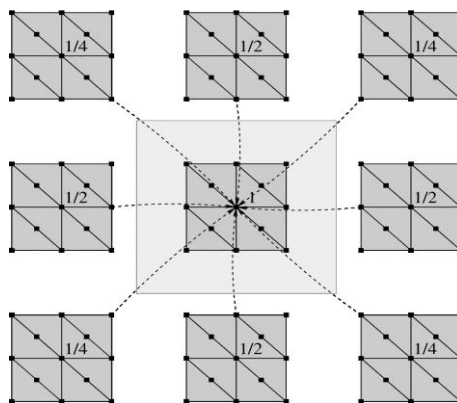


РП4: Компютърна симулация с крайни елементи на силно хетерогенни среди

1. Основни дейности и резултати

Задача 4.1: Робастни методи за дискретизация на силно хетерогенни среди.

Задачи, описани с помощта на частни диференциални уравнения, могат да бъдат дискретизирани с метод на крайните обеми, метод на крайните елементи (МКЕ) на Гальоркин, или смесен МКЕ. Всеки от тези методи има своите предимства. Получени са нови резултати, характеризиращи скоростта на сходимост на многонивови методи от тип AMLI. Публикуван е научен обзор (статия по покана в специализиран том на Springer Proceedings in Mathematics & Statistics) на съвременното състояние на многонивовите методи за силно анизотропни елиптични задачи. Тук специално ще отбележим получените нови резултати на базата на адитивна апроксимация на допълнението на Шур при представяне на областта, като обединение от макроелементи с припокриване (виж Фиг. 1). За пръв път са представени числени експерименти, демонстриращи оптималната изчислителна сложност на новите AMLI алгоритми за силно хетерогенни среди, включващи доминиращо направление на анизотропия, несъгласувано с мрежата на дискретизация, както и анизотропни канали. Получени са също така нови резултати за съгъстяване на мрежата от тип SC (агрегиране по направления: semicoarsening) и балансиран SC за бикубични крайни елементи. Резултати от този тип имат пряко отношение към дискретизация и ефективно решаване на силно свързани нестационарни системи, в това число уравненията на Ламе за почти несвиваеми материали или уравненията на Навие-Стокс при големи числа на Рейнолдс. Продължи работата в областта на алгоритми за дискретизация на нестационарни задачи, с използване на устойчива схема по времето на базата на метод на променливите направления. Публикуваният алгоритъм за уравненията на Стокс има оптимална изчислителна сложност. Получени са също така нови резултати за числено решаване на класове нелинейни задачи, описващи динамика на греди със сложно напречно сечение (в това число ламинарни композитни материали). Ефективността на този клас алгоритми се основава на комбиниране на p -версия на МКЕ и подходящо развитие в степенни редове.



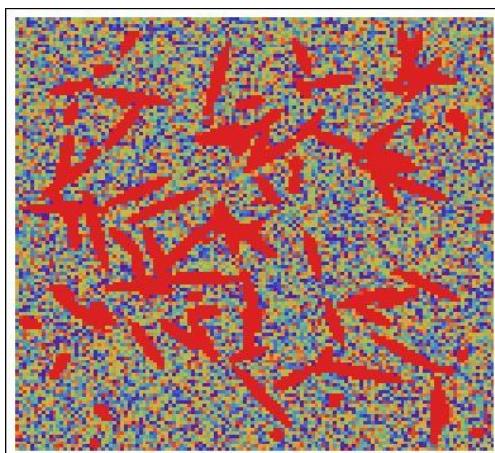
Фиг. 1 AMLI преобуславяне: адитивна апроксимация на допълнението на Шур при разделяне на областта на макроелементи с припокриване и техните тегла

Резултати по тази задача са представени в [GKL_12], [KLM_12], [KLMa_13], [Sma_1], [L_13a], [SMM_13s], [SM_13p], [SM_13p].

Задача 4.2: Паралелни итерационни методи, алгоритми и софтуерни средства за линейни системи, получени при прилагане на МКЕ.

