Dyskretyzacja zagadnień parabolicznych metodą dekompozycji obszaru

Mariusz Kozakiewicz

Autoreferat rozprawy doktorskiej

1 Wprowadzenie

Wiele zadań praktycznych współczesnej nauki i techniki wymaga wyznaczenia rozwiązania opisującego go zagadnienia różniczkowego, a ponieważ analityczne rozwiązywanie zagadnień różniczkowych jest w większości przypadków niemożliwe, dlatego poszukujemy określonego przybliżenia interesującego nas rozwiązania dokładnego. Przybliżone rozwiązywanie równań różniczkowych cząstkowych stanowi jedno z najważniejszych wyzwań stawianych przed współczesnymi komputerami i specjalistami z dziedziny szeroko rozumianej *analizy numerycznej*.

Dyskretyzacja równań różniczkowych *metodą różnic skończonych (MRS)* i *metodą elementu skończonego (MES)*, najczęściej stosowanymi w praktyce obliczeniowej (patrz np. [8], [10], [11], [12], [15], [16]), prowadzi do rzadkich, ale bardzo wielkich układów równań algebraicznych (często rzędu milionów niewiadomych), które są bardzo źle uwarunkowane. Numeryczne rozwiązywanie układów równań algebraicznych powstałych w wyniku dyskretyzacji, których uwarunkowanie jest wielomianową funkcją wymiaru przestrzeni niewiadomych, jest zadaniem bardzo trudnym, a przy dużej liczbie niewiadomych wręcz niewykonalnym dla komputera wyposażonego w pojedynczy procesor. Współcześnie do tego typu zadań stosuje się tzw. *superkomputery* (-komputery o wielu procesorach) i *klastry obliczeniowe*, jednak aby efektywnie wykorzystać moc obliczeniową sprzętu, należy zaprojektować odpowiedni *algorytm równoległy*, zobacz np. [9].

Jedną z metod umożliwiających projektowanie algorytmów równoległych jest *metoda dekompozycji obszaru (MDO)* (patrz monografie np. [6], [13], [17]). Jest ona odpowiednikiem podejścia *dziel i rządź*, na gruncie teorii przybliżonego rozwiązywania równań różniczkowych cząstkowych. *MDO* jest nowoczesną metodą rozwiązywania zagadnień różniczkowych, pozwalającą w pełni wykorzystać możliwości współczesnych *superkomputerów* i *klastrów obliczeniowych.*

W *MDO* wyróżnić możemy dwa podejścia. Pierwsze z nich daje możliwość projektowania równoległych algorytmów rozwiązywania wielkich układów równań algebraicznych powstałych np. w wyniku standardowej dyskretyzacji równań różniczkowych cząstkowych z wykorzystaniem *MRS*, *MES* lub ich kombinacji - zobacz np. [1]. W podejściu drugim natomiast *MDO* daje możliwość projektowania równoległej dyskretyzacji. W tym przypadku wyjściowe zagadnienie różniczkowe jest przeformułowywane, z zagadnienia postawionego na obszarze Ω na szereg podzadań określonych na rozłącznych podobszarach Ω_i, stanowiących rozkład Ω. Dopiero te podzadania są dyskretyzowane np. *MRS*, *MES* lub kombinacją tych metod - patrz np. [2], tak aby miała miejsce aproksymacja zagadnienia wyjściowego podzadaniami określonymi na obszarach Ω_i i sformułowane zadanie dyskretne miało dobre własności numeryczne.

Stosowanie obu wyżej wymienionych podejść *MDO* daje możliwość zaprojektowania takiego algorytmu równoległego, za pomocą którego rozwiązania przybliżonego dla danego zagadnienia różniczkowego, poszukujemy jako sumy słabo ze sobą powiązanych lub prawie zupełnie niezależnych podzadań lokalnych i rozwiązania zadania globalnego o małym wymiarze. Dekompozycja oryginalnego zadania gwarantuje zmiejszenie wymiaru lokalnych podzadań i umożliwia stosunkowo nieskomplikowaną równoległą implementację procesu obliczeniowego.

Rozwiązanie przybliżone dla danego zadania wyjściowego otrzymywane jest najczęściej *iteracyjnie*. W sposobie tym zadania lokalne rozwiązywane są wielokrotnie do uzyskania określonych warunków zgodności w punktach nodalnych tzw. *grubej siatki*, siatki wyznaczonej przez dekompozycję wyjściowego obszaru Ω na odpowiednie podobszary Ω_i. W tym podejściu, między kolejnymi iteracjami, w punktach nodalnych *grubej siatki*, wymieniana jest informacja pomiędzy rozwiązaniami określonymi na sąsiadujących ze sobą podobszarach, a w celu zapewnienia optymalności metody często wymagane jest rozwiązanie pewnego globalnego zadania małego wymiaru, określonego w punktach nodalnych *grubej siatki*. Przykładem może być tutaj cała klasa *metod Schwarza* - [6]. Istnieją jednak metody, które pozwalają wyznaczyć globalne rozwiązanie przybliżone po jednokrotnym rozwiązaniu problemów lokalnych, bez konieczności rozwiązywania odpowiedniego zadania globalnego. Metody takie nazywać będziemy dalej *bezpośrednimi*. Przykładem takiej metody może być ta przedstawiona w [2].

Literatura dotycząca *MDO* dla równań różniczkowych cząstkowych typu parabolicznego nie jest tak bogata, jak odpowiednia dla zagadnień różniczkowych typu eliptycznego (patrz monografie [6], [13], [17] i literaturę tam cytowaną, a także sprawozdania z *Conferences on Domain Decomposition Method : 1-17*, patrz [18]), można w niej jednak odnaleźć trzy główne grupy tematyczne. Pierwsza z nich, z której ideę zaczerpnęliśmy w tej pracy, prezentowana jest w [2], [3]. Autorzy tych prac konstruują dyskretyzację z wykorzystaniem *MDO* dekomponując wyjściowy obszar określoności zmennej przestrzennej. Druga grupa, reprezentowana w [4], polega na konstrukcji dyskretyzacji bazującej na dekompozycji obszaru określoności zmiennej czasowej. Trzecia natomiast polega na przenoszeniu algorytmów *MDO* otrzymanych dla równań eliptycznych na grunt równań typu parabolicznego na ustalonych warstwach czasowych - zobacz np. [1]. Miarodajny przegląd najnowszych metod dekompozycji tego typu zagadnień odnaleźć można w pracy [5].

