



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING

ÚSTAV MATEMATIKY

INSTITUTE OF MATHEMATICS

**AKCELERACE NUMERICKÉHO VÝPOČTU VEDENÍ TEPLA
V TUHÝCH TĚLESECH V INVERZNÍCH ÚLOHÁCH**

ACCELERATION OF NUMERICAL COMPUTATION OF HEAT CONDUCTION IN SOLIDS IN INVERSE TASKS

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. Tomáš Ondruch

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

doc. Ing. Michal Pohanka, Ph.D.

BRNO 2019

Zadání diplomové práce

Ústav:	Ústav matematiky
Student:	Bc. Tomáš Ondruch
Studijní program:	Aplikované vědy v inženýrství
Studijní obor:	Matematické inženýrství
Vedoucí práce:	doc. Ing. Michal Pohanka, Ph.D.
Akademický rok:	2018/19

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

Akcelerace numerického výpočtu vedení tepla v tuhých tělesech v inverzních úlohách

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

Inverzní výpočty, u kterých se okrajové podmínky počítají nepřímou, se vyznačují velkou výpočetní náročností. Během řešení inverzních úloh se mnohonásobně provádí výpočet vedení tepla v tuhých tělesech. Desktopové procesory (CPU) a zejména grafické karty (GPU), které se vyznačují potencionálně mnohonásobně větším výpočetním výkonem než CPU, umožňují paralelně zpracovávat velké množství úloh. Diplomová práce se zaměřuje na prozkoumání a otestování možností urychlení inverzních výpočtů s využitím paralelizace, která může být použita na různých úrovních, a to jak ve vlastním výpočtovém jádře vedení tepla, tak v několikanásobném spuštění výpočtového jádra. Příkladem je řešení inverzního výpočtu vedení tepla s využitím genetických algoritmů, kdy je možné dosáhnout během řešení velkého stupně paralelizace, a tudíž je možné využít velké výpočetní síly GPU. Numerický výpočet vedení tepla lze řešit různými přístupy. Může se využít princip superpozice, který vede na velké množství úloh s třídiagonální maticí, které je možné řešit na GPU pomocí některých z metod: Parallel Cyclic Reduction, Cyclic Reduction, Sweep (Gauss elimination + reordering optimization for full coalescing). Nebo lze problém popsat pomocí soustavy lineárních rovnic, která vede na úlohu s velmi řídkou maticí a tu řešit např. pomocí metody sdružených gradientů s využitím předpodmínění. Diplomant bude mít na našem pracovišti zajištěno potřebné HW i SW vybavení.

Cíle diplomové práce:

Diplomant provede rešeršní studii použitelných metod výpočtů, které využívají paralelizaci řešeného problému. Cílem práce je vybrat vhodné metody, naprogramovat je a otestovat je. V rámci porovnání dosažených výsledků je úkolem zjistit, které metody jsou pro numerické výpočty vedení tepla v tuhých tělesech v inverzních úlohách nejvhodnější, a jaké je možné dosáhnout zrychlení v porovnání s klasickými přístupy.

Seznam doporučené literatury:

POHANKA, M.; ONDROUSKOVA, J. Implicit numerical multidimensional heat-conduction algorithm parallelization and acceleration on a graphics card. *Materiali in Tehnologije*, vol. 50 (2), 2016, pp. 183-187.

INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. 4th ed. New York: Wiley, 1996. ISBN 0-471-30460-3.

PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980. ISBN 0-891-16522-3.

POHANKA, M. Limitation of thermal inverse algorithm and boundary conditions reconstruction for very fast changes on boundary, *IM2007*, 2007, pp.229-230, ISBN 978-80-87012-06-2.

RAUDENSKÝ, M.; POHANKA, M.; HORSKÝ, J. Combined inverse heat conduction method for highly transient processes. In *Advanced computational methods in heat transfer VII*, Halkidiki: WIT Press, 2002, pp. 35–42. ISBN 1 85312 9062.

BECK, J. V.; BLACKWELL, B.; CHARLES, R. C. *Inverse Heat Conduction: Ill-posed Problems*. New York: Wiley, 1985. ISBN 0-471-08319-4.

WILLIAM, T. V. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 2nd Edition, 1992, ISBN 0-52-43108-5.

SLÁMA, L.; RAUDENSKÝ, M.; HORSKÝ, J.; BŘEZINA, T.; KREJSA, J. Evaluation of quenching test of rotating roll with unknown time constant of sensor using genetic algorithm. *Int. Conf. Mendel*, Brno, 1996.

MAN, K. F., TANG, K. S., KWONG, S. *Genetic Algorithms.: Concepts and Designs*, Springer, 1999. ISBN 9781852330729.

ABSTRAKT

Diplomová práce se zabývá možnostmi urychlení numerických výpočtů, které jsou prováděny v rámci řešení úloh vedení tepla v tuhých tělesech. Práce shrnuje základní poznatky o principech přenosu tepla s důrazem na vedení. Dále se věnuje teorii metody kontrolních objemů, která umožňuje převést danou přímou úlohu vedení tepla do tvaru soustavy lineárních rovnic s řídkou maticí. Přehledově je popsána problematika inverzních úloh vedení tepla, v rámci kterých jsou výpočty přímých úloh intenzivně využívány. Jsou představeny vybrané numerické metody, které lze pro účely časově efektivního řešení přímých úloh vedení tepla využít. Vysvětleny jsou poznatky o implementaci výpočtů a jejich testování na modelové úloze dvourozměrného vedení tepla. Dosažené výsledky jsou porovnány a zhodnoceny z hlediska časové náročnosti testovaných přístupů.

KLÍČOVÁ SLOVA

vedení tepla, numerické metody, lineární rovnice, řídká matice, efektivita, paralelizace

ABSTRACT

The master's thesis deals with possible ways of accelerating numerical computations, which are present in problems related to heat conduction in solids. The thesis summarizes basic characteristics of heat transfer phenomena with emphasis on heat conduction. Theoretical principles of control volume method are utilized to convert a direct heat conduction problem into a sparse linear system. Relevant fundamentals from the field of inverse heat conduction problems are presented with reference to intensive computations of direct problems of such kind. Numerical methods which are well-suited to find a solution of direct heat conduction problems are described. Remarks on practical implementation of time-efficient computations are made in relation with a two-dimensional heat conduction model. The results are compared and discussed with respect to obtained computational time for several tested methods.

KEYWORDS

heat conduction, numerical methods, linear equations, sparse matrix, efficiency, parallel computing

ONDRUCH, Tomáš. *Akcelerace numerického výpočtu vedení tepla v tuhých tělesech v inverzních úlohách*. Brno, 2019, 96 s. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, Ústav matematiky. Vedoucí práce: doc. Ing. Michal Pohanka, Ph.D.

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že svou diplomovou práci na téma „Akcelerace numerického výpočtu vedení tepla v tuhých tělesech v inverzních úlohách“ jsem vypracoval samostatně pod vedením vedoucího diplomové práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou všechny citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce.

Brno

.....

podpis autora

PODĚKOVÁNÍ

Rád bych poděkoval vedoucímu diplomové práce panu doc. Ing. Michalu Pohankovi, Ph.D. za odborné vedení, konzultace, trpělivost a podnětné návrhy k práci. Poděkování bych rovněž věnoval také rodině a přátelům, kteří mě během studia vytrvale podporovali.

Brno

.....

podpis autora

OBSAH

Úvod	14
1 Základy teorie přenosu tepla	16
1.1 Vedení tepla	16
1.2 Proudění	18
1.3 Záření	19
2 Numerické řešení přímé úlohy vedení tepla	20
2.1 Metoda konečných diferencí	20
2.2 Metoda konečných objemů	20
2.3 Metoda konečných prvků	21
2.4 Metoda kontrolních objemů	22
3 Inverzní úlohy vedení tepla	30
3.1 Úvod do problematiky inverzních úloh	30
3.2 Metody pro řešení inverzních úloh vedení tepla	32
4 Řešení soustav lineárních rovnic v přímých úlohách vedení tepla	39
4.1 ADI - Metoda střídavých směrů	39
4.2 Metoda sdružených gradientů	47
5 Prostředky ke zvýšení efektivity numerických výpočtů	55
5.1 Významné aspekty sériového přístupu	55
5.2 Významné aspekty paralelního přístupu	57
6 Experimentální měření	60
6.1 Příprava experimentu	60
6.2 Průběh měření	60
7 Modelová úloha	62
8 Implementace numerického řešení modelové úlohy	65
8.1 Implementace převodu úlohy do diskrétního tvaru	65
8.2 Implementace metody střídavých směrů	67
8.3 Implementace metody sdružených gradientů s předpokládáním	68
9 Výsledky numerických výpočtů	70
9.1 Využití hardwarové prostředky	70
9.2 Nastavení přesnosti numerických výpočtů	70
9.3 Srovnání naměřených a vypočítaných teplot	71

9.4	Vyhodnocení výsledků z hlediska dosaženého urychlení numerických výpočtů	72
Závěr		82
Literatura		85
Seznam symbolů, veličin a zkratk		89
Seznam příloh		92
A	Návod k obsluze spustitelných programů	93
A.1	Obsluha programu vypocetADI	93
A.2	Obsluha programu vypocetPCG	94
B	Obsah přiloženého CD	96

ÚVOD

Při řešení úloh z oblasti aplikovaného výzkumu se lze díky technologickému pokroku stále častěji setkat s využitím numerických výpočtů a simulací, které umožňují modelovat zkoumaný fyzikální systém. Pro účely popisu dynamiky daného fyzikálního jevu se pak běžně využívá matematicko-fyzikálních modelů, jejichž odvození vychází z teorie diferenciálních rovnic.

Zahrnuje-li vyšetřovaný fyzikální systém tuhé těleso, ve kterém je zkoumáno vedení tepla, a cílem řešené úlohy je určení vývoje teplotního pole v daném tělese, pak sestavený matematicko-fyzikální model zřejmě vychází z formulace tzv. přímé úlohy nestacionárního vedení tepla. Ta při popisu přenosu tepla vedením využívá aparát parciálních diferenciálních rovnic druhého řádu a zahrnuje rovněž předepsání počáteční podmínky a známých okrajových podmínek. V aplikační sféře se při řešení přímých úloh vedení tepla využívá především numerický přístup, díky kterému lze výpočty teplotních polí provádět formou počítačových simulací.

V technické praxi bývá určení okrajových podmínek značně problematické, což komplikuje formulaci přímé úlohy. Obvykle lze na základě experimentálního přístupu zjistit časový průběh teplot pouze ve vybraných bodech uvnitř zkoumaného tělesa. Úloha, jejímž cílem je určení okrajových podmínek ze známého teplotního průběhu uvnitř tuhého tělesa, se nazývá inverzní úloha vedení tepla. [1]

V posledních letech byla vyvinuta řada metod pro řešení inverzních úloh vedení tepla. Vhodnost jejich použití se odvíjí v závislosti na několika faktorech zahrnujících povahu vyšetřovaného jevu nebo výpočetní efektivitu. Významným společným rysem všech známých metod pro řešení inverzních úloh vedení tepla je skutečnost, že pro účely výpočtu okrajových podmínek je mnohonásobně proveden výpočet řešení přímé úlohy nestacionárního vedení tepla. Právě z tohoto důvodu je pro inverzní úlohy vedení tepla obecně typická jejich výpočetní náročnost, a je tak účelné zabývat se možnostmi urychlení výpočtu okrajových podmínek.