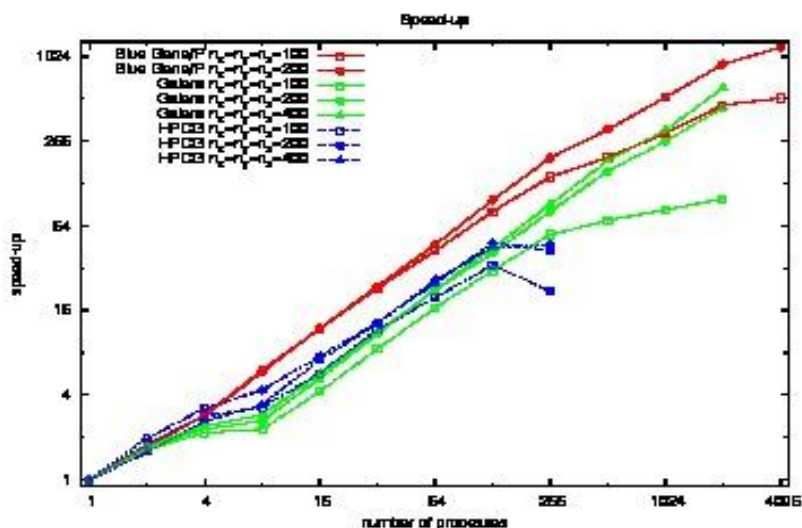
Съвременната теория на оптималните методи за решаване на големи линейни системи с разреждени матрици е доста добре развита, когато скоковете на коефициентите са съгласувани с интерфейсите на нивото на най-грубо геометрично разделяне на областта. Такива предположения обикновено се правят при многонивови и мултигрид методи, както и при методи, използващи

разделяне на областта на подобласти. От друга страна, съществуват паралелни методи използващи непълна факторизация, които могат да са по-робастни по отношение на локализирани скокове на коефициентите, но тяхната сходимост е по-бавна.



Фиг. 2. Тестова задача включваща хетерогенна среда със стохастично вариращи коефициенти на дифузия и сложна мрежа от канали: получените резултати от числени експерименти потвърждават оптималната изчислителна сложност на многонивовия итерационен метод при робастност относно скоковете на коефициентите и геометрията на интерфейсите

В тази задача се търси баланс между робастност и изчислителна сложност с акцент върху възможностите за ефективна реализация върху високопроизводителни кълъстери и масивно паралелни машини с разпределена памет, в това число суперкомпютър IBM Blue Gene/P. Важна роля за ефективната паралелна реализация на МКЕ има балансираното разделяне на задачата на подзадачи и съответствието на разделянето на графа на дискретната задача относно комуникационния граф на паралелната изчислителна система. Получени са нови резултати, както за дискретизации с вокселна структура, така и за тримерни неструктурирани мрежи при най-общи предположения. Те включват: а) анализ на изчислителната сложност; б) анализ на възможностите за паралелна реализация; в) разработване на ефективни паралелни алгоритми и тяхната програмна реализация; г) сравнителен анализ на паралелните ускорения и ефективност.

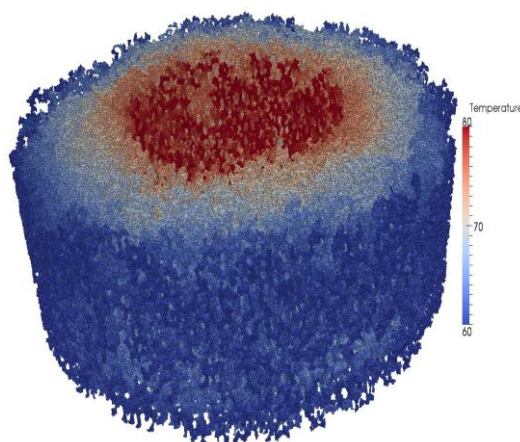


Фиг. 3. Сравнителен анализ паралелните ускорения при численото решаване на нестационарното уравненията на Стокс върху: а) суперкомпютър IBM Blue Gene/P; б) високопроизводителен HP кълъстер в ИИКТ – БАН; в) високопроизводителен кълъстер Galera в ТУ – Гданск, Полша

Резултати по тази задача са публикувани в статии [GKL_12], [LPG_12], [LPGG_13], [GLP_13a], [SM_13a], [SWGDPFL_13a],[KLM_13p].

