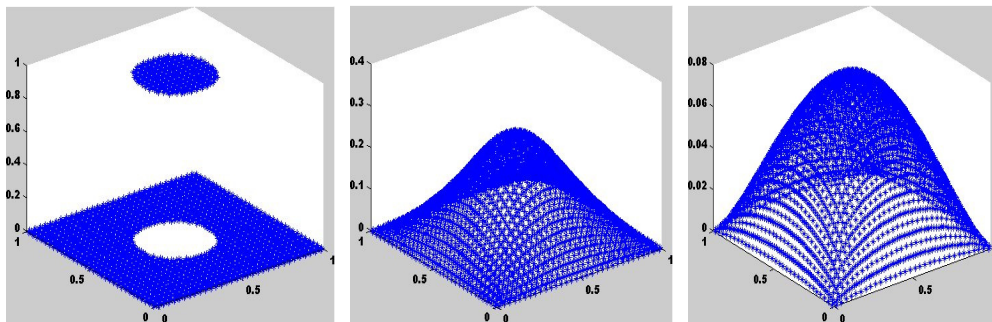


РПЗ: Компютърна симулация с крайни елементи на силно хетерогенни среди

1. Основни дейности и резултати

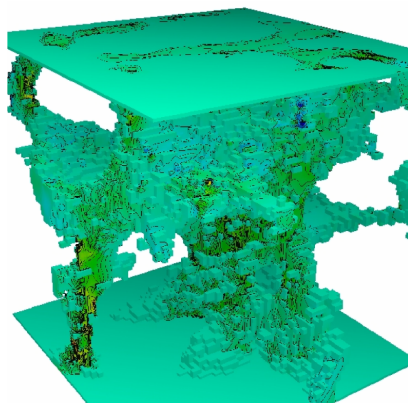
Задача 3.1: *Робастни методи за дискретизация на силно хетерогенни среди.* Основни съвременни средства за компютърно моделиране на непрекъснати среди са методът на крайните обеми, методът на крайните елементи (МКЕ) на Гальоркин, или смесеният МКЕ. Всеки от тези подходи има предимства и недостатъци. При силно хетерогенни среди, методът на крайните обеми и смесеният МКЕ имат висока точност и са локално консервативни. При прилагане на смесен МКЕ е показано, че след елиминиране на налягането и скоростите в алгебричната система, полученото допълнение на Шур за Лагранжевите множители е еквивалентно на дискретизация по метода на Гальоркин с използване на линейни неконформни елементи. Това е един от съществените мотиви за изследваните в рамките на настоящата задача на неконформен МКЕ и прекъснатия вариант на метода на Гальоркин (ПМГ). Така например, получени са нови робастни и локално консервативни неконформни и ПМГ дискретизации за: а) параболични задачи (виж Фиг. 1); б) почти несвиваеми материали в теория на еластичността; в) уравнения на Навие Стокс при големи числа на Рейнолдс. Специално внимание е отделено на изследването на съставни локално консервативни дискретизации, приложими към вокселни структури (виж. Фиг. 2). Разработени са и са изследвани специализирани методи за числена хомогенизация. Резултати по тази задача са публикувани в статии [KMV_09c, VMN_09s, HP_09a] с участието на Н. Костурски, П. Боянова, С. Маргенов, С. Петрова и Я. Вутов.



Фиг.1 Числено решение на параболична задача с неконформни крайни елементи: $t = 0$ (ляво), $t = 2$ (в средата), $t = 10$ (дясно) [VMN_09s]

Задача 3.2: *Паралелни итерационни методи, алгоритми и софтуерни средства за реализация на метода на крайните елементи.* Тази задача включва разработване, адаптиране, настройка и тестване на алгоритми и програмни средства. За решаване на линейни системи възникващи в МКЕ се прилагат ефективни проекционни итерационни методи в пространства на Крилов от тип спрегнат градиент. При тях основна роля играе задълбоченото познаване и отчитане на свойствата и структурата на съответните матрици на коравина. Получени са нови резултати за паралелни методи за преобуславяне MIC(0) (модифицирана непълна факторизация) и AMG (алгебричен мултигрид). При решаване на нелинейни задачи, за линеаризация се прилагат проекционни схеми за декомпозиция и/или метод на Нютон. Балансираното разделяне на матрицата на блокове е в основата на конструиране на ефективни (в това число паралелни) итерационни методи и алгоритми за сложни и силно свързани съставни задачи. Важен елемент от блочното представяне е разделянето на областта на подобласти. Един общ подход за конструиране на ефективно разделяне на матрицата на коравина е анализа на графа представящ разредената структура на матрицата. За получаване на по-реалистични теоретични оценки на паралелната ефективност са изследвани времената за комуникация при отчитане на архитектурата на паралелната изчислителна система и характеристиките на нейната свързаност. Алгоритми използващи оригинално разработен паралелен MIC(0) преобусловител, както и съставни алгоритми използващи Boomer AMG (разработка на Националната лаборатория на САЩ Лорас Ливермор) са реализирани и тествани върху суперкомпютър IBM Blue Gene/P. Резултати по тази задача са

получени с участието на Г. Бенчева, И. Лирков, Н. Костурски, С. Маргенов и Я. Вутов и са публикувани в работи [V_09, GPDSLIT_09a, KM_09a, LVGP_09a, V_09p, K_09p].