Pro snížení výpočetního času při řešení inverzní úlohy vedení tepla je vhodné zaměřit se právě na organizaci výpočtu řešení přímých úloh a numerické metody, které jsou při řešení těchto úloh použity. Navíc se lze v souvislosti s nezanedbatelnými nároky na výpočetní výkon zabývat možnostmi paralelizace numerických výpočtů. Koncept paralelního programování se v posledních několika letech v oblasti vědeckých výpočtů hojně využívá, zejména díky značným pokrokům v oblasti vývoje desktopových procesorů (CPU), grafických karet (GPU) a příslušného softwarového rozhraní. [2] Numerické metody řešení přímých úloh vedení tepla obvykle spočívají v diskretizaci časoprostorové domény a následném přepisu úlohy do tvaru soustavy lineárních rovnic s řídkou maticí. V rámci práce jsou nalezeny a popsány takové algoritmy, které umožňují dané soustavy efektivně řešit, a to jak z hlediska využití specifických vlastností matice soustavy, tak i v souvislosti s možností paralelizace výpočtů. Testování vybraných přístupů a vzájemné srovnání dosažených výsledků je následně provedeno

na modelové úloze, která popisuje dvourozměrné nestacionární vedení tepla při sprchovém chlazení ocelové desky. Tato úloha vychází z experimentálního měření, které bylo v rámci aplikovaného výzkumu pro hutnický průmysl provedeno v Laboratoři přenosu tepla a proudění.

V oblasti ocelářství se řešení inverzních úloh vedení tepla využívá zejména pro účely optimalizace dílčích procesů výroby a zpracování oceli. Mezi ně se řadí například plynulé odlévání oceli, tepelné zpracování oceli nebo válcování za tepla [2].

1 ZÁKLADY TEORIE PŘENOSU TEPLA

Procesy výroby a zpracování oceli jsou velmi úzce spojeny s problematikou přenosu tepla. Tento jev lze z hlediska své fyzikální podstaty klasifikovat podle základních mechanismů, kterými jsou vedení, proudění a záření. V této kapitole budou přehledově vysvětleny principy jednotlivých způsobů přenosu tepla. Z důvodu obsahového zaměření diplomové práce bude pozornost věnována především vedení tepla.

1.1 Vedení tepla

Při přenosu tepla vedením dochází k přenosu energie od více energetických k méně energetickým částicím, kterými obecně mohou být atomy nebo molekuly. Z fyzikální podstaty platí, že částice má tím větší kinetickou energii, čím vyšší je její teplota. Dojde-li ke srážce dvou částic, pak částice s vyšší energií předá část své energie částici s energií nižší. Přenos tepla vedením probíhá ve spojitém látkovém prostředí, a to v látkách pevných, kapalných i plynných. [3]

1.1.1 Fourierův zákon

Pro základní popis přenosu tepla vedením slouží konstituční vztah známý jako Fourierův zákon. Ten lze pro obecný případ vedení tepla v třírozměrném tělese zapsat ve tvaru

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T. \quad (1.1)$$

Uvedený vztah lze z fyzikálního hlediska interpretovat tak, že hustota tepelného toku \mathbf{q} vedeného z místa o vyšší teplotě do místa o nižší teplotě je přímo úměrná teplotnímu gradientu

$$\nabla T = \frac{\partial T}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial T}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial T}{\partial z} \vec{k}$$

a má vůči němu opačné znaménko. Symboly $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ v zápisu pro gradient teploty označují jednotkové směrové vektory vzájemně kolmých os soustavy kartézských souřadnic. Úměrnost ve vztahu určuje termofyzikální vlastnost látky nazývaná součinitel tepelné vodivosti λ . Hodnota tohoto součinitele je obecně závislá na teplotě a v případě nehomogenních látek je rovněž funkcí polohy ve zkoumaném tělese. [3]

1.1.2 Diferenciální rovnice vedení tepla

V rámci vědeckovýzkumné činnosti v oblasti techniky a přírodních věd se často řeší úlohy, jejichž řešení vyžaduje aplikaci významného matematického aparátu, který umožňuje popsat časový vývoj teplotního pole ve zkoumaném tělese. Pro účely modelování vývoje teploty uvnitř tuhého tělesa slouží diferenciální rovnice vedení tepla, známá rovněž pod pojmen rovnice tepelné difuze. V případě řešení jednorozměrné

úlohy nestacionárního vedení tepla, kdy lze za zkoumané těleso zvolit například tenkou tyč nebo rovinnou stěnu, je diferenciální rovnice tvaru

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + Q, \quad (1.2)$$

kde $T = T(x, t)$ je hledaná skalární funkce, která popisuje teplotu v tělese v bodě se souřadnicí x a čase t a člen $Q = Q(T(x, t))$ označuje vnitřní zdroje tepla, které lze považovat za teplotně závislé. Hustota ρ , měrná tepelná kapacita c a součinitel tepelné vodivosti λ vystupující v rovnici představují materiálové vlastnosti, které charakterizují dané těleso.

Obsah navazujících kapitol bude velmi úzce spojen s výpočtem teplotního pole pro případ dvourozměrné úlohy nestacionárního vedení tepla. Diferenciální rovnice ve dvou prostorových proměnných (x, y) je pak tvaru

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + Q. \quad (1.3)$$

Pro úplnost přehledu teorie o modelování dynamiky vedení tepla v kartézském souřadném systému se nabízí uvést rovnici pro obecný případ nestacionárního vedení tepla v třírozměrném tělese:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q. \quad (1.4)$$

Symboly x, y, z mají obvyklý význam tří kartézských souřadnic v prostoru. Rovnice vedení tepla se řadí mezi tzv. rovnice matematické fyziky a z hlediska teorie diferenciálních rovnic se jedná o parciální diferenciální rovnici druhého řádu parabolického typu. [4], [5]

1.1.3 Počáteční a okrajové podmínky

Při řešení úlohy nestacionárního vedení tepla v tuhém tělese se kromě rovnice dále uplatňuje také tzv. počáteční podmínka. Ta umožňuje popsat situaci v časovém okamžiku t_0 , ve kterém uvažovaný model začíná přenos tepla popisovat. Pro jednorozměrnou úlohu vedení tepla se počáteční podmínka předepisuje ve tvaru

$$T(x, t_0) = T_0(x), \quad x \in (a, b), \quad (1.5)$$

tedy vyjadřuje rozložení teploty v tělese v počátečním čase t_0 , přičemž funkce $T_0(x)$ je známá. Dvojice hodnot (a, b) představuje interval vymezující oblast v prostoru, na které jednorozměrné vedení tepla modelujeme; například pro tenkou tyč se v učebních textech obvykle považují body a, b za levý a pravý konec tyče.

Situaci na hranici uvažované prostorové domény z pohledu zkoumaného fyzikálního jevu popisují tzv. okrajové podmínky. V následujících odstavcích budou přehledově uvedeny jejich tři základní typy, přičemž příslušné formulace podmínek budou odpovídat popisu situace pro jednorozměrnou úlohu v pravém krajním bodě b .

1. *Dirichletova podmínka* předepisuje teplotu v krajním bodě b :

$$T(b, t) = T_b(t), \quad t > t_0, \quad (1.6)$$

kde $T_b(t)$ je známá funkce popisující časový vývoj teploty v krajním bodě b .

2. *Neumannova podmínka* předepisuje hustotu tepelného toku v krajním bodě b :

$$\frac{\partial T}{\partial x}(b, t) = g(t), \quad t > t_0, \quad (1.7)$$

kde $g(t)$ je daná funkce. Speciální případ $g(t) = 0$ odpovídá popisu tepelně izolovaného konce b . Někdy se pro účely explicitního vyjádření hustoty tepelného toku q uvádí podmínka také ve tvaru, který přímo vychází ze zápisu pro Fourierův zákon:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x}(b, t) = q(b, t), \quad t > t_0. \quad (1.8)$$

3. *Newtonova podmínka* (někdy také označovaná jako *Robinova podmínka*) představuje kombinaci Dirichletovy a Neumannovy podmínky, neboť zahrnuje informaci o teplotě i hustotě tepelného toku v krajním bodě b . Její zápis je tvaru

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x}(b, t) = h(T(b, t) - T_b(t)), \quad t > t_0. \quad (1.9)$$

Podle předpisu Newtonovy podmínky závisí hustota tepelného toku v bodě b na rozdílu teploty tělesa T v tomto bodě a dané teploty okolního prostředí T_b v blízkosti krajního bodu b . Koeficient h vystupující na pravé straně předpisu se nazývá součinitel přestupu tepla. Tento typ podmínky se v úlohách vedení tepla využívá zejména v případě, kdy okolo povrchu zkoumaného tělesa proudí tekutina, která jej ochlazuje nebo zahřívá. [4], [5]

Rovnice vedení tepla spolu s počáteční podmínkou a příslušnými okrajovými podmínkami představuje základ pro formulaci úlohy vedení tepla. Obsah kapitoly 2 se věnuje numerickým přístupům při řešení přímé úlohy nestacionárního vedení tepla v tuhých tělesech, která spočívá v nalezení vývoje teplotního pole na dané časoprostorové doméně. V případě, že některé vstupní údaje úlohy nejsou známé (např. materiálové vlastnosti tělesa, popis hranice zkoumané prostorové oblasti nebo data vystupující v okrajových podmínkách), hovoří se o tzv. inverzních úlohách vedení tepla. Základní princip a metody řešení tohoto typu úloh shrnuje kapitola 3.

1.2 Proudění

Dalším způsobem přenosu tepla je proudění. Z hlediska povahy procesu lze dále rozlišovat proudění přirozené, nucené a kombinované. Proudění může probíhat pouze v kapalinách a plynech. S tímto způsobem přenosu tepla se lze běžně setkat ve výrobních procesech z oblasti hutnictví, například při sprchovém chlazení ocelových

produktů. Chladicí kapalina se zde dostává do kontaktu s horkým povrchem oceli a díky teplotním rozdílům tak v blízkosti tohoto kontaktu dochází k přenosu tepla prouděním. Fyzikální jev popisuje Newtonův ochlazovací zákon

$$q = h(T_s - T_\infty), \quad (1.10)$$

kde symbol h má význam součinitele přestupu tepla, který na pravé straně vztahu vystupuje v součinu s rozdílem teploty povrchu obtékaného tělesa T_s a tzv. teploty volného proudu T_∞ , která ve vztahu číselně vyjadřuje teplotu okolní tekutiny v dostatečné vzdálenosti od povrchu. [6]

1.3 Záření

Přenos tepla zářením lze charakterizovat jako fyzikální jev, při kterém těleso do prostoru emituje energii ve formě elektromagnetického záření. Ze své podstaty tak proces tepelné výměny nemusí být nutně zprostředkován látkovým prostředím, tedy narozdíl od vedení a proudění může probíhat i ve vakuu. V případě, že je přenos realizován převážně infračerveným zářením, označuje se tento fyzikální jev pojmem sálání. Vztah pro výpočet hustoty zářivého toku šedého tělesa E popisuje Stefanův-Boltzmannův zákon

$$E = \epsilon\sigma_0 T^4, \quad (1.11)$$

kde $\epsilon \in (0, 1)$ označuje emisivitu nedokonalého zářiče, $\sigma_0 = 5,6697 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$ je Stefanova-Boltzmannova konstanta a T má význam absolutní teploty povrchu tělesa [3]. Stejně jako v případě proudění je rovněž přenos tepla zářením v procesech výroby a zpracování oceli při vysokých teplotách nezanedbatelný.