W rozprawie rozważana jest specjalna dyskretyzacja zagadnienia początkowo-brzegowego dla równania parabolicznego drugiego rzędu, która jest rozwinięciem metod *bezpośrednich* proponowanych w [2] i [3]. Idea metody prezentowanej w rozprawie może być traktowana jako daleko idące uogólnienie i zarazem połączenie dwóch różnicowych metod dyskretyzacji zagadnień parabolicznych: *metody ADI* - patrz np. [10] i *metody Saulewa* - patrz np. [14].

2 Motywacja i cel

Punktem wyjścia tej rozprawy są wyniki prac [2] i [3], a celem jest ich uogólnienie.

W pracach tych, rozważane są dyskretyzacje zagadnienia początkowo-brzegowego typu prarabolicznego rzędu drugiego, zadanego w postaci uogólnionej:

znaleźć $u \in L^2\left(0,T;H_0^1(\Omega)\right) \cap C^0\left(0,T;L^2(\Omega)\right)$ takie, że:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t},\varphi\right)_{L^2(\Omega)} + (\nabla u,\nabla\varphi) = (f,\varphi)_{L^2(\Omega)}, \quad \varphi \in H_0^1(\Omega), \quad t \in (0,T) \ \ p.w. \qquad (2.1.a)$$

$$(u,\varphi)_{L^2(\Omega)} = (u_0,\varphi)_{L^2(\Omega)} \qquad \varphi \in L^2(\Omega) \qquad (2.1.b)$$

gdzie Ω jest wielokątem z $\mathcal{R}^2$.

Schemat rozważany w pracy [2] bazuje na *schemacie zamkniętym Eulera* i powstaje w wyniku dyskretyzacji wyjściowego zagadnienia różniczkowego *MES* z elementami trójkątnymi i funkcjami ciągłymi, kawałkami liniowymi, względem zmiennej przestrzennej i *MRS* względem zmiennej czasowej - zobacz np. [10], [11]. Schemat proponowany w [2] jest stosunkowo prosty, ale jednocześnie bardzo efektywny w ujęciu obliczeń równoległych. Sformułowano tam twierdzenia o stabilności i o zbieżności proponowanego schematu przy zachowaniu stałego stosunku parametrów dyskretyzacji $\frac{\tau}{h} = const$. Udowodniono, że zbieżność ta jest rzędu $\mathcal{O}(\tau^{\frac{1}{2}}+h)$, gdzie τ, h są odpowiednio parametrami siatek czasowej i przestrzennej. W porównaniu ze *schematem zam-*

kniętym Eulera, którego rząd zbieżności to $\mathcal{O}(\tau + h)$, wynik ten nie był zadawalający i stanowił przedmiot dalszych badań.

W pracy [3] zaproponowany został podobny model dyskretyzacji do zaprezentowanego w [2], jednak bazował on już na *schemacie Cranka-Nicholsona*. Udowodniono tam, że proponowany schemat jest stabilny i zbieżny z rzędem $\mathcal{O}(\tau + h + \frac{\tau}{\sqrt{hH}})$, co także, zważywszy na to, że oryginalny *schemat Cranka-Nicholsona* jest rzędu $\mathcal{O}(\tau^2 + h)$, nie było wynikiem optymalnym w tej klasie schematów.

W naszej rozprawie doktorskiej postawiono sobie za cel taką modyfikację schematu rozważanego w [2], żeby schemat był stabilny i zbieżny z rzędem wyższym niż schematy rozważane w pracach [2], [3].

3 Zadanie dyskretne - MRS

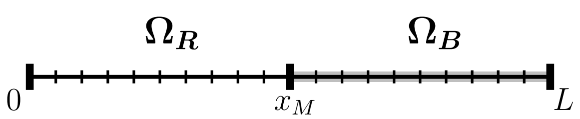
W rozprawie przeprowadzono analizę zarówno dla schematu w sformułowaniu różnicowym po x i t, jak i sformułowaniu wariacyjno-różnicowym (*MRS* po t i *MES* po x). Rozważono zagadnienia z jednowymiarowym i dwuwymiarowym (- wielokąt) obszarem Ω. Z uwagi na swoją prostotę do opisu schematu w autoreferacie wybraliśmy wariant dekompozycji, w którym wyjściowy, jednowymiarowy obszar Ω podzielony został tylko na dwa podobszary, a do dyskretyzacji użyta została *MRS*.

Rozważmy więc zagadnienie różniczkowe w sformułowaniu klasycznym, odpowiadające zagadnieniu (2.1.a)-(2.1.b):

znaleźć $u(x,t) \in C^{2,1}(\Omega \times (0,T]) \cap C\left(\overline{\Omega} \times [0,T]\right)$ takie, że

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) = f(x,t) & x \in \Omega, \quad t \in (0,T] & (3.1.a) \\ u(x,0) = u_0(x) & x \in \Omega, & (3.1.b) \\ u(x,t) = 0 & t \in (0.T] \quad x \in \partial\Omega. & (3.1.c) \end{cases}$$

gdzie $u_0 \in C(\overline{\Omega})$, $u_0(0) = u_0(L) = 0$, $f \in C(\Omega \times (0,T])$, Ω jest odcinkiem, $\Omega = (0, L)$.



Rys. 1

Sposób dyskretyzacji zagadnienia (3.1.a)-(3.1.c) bazuje na *metodzie różnic skończonych*. Dokładny jej opis znaleźć można np. w [10].

Niech h oraz τ będą krokami odpowiednio siatki przestrzennej i czasowej, a $\overline{\Omega}^h$ oznacza zbiór punktów siatki przestrzennej

$$\overline{\Omega}^h = \{x : x = ih, \ i = 0, 1, \ldots, 2M\}, \qquad h = \frac{L}{2M}.$$

Wyjściowy obszar Ω, zostaje podzielony na dwie równe części, a podobszarom Ω nadajemy symboliczne kolory *Red* i *Black* (*Red-Black ordering*-patrz [6],[13]).