Задача 4.3: Йерархична симулация: микроструктура на порести среди.

По тази задача продължава работата, свързана с прилагане на микро ниво на МКЕ (μ FEM) и суперкомпютърни приложения с включващи: а) μ МКЕ анализ на микроструктурата на човешката кост; б) μ FEM анализ на композитни материали. Задачата е мотивирана от напредъка в суперкомпютърните технологии, както и от наличността на компютърни томографски изображения на микро структурата. Прилага се числена хомогенизация за референтния обемен елемент чрез решаване на подходящи задачи за клетки от областта и генериране на макроскопичните свойства на хомогенизираната среда. Получени са нови резултати за определяне на ефективните биомеханични характеристики на трабекуларна костна тъкан при отчитане на главните направления на доминираща анизотропия. Изследвана е също така ефективната топлопроводимост на $SiSiC$. Това е специален инертен материал с висока степен на пористост, който се използва при конструиране на ефективни системи за горене. На базата на компютърно томографско изображение на част от материала, дигитално е възстановена цялата област на горене, където е изследвано времето за въздушно охлаждане при висока скорост на потока.

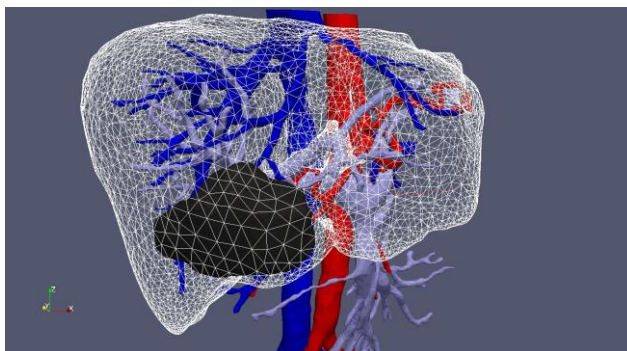


Фиг. 4. Суперкомпютърно моделиране на процеси на горене и охлаждане в пореста среда на базата на компютърно томографско изображение на микроструктурата на $SiSiC$

Резултати по тази задача са публикувани в работи [MSV_13], [KMV_13], [KMV_13a], [B_13p], [BL_13p].

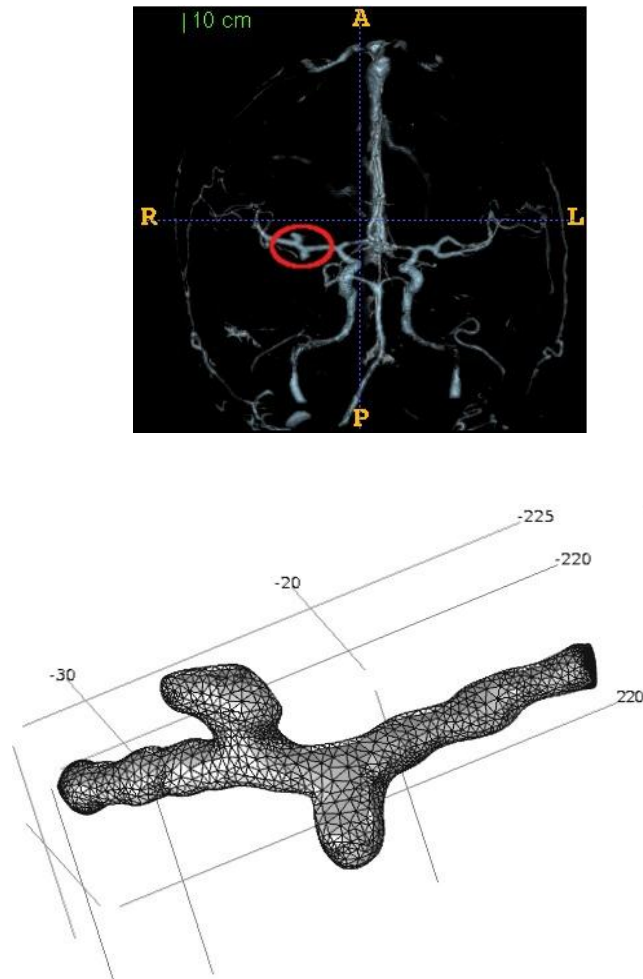
Задача 4.4: Йерархично моделиране: биомедицински приложения.