2 NUMERICKÉ ŘEŠENÍ PŘÍMÉ ÚLOHY VEDENÍ TEPLA

Při hledání řešení přímé úlohy vedení tepla v tuhých tělesech lze využít dva základní přístupy. Řešení úlohy nalezené při použití analytických metod je přesné, tedy nalezená funkce teploty vyhovuje rovnici, počáteční podmínce i zadaným okrajovým podmínkám. Využití analytického přístupu však obvykle vyžaduje jednoduchý popis geometrie a materiálového složení daného tělesa a rovněž je možné pouze pro vybrané tvary okrajových podmínek [7]. Mezi analytické metody řešení úlohy vedení tepla se řadí například Duhamelův princip, metoda Greenovy funkce, metoda Laplaceovy transformace nebo Fourierova metoda [4], [8].

V aplikační sféře se lze častěji setkat s využitím numerického přístupu. Pro výpočet numerického řešení se obvykle využívá výpočetní technika a narozdíl od analytického řešení jsou hodnoty teplotního pole určeny pouze v diskrétních bodech časoprostorové domény. Přesnost numerických metod pak lze testovat například právě pomocí známých analytických řešení pro modelové úlohy.

V dalších odstavcích této kapitoly budou uvedeny některé numerické metody, které se v praxi uplatňují při řešení přímých úloh vedení tepla.

2.1 Metoda konečných diferencí

Princip metody konečných diferencí spočívá v pokrytí uvažované časoprostorové domény sítí uzlových bodů a nahrazení parciálních derivací vystupujících v zadání úlohy příslušnými diferenčními kvocienty. Podle kombinace tvarů zvolených diferenčních kvocientů se pak rozeznávají tzv. numerická schémata, která umožňují formou rovnosti vyjádřit dynamiku pozorovaného děje v diskrétním tvaru pro každý uzlový bod diskretizace. Pomocí těchto rovností pak lze vypočítat numerické řešení úlohy, které je dáno hodnotami teploty v uzlových bodech pro konkrétní časový okamžik. V závislosti na numerickém schématu diskretizace může výpočet těchto hodnot probíhat buďto podle explicitního předpisu, anebo jako řešení úlohy o nalezení vektoru neznámých pro soustavu lineárních rovnic.

Metoda konečných diferencí je velmi vhodná pro řešení úloh, jejichž geometrický popis prostorové domény využívá rovnoběžnosti částí hranice s osami kartézského souřadného systému. Vyznačuje-li se prostorová doména nepravidelnými tvary, je pro řešení takových úloh vhodnější zvolit některou z jiných numerických metod [10].

2.2 Metoda konečných objemů

Přestože se s praktickým využitím metody konečných objemů lze setkat zejména v oblasti výpočtové dynamiky tekutin, své uplatnění metoda nalézá i v případě ře-

šení úloh nestacionárního vedení tepla. Princip této metody je založen na aplikaci integrální formy energetické bilanční rovnice na jednotlivé subdomény pokrývající uvažovanou oblast, které se označují jako konečné objemy. Pro uvažovaný i -tý konečný objem V_i a třírozměrnou úlohu vedení tepla lze bilanční rovnici s pomocí Gaussovy - Ostrogradského věty zapsat ve tvaru

$$\iiint_{V_i} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dV_i = \iint_{A_i} \mathbf{n}(\lambda \nabla T) dA_i + \iiint_{V_i} Q dV_i, \quad (2.1)$$

kde $A_i = \partial V_i$ je uzavřená plocha vymežující hranici konečného objemu V_i , symbol \mathbf{n} označuje pole normálových vektorů plochy A_i a ∇T reprezentuje operátor gradientu. Označení ρ , c , λ a Q mají obvyklý význam veličin, jejichž role v úlohách vedení tepla byla vysvětlena v rámci kapitoly 1.

Použití metody konečných objemů je vhodné pro řešení úloh vedení tepla na doménách nepravidelných tvarů. Konečné objemy pak jsou v případě dvourozměrné úlohy reprezentovány například trojúhelníky nebo konvexními čtyřúhelníky a hovoříme o metodě konečných objemů pro nestrukturované sítě. [7], [9]

2.3 Metoda konečných prvků

S metodou konečných prvků se lze pro svou univerzálnost a schopnost řešení úloh vyžadujících složitý popis sledovaného fyzikálního jevu setkat v oblasti pevnostních výpočtů, simulací proudění tekutin i modelování vedení tepla. Při formulaci úlohy metody konečných prvků se obvykle využívá jeden ze tří základních přístupů:

1. Přímý přístup

Přímý přístup bývá v praxi uplatňován především v úlohách analýzy staticky neučitých konstrukcí a v učebních textech statiky se často uvádí pod označením deformační metoda (anglicky *direct stiffness method*). Pro účely řešení úloh vedení tepla nebývá použití přístupu obvyklé. [10]

2. Variační přístup

Variační přístup spočívá v reformulaci zadané úlohy na problém hledání stacionárních bodů funkce stavových proměnných, která se nazývá funkcionál. Matematický zápis funkcionálu je pak sestaven na základě tzv. variačního principu, jehož znění se liší v závislosti na řešené úloze.

Ve své publikaci formuloval Gurtin [11] variační princip pro úlohu nestacionárního vedení tepla s Dirichletovou okrajovou podmínkou. V případě řešení praktických úloh, které mohou současně zahrnovat různé typy okrajových podmínek a složitý popis zkoumaného tělesa, jsou však možnosti využití tohoto přístupu značně omezené.

3. Metoda vážených reziduí

Metoda vážených reziduí obecně označuje přístup vhodný pro řešení takových úloh, které pro účely popisu modelovaného jevu využívají aparát diferenciálních rovnic. V odborných publikacích, které se zabývají problematikou vedení tepla, bývá přístup uplatněn při odvození diskrétního tvaru přímých úloh vedení tepla. Z hlediska využití speciální volby tzv. váhové funkce se pak v uvedené oblasti výzkumu metoda vážených reziduí běžně uvádí pod názvem metoda kontrolních objemů (anglicky *control volume method*).

2.4 Metoda kontrolních objemů

Využití metody kontrolních objemů bude v dalších odstavcích názorně představeno při převodu úlohy nestacionárního vedení tepla do diskrétního tvaru, který vede na řešení soustav lineárních rovnic. Zvláštní pozornost je tomuto přístupu věnována zejména z důvodu jeho vazby na praktickou část diplomové práce, v rámci níž jsou poznatky o odvození podle metody kontrolních objemů využívány.

Základní myšlenka metody kontrolních objemů vychází z rozdělení uvažované domény na nepřekrývající se podoblasti, které se označují jako kontrolní objemy. Při určování hranic kontrolních objemů se vyžaduje, aby každá z těchto podoblastí obsahovala ve svém vnitřku právě jeden uzlový bod prostorové diskretizace, ve kterém se hledají hodnoty numerického řešení úlohy [12]. Princip metody bude dále podrobněji vysvětlen na případu jednorozměrné úlohy nestacionárního vedení tepla.

2.4.1 Jednorozměrná úloha

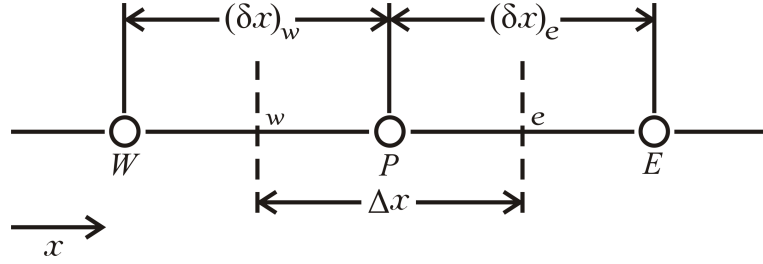
Při reformulaci 1D úlohy se vychází z rovnice

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + Q. \quad (2.2)$$

Diskretizace prostorové domény zahrnuje vymezení polohy uzlových bodů a stanovení hranic kontrolních objemů. Pro účely srozumitelnosti dalšího výkladu uvažujme jednotnou velikost kontrolních objemů, kterou označíme Δx . Na obrázku 2.1 je znázorněn kontrolní objem pro bod P a zobrazeny jsou rovněž příslušné sousední uzlové body, přičemž W označuje sousední bod pro západní směr (z anglického *west*) a E označuje bod pro východní směr (z anglického *east*). Malými písmeny w, e jsou pak vyznačeny stěny kontrolního objemu, které se nachází mezi příslušnými uzlovými body. Vzdálenost dvou sousedních bodů W a P je označena symbolem $(\delta x)_w$, analogicky je pro vzdálenost bodů P a E použito označení $(\delta x)_e$.

V dalším kroku řešení úlohy se zabýváme energetickou bilancí pro uvažovaný kontrolní objem. Při integraci rovnice (2.2) přes kontrolní objem dostáváme

$$\rho c \int_w^e \frac{\partial T}{\partial t} dx = \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx + \int_w^e Q dx, \quad (2.3)$$



Obr. 2.1: Kontrolní objem s přilehlými uzlovými body. [12]

kde materiálové vlastnosti ρ, c budeme v dalším výkladu uvažovat jako konstantní. Pro účely časové diskretizace volíme časový krok Δt . Po integraci rovnice (2.3) přes časový přírůstek Δt lze tak energetickou bilanci kontrolního objemu zapsat ve tvaru

$$\rho c \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e Q dx dt. \quad (2.4)$$

V této fázi reformulace úlohy je potřeba zahrnout do vztahu (2.4) čtyři předpoklady, které se týkají modelování teplotního profilu na uvažované časoprostorové doméně:

1. Při diskretizaci členu $\partial T / \partial x$ je uvažován po částech lineární teplotní profil. Pro tento člen na pravé straně rovnice (2.4) tak platí

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dt = \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\lambda_e (T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{\lambda_w (T_P - T_W)}{(\delta x)_w} \right] dt, \quad (2.5)$$

kde λ_e označuje hodnotu součinitele tepelné vodivosti, která je vyhodnocena na části hranice kontrolního objemu oddělující uzlové body P a E . Analogicky lze odvodit význam pro symbol λ_w ve vztahu ke dvojici uzlových bodů P a W .

2. Pro vyjádření členu $\partial T / \partial t$ se předpokládá, že teplota T je v rámci kontrolního objemu konstantní a je určena právě hodnotou v příslušném uzlovém bodě. Pro levou stranu rovnice (2.4) tedy dostáváme

$$\rho c \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \rho c \Delta x (T_P^1 - T_P^0), \quad (2.6)$$

přičemž T_P^0 označuje známou hodnotu teploty v uzlovém bodě P v čase t a T_P^1 je hledaná neznámá hodnota popisující teplotu v témže bodě v čase $t + \Delta t$.