Фиг.2 Референтен обемен елемент: вокселна микроструктура трабекуларна кост

Задача 3.3: Йерархична симулация на костна тъкан и (гео)композити. Задачата включва две суперкомпютърни приложения: а) μ МКЕ анализ на микроструктурата на костта; б) μ FEM анализ на (гео)композитни материали. Разработени са и са реализирани специализирани методи за числена хомогенизация на еластичните (пороеластичните) характеристики на силно хетерогенна среда с висока степен на пористост. Микроструктурата на референтния обемен елемент (виж. Фиг.1) е получена на базата на компютърна томография с висока разрешителна способност. В редица случаи тези задачи водят до системи с 10^8 - 10^9 степени на свобода. Използването на паралелни изчислителни системи е единственият начин за решаване на подобни дискретни задачи. Получени са резултати, характеризиращи развитието на процеси на остеопороза в трабекуларна костна тъкан. Изследвано е нивото на анизотропия, както и влиянието на течната (флуидната) фаза при различни степени на пористост в рамките на линеен еластичен модел на микро и макро ниво. Проведени са пилотни числени експерименти за анализ на костта при модел на Био (пороеластичност) на макро ниво и свързана система от тип взаимодействие на флуид и еластично тяло на микро ниво. В процес на реализация е паралелен алгоритъм за йерархично моделиране на течение в геокомпозитна среда. Съществена следваща стъпка в областта на компютърното моделиране на композитни материали са получените резултати свързани с анализ на микрофлуидни процеси и оптимизация на формата на микро ниво. Резултати по тази задача са получени с участието на Н. Костурски, П. Попов, С. Маргенов, С. Петрова и Я. Вутов. Част от тях са публикувани в работи [KM_09a, P_09a, HP_09a, P_09, K_09s].

2. Публикации по темата на проекта, където е цитиран проект ДО 02-115/08

а) излезли от печат:

[V_09] Y. Vutov, Scalability Tests of Two Parallel PCG Solvers on Blue Gene/P, 3rd Annual Meeting of the Bulgarian Section of SIAM, Proceedings (2009), ISSN: 1313-3357, 87-90

[KMV_09] N. Kosturski, S. Margenov, Y. Vutov, Efficient Solution of μ FEM Elasticity Problems in the Case of Almost Incompressible Materials, 3rd Annual Meeting of the Bulgarian Section of SIAM, Proceedings (2009), ISSN: 1313-3357, 65-68

[P_09] S. Petrova, Applications of one-shot methods in PDEs constrained shape optimization, Mathematics and Computers in Simulation, 80, No. 3 (2009), ISSN: 0378-4754, 581-597

б) приети за печат

[KM_09a] N. Kosturski, S. Margenov, Numerical Homogenization of Bone Microstructure, Large Scale Scientific Computing, Springer LNCS 5910

[P_09a] S. Petrova, On Shape Optimization of Acoustically Driven Microfluidic Biochips, Large Scale Scientific Computing, Springer LNCS 5910

[GPDSLIIOT_09a] M. Ganzha, M. Paprzycki, M. Drozdowicz, M. Senobari, I. Lirkov, S. Ivanovska, R. Olejnik, P. Telegin, Information flow and mirroring in an agent-based Grid resource brokering system, Large Scale Scientific Computing, Springer LNCS 5910

[LVGP_09a] I. Lirkov, Y. Vutov, M. Ganzha, M. Paprzycki, Parallel Performance Evaluation of MIC(0) Preconditioning Algorithm for Voxel μ FE Simulation, Proceedings of Parallel processing and applied mathematics 2009

[HP_09a] R.H.W. Hoppe and S.I. Petrova, Multi-scale method for the crack problem in microstructural materials, Computational Methods in Applied Mathematics, Volume 10, 2010

в) изпратени за публикуване

[BMN_09s] Boyanova, S. Margenov, M. Neytcheva, Robust AMLI Methods for Elliptic and Parabolic Crouzeix-Raviart FEM systems, Computational Methods in Applied Mathematics

г) в процес на подготовка

[K_09p] N. Kosturski, Scalable PCG Solution Algorithms for μ FEM Elasticity Systems