Основен акцент тук е създаването на йерархични модели за порести среди, които включват процеси на дифузия, конвекция, реакция и динамика на флуиди. На микро ниво средата има силно изразена хетерогенна структура и нелинейни свойства. Освен това процесите имат различни времеви мащаби.



Фиг. 5. Суперкомпютърно моделиране на радиочестотна туморна аблация: крайноелементна мрежа на черния дроб, генерирана на базата на сегментирано медицинско изображение

През отчетния период продължи работата в областта на следните биомедицински приложения: а) моделиране на процесите при радиочестотна аблация на чернодробни туморни образувания; б) моделиране на процеси на миграция на стволови клетки при терапия на заболявания на кръвта; в) моделиране на течения в кръвоносни съдове с мозъчни аневризми. Така например, в случая на туморна аблация компютърният модел включва: електрическо поле, генерирано от радиочестотни електрохирургични инструменти; температурно поле породено от градиента на електрическото поле; загуба на топлина вследствие на течението на кръвта в капилярната мрежа (масов член) и постъпващата кръв през порталната вена; разрушаване на клетъчната структура в зоната на аблация.



Фиг. 6. Суперкомпютърно моделиране на мозъчни аневризми: горе - сегментирано медицинско изображение; долу - крайноелементна мрежа на показаната горе част кръвоносен съд с аневризми
Част от получените резултати са представени в статии [KMV_13], [KMV_13a], [B_13p], [BL_13p].

2. Публикации по темата на проекта, където е цитиран проект DCVP 02/1

а) излезли от печат:

[GKL_12] M. Ganzha, N. Kosturski, I. Lirkov, Improving the Efficiency of Parallel Alternating Directions Algorithm for Time Dependent Problems, AIP Conference Proceedings, 1487 (2012), 322-328

[KMV_13] N. Kosturski, S. Margenov, Y. Vutov, Computer Simulation of RF Liver Ablation on an MRI Scan Data, AIP Conf. Proc. 1487 (2013), 120-126

[KLM_12] J. Kraus, M. Lyubery, S. Margenov, Semi-Coarsening AMLI Preconditioning of Higher Order Elliptic Problems, AIP Conference Proceedings, Vol. 1487 (1) (2012), 30-41

[KLM_13] J. Kraus, M. Lyubery, S. Margenov, Robust Algebraic Multilevel Preconditioners for Anisotropic Elliptic Problems, In: Numerical Solution of Partial Differential Equations: Theory, Algorithms and their Applications, Springer Proceedings in Mathematics & Statistics (2013), 217-246

[KLMa_13] J. Kraus, M. Lyubery, S. Margenov, Robust Multilevel Methods for Quadratic Finite Element Anisotropic Elliptic Problems, Numerical Linear Algebra With Applications (2013), DOI: 10.1002/nla.1876 (IF 1.202)

[LPG_12] I. Lirkov, M. Paprzycki, M. Ganzha, Performance Analysis of Parallel Alternating Directions Algorithm for Time Dependent Problems, Springer LNCS, 7203 (2012), 173-182

[LPGG_13], I. Lirkov, M. Paprzycki, M. Ganzha, P. Gepner, Performance Evaluation of MPI/OpenMP Algorithm for 3D Time Dependent Problems, Preprints of Position Papers of the Federated Conference on Computer Science and Information Systems (2013), 27-32

[SM_13] S. Stoykov, S. Margenov, Nonlinear Vibrations of Rotating 3D Tapered Beams with Arbitrary Cross Sections, Proceedings of the 4th ECCOMAS Thematic Conference on Computational Methods in Structural Dynamics and Earthquake Engineering, M. Papadrakakis, P. Papadopoulos (eds.), Kos, Greece (2013), Paper id.: 1479, 15 p.

[SMa_13] S. Stoykov, S. Margenov, Nonlinear Free Vibrations of 3D Composite Beams, Proceedings of the 11th International Conference on Vibration Problems, Z. Dimitrova, J. Almeida, R. Goncalves (eds.), Lisbon, Portugal (2013), Paper id: 164, 10 p.