3. Závislost členu vnitřních zdrojů $Q = Q(T(x, t))$ na teplotě je linearizována. Pro reprezentaci zdrojového členu v kontrolním objemu obklopujícím bod $x = P$ uvažujeme předpis

$$Q(T(P, t)) = Q_C + Q_P T_P, \quad (2.7)$$

kde Q_C vyjadřuje absolutní člen lineární funkce a Q_P je nekladný lineární koeficient. Předpokládá se přitom, že teplota T je v rámci uvažovaného kontrolního objemu konstantní a je určena hodnotou v příslušném uzlovém bodě.

4. Předpoklad na průběh teploty v uzlovém bodě T_P mezi časovými okamžiky t a $t + \Delta t$ je popsán pomocí vztahu

$$\int_t^{t+\Delta t} T_P dt = [f_w T_P^1 + (1 - f_w) T_P^0] \Delta t, \quad (2.8)$$

kde $f_w \in \langle 0, 1 \rangle$ je váhový faktor.

Při uplatnění předpokladů (2.5), (2.6) a (2.7) tedy z rovnosti (2.4) dostáváme

$$\begin{aligned} \rho c \Delta x (T_P^1 - T_P^0) &= \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\lambda_e (T_E - T_P)}{(\delta x)_e} - \frac{\lambda_w (T_P - T_W)}{(\delta x)_w} \right] dt + \\ &+ \int_t^{t+\Delta t} (Q_C \Delta x + Q_P T_P \Delta x) dt, \end{aligned} \quad (2.9)$$

a při využití předpokladu (2.8) lze tento vztah dále formulovat jako

$$\begin{aligned} \rho c \frac{\Delta x}{\Delta t} (T_P^1 - T_P^0) &= f_w \left[\frac{\lambda_e (T_E^1 - T_P^1)}{(\delta x)_e} - \frac{\lambda_w (T_P^1 - T_W^1)}{(\delta x)_w} + Q_P \Delta x T_P^1 \right] + \\ &+ (1 - f_w) \left[\frac{\lambda_e (T_E^0 - T_P^0)}{(\delta x)_e} - \frac{\lambda_w (T_P^0 - T_W^0)}{(\delta x)_w} + Q_P \Delta x T_P^0 \right] + \\ &+ Q_C \Delta x. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Po dalších úpravách dostáváme předpis pro výpočet uzlové teploty T_P^1 v časovém okamžiku $t + \Delta t$:

$$\begin{aligned} a_P T_P^1 &= a_E [f_w T_E^1 + (1 - f_w) T_E^0] + a_W [f_w T_W^1 + (1 - f_w) T_W^0] + \\ &+ [a_P^0 - (1 - f_w) a_E - (1 - f_w) a_W + (1 - f_w) Q_P \Delta x] T_P^0 + Q_C \Delta x, \end{aligned} \quad (2.11)$$

kde

$$a_E = \frac{\lambda_e}{(\delta x)_e},$$

$$a_W = \frac{\lambda_w}{(\delta x)_w},$$

$$a_P^0 = \frac{\rho c \Delta x}{\Delta t},$$

$$a_P = f a_E + f a_W - f \Delta x Q_P + a_P^0.$$

Postup dalšího výpočtu se odvíjí od nastavení hodnoty pro váhový faktor f_w . Při volbě $f_w = 0$ přechází rovnost (2.11) do tvaru

$$a_P T_P^1 = a_E T_E^0 + a_W T_W^0 + (a_P^0 - a_E - a_W + Q_P \Delta x) T_P^0 + Q_C \Delta x \quad (2.12)$$

a dostáváme tak explicitní schéma pro vyjádření hledané hodnoty T_P^1 . V praxi se však explicitní schéma při výpočtech běžně nepoužívá, a to z důvodu omezení, které se klade na velikost časového kroku Δt . Podmínka stability je pro případ vedení tepla v tělese homogenního materiálu a velikosti kontrolních objemů $\Delta x = (\delta x)_e = (\delta x)_w$ tvaru

$$\Delta t < \frac{\rho c (\Delta x)^2}{2\lambda}.$$

Při volbě $f_w = 0,5$ vede rovnost (2.11) na Crankovo-Nicolsonovo schéma. Přestože se v učebních textech schéma obvykle uvádí jako bezpodmínečně stabilní, mohou v praktických výpočtech nastat situace, že získaná řešení vykazují kmitavý charakter a z fyzikálního hlediska je lze označit za nerealistická [12].

Jediná volba váhového faktoru, která při bezpodmínečné stabilitě zaručuje nalezení fyzikálně možného řešení, je $f_w = 1$. Hovoříme pak o implicitním schématu, pro které rovnost (2.11) přechází do tvaru

$$a_P T_P^1 = a_E T_E^1 + a_W T_W^1 + a_P^0 T_P^0 + Q_C \Delta x. \quad (2.13)$$

Narozdíl od explicitního schématu zde však není výpočet hodnoty T_P^1 zcela přímočarý, neboť na pravé straně rovnosti vystupují hodnoty T_E^1 , T_W^1 pro teploty v sousedních uzlech, které mají v uvedeném vztahu rovněž roli neznámých. Pokud je však rovnost (2.13) formulována pro všech n uzlových bodů 1D diskretizační sítě a současně je pro tyto body provedeno vhodné očíslování, vede úloha na řešení soustavy lineárních rovnic (dále jen zkráceně SLR)

$$\mathbf{A}\mathbf{T} = \mathbf{b}, \quad (2.14)$$

ve které symbol $\mathbf{T} = (T_1^1, T_2^1, \dots, T_n^1)$ označuje vektor neznámých pro teploty v příslušných uzlových bodech. Vzhledem k charakteru metody kontrolních objemů a tvaru rovnosti (2.13) je patrné, že sestavená matice soustavy \mathbf{A} pro 1D úlohu nestacionárního vedení tepla se vyznačuje třídiagonální strukturou. Některé další užitečné vlastnosti matice \mathbf{A} , které lze uplatnit pro účely efektivního řešení odvozených SLR, budou popsány v závěrečné části této kapitoly.

Pro úplnost výkladu k metodě kontrolních objemů pro 1D úlohu vedení tepla lze doplnit, že v odvozené SLR jsou rovněž zahrnuty okrajové podmínky některého ze tří známých typů vysvětlených v kapitole 1. Pro levý konec prostorové domény jsou okrajové podmínky zohledněny v rámci první složky vektoru \mathbf{b} na pravé straně soustavy, v případě pravého konce jsou pak zastoupeny v n -té složce tohoto vektoru.

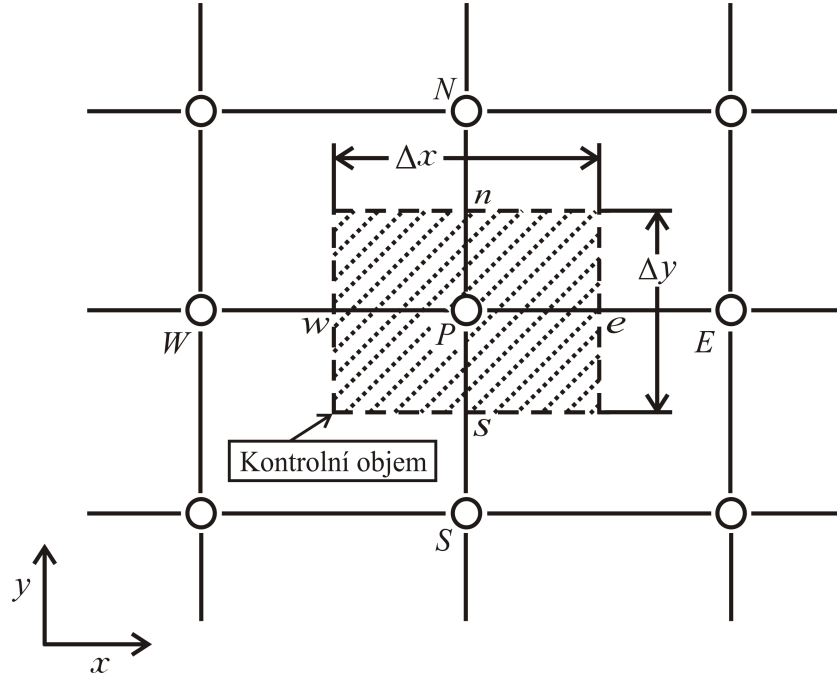
2.4.2 Dvourozměrná úloha

Pokud lze doménu uvažovaného tělesa popsat pomocí dvojice kartézských souřadnic x, y , vychází metoda kontrolních objemů z diferenciální rovnice

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + Q. \quad (2.15)$$

Kontrolní objemy mají obdélníkový tvar a pokrývají dvourozměrnou síť uzlových bodů. Na obrázku 2.2 je ilustračně znázorněn kontrolní objem pro uzlový bod P . Narozdíl od 1D úlohy je nutné kromě sousedních bodů W a E uvažovat rovněž sousední uzel N (z anglického *north*) ležící nad bodem P a uzel S (z anglického *south*), který se nachází bezprostředně pod uzlovým bodem P . Stěny kontrolního

objemu, které se nacházejí mezi uzlovým bodem P a příslušnými sousedními uzly, označíme písmeny w , n , e , s . Velikost obdélníkového kontrolního objemu v x -ovém směru značíme symbolem Δx a v y -ovém směru používáme označení Δy .



Obr. 2.2: Kontrolní objem pro úlohu s dvěma prostorovými proměnnými. [12]

Při odvození diskrétního tvaru úlohy se postupuje analogicky jako u 1D úlohy. Jedinou odlišností je nutnost zohlednit rozměr stěn kontrolních objemů při popisu tepelných toků, které probíhají mezi dvěma sousedními kontrolními objemy. Pro kontrolní objem, který obklopuje libovolně zvolený vnitřní uzlový bod P , vede uplatnění implicitního schématu na rovnost

$$a_P T_P^1 = a_E T_E^1 + a_W T_W^1 + a_N T_N^1 + a_S T_S^1 + a_P^0 T_P^0 + Q_C \Delta x \Delta y. \quad (2.16)$$

Pro jednotlivé koeficienty, které v rovnosti (2.16) vystupují, platí následující vztahy:

$$a_E = \frac{\lambda_e \Delta y}{(\delta x)_e},$$

$$a_W = \frac{\lambda_w \Delta y}{(\delta x)_w},$$

$$a_N = \frac{\lambda_n \Delta x}{(\delta y)_n},$$

$$a_S = \frac{\lambda_s \Delta x}{(\delta y)_s},$$

$$a_P^0 = \frac{\rho c \Delta x \Delta y}{\Delta t},$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S - Q_P \Delta x \Delta y + a_P^0.$$

Při formulaci rovnosti (2.16) pro každý z uzlových bodů 2D diskretizační sítě a vhodném očíslování uzlových bodů vede odvození podobně jako u 1D úlohy na řešení SLR, kterou lze obecně zapsat ve tvaru $\mathbf{AT} = \mathbf{b}$. Jsou-li uzlové body rozmístěny v n_x sloupcích a n_y řádcích obdélníkové diskretizační sítě, pak počet neznámých odvozené SLR je roven $n_x n_y$.