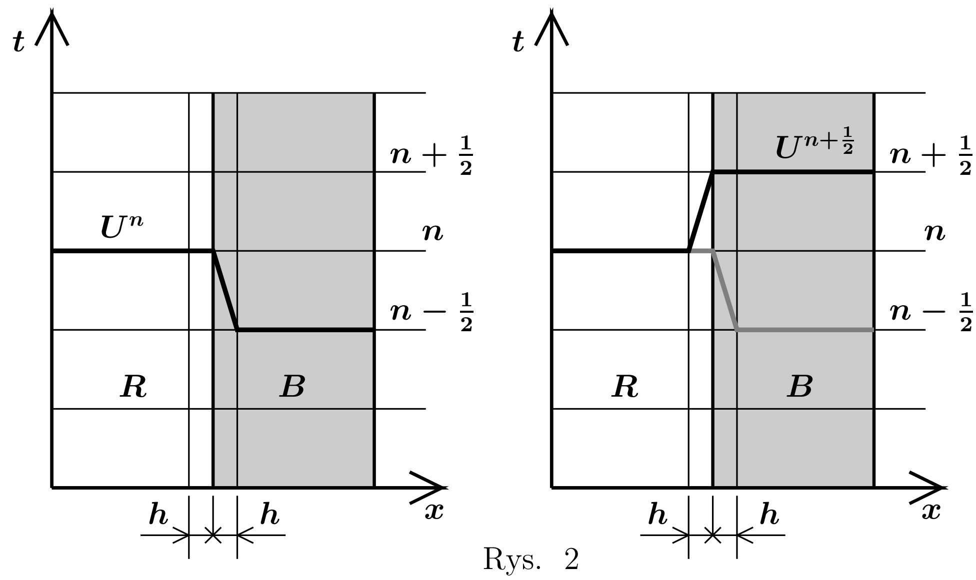
$$\Omega_R = \Big(0, x_M\Big), \qquad \Omega_B = \Big(x_M, L\Big), \qquad x_M = Mh = \frac{L}{2}.$$

Niech

$$\overline{\Omega}_R^h = \{x : x = ih,\ \ i = 0, \ldots, M\} \subset \overline{\Omega}^h,$$
$$\overline{\Omega}_B^h = \{x : x = ih,\ \ i = M, \ldots, 2M\} \subset \overline{\Omega}^h.$$

Podział Ω i konstrukcję siatki przedstawia symbolicznie *Rys. 1.*

W każdym kroku czasowym rozwiązania przybliżonego zagadnienia (3.1) poszukiwać będziemy rozwiązując naprzemian niezależne zadania postawione na Ω_R i Ω_B. Na obszarze $\overline{\Omega}_R$ będziemy poszukiwali aproksymacji zagadnienia wyjściowego na pełnych warstwach czasowych, tzn. dla $t \in \{\tau, 2\tau, \ldots, n\tau\}$, natomiast na obszarze $\overline{\Omega}_B$ na połówkowych warstwach czasowych, tzn. dla $t \in \Big\{\frac{1}{2}\tau, \frac{3}{2}\tau, \ldots, (N - \frac{1}{2})\tau)\Big\}$. Ponieważ w punkcie x_M rozwiązanie przybliżone jest liczone co pół kroku czasowego, co pół kroku następować będzie wymiana informacji pomiędzy rozwiązaniami określonymi na podobszarach Ω_R, Ω_B, w tym właśnie punkcie. Także co pół kroku czasowego, uaktualniana będzie również różnicowa pochodna w punkcie x_M. Ideę schematu symbolicznie przedstawia *Rys. 2.*



Rys. 2

Przyjmijmy oznaczenia na pochodne różnicowe z [10]

$$\partial_x U_i^n \equiv \frac{1}{h}\Big(U_{i+1}^n - U_i^n\Big), \qquad \overline{\partial}_x U_i^n \equiv \frac{1}{h}\Big(U_i^n - U_{i-1}^n\Big),$$
$$\partial_x \overline{\partial}_x U_i^n \equiv \frac{1}{h}\Big(\overline{\partial}_x U_{i+1}^n - \overline{\partial}_x U_i^n\Big) = \frac{1}{h^2}\left(U_{i-1}^n - 2U_i^n + U_{i+1}^n\right),$$
$$\partial_t U_i^n \equiv \frac{1}{\tau}(U_i^{n+1} - U_i^n), \qquad \partial_{t/2} U_i^n \equiv (U_i^{n+\frac{1}{2}} - U_i^n)/(t/2).$$

W rozprawie, zaproponowano następujący schemat dyskretyzacji dla zagadnienia (3.1)

znaleźć $U_j^{\frac{1}{2}}$, $j = M, \ldots, 2M-1$, takie że:

$$\begin{cases} \partial_{t/2} U_j^0 - \partial_x \overline{\partial}_x U_j^{\frac{1}{2}} = f_j^{\frac{1}{2}} & j = M+1, \ldots, 2M-1, \\ \partial_{t/2} U_j^0 - \frac{1}{h}(\overline{\partial}_x U_{j+1}^{\frac{1}{2}} - \overline{\partial}_x U_j^0) = f_j^{\frac{1}{2}} & j = M, \\ U_j^{\frac{1}{2}} = U_j^0 & j = 1, \ldots, M-1, \end{cases} \tag{3.2.a}$$