б) приети за печат

[GLP_13a] M. Ganzha, I. Lirkov, M. Paprzycki, Comparative Analysis of High Performance Solvers for Solving Stokes Equation, AIP Conf. Proc.

[GKV_13a] K. Georgiev, N. Kosturski, Y. Vutov, On the Adaptive Time-Stepping in Radio-Frequency Liver Ablation Simulation: Some Preliminary Results, Springer LNCS

[KMV_13a] N. Kosturski, S. Margenov, Y. Vutov, Calibration of Parameters for Radio-Frequency Ablation Simulation, Springer LNCS

[L_13a] M. Lyubery: Robust Balanced Semi-Coarsening Multilevel Preconditioning of Bicubic FEM Systems, Springer LNCS

[MSV_13] S. Margenov, S. Stoykov, Y. Vutov, Numerical Homogenization of Heterogeneous Anisotropic Linear Elastic Materials, Springer LNCS

[SM_13a] S. Stoykov, S. Margenov, Nonlinear Forced Vibration Analysis of Elastic Structures by Using Parallel Solvers for Large-Scale Systems, Springer LNCS

[SWGDPFL_13a] P. Szmeja, K. Wasielewska, M. Ganzha, M. Drozdowicz, M. Paprzycki, S. Fridanova, I. Lirkov, Reengineering and Extending the Agents in Grid Ontology, Springer LNCS

в) изпратени за печат

[SMM_13s] S. Stoykov, E. Manoach, S. Margenov, An efficient beam model based on the p-version finite element method and preliminary cross sectional analysis, Finite Elements in Analysis and Design

г) в процес на подготовка

[B_13p] G. Bencheva, Computer Modelling of Cerebral Aneurysm Hemodynamics

[BL_13p] G. Bencheva, I. Lirkov, High-Performance Computer Modelling of Patient Specific Cerebral Aneurysm Hemodynamic

[KLM_13p] J. Kraus, M. Lyubery, S. Margenov, Auxiliary Space Multigrid Method for Elliptic Boundary Value Problems

[SM_13p] S. Stoykov, S. Margenov, Nonlinear Forced Vibrations of 3D Laminated Composite Beams, Journal of Applied Mathematics

[Sma_13p] S. Stoykov, S. Margenov, Geometrically Nonlinear Vibrations of Elastic Structures by Parallel Computations

3. Презентации и доклади

I. Lirkov, Improving the efficiency of parallel alternating directions algorithm for time dependent problems, Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences, St.St. Constantine and Helena, Varna, Bulgaria, June 11-16, 2012

M. Lymbery, Semi-coarsening AMLI preconditioning of higher order elliptic problems, Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences, plenary talk, St.St. Constantine and Helena, Varna, Bulgaria, June 11-16, 2012

S. Margenov, Multilevel preconditioning of anisotropic heterogeneous problems, Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences, St.St. Constantine and Helena, Varna, Bulgaria, June 11-16, 2012

S. Margenov, Multilevel preconditioning of strongly anisotropic elliptic problems, 21st International Conference on Domain Decomposition Methods, INRIA, Rennes, France, June 25-29, 2012

S. Margenov, Robust multilevel methods for strongly heterogeneous anisotropic problems and simulations in porous media, plenary talk, Annual Conference of the European Consortium for Mathematics in Industry, ECMI 2012, Lund, Sweden, July 23-27, 2012

S. Margenov, On the robustness of multilevel preconditioners for quadratic FE discretizations of anisotropic elliptic problems, European Congress on Computational Methods in Applied Science and Engineering, ECCOMAS 2012, Vienna, Austria, September 10-14, 2012

M. Lymbery, On the robustness of multilevel preconditioners for quadratic FE discretizations of elliptic problems, European Congress on Computational Methods in Applied Science and Engineering, ECCOMAS 2012, Vienna, Austria, September 10-14, 2012

S. Margenov, Robust solution methods for strongly heterogeneous problems and supercomputing applications in porous media, plenary talk, SPOMECH, Workshop on Supercomputing for computational solid and fluid mechanics, Ostrava, Czech Republic, November 19-23, 2012