Z rovnosti (2.16) vyplývá, že vektor \mathbf{b} vystupující v odvozené SLR ve svých složkách zřejmě zahrnuje členy $a_P^0 T_P^0 + Q_C \Delta x \Delta y$. Kromě toho však tento vektor zohledňuje i veličiny, které vystupují v okrajových podmínkách řešené úlohy. Poznatky o odvození členů pro jednotlivé typy okrajových podmínek a jejich implementace v sestavených SLR jsou vysvětleny v publikaci [12]. Z hlediska tematického zaměření diplomové práce je vhodné poznamenat, že tvar vektoru pravé strany nemá v praxi vliv na výběr algoritmu pro efektivní řešení odvozených SLR. V dalším textu se tedy práce konkrétním tvarem vektoru \mathbf{b} nebude zabývat.

V dalším textu bude pozornost věnována některým zajímavým poznatkům o struktuře matice \mathbf{A} vystupující v SLR tvaru $\mathbf{AT} = \mathbf{b}$. Výklad se vztahuje k odvození soustavy pro 1D i 2D úlohu.

2.4.3 Vybrané charakteristické vlastnosti matice \mathbf{A}

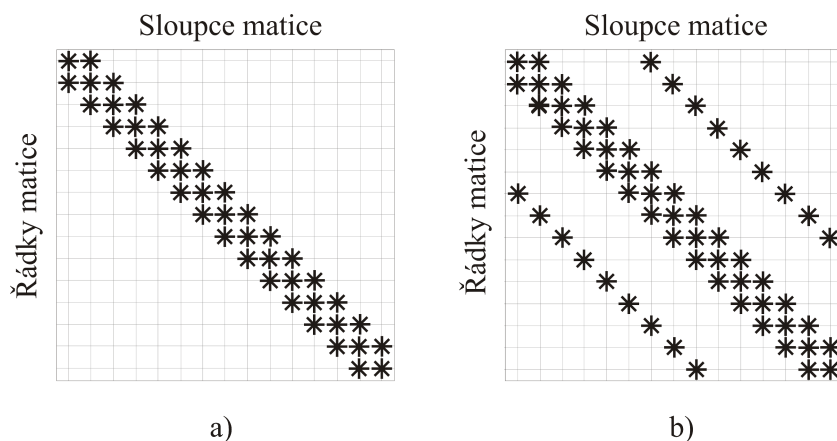
Matice soustavy \mathbf{A} pro diskretizovanou úlohu nestacionárního vedení tepla je čtvercová a vyznačuje se řadou užitečných vlastností, kterých lze pro účely efektivního řešení odvozených soustav tvaru $\mathbf{AT} = \mathbf{b}$ využít. Bližšímu vysvětlení čtyř velmi důležitých vlastností se věnují následující odstavce.

Řídkost matice \mathbf{A}

Převážná většina prvků matice soustavy \mathbf{A} je rovna nule. V důsledku toho je vhodné zabývat se možnostmi efektivní implementace numerických výpočtů, které s řešením příslušných SLR souvisejí. Prostor ke zvýšení efektivity výpočtů nabízí zejména možnost úsporné reprezentace matice \mathbf{A} v paměti počítače pomocí některého z tzv. řídkých formátů pro ukládání matic. V minulosti byla navíc programátory vyvinuta řada knihoven, které v rámci numerických výpočtů umožňují efektivní provádění operací s řídkými maticemi.

Pravidelnost schématu řídkosti matice \mathbf{A}

Kromě své řídkosti se matice \mathbf{A} se navíc vyznačuje pravidelným schématem řídkosti (anglicky *sparsity pattern*). Konkrétně platí, že odvození SLR pro 1D úlohu vedení tepla vede na konstrukci matice \mathbf{A} s třídiagonální strukturou. V případě 2D úlohy vedení tepla se pak nenulové prvky díky subdoménovému přístupu znázorněnému na obrázku 2.2 nacházejí pouze podél pěti diagonál matice soustavy. Na obrázku 2.3.a) je ilustračně znázorněno schéma řídkosti třídiagonální matice. Obrázek 2.3.b) pak v podobném smyslu zachycuje schéma řídkosti pro pětidiagonální matici.



Obr. 2.3: Schéma řídkosti pro a) třídiagonální matici, b) pětdiagonální matici

Symetrie matice \mathbf{A}

Označíme-li prvek matice \mathbf{A} nacházející se v i -tém řádku a j -tém sloupci symbolem a_{ij} , pak pro symetrickou matici \mathbf{A} řádu n platí

$$a_{ij} = a_{ji} \quad \text{pro všechna } i, j = 1, 2, \dots, n.$$

Platnost této vlastnosti matice \mathbf{A} lze snadno dokázat pro případ 1D i 2D úlohy vedení tepla. V dalších odstavcích bude důkaz vlastnosti symetrie matice \mathbf{A} proveden v souvislosti s odvozením pro 2D úlohu.

Důkaz symetrie matice soustavy \mathbf{A} pro SLR ve 2D úloze vedení tepla

Důkaz plyne z odvození matice soustavy podle metody kontrolních objemů a použitého pětibodového schématu znázorněného na obrázku 2.2. Z podstaty metody kontrolních objemů a principu odvození energetické bilance tvaru (2.16) vyplývá, že každý z mimodiagonálních prvků matice \mathbf{A} slouží pro účely číselného vyjádření tepla, jehož přenos probíhá mezi dvěma různými kontrolními objemy.

Nechť I a J jsou dva různé pevně zvolené uzlové body ve 2D diskretizační síti. Dále necht a_{IJ} je prvek matice \mathbf{A} , který v rovnici pro uzlový bod I číselně charakterizuje přenos tepla mezi kontrolními objemy příslušící uzlům I a J . Necht symbol a_{JI} má tentýž význam v rovnici pro uzlový bod J . Pak podle volby dvojice uzlových bodů I a J mohou nastat tyto dva případy:

1. *Kontrolní objemy obklopující uzlové body I a J nemají společnou stěnu.*

Jelikož energetická bilance tvaru (2.16) pro kontrolní objem příslušný uzlovému bodu I zahrnuje pouze členy charakterizující uzlový bod pro tento kontrolní objem a takové sousední subdomény, které s uzlovým bodem I sdílejí stěnu, dostáváme $a_{IJ} = 0$. Analogicky v rovnici získané z energetické bilance pro uzlový bod J dostáváme, že z podstaty metody kontrolních objemů nutně pro příslušný člen a_{JI} plyne, že $a_{JI} = 0$. Celkově tedy $a_{IJ} = a_{JI}$.

2. *Kontrolní objemy obklopující uzlové body I a J mají společnou stěnu.*

V takovém případě je sdílenou částí hranice úsečka, jejíž délku označíme symbolem Δ_{IJ} . Hodnotu součinitele tepelné vodivosti na této úsečce označíme jako

λ_{IJ} . Vzájemnou vzdálenost těchto sousedních uzlů reprezentuje označení δ_{IJ} . Pak z výkladu metody kontrolních objemů po přerovnání energetické bilance tvaru (2.16) pro uzlový bod I plyne

$$a_{IJ} = -\frac{\lambda_{IJ}\Delta_{IJ}}{\delta_{IJ}}. \quad (2.17)$$

Je-li však energetická bilance sepsána pro kontrolní objem obklopující uzlový bod J , platí vyjádření (2.17) rovněž pro koeficient a_{JI} vystupující v této energetické bilanci. Vskutku, z pravé strany předpisu (2.17) je patrné, že veličiny Δ_{IJ} , λ_{IJ} a δ_{IJ} se nevztahují ke konkrétnímu kontrolnímu objemu, nýbrž charakterizují buďto společnou část hranice, anebo popisují vzájemné postavení sousedních uzlových bodů I a J . Platí tedy opět $a_{IJ} = a_{JI}$ a jelikož byly uzlové body I a J zvoleny libovolně, je tak vlastnost symetrie matice \mathbf{A} pro SLR ve 2D úloze vedení tepla dokázána.

Pozitivní definitnost matice \mathbf{A}

Podle definice se reálná čtvercová matice \mathbf{A} nazývá pozitivně definitní, jestliže

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0 \quad \text{pro všechny nenulové vektory } \mathbf{x}.$$

Pozitivní definitnost matice \mathbf{A} lze spolu s vlastností symetrie uplatnit zejména při volbě algoritmu umožňujícího efektivní řešení SLR tvaru $\mathbf{A}\mathbf{T} = \mathbf{b}$ pro 2D úlohu vedení tepla. Této problematice se detailněji věnuje kapitola 4. S ohledem na otázku řešitelnosti úloh navíc platí, že pro SLR se symetrickou a pozitivně definitní maticí soustavy vždy existuje řešení, které je určeno jednoznačně [13].

3 INVERZNÍ ÚLOHY VEDENÍ TEPLA

S inverzními úlohami se lze setkat v široké škále odvětví aplikovaného výzkumu, mezi které se řadí dynamika tekutin [14], robotika [15], biomedicína [16] a mnoho dalších. V oblasti termokinetiky se řešení inverzních úloh využívá pro účely odhadu hodnot neznámých fyzikálních veličin na povrchu zkoumaného tělesa nebo pro stanovení jeho materiálových vlastností [6].

V rámci této kapitoly jsou uvedeny základní poznatky z teorie inverzních úloh a jsou představeny vybrané metody, které se při řešení inverzních úloh vedení tepla v praxi běžně využívají.

3.1 Úvod do problematiky inverzních úloh

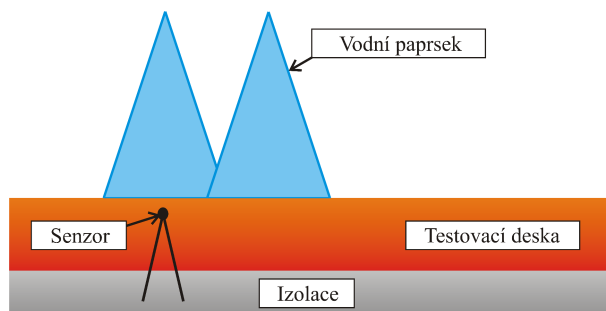
Z hlediska základní podstaty zkoumaného problému lze v mnoha oblastech výpočtového modelování rozlišovat pojmy přímé a inverzní úlohy. Sousedí přímá úloha obecně označuje takový typ problému, kdy se při řešení postupuje od příčiny k důsledku. V případě přímé úlohy vedení tepla zahrnuje příčina popis počátečního stavu fyzikálního systému, formulaci okrajových podmínek a znalosti o dynamice zkoumaného vedení tepla. Sledovaným důsledkem jsou pak výsledná teplotní pole v tělese. Při určování okrajových podmínek v technické praxi se však lze často setkat s komplikacemi, neboť přímé měření fyzikálních veličin na povrchu tělesa bývá mnohdy značně obtížné. V takových případech se v rámci experimentů provádí měření teploty v několika bodech uvnitř tělesa. Úloha, jejímž cílem je odhadnout hodnoty fyzikálních veličin vystupujících v okrajových podmínkách, se nazývá inverzní úloha vedení tepla. Výpočet příslušných odhadů je pak založen právě na využití časového průběhu teplot, který byl zaznamenán v konečném počtu bodů uvnitř tělesa. [1]

Podle formální klasifikace matematických úloh se inverzní úlohy řadí mezi tzv. matematicky nekorektní úlohy. Pro takovou třídu úloh platí, že u nich nelze obecně zaručit existenci a jednoznačnost řešení. Inverzní úlohy se rovněž vyznačují svou citlivostí na chyby a šum v měřených vstupních datech - úloha se pak označuje jako špatně podmíněná, nebo také jako numericky nestabilní. V případě, že se hodnoty některé z materiálových vlastností zkoumaného tělesa mění v závislosti na teplotě, stává se inverzní úloha vedení tepla nelineární a v důsledku toho vyvstávají navíc problémy související s obtížnou řešitelností [6].