dla $n = 1, \ldots, N$,

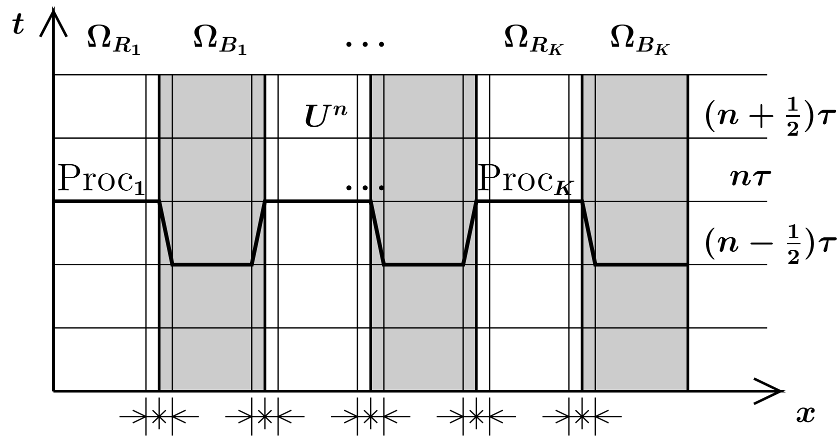
$$\begin{cases} \text{znaleźć } U_j^n,\ j = 1, \ldots, 2M-1, \text{ takie że:} \\ \begin{cases} \partial_t U_j^{n-1} - \partial_x \overline{\partial}_x U_j^n = f_j^n & j = 1, \ldots, M-1, \\ \partial_{t/2} U_j^{n-\frac{1}{2}} - \frac{1}{h}(\overline{\partial}_x U_{j+1}^{n-\frac{1}{2}} - \overline{\partial}_x U_j^n) = f_j^n & j = M, \\ U_j^n = U_j^{n-\frac{1}{2}} & j = M+1, \ldots, 2M-1, \end{cases} & (3.2.b) \\ \text{znaleźć } U_j^{n+\frac{1}{2}},\ j = 1, \ldots, 2M-1, \text{ takie że:} \\ \begin{cases} \partial_t U_j^{n-\frac{1}{2}} - \partial_x \overline{\partial}_x U_j^{n+\frac{1}{2}} = f_j^{n+\frac{1}{2}} & j = M+1, \ldots, 2M-1, \\ \partial_{t/2} U_j^n - \frac{1}{h}(\overline{\partial}_x U_{j+1}^{n+\frac{1}{2}} - \overline{\partial}_x U_j^n) = f_j^{n+\frac{1}{2}} & j = M, \\ U_j^{n+\frac{1}{2}} = U_j^n & j = 1, \ldots, M-1, \end{cases} & (3.2.c) \end{cases}$$

$$U^0(x_j) = u_0(x_j) \qquad j = 1, \ldots, 2M-1, \tag{3.2.d}$$

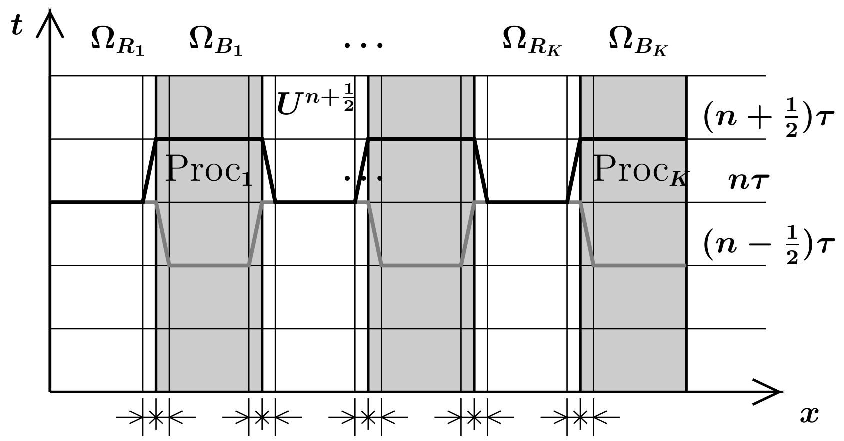
Implementacja schematu (3.2.a)-(3.2.d) przedstawia się nastepująco. Niech dane będzie $U^{n-\frac{1}{2}}(x)$. W pierszym półkroku obliczamy $U^n(x)$ z (3.2.b). Sprowadza się to do rozwiązania zadania tylko na $\overline{\Omega}_R$. Po obliczeniu $U^n(x)$ uaktualniona zostaje wartość $U^{n-\frac{1}{2}}(x)$ w punkcie x_M i obliczamy $U^{n+\frac{1}{2}}(x)$ z rówanania (3.2.c). Tak więc $U^{n+\frac{1}{2}}(x)$ jesteśmy w stanie obliczyć rozwiązując dwa zadania dwukrotnie mniejszego wymiaru. Jedyna wymiana informacji pomiędzy podobszarami następuję co *pół kroku czasowego* i dotyczy danych związanych z punktem x_M.

Proponowany schemat umożliwia zatem znalezienia rozwiązania globalnego na ustalonej warstwie czasowej w dwóch krokach, z których każdy wymaga rozwiązania układu równań algebraicznych z macierzą trójdiagonalną wymiaru $M \times M$. Dla przypomnienia, w standardowej dyskretyzacji *schematem zamkniętym Eulera*, powstaje układ równań algebraicznych, z macierzą trójdiagonalną wymiaru $2M \times 2M$.

Uogólnienie powyższej dyskretyzacji na dekompozycję Ω na większą ilość pododcinków przedstawiają symbolicznie *Rys. 3-4*.



Rys. 3



Rys. 4

Rozważmy sytuację, w której dysponujemy komputerem o K procesorach. W jednym kroku czasowym możemy niezależnie policzyć $U^n(x)$ na każdym z podobszarów typu Ω_R - każdy z K procesorów liczy niezależne zadanie określone na jednym z obszarów Ω_{R_k} dla $k = 1, \ldots, K$. W drugim kroku, po wymianie informacji na brzegach poszczególnych podobszarów, niezależnie liczymy $U^{n+\frac{1}{2}}(x)$ na każdym z obszarów Ω_B.