S. Margenov, Robust multilevel methods for strongly heterogeneous problems, Numerical Methods for PDEs, Texas A & M University, College Station, Texas, USA, January 25-26, 2013

Г. Бенчева, Паралелни пресмятания с MPI, Еднодневен курс "Въведение в паралелно програмиране с MPI и CUDA", ИИКТ-БАН, София, България, Февруари 25, 2013

S. Margenov, Supercomputing Support of the Researches and Education, First Europe – China HPC Conference: Partnership for Supercomputing Applications in Science and Industry, Sofia, Bulgaria, April 8-10, 2013

Г. Бенчева, Компютърно моделиране хемодинамиката на церебрален аневризъм, Workshop: Информационни и комуникационни технологии за човешко здраве и качество на живот (ICT-HuHeQuL), Старозагорски минерални бани, 15-17 Май, 2013

S. Margenov, Robust multilevel methods for strongly heterogeneous problems and supercomputing applications in porous media, plenary talk, 5th International Conference on Porous Media, Prague, Czech Republic, May 21-24, 2013

Y. Vutov, Numerical simulation of the cooling process in a porous media gas burner, 5th International Conference on Porous Media, Prague, Czech Republic, May 21-24, 2013

G. Bencheva, On the High-Performance Computer Modelling of Patient Specific Cerebral Aneurysm Hemodynamics, Large-Scale Scientific Computations, Sozopol, Bulgaria, June 3-7, 2013

I. Lirkov, Reengineering and extending the Agents in Grid Ontology, Large-Scale Scientific Computations, Sozopol, Bulgaria, June 3-7, 2013

M. Lymbery, Robust balanced semi-coarsening multilevel preconditioning of bicubic FEM systems, Large-Scale Scientific Computations, Sozopol, Bulgaria, June 3-7, 2013

S. Stoykov, Nonlinear forced vibration analysis of elastic structures by using parallel solvers for Large-Scale Systems, 9th International Conference on "Large-Scale Scientific Computations", Sozopol, Bulgaria, June 3-7, 2013

Y. Vutov, Numerical Homogenization of Heterogeneous Anisotropic Linear Elastic Materials, 9th International Conference on "Large-Scale Scientific Computations", Sozopol, Bulgaria, June 3-7, 2013

S. Stoykov, Nonlinear vibrations of rotating 3D tapered beams with arbitrary cross sections, COMPDYN 2013, Kos, Greece, June 12-14, 2013

I. Lirkov, Comparative analysis of high performance solvers for solving Stokes equation, Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences, Albena, Bulgaria, June 24-29, 2013

S. Margenov, Multilevel methods for strongly anisotropic problems, plenary talk, Preconditioning of Iterative Methods, Prague, Czech Republic, July 1-5, 2013

I. Lirkov, Performance Evaluation of MPI/OpenMP Algorithm for 3D Time Dependent Problems, 6th workshop "Computer Aspects of Numerical Algorithms", Federated conference on Computer science and information systems, Krakow, Poland, September 8-11, 2013

S. Stoykov, Nonlinear free vibrations of 3D composite beams, ICOVP, Lisbon, Portuga, September 9-12, 2013

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, РП4 и РП5 (С. Маргенов, В. Лазаров, Е. Атанасов, И. Димов, К. Георгиев);

[2] Популяризиране на проекта в средства за масова информация (С. Маргенов);

[3] Създаване и поддръжка на интернет страница на проекта: (С. Грозданова);

[4] Координиране на работата по закупуване на техника и специализиран софтуер по РП1, РП3, РП4 и РП5 (С. Маргенов, Е. Атанасов, В. Лазаров);

[5] Адаптация и допълнение на учебното съдържание на курсове по „Паралелни алгоритми“ и „Числени методи за системи с разредени матрици“ към ФМИ СУ (С. Маргенов, Г. Бенчева);

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

а) Conference on Large Scale Scientific Computing, Sozopol, June 6-20, 2013 (С. Маргенов, С. Грозданова, И. Лирков, Г. Бенчева, М. Лимбери, С. Стойков);

б) Работен семинар: SuperCA++, Трявна, 31 март – 2 април 2013 (С. Маргенов, С. Грозданова);