Z důvodu rozsahu práce se další text věnuje výhradně lineární inverzní úloze, jejíž formulace vyžaduje, aby materiálové vlastnosti zkoumaného tělesa byly nezávislé na teplotě. Rovněž se dále předpokládá, že časový průběh teplot je naměřen pouze v jednom bodě pod povrchem tělesa.

Základní inverzní úloha vedení tepla

Navazující kapitoly se věnují metodám řešení inverzní úlohy, jejichž principy budou vysvětleny na základní inverzní úloze vedení tepla. Tu lze formulovat například pro fyzikální systém zahrnující testovací desku dané tloušťky, která je přehřátá na známou počáteční teplotu a následně chlazená ostříkem. Spodní strana desky je tepelně izolována a ve známé hloubce pod chlazeným povrchem je umístěn termočlánek měřící časový průběh teplot. Schematicky je model uvažované sestavy znázorněn na obrázku 3.1.



Obr. 3.1: Modelová sestava pro základní inverzní úlohu vedení tepla. [6]

Matematická formulace vstupů základní inverzní úlohy vedení tepla je tvaru

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad (3.1)$$

$$T(x, 0) = T_0(x), \quad (3.2)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=L} = 0, \quad (3.3)$$

$$T(x_1, t_i) = Y_i, \quad (3.4)$$

kde $T_0(x)$ je známá funkce popisující teplotní pole v čase $t = 0$ a L označuje tloušťku desky. Podmínka (3.4) vyjadřuje, že hodnoty teploty v bodě x_1 , který vyjadřuje polohu umístění termočláneku od chlazeného povrchu desky, jsou určeny v diskrétních časových okamžicích t_i příslušnými naměřenými teplotami Y_i . V rámci uvažované základní úlohy jsou všechny materiálové vlastnosti, délkové parametry i hodnoty konečné posloupnosti dvojic (t_i, Y_i) považovány za známé.

Cílem úlohy pak je vypočítat hustotu tepelného toku na chlazeném povrchu v časových okamžicích t_i , tedy hledáme hodnoty

$$q(t_i) = -\lambda \left. \frac{\partial T(x, t_i)}{\partial x} \right|_{x=0}. \quad (3.5)$$

V souvislosti s principem řešení inverzních úloh je nutno poznamenat, že vypočítané hodnoty $q(t_i)$ mají pouze charakter odhadů pro číselné vyjádření hustoty tepelného

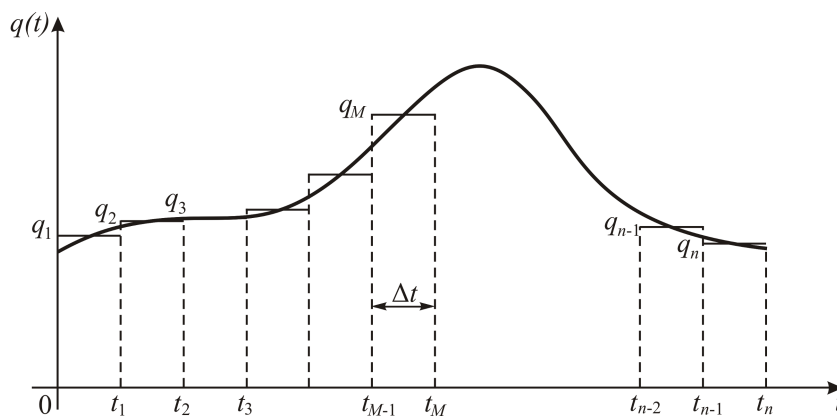
toku. Nedílnou součástí vývoje metod pro řešení inverzních úloh vedení tepla by proto mělo být důkladné vyhodnocení vypočítaných výsledků z hlediska posouzení kvality získaných odhadů.

3.2 Metody pro řešení inverzních úloh vedení tepla

V praktických úlohách se pro účely řešení inverzních úloh vedení tepla běžně využívají přístupy, které se v odborné literatuře řadí mezi tzv. metody odhadu funkce (anglicky *function specification methods*). V rámci těchto metod se využívá funkční forma časového průběhu hustoty tepelného toku $q(t)$. Je-li při řešení inverzní úlohy funkce modelující průběh hustoty tepelného toku nalezena najednou, označuje se přístup jako tzv. celodoménová metoda. V případě tzv. sekvenční metody jsou naopak odhady určeny postupně od počátečního času pro každý časový krok. Oba tyto přístupy, které v druhé polovině minulého století vyvinul a ve své publikaci [17] popsal J.V. Beck, budou v následujících odstavcích blíže vysvětleny.

3.2.1 Celodoménová metoda

Při určování odhadu hustoty tepelného toku je důležité, aby použitá metoda pro výpočet okrajových podmínek dokázala modelovat případné prudké změny v časovém průběhu sledované fyzikální veličiny. V některých praktických aplikacích mohou tyto změny vykazovat až charakter skokové nespojitosti [6]. Pro takové případy lze pro účely řešení dané inverzní úlohy vedení tepla využít celodoménovou metodu, jejíž myšlenka vychází ze zavedení ekvidistantního dělení zkoumaného časového intervalu $\langle 0, t_n \rangle$ na n dílků délky Δt a funkce $q(t)$ je na každém ze vzniklých dílků nahrazena konstantní hodnotou. Pro účely aproximace na M -tém dílku $\langle t_{M-1}, t_M \rangle$ se v praxi obvykle používá určená funkční hodnotou hustoty tepelného toku v časovém okamžiku $t_{M-\frac{1}{2}} = (t_{M-1} + t_M)/2$. Příslušná hodnota odhadu hustoty tepelného toku na M -tém dílku se pak značí symbolem q_M . Princip aproximace funkční formy $q(t)$ podle celodoménové metody ilustruje obrázek 3.2.



Obr. 3.2: Konstantní aproximace funkční formy $q(t)$. [6]

numerické nestability výpočtu ošetřuje využitím techniky regularizace a reformulací úlohy do tvaru pro minimalizaci součtu čtverců odchylek naměřených a vypočítaných hodnot teploty v místě senzoru (více o využití regularizace v inverzních úlohách vedení tepla lze nalézt například v [17]). I přes možnost využití regularizace je však v současné době využitelnost celodoménové metody v praxi omezená, neboť její algoritmus doposud nebyl uzpůsoben pro řešení nelineárních inverzních úloh.

3.2.2 Sekvenční metoda se stabilizací

Myšlenka zavedení ekvidistantního dělení a využití konstantní aproximace funkční formy $q(t)$ se podobně jako v celodoménové metodě uplatňuje rovněž v rámci sekvenční metody se stabilizací. V tomto případě však složky vektoru \mathbf{q} nejsou vypočítány najednou jako při využití rovnice (3.9), nýbrž jednotlivé hodnoty jsou určeny od první složky postupně krok po kroku [6].

Algoritmus sekvenční metody se stabilizací pomocí r dopředných časových kroků lze shrnout do čtyř základních fází, které poskytují návod pro určení odhadu hustoty tepelného toku q_M ($M = 1, 2, \dots, n - r$) aproximující tuto fyzikální veličinu na intervalu $\langle t_{M-1}, t_M \rangle$:

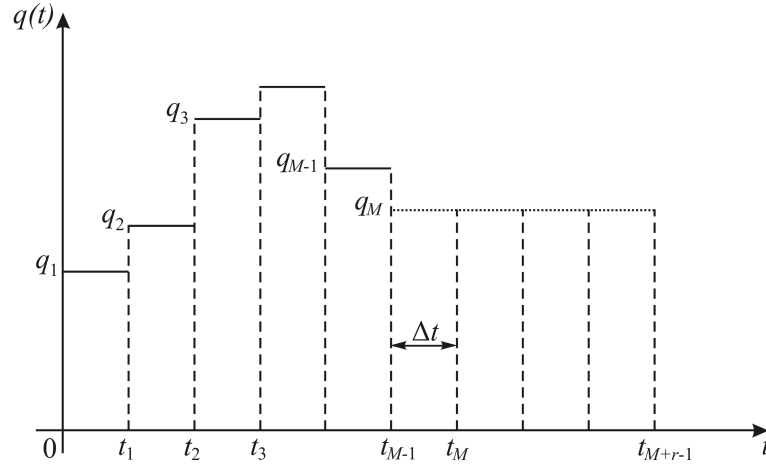
1. Je zvolena funkční forma průběhu hustoty tepelného toku $q(t)$ pro r dopředných časových kroků $t_M, t_{M+1}, \dots, t_{M+r-1}$. Pomocí řešení přímé úlohy vedení tepla jsou pro tyto modelované hustoty tepelného toku spočteny příslušné hodnoty pro teplotu v místě senzoru.
2. Složky vektoru \mathbf{T} pro vypočítané teploty jsou spolu s odpovídající r -ticí naměřených teplot \mathbf{Y} dosazeny do předpisu pro funkci S , která vyjadřuje součet čtverců odchylek pro dané dvojice hodnot.
3. S využitím funkce S je ve smyslu metody nejmenších čtverců určen odhad pro hustotu tepelného toku q_M .
4. Index pro časový krok M je navýšen o jedničku a celý proces výpočtu se opakuje, dokud $M \leq n - r$.

Využití r dopředných časových kroků v algoritmu sekvenční metody představuje nástroj pro stabilizaci špatně podmíněné inverzní úlohy. V praxi se obvykle volí $r > 1$, podrobněji se stanovení optimálního počtu dopředných kroků v souvislosti s kvalitativními vlastnostmi získaných odhadů věnuje například [17].

Funkční forma $q(t)$ pro r dopředných časových kroků se obvykle volí jako konstantní na celém časovém úseku $\langle t_{M-1}, t_r \rangle$, tedy pro odpovídající délky se předpokládá

$$q_M = q_{M+1} = q_{M+2} = \dots = q_{M+r-1}. \quad (3.10)$$

Základní princip modelování průběhu hustoty tepelného toku v sekvenční metodě je graficky znázorněn na obrázku 3.3 - ten zachycuje jak aproximaci funkce $q(t)$ na časovém úseku $\langle 0, t_{M-1} \rangle$ využívající známých odhadů q_1, q_2, \dots, q_{M-1} , tak i funkční formu pro dopředné časové kroky vycházející z předpokladu (3.10).