Przy założeniu, że H jest średnicą najmniejszego podobszaru wyznaczającego dekompozycję Ω, dla uogólnienia schematu (3.2.a)-(3.2.d) na większą ilość podobszarów, udowodniono dwa twierdzenia o bezwarunkowej stabilności

Twierdzenie 1 (Silne normy). *Rozwiązania schematu spełniają następujące oszacowanie*

$$\max_{n=1,\dots,N-1}\left\{\left\|\partial_{t/2}U^n\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)}+\left\|\partial_{t/2}U^{n-\frac{1}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)}\right\}+$$
$$+\max_{n=1,\dots,N-1}\left\{\left\|\partial_t U^n\right\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)}+\left\|\partial_t U^{n-\frac{1}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}\right\}+$$
$$+\tau\sum_{n=0}^{N-1}\left\{\left\|\overline{\partial}_x\partial_t U^n\right\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)}+\left\|\overline{\partial}_x\partial_t U^{n-\frac{1}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}\right\}\leqslant$$
$$\leqslant\mathcal{M}\Bigg\{\left\|f^{\frac{1}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}+\left\|f^1\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_R)}+\tau\sum_{n=2}^{N}\left\{\left\|\partial_t f^{n-\frac{3}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_B)}+\left\|\partial_t f^{n-1}\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_R)}\right\}+$$
$$+\tau\sum_{n=2}^{N}\left\{\left\|\partial_{t/2}f^{n-\frac{3}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)}+\left\|\partial_{t/2}f^{n-1}\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)}\right\}+\left\|\partial_x\overline{\partial}_x U^0\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h)}\Bigg\},$$

gdzie $\mathcal{M}$ jest stałą niezależna od τ, h oraz H.

Twierdzenie 2 (Słabe normy). *Schemat jest bezwarunkowo stabilny w sensie następującego oszacowania*

$$\max_{n=1,\dots,N}\left\{\|U^n\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)}+\|\overline{\partial}_x U^n\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)}\right\}+$$
$$+\max_{n=0,\dots,N-1}\left\{\|U^{n+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}+\|\overline{\partial}_x U^{n+\frac{1}{2}}\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}\right\}\leqslant$$
$$\leqslant\mathcal{M}\Bigg\{\left\|f^{\frac{1}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}+\left\|f^1\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_R)}+\tau\sum_{n=2}^{N}\left\{\left\|\partial_t f^{n-\frac{3}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_B)}+\left\|\partial_t f^{n-1}\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_R)}\right\}+$$
$$+\tau\sum_{n=2}^{N}\left\{\left\|\partial_{t/2}f^{n-\frac{3}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)}+\left\|\partial_{t/2}f^{n-1}\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)}\right\}+$$
$$+\|U^0\|^2_{L^2_h(\Omega^h)}+\|\overline{\partial}_x U^0\|^2_{L^2_h(\Omega^h)}+\left\|\partial_x\overline{\partial}_x U^0\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h)}\Bigg\},$$

gdzie $U^n, U^{n+\frac{1}{2}}$ są rozwiązaniami schematu, zaś $\mathcal{M}$ jest stała niezależną od τ, h oraz H.

Niech η^n, $\eta^{n+\frac{1}{2}}$ będą błędami zbieżności schematu (3.2.a)-(3.2.d) na ustalonych warstwach czasowych, odpowiednio $n\tau$ i $(n+\frac{1}{2})\tau$. W rozprawie udowodniono dwa niżej wypisane twierdzenia o rzędzie zbieżności rozważanego schematu.

Twierdzenie 3 (Silne normy). *Niech u będzie rozwiązaniem (3.1), takim że $u \in C^{4,3}(\Omega \times [0,T])$. Dla $\eta^n, \eta^{n+\frac{1}{2}}$ zachodzi następujące szacowanie*

$$\max_{n=0,\dots,N-1}\left\{\left\|\partial_{t/2}\eta^n\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)} + \left\|\partial_{t/2}\eta^{n-\frac{1}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)}\right\} +$$
$$+\max_{n=0,\dots,N-1}\left\{\left\|\partial_t\eta^n\right\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)} + \left\|\partial_t\eta^{n-\frac{1}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}\right\} +$$
$$+\tau\sum_{n=0}^{N-1}\left\{\left\|\overline{\partial}_x\partial_t\eta^n\right\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)} + \left\|\overline{\partial}_x\partial_t\eta^{n-\frac{1}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}\right\} \leqslant$$
$$\leqslant \mathcal{M}\left(\tau^2 + h^4 + \frac{\tau^2}{hH}\right),$$

gdzie $\mathcal{M}$ jest stałą dodatnią niezależną od τ, h oraz H.

Twierdzenie 4 (Słabe normy). *Niech u będzie rozwiązaniem (3.1),takim że $u \in C^{4,3}(\Omega \times [0,T])$. Przy $\tau/h^{\frac{3}{2}+\alpha} = const$ i $\alpha \geqslant 0$ dla $\eta^n, \eta^{n+\frac{1}{2}}$ zachodzi następujące oszacowanie*

$$\max_{n=1,\dots,N}\left\{\|\eta^n\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)} + \|\eta^{n-\frac{1}{2}}\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}\right\} +$$
$$+\tau\sum_{i=1}^{N}\left\{\|\overline{\partial}_x\eta^n\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)} + \|\overline{\partial}_x\eta^{n-\frac{1}{2}}\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}\right\} \leqslant \mathcal{M}\left(\tau^2 + h^4 + \frac{\tau^2}{H^2} + \frac{\tau^2 h^{2\alpha}}{H}\right),$$

gdzie $\mathcal{M}$ jest stałą dodatnią niezależną od τ, h oraz H.