[V_09p] Y. Vutov, Parallel MIC(0) Preconditioning for Numerical Upscaling of Anisotropic Linear Elasticity Materials

3. Презентации и доклади

[1] N. Kosturski, Scalable PCG Solution Algorithms for μ FEM Elasticity Systems, Mathematics and Computers in Simulation, Modelling 2009, Roznov pod Radhostem, Czech Republic, June 22 - 26, 2009

[2] N. Kosturski, Scalable PCG Solution Algorithms for μ FEM Elasticity Systems, Mathematics and Computers in Simulation, Annual Meeting of BGSIAM'09, Sofia, Dec. 21 - 22, 2009

[3] E. Lilkova, Computer simulation of human interferon-gamma mutants, Meetings in Physics, Sofia University, March 2009

[4] I. Lirkov, Parallel Performance Evaluation of MIC(0) Preconditioning Algorithm for Voxel μ FE Simulation, 8th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, Wroclaw, September 13-16, 2009

[5] S. Margenov, Blue Gene in Bulgaria – Center of Excellences on Supercomputing Applications – Joint Project of IPP - BAS, SU, TU - Sofia and MU - Sofia, Opening of the IBM Academic Initiative, Mar. 9, Sofia, 2009

[6] S. Margenov, Parallel PCG algorithms for voxel FEM systems, ComplexHPC Meeting, Universidade Tecnica de Lisboa, Portugal, Oct. 19-20, 2009

[7] S. Margenov, Supercomputing: methods, algorithms and applications (plenary talk), Computer Science'09, Technical University - Sofia, Bulgaria, Nov. 5-6 2009

[8] S. Petrova, Applications of one-shot methods in PDEs constrained shape optimization, Mathematics and Computers in Simulation, ENUMATH 2009, Uppsala, Swiden, June 29-July 3, 2009

[9] Y. Vutov, A Parallel MIC(0) Preconditioning Technique for Elliptic Problems, Bulgarian – Swedish Workshop “Numerical Methods and High Performance Computations – Integrity and Novel Ideas, IPP – BAS, Sofia, February 17 – 18, 2009

[10] Y. Vutov, Parallel MIC(0) Preconditioning for Numerical Upscaling of Anisotropic Linear Elasticity Materials, Minisymposium on HPC-driven Numerical Methods and Applications, ENUMATH 2009, Uppsala, Sweden, June 29-July 3, 2009

4. Други

[1] Организационно финансови дейности:

а) Организиране и провеждане на периодични сбирки на Оперативния комитет (С. Маргенов, С. Грозданова);

б) Периодични сбирки на оперативна група за организация на работата по РП1, РП3 и РП4 (С. Маргенов, К. Боянов, В. Лазаров, И. Димов, К. Георгиев);

в) Допълнително споразумение и Анекс към Допълнително Споразумение (С. Маргенов, К. Боянов).

[2] Създаване и поддръжка на интернет страница на проекта: Вариант 1 – юни 2009; Вариант 2 – октомври 2009 (С. Грозданова).

[3] Закупуване на техника по РП1, РП3 и РП4 (С. Маргенов, К. Боянов, В. Лазаров, К. Георгиев). Подготовка на спецификация на софтуер по РП1, РП3 и РП4 (С. Маргенов, И. Димов, К. Георгиев, В. Лазаров).

[4] Създаване на компютърен клас за провеждане на обучение и работа по проект SuperCA: ремонт, компютърно и комуникационно оборудване, инсталиране на софтуер под управление на Linux (С. Маргенов, В. Лазаров, И. Лирков, Я. Вутов, Н. Костурски, Г. Бенчева, С. Грозданова).

[5] Адаптация и допълнение на учебното съдържание на курс по Паралелни алгоритми към ФМИ СУ (С. Маргенов, Г. Бенчева).

[6] Адаптация и допълнение на учебното съдържание на курс по Числени методи за системи с разредени матрици към ФМИ СУ (С. Маргенов, Г. Бенчева).

[7] Допълнителни дейности по разпространяване и популяризиране на резултатите в рамките на:

а) Conference on Large Scale Scientific Computing, Sozopol, June 4-8, 2009 (организирана от ИПОИ);

б) Учредително заседание на УК по COST Action IC0805 Open Network for High-Performance Computing on Complex Environments, Брюксел, 7 май 2009 (С. Маргенов, член на УК);

в) Minisymposium on HPC-driven Numerical Methods and Applications, ENUMATH 2009, Uppsala, June 29 – July 3 (С. Маргенов, съорганизатор);

г) Заседание на УК по COST Action IC0805 Open Network for High-Performance Computing on Complex Environments, Лисабон, 20 октомври 2009 (С. Маргенов, член на УК).