Obr. 3.3: Konstantní průběh hustoty tepelného toku v dopředných krocích. [6]

K výpočtu hodnot pro teploty v místě senzoru $T_M, T_{M+1}, \dots, T_{M+r-1}$ v rámci prvního kroku uvedeného algoritmu lze využít pozměněný zápis rovnice (3.6):

$$\mathbf{T} = \mathbf{X}\mathbf{q} + \hat{\mathbf{T}}|_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}. \quad (3.11)$$

Členy vystupující v uvedeném vztahu mají význam uzpůsobený pro formulaci sekvenční metody - matice \mathbf{X} je tentokrát řádu r , vektory $\mathbf{T}, \mathbf{q}, \hat{\mathbf{T}}|_{\mathbf{q}=\mathbf{0}}$ jsou délky r a pro vyjádření po složkách platí

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_M \\ T_{M+1} \\ \vdots \\ T_{M+r-1} \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} q_M \\ q_{M+1} \\ \vdots \\ q_{M+r-1} \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \Delta\phi_0 & & & \\ \Delta\phi_1 & \Delta\phi_0 & & \\ \vdots & \vdots & & \\ \Delta\phi_{r-1} & \Delta\phi_{r-2} & \dots & \Delta\phi_0 \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$

$$\hat{\mathbf{T}}|_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} = \begin{pmatrix} \hat{T}|_{q_M=0} \\ \hat{T}|_{q_M=q_{M+1}=0} \\ \vdots \\ \hat{T}|_{q_M=q_{M+1}=\dots=q_{M+r-1}=0} \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Z rovnice (3.11) a vyjádření (3.12)-(3.15) plyne pro vypočítané teploty v místě senzoru předpis

$$T_{M+i-1} = \hat{T}|_{q_M=\dots=q_{M+i-1}=0} + \phi_i q_M, \quad i = 1, 2, \dots, r,$$

kde pro ϕ_i platí

$$\phi_i = \sum_{j=0}^{i-1} \Delta\phi_j.$$

V navazující fázi algoritmu pro určení odhadu q_M je provedeno srovnání hodnot pro vypočítané $(T_M, T_{M+1}, \dots, T_{M+r-1})$ a naměřené $(Y_M, Y_{M+1}, \dots, Y_{M+r-1})$ teploty z r dopředných kroků. Pro tento účel je zavedena funkce S , která neshody příslušných hodnot vektorů \mathbf{T} a \mathbf{Y} ve smyslu součtu čtverců odchylek číselně vyjadřuje:

$$S = \sum_{i=1}^r (Y_{M+i-1} - T_{M+i-1})^2 = \sum_{i=1}^r (Y_{M+i-1} - \hat{T}|_{q_M=\dots=q_{M+i-1}=0} - \phi_i q_M)^2. \quad (3.16)$$

Následně je nalezen předpis pro první derivaci funkce S podle q_M a výraz je položen roven nule. Vyjádření pro hledaný odhad q_M je pak tvaru

$$q_M = \frac{\sum_{i=1}^r (Y_{M+i-1} - \hat{T}_{M+i-1}|_{q_M=\dots=q_{M+i-1}=0})\phi_i}{\sum_{i=1}^r \phi_i^2}. \quad (3.17)$$

V dalším postupu je index M navýšen o jedničku a uvedený algoritmus se opakuje. Při využití r dopředných časových kroků platí, že sekvenční metoda umožňuje určit pro vstupní sekvenci n naměřených teplot pouze hodnoty pro $n - r$ složek vektoru \mathbf{q} , které představují hledané odhady okrajové podmínky ve vztahu (3.5). [6]

Využití přímých úloh v sekvenční metodě

Nedílnou součástí Beckova sekvenčního algoritmu je využití matice koeficientů citlivosti \mathbf{X} , jejíž prvky mají dle předpisu (3.8) význam parciálních derivací teploty v daném čase podle vybrané složky hustoty tepelného toku. V praktických výpočtech se však parciální derivace obvykle nahrazují podílem konečných diferencí

$$X_{ij} = \frac{\partial T_i}{\partial q_j} \approx \frac{T_{i_2} - T_{i_1}}{q_{j_2} - q_{j_1}},$$

kde T_{i_1} označuje teplotu v místě senzoru v čase i , která je vypočítána v rámci přímé úlohy vedení tepla, ve které je hustota tepelného toku v časovém okamžiku j rovna hodnotě q_{j_1} . Obdobně je proveden i druhý výpočet přímé úlohy vedení tepla s využitím hodnoty q_{j_2} ($q_{j_2} \neq q_{j_1}$), které následně odpovídá vypočítaná teplota T_{i_2} . Z tohoto poznatku plyne, že pro určení každého z koeficientů citlivosti X_{ij} ($i \geq j$) se využívají dva výpočty přímé úlohy. V případě sekvenční metody s r dopřednými časovými kroky je matice \mathbf{X} řádu r a ze struktury matice plyne, že určení prvků matice tedy vyžaduje $2r$ výpočtů přímé úlohy.

Má-li vektor \mathbf{Y} naměřených teplot v místě senzoru n složek, pak je třeba v každém z $(n - r)$ časových kroků vypočítat r hodnot vektoru $\hat{\mathbf{T}}|_{\mathbf{q}_M=0}$. Pro určení každé ze složek tohoto vektoru se využívá řešení jedné přímé úlohy vedení tepla, tedy výpočet hodnot vektoru $\hat{\mathbf{T}}|_{\mathbf{q}_M=0}$ délky r vyžaduje v každém z $(n - r)$ časových okamžků

nalezení řešení pro r přímých úloh.

V konečném součtu tedy pro sekvenční metodu s r dopřednými časovými kroky a n naměřenými hodnotami platí, že jeden výpočet lineární inverzní úlohy vedení tepla s jedním senzorem vyžaduje $2r + (n - r)r$ výpočtů přímé úlohy.

V inverzních úlohách vedení tepla, které jsou řešeny pro praktické aplikace, je však potřeba pro dosažení co možná největší přesnosti vypočítaných okrajových podmínek uvažovat závislost materiálových vlastností na teplotě. V takovém případě se inverzní úloha stává nelineární a je-li pro nalezení jejího řešení použita sekvenční metoda, počet využívaných přímých úloh se značně navýší. Tento poznatek plyne ze skutečnosti, že nelineární inverzní úloha vyžaduje výpočet r koeficientů citlivosti X_{ij} ($i \geq j$) v každém z $n - r$ časových kroků. Počet řešených přímých úloh pro nelineární inverzní úlohu s jedním senzorem je tak v případě použití sekvenční metody roven $(n - r)2r + (n - r)r = 3r(n - r)$.

Tabulka 3.1 uvádí srovnání počtu řešených přímých úloh pro lineární i nelineární inverzní úlohu, přičemž počet okamžiků měření $n = 40000$ a počet zvolených dopředných kroků $r = 20$ odpovídají hodnotám, které se běžně používají při řešení inverzních úloh v Laboratoři přenosu tepla a proudění FSI VUT v Brně. Srovnání je rovněž uvedeno pro případy, kdy v rámci experimentálního měření pro výzkumné projekty mohou být sekvence teplot snímány s použitím jednoho, osmi, nebo osmácti senzorů.

Typ inverzní úlohy	Lineární			Nelineární		
Počet senzorů	1	8	18	1	8	18
Počet přímých úloh	799640	6397120	14393520	2398800	19190400	43178400

Tab. 3.1: Srovnání počtu přímých úloh pro sekvenční metodu ($n = 40000, r = 20$).

Z hodnot uvedených v tabulce 3.1 je zřejmé, že výpočetní náročnost inverzní úlohy je značně ovlivněna vysokým počtem přímých úloh, jejichž řešení jsou v rámci inverzní úlohy využívána. Zabýváme-li se tedy možnostmi urychlení výpočtu inverzní úlohy, je účelné zaměřit se především na snížení výpočetního času, který je věnován výpočtu přímých úloh. Teoretickým poznatkům o možnostech časově efektivního výpočtu přímých úloh se dále věnuje kapitola 4.

3.2.3 Některé další metody

Kromě celodoménové metody s regularizací a sekvenční metody s dopřednými kroky byly v posledních letech vyvinuty další přístupy, které umožňují vypočítat odhady pro okrajové podmínky v úlohách vedení tepla. V následujících odstavcích budou některé z nich přehledově uvedeny.

Sub-doménová metoda

V rámci diplomové práce V. Hříbové [6] byla v Laboratoři přenosu tepla a proudění vyvinuta tzv. sub-doménová metoda, která kombinuje výhody přesnosti celodoménové metody s regularizací a nízké výpočetní náročnosti sekvenční metody pro řešení lineárních inverzních úloh vedení tepla. Základní myšlenka metody spočívá ve využití tzv. okna, které se postupně pohybuje po časové ose grafu zachycujícího data z experimentálního měření. Okno vždy vymezuje časový interval zahrnující zvolený počet vzorků z měření, pro které je následně výpočet okrajových podmínek proveden s využitím principu celodoménové metody. Podrobnější popis včetně algoritmu sub-doménové metody a její srovnání s celodoménovou a sekvenční metodou lze nalézt v příslušné diplomové práci.

Metoda sekvenční identifikace

Metoda sekvenční identifikace byla vyvinuta M. Pohankou z Laboratoře přenosu tepla a proudění a její princip je blíže vysvětlen v publikaci [19]. Princip metody spočívá v předpokladu, že průběh odhadované okrajové podmínky v čase lze modelovat po částech lineární funkcí. S využitím dostupných naměřených dat z několika budoucích časů je pak v každém časovém kroku hledána taková směrnice příslušného lineárního spojovatele, která ve smyslu metody nejmenších čtverců nejlépe vystihuje očekávaný průběh teplot. Důležitou roli přitom podobně jako v Beckových metodách mají výpočty přímých úloh vedení tepla, které v případě Pohankovy metody poskytují vstupní hodnoty pro úlohu minimalizace součtu čtverců odchylek naměřených a vypočítaných teplot v místě senzoru.

Optimalizační metody

Je-li studovaná inverzní úloha vedení tepla přeformulovaná do tvaru optimalizační úlohy, lze se zabývat možnostmi využití některého z optimalizačních algoritmů pro její řešení. Mezi takové optimalizační metody patří například genetické algoritmy, neuronové sítě, nebo metoda optimalizace hejnem částic. Všechny tyto přístupy se řadí mezi moderní výpočetní techniky z oblasti umělé inteligence a jsou-li využity při řešení praktických úloh, vyznačují se obvykle vysokou výpočetní náročností. Podrobněji se možnostem využití optimalizačních metod pro řešení inverzních úloh věnuje například [18].

4 ŘEŠENÍ SOUSTAV LINEÁRNÍCH ROVNIC V PŘÍMÝCH ÚLOHÁCH VEDENÍ TEPLA

V textu kapitoly 2 byl vysvětlen přístup pro reformulaci úlohy nestacionárního vedení tepla do diskrétního tvaru, kdy je původní úloha s využitím metody kontrolních objemů převedena na problém řešení soustavy lineárních rovnic (SLR). Sestavená matice soustavy se přitom vyznačuje několika zajímavými vlastnostmi, mezi které se řadí její řídká struktura, symetrie a pozitivní definitnost. V rámci této kapitoly budou představeny dva efektivní přístupy, které lze v souvislosti s řešením odvozených SLR využít. Z hlediska zaměření praktické části diplomové práce bude pozornost věnována diskretizované úloze nestacionárního vedení tepla ve dvou prostorových proměnných (dále zkráceně označované jako 2D úloha).

První část kapitoly se věnuje metodě střídavých směrů. Ta spočívá v převodu dané 2D úlohy na problém několikanásobného výpočtu řešení 1D úloh vedení tepla v horizontálním a vertikálním směru diskretizované domény. Vzniklé soustavy jsou pak řešeny pro relativně malý počet proměnných a matice soustav se vyznačují třídiagonální strukturou (viz odvození v části 2.4.1). V této souvislosti budou uvedeny tři numerické algoritmy, které jsou z hlediska efektivity výpočtu pro řešení SLR s třídiagonální maticí velmi výhodné.