Uwaga 1. *Zwróćmy uwagę, że przy ustalonym stosunku kroków $\frac{\tau}{h^2} = const$ i przy ustalonej dekompozycji - $H = const$, rząd zbieżności schematu (3.2.a)-(3.2.d) przy dekompozycji na wiele pododcinków, jest taki sam, jak w przypadku schematu zamkniętego Eulera - patrz np. [15].*

Uwaga 2. *Rezultaty czterech powyższych twierdzeń automatycznie przenoszą się na przypadek dekompozycji prostokąta Ω w tzw. pasy (- patrz [6]), przy ustalonym kroku siatki przestrzennej h.*

4 Zadanie dyskretne - MES

W rozprawie rozważono dyskretyzację zagadnienia początkowo-brzegowego dla równania parabolicznego zadanego w następujęcej formie znaleźć $u \in L^2\left(0,T;H_0^1(\Omega)\right) \cap C^0\left(0,T;L^2(\Omega)\right)$ takie, że

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t},\varphi\right)_{L^2(\Omega)} + \mathcal{A}(t;u,\varphi) = (f,\varphi)_{L^2(\Omega)},\;\; \varphi \in H_0^1(\Omega),\;\; t \in (0,T)\;\; p.w. \qquad (4.1.a)$$

$$(u,\varphi)_{L^2(\Omega)} = (u_0,\varphi)_{L^2(\Omega)} \qquad \varphi \in L^2(\Omega) \qquad (4.1.b)$$

gdzie

$$\mathcal{A}(t;u,\varphi) = \int_\Omega \sum_{i,j=1}^{2} a_{i,j}(x,t)D_i u(x) D_j v(x)dx +$$

$$+\int_\Omega \sum_{i=1}^{2} b_i(x,t)D_i u(x)v(x)dx + \int_\Omega c(x,t)u(x)v(x)dx,$$

Zakładamy że $\Omega \subset \mathcal{R}^2$ jest wielokątem. Zakładamy również odpowiednią regularność funkcji u, f i współczynników koercytywnej formy dwuliniowej $\mathcal{A}(t;\cdot,\cdot)$.

W rozprawie, do dyskretyzacji zagadnienia (4.1), zaproponowany został schemat oparty na *MES* względem zmiennej przestrzennej i *MRS* względem zmiennej czasowej. Była ona wzorowana na tej przedstawionej w pracach [10] i [11] i jest istotnym rozszerzeniem aproksymacji rozważanych w [2] i [3].

Jako wyjściową przestrzeń elementu skończonego przyjęliśmy

$$V^h(\Omega) = \left\{ v : v \in C(\overline{\Omega}), \quad v|_{e_i} \in P_1(e_i), \quad v(x) = 0 \text{ dla } x \in \partial\Omega \right\};$$

gdzie e_i są elementami odpowiedniej triangulacji $\mathcal{T}^h$.

Dekompozycji wyjściowego obszaru dokonaliśmy w następujący sposób: obszar Ω podzielony został na wielokąty Ω_i, tak że $\overline{\Omega} = \bigcup_{i \in I} \Omega_i$, a krawędzie każdego z wielokątów Ω_i wyznaczone zostały przez krawędzie trójkątów e_k triangulacji $\mathcal{T}^h$. Podobszary Ω_i stanowią elementy tzw. *grubej triangulacji* $\boldsymbol{\mathcal{T}^H}$. O tych elementach zakładamy, że mogą mieć wspólną krawędź, wspólny wierzchołek lub być rozłączne. Elementy *grubej triangulacji* dzielimy na dwie grupy *Red* i *Black* w następujący sposób:

1. $|I_R| + |I_B| = |I|$, gdzie $|I_R|$ i $|I_B|$ są odpowiednio liczbami elementów zbiorów I_R, I_B indeksujących podobszary typu *Red* i *Black*;
2. $\overline{\Omega}_R = \bigcup_{i \in I_R} \overline{\Omega}_{R_i}, \qquad \overline{\Omega}_B = \bigcup_{i \in I_B} \overline{\Omega}_{B_i}$;
3. $\overline{\Omega}_R \cup \overline{\Omega}_B = \overline{\Omega}$;
4. każde dwa elementy $\overline{\Omega}_{R_p}$, $\overline{\Omega}_{R_q}$ dla $p,q \in I_R$ oraz każde dwa elementy $\overline{\Omega}_{R_r}$, $\overline{\Omega}_{R_s}$ $r,s \in I_B$ mogą być albo rozłączne albo mieć wspólny wierzchołek;

5. każde dwa elementy $\overline{\Omega}_{R_p}$, $\overline{\Omega}_{B_q}$ dla $p \in I_R$, $q \in I_B$ mogą być albo rozłączne albo mieć wspólną krawędź;

Do przybliżonego rozwiązywania zagadnienia (4.1) zaproponowano odpowiedni schemat szczegółowo opisany w rozprawie. Dla tego schematu udowodniono następujące twierdzenia o bezwarunkowej stabilności i rzędzie zbieżności w *silnych* i *słabych* normach.

Twierdzenie 5 (Silne normy). *Niech $u_0 \in H^2(\Omega)$ i u, rozwiązanie zagadnienia (4.1) oraz współczynniki formy dwulioniowej $\mathcal{A}(t;\cdot,\cdot)$, będą odpowiednio regularne. Wtedy istnieje takie τ_0, że dla $\tau \leqslant \tau_0$, rozwiązania rozważanego schematu spełniają następujące oszacowanie*

$$\begin{aligned}
&\max_{n=1,\dots,N}\left\{\|\partial_{t/2}U^{n-1}\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)} + \|\partial_{t/2}U^{n-\frac{1}{2}}\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)}\right\} + \\
&+\max_{n=2,\dots,N}\left\{\|\partial_t U^{n-1}\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)} + \|\partial_t U^{n-\frac{3}{2}}\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}\right\} + \\
&+\tau\sum_{n=2}^{N}\left\{|\partial_t U^{n-1}|^2_{H^1(\Omega_R)} + |\partial_t U^{n-\frac{3}{2}}|^2_{H^1(\Omega_B)}\right\} \leqslant \\
&\leqslant \mathcal{M}\Bigg\{\tau\sum_{n=2}^{N}\left\{\|\partial_t f^{n-1}\|^2_{L^2(\Omega_R)} + \|\partial_t f^{n-\frac{3}{2}}\|^2_{L^2(\Omega_B)}\right\} + \\
&+\tau\sum_{n=2}^{N}\left\{\|\partial_{t/2}f^{n-1}\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)} + \|\partial_{t/2}f^{n-\frac{3}{2}}\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)}\right\} + \|\partial_{t/2}f^0\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)} + \\
&+\|f^{\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)} + \|f^1\|^2_{L^2(\Omega)} + \|u_0\|^2_{H^2(\Omega)}\Bigg\},
\end{aligned}$$

gdzie $\mathcal{M}$ jest stałą dodatnią niezależna od τ, h oraz H.

Twierdzenie 6 (Słabe normy). *Niech $u_0 \in H^2(\Omega)$ i u, rozwiązanie zagadnienia (4.1) oraz współczynniki formy dwuliniowej $\mathcal{A}(t;\cdot,\cdot)$, będą odpowiednio regularne. Wtedy istnieje takie τ_0, że dla $\tau \leqslant \tau_0$, rozwiązania rozważanego schematu spełniają następujące oszacowanie*

$$\begin{aligned}
&\max_{n=1,\dots,N}\left\{|U^n|^2_{H^1(\Omega_R)} + \|U^n\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)} + |U^{n-\frac{1}{2}}|^2_{H^1(\Omega_B)} + \|U^{n-\frac{1}{2}}\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}\right\} \leqslant \\
&\leqslant \mathcal{M}\Bigg\{\tau\sum_{n=2}^{N}\left\{\|\partial_t f^{n-1}\|^2_{L^2(\Omega_R)} + \|\partial_t f^{n-\frac{3}{2}}\|^2_{L^2(\Omega_B)}\right\} + \\
&+\tau\sum_{n=2}^{N}\left\{\|\partial_{t/2}f^{n-1}\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)} + \|\partial_{t/2}f^{n-\frac{3}{2}}\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)}\right\} + \\
&+\|f^{\frac{1}{2}}\|^2_{L^2(\Omega)} + \|f^1\|^2_{L^2(\Omega)} + \|u_0\|^2_{H^2(\Omega)}\Bigg\},
\end{aligned}$$

gdzie $\mathcal{M}$ jest stałą dodatnią niezależna od τ, h oraz H.

Niech $\xi^n = U^n - W^n$, gdzie U^n jest rozwiązaniem zaproponowanego schematu, a W^n interpolacją rozwiązania zagadnienia (4.1) w przestrzeni $V^h(\Omega)$.

Twierdzenie 7 (Silne normy). *Niech $u_0 \in H^2(\Omega)$. Przy odpowiednich założeniach o u, rozwiązaniu zagadnienia (4.1) oraz współczynnikach formy dwuliniowej $\mathcal{A}(t;\cdot,\cdot)$, istnieje takie τ_0, że dla $\tau \leqslant \tau_0$, błąd schematu spełnia następujące oszacowanie*

$$\max_{n=1,\dots,N-1}\left\{\|\partial_{t/2}\xi^n\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)} + \|\partial_{t/2}\xi^{n-\frac{1}{2}}\|^2_{L^2_h(\Omega^h_\delta)}\right\} +$$
$$+\max_{n=1,\dots,N-1}\left\{\|\partial_t\xi^n\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)} + \|\partial_t\xi^{n-\frac{1}{2}}\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}\right\} +$$
$$+\tau\sum_{n=1}^{N-1}\left\{|\partial_t\xi^n|^2_{H^1(\Omega_R)} + |\partial_t\xi^{n-\frac{1}{2}}|^2_{H^1(\Omega_B)}\right\} \leqslant \mathcal{M}\left(\tau^2 + h^2 + \frac{\tau^2}{hH}\right),$$

gdzie $\mathcal{M}$ jest stałą dodatnią niezależną od τ, h oraz H.

Twierdzenie 8 (Słabe normy). *Niech $u_0 \in H^2(\Omega)$. Przy odpowiednich założeniach o u, rozwiązaniu zagadnienia (4.1) oraz współczynnikach formy dwuliniowej $\mathcal{A}(t;\cdot,\cdot)$ oraz przy $\tau/h^{\frac{3}{2}+\alpha} = const$ dla $\alpha \geqslant 0$, istnieje takie τ_0, że dla $\tau \leqslant \tau_0$, błąd schematu spełnia następujące oszacowanie*

$$\max_{n=1,\dots,N}\left\{\|\xi^n\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_R)} + \left\|\xi^{n-\frac{1}{2}}\right\|^2_{L^2_h(\overline{\Omega}^h_B)}\right\} +$$
$$+\tau\sum_{n=1}^{N}\left\{|\xi^n|^2_{H^1(\Omega_R)} + \left|\xi^{n-\frac{1}{2}}\right|^2_{H^1(\Omega_B)}\right\} \leqslant$$
$$\leqslant \mathcal{M}\left(\tau^2 + h^2 + \frac{\tau^2}{H^2} + \frac{\tau^2 h^{2\alpha}}{H} + \frac{\tau^4}{hH}\right),$$

gdzie $\mathcal{M}$ jest stałą dodatnią niezależną od τ, h oraz H.

Uwaga 3. *Przy dostatecznie silnych założeniach o współczynnikach formy dwuliniowej $\mathcal{A}(t;\cdot,\cdot)$, w czterech powyższych Twierdzeniach, nie jest koniczne zalożenie $\tau \leqslant \tau_0$.*

5 Eksperymenty numeryczne

W rozprawie przedstawiono wyniki serii eksperymentów numerycznych potwierdzających wyniki teoretyczne otrzymane dla zaproponowanej metody dyskretyzacji zagadnienia (2.1) zarówno w przypadku $\Omega \subset \mathcal{R}$ jak i $\Omega \subset \mathcal{R}^2$. Przy podziale odcinka Ω na podokcinki i podziale kwadratu w tzw. *kratę* (- patrz np. [6]), przeprowadzone zostały następujące serie eksperymentów:

1. przy ustalonym stosunku $\frac{\tau}{h^2}$ i ustalonym H;
2. przy ustalonym stosunku $\frac{\tau}{h^2}$ i ustalonym stosunku $\frac{H}{h}$;
3. przy ustalonym stosunku $\frac{\tau}{h}$ i ustalonym H;
4. przy ustalonym stosunku $\frac{\tau}{h}$ i ustalonym stosunku $\frac{H}{h}$;

Eksperymenty te pozwoliły potwierdzić numerycznie własności zaproponowanego schematu - bezwarunkową stabilność i rząd zbieżności. Dały również możliwość określenia zależności błędu schematu od parametru H.

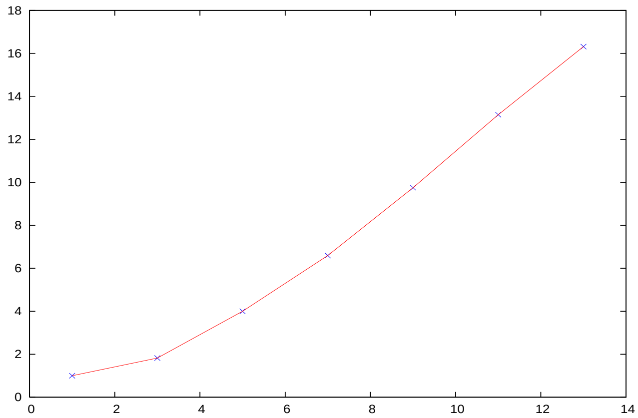
Dodatkowo zaprezentowano także wyniki eksperymentów numerycznych przeprowadzonych na *sieci komputerowej*, które miały na celu zbadanie efektywności zaproponowanej metody w ujęciu obliczeń równoległych. Wyniki, które zostały uzyskane pozwalają twierdzić, że jest to schemat idealnie nadający się do obliczeń równoległych. Rozważono funkcję *Speed Up*, tj.

$$\textit{Speed Up}(n) = \frac{T_1}{T_n}$$

gdzie w naszym przypadku

- T_1 - czas obliczeń dla *schematu zamkniętego Eulera*;
- T_n - czas obliczeń dla schematu rozważanego w rozprawie przy wykorzystaniu n procesorów;

dla danego zadania, przy ustalonych parametrach dyskretyzaji τ oraz h. Funkcja *Speed Up* mierzona względem czasu obliczeń dla *schematu zamkniętego Eulera*, okazała się liniowa z współczynnikiem nachylenia bliskim 1.



Rys. 5

Przykładowe wyniki pomiaru funkcji *Speed Up* w przypadku dekompozycji kwadratu Ω na tzw. *pasy* (- patrz [6]), przedstawione zostały na *Rys. 5.* Na osi pionowej odłożone zostały wartości funkcji *Speed Up*. Na osi poziomej odłożona została ilość wykorzystanych procesorów.

6 Podsumowanie

W rozprawie przedstawiono nową metodę dyskretyzacji zagadnień początkowo-brzegowych typu parabolicznego dającą bezpośrednią możliwość równoległej realizacji. Udowodniono teoretycznie i eksperymentalnie, że przy ustalonej dekompozycji obszaru Ω, tj. ustalonym H i przy optymalnym doborze parametrów dyskretyzacji w *MES*, tzn. dowolnym, ale ustalonym stosunku $\frac{\tau}{h^2} = const$, schemat rozważany w rozprawie jest stabilny i ma ten sam rząd zbieżności co *schemat zamknięty Eulera*, czyli jest w swojej klasie optymalny, ze względu na rząd zbieżności. Schemat ten daje dodatkowo możliwość stosunkowo nieskomplikowanej i bardzo efektywnej implementacji równoległej, czego nie ma *schemat zamknięty Eulera*. Zaproponowany w rozprawie schemat ma rząd zbieżności o 1/2 większy od schematów rozważanych w [2] i [3]. Według naszej wiedzy jest to wynik nowy w literaturze - patrz monografie [6], [13], [17] i literaturę tam cytowaną, a także sprawozdania z *Conferences on Domain Decomposition Method : 1-17*, patrz [18].

Literatura

[1] X.-C. Cai *Additive Schwarz Algorithms for Parabolic Convection-Diffusion Equations* Numer. Math., 60(1991), str. 41-61.

[2] M. Dryja *Substructuring Methods For Parabolic Problems.* Proceedings of Fourth International Symposium on Domain Decomposition Method for Partial Differential Equations, SIAM, Philadelphia, str. 264-271, 1991

[3] M. Dryja, X. Tu *A Domain Decomposition Discretization of Parabolic Problems.* Ukaże się w roku 2007 w Numer. Math.

[4] J.L. Lions, Y. Maday, G. Turinici *Résolution d'EDP par un schéma en temps ≪pararéel≫.*
C. R. Acad. Sci. Paris, t. 332, Série I, str. 661-668, 2001

[5] Y. Zhuang, X.H. Sun *Stabilized Explicit-Implicit Domain Decomposition Methods for The Numerical Solution of Parabolic Equations.*
SIAM J. SCI. COMPUT Vol. 24, No. 1, str. 335-358, 2003

[6] P.E. Bjorstad, W.D. Gropp, B.F. Smith *Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations.* Cambridge University Press, 1996

[7] S.C. Brener, L.R. Scott *The Mathematical Theory of Finite Element Methods.* Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2002

[8] P. Ciarlet *The Finite Elemen Methods for Eliptic Problems.* North-Holland Publishing Company Amsterdam-New York-Oxford, 1st edition 1978

[9] J.J. Dongarra, I.S. Duff, D. Sorensen, H.A. van der Vorst *Solving Linear Systems on Vector and Shared Memory Computers* Siam, Philadelphia, PA, 1991

[10] M.Dryja, J.M. Jankowscy, *Przegląd metod i algorytmów numerycznych II.* Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa 1988

[11] G. Fairweather *Finite Element Galerkin Methods for differential Equations.* Marcel Dekker, INC., New York and Basel, 1978

[12] A. Quarteroni, A. Valli *Numerical Approximation of Partial Differential Equations.* Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1994

[13] A. Quarteroni, A. Valli *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations* Clarendon Press, Oxford 1999

[14] R.D. Richtmyer, K.W. Morton *Differential Methods for Initial-Value Problems* John Wiley & Sons Inc., New York, 1967

[15] A.A. Samarski *The Theory of Difference Schemes.* Marcel Dekker, Inc., New York, Basel, 2001

[16] V. Thomeé *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems.* Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1997

[17] A.Toselli, O.Widlund *Domain Decomposition Methods - Algorithms and Theory* Springer-Verlag, 2004

[18] *Proceedings of International Conferences on Domain Decomposition Method for Science and Engineering* dostępne na stronie internetowej *http://www.ddm.org*