Odlíšný přístup pro řešení úlohy vedení tepla spočívá v řešení rozsáhlých SLR s pětdiagonální maticí, které vznikají při reformulaci zadané 2D úlohy do diskrétního tvaru (viz odvození v části 2.4.2). V takovém případě se nabízí využití metody sdružených gradientů, která při řešení soustav se symetrickou a pozitivně definitní maticí soustavy nalézá efektivní uplatnění.

4.1 ADI - Metoda střídavých směrů

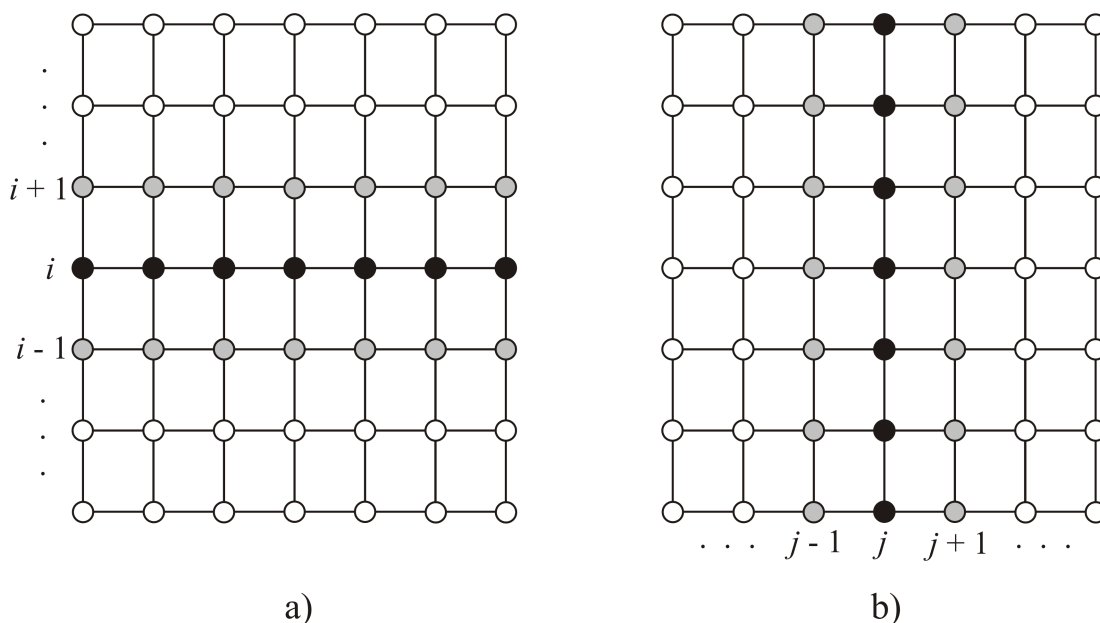
Vytvářejí-li uzlové body diskretizované domény v úloze 2D vedení tepla strukturovanou obdélníkovou sít, lze pro účely výpočtu numerického řešení úlohy využít metodu, která bývá v odborných publikacích označována zkratkou ADI (z anglického *alternating direction implicit method*). V česky psané literatuře se přístup obvykle uvádí pod názvem metoda střídavých směrů (bez odkazu na její implicitní charakter) [20].

4.1.1 Odvození metody

Základní myšlenka metody střídavých směrů při řešení 2D úlohy vedení tepla vychází ze strukturovanosti sítě uzlových bodů, která umožňuje účelně rozlišit horizontální a vertikální směr při popisu rozmístění uzlových bodů. Jinými slovy, při strukturovanosti sítě lze polohu každého uzlového bodu popsat pomocí indexu řádku ($i = 1, 2, \dots, m$) a sloupce ($j = 1, 2, \dots, n$), ve kterém se nachází. Tento poznatek umožňuje zabývat se možností řešit původní 2D úlohu ve smyslu skládání dílčích

řešení 1D úloh vedení tepla v horizontálním a vertikálním směru. Metoda však současně respektuje 2D charakter úlohy a vychází tak při sestavování bilančních rovností z pětibodového diskretizačního schématu.

Obrázek 4.1.a) schematicky znázorňuje obdélníkovou síť uzlových bodů s černě vyznačenými uzlovými body zvoleného i -tého řádku, pro který lze formulovat 1D úlohu vedení tepla. Šedou barvou jsou pak zvýrazněny přilehlé uzlové body, které jsou při sestavování rovnic modelujících vedení tepla v i -tém řádku zohledněny. Analogicky obrázek 4.1.b) zachycuje situaci pro 1D úlohu vedení tepla ve vertikálním směru pro obecný j -tý sloupec, přičemž v rámci pětibodového schématu diskretizace jsou zohledněny uzlové body v sousedních sloupcích s indexy $(j - 1)$ a $(j + 1)$.



Obr. 4.1: Metoda střídavých směrů: uskupení uzlových bodů pro 1D úlohy vedení tepla a) v horizontálním směru, b) ve vertikálním směru. [2]

1. Vedení tepla v horizontálním směru

V následujících odstavcích budeme předpokládat, že jednotlivé uzlové body jsou v rozmístěny v m řádcích a n sloupcích obdélníkové sítě. V první fázi metody střídavých směrů se zabýváme úlohami 1D vedení tepla v horizontálním směru. Pro libovolně zvolený vnitřní uzlový bod P po diskretizaci úlohy dostáváme pro energetickou bilanci vztah

$$a_P T_P^{\frac{1}{2}} = a_E T_E^{\frac{1}{2}} + a_W T_W^{\frac{1}{2}} + a_N T_N^0 + a_S T_S^0 + a_P^0 T_P^0 + Q_C \Delta x \Delta y, \quad (4.1)$$

kde $T_P^{\frac{1}{2}}, T_E^{\frac{1}{2}}, T_W^{\frac{1}{2}}$ vyjadřují neznámé teploty v uzlových bodech P, E a W v časovém okamžiku $t + \frac{1}{2}\Delta t$. Symboly T_N^0, T_S^0 označují známé hodnoty pro teplotu v uzlových bodech N a S z časového okamžiku t a význam ostatních členů je stejný jako v zápisu rovnosti (2.16), která vyjadřuje odvozenou energetickou bilanci pro 2D úlohu. Při formulaci rovnosti (4.1) pro všechny vnitřní uzlové body pevně zvoleného řádku

a s využitím okrajových podmínek lze následně sestavit SLR s třídiagonální maticí soustavy pro n neznámých. Obdobně lze při formulaci 1D úloh vedení tepla v horizontálním směru postupovat u ostatních řádků strukturované sítě. Řešením odvozených m SLR s třídiagonální maticí jsou hodnoty $T_{ij}^{\frac{1}{2}}$, které mají význam teploty příslušných v uzlových bodech strukturované sítě v čase $t + \frac{1}{2}\Delta t$.

2. Vedení tepla ve vertikálním směru

Ve druhé fázi metody střídavých směrů postupujeme analogicky při odvození diskrétního tvaru energetické bilance v uzlovém bodě P pro vedení tepla ve vertikálním směru:

$$a_P T_P^1 = a_E T_E^{\frac{1}{2}} + a_W T_W^{\frac{1}{2}} + a_N T_N^1 + a_S T_S^1 + a_P^0 T_P^{\frac{1}{2}} + Q_C \Delta x \Delta y. \quad (4.2)$$

Lze si povšimnout, že vztah (4.2) využívá teploty $T_E^{\frac{1}{2}}$, $T_W^{\frac{1}{2}}$ a $T_P^{\frac{1}{2}}$ vypočítané v první fázi metody střídavých směrů pro horizontální směr vedení tepla. Hodnoty T_P^1 , T_N^1 a T_S^1 pro teplotu v příslušných uzlových bodech v časovém okamžiku $t + \Delta t$ mají v uvedené rovnosti význam neznámých. Sestavení diskrétního tvaru energetické bilance (4.2) pro všechny vnitřní uzly v n sloupcích strukturované sítě a implementace zadaných okrajových podmínek úlohy následně vede na řešení n SLR s třídiagonální maticí pro m neznámých. Získaná řešení soustav pak představují vypočítané hodnoty T_{ij}^1 pro teplotu v uzlových bodech diskretizované domény v časovém okamžiku $t + \Delta t$. Nutno poznamenat, že v praktických aplikacích lze s ohledem na povahu zadané úlohy měnit pořadí dvou uvedených fází pro řešení úloh vedení tepla v horizontálním a vertikálním směru.

4.1.2 Iterační charakter metody

V základním algoritmu metody střídavých směrů pro řešení 2D úloh, který poprvé představili Douglas a Rachford ve svém článku [21] z roku 1956, je nalezením hodnot T_{ij}^1 dokončen výpočet pro časový krok $t + \Delta t$. Metoda tak pro výpočet řešení v každém z časových okamžiků $t + \Delta t, t + 2\Delta t, t + 3\Delta t, \dots$ využívá vždy pouze jednu iteraci, v rámci níž jsou nejprve vypočítány mezivýsledky získané řešením třídiagonálních soustav v horizontálním směru a následně je s využitím úloh vedení tepla ve vertikálním směru nalezeno konečné řešení pro daný časový okamžik.

V případě řešení úloh vedení tepla v heterogenním tělese, které sestává ze dvou a více látek se vzájemně odlišnou tepelnou vodivostí, se metoda střídavých směrů v praxi častěji využívá jako iterační metoda. Pro účely korektního modelování sledovaného fyzikálního jevu je tak v každém časovém kroku potřeba spočítat řešení úlohy vedení tepla v horizontálním a vertikálním směru několikrát po sobě [7].

Při uplatnění upravených rovností (4.1) a (4.2) lze iterační výpočet v konkrétním časovém kroku metody střídavých směrů popsat s využitím iteračního indexu k pomocí následujícího algoritmu ADI.

Algoritmus ADI - iterační výpočet v rámci jednoho časového kroku

for $k := 1, 2, \dots$ **do**

1. Formulace energetických bilancí pro úlohy vedení tepla v horizontálním směru:

$$a_P T_P^{\frac{1}{2},k} = a_E T_E^{\frac{1}{2},k} + a_W T_W^{\frac{1}{2},k} + a_N T_N^{1,k-1} + a_S T_S^{1,k-1} + a_P^0 \hat{T}_P + Q_C \Delta x \Delta y, \quad (4.3)$$

kde \hat{T}_P označuje teplotu vypočítanou v předchozím časovém kroku pro příslušný uzlový bod P .

2. Řešení SLR sestavených z rovností (4.3) pro všechny uzlové body.
3. Formulace energetických bilancí pro úlohy vedení tepla ve vertikálním směru:

$$a_P T_P^{1,k} = a_E T_E^{\frac{1}{2},k} + a_W T_W^{\frac{1}{2},k} + a_N T_N^{1,k} + a_S T_S^{1,k} + a_P^0 \hat{T}_P + Q_C \Delta x \Delta y. \quad (4.4)$$

4. Řešení SLR sestavených z rovností (4.4) pro všechny uzlové body.
5. Kontrola dosažené přesnosti:

$$\mathbf{if} \left\| \bar{\boldsymbol{\xi}}^k \right\|_{\infty} < T_{\epsilon}, \quad \mathbf{break},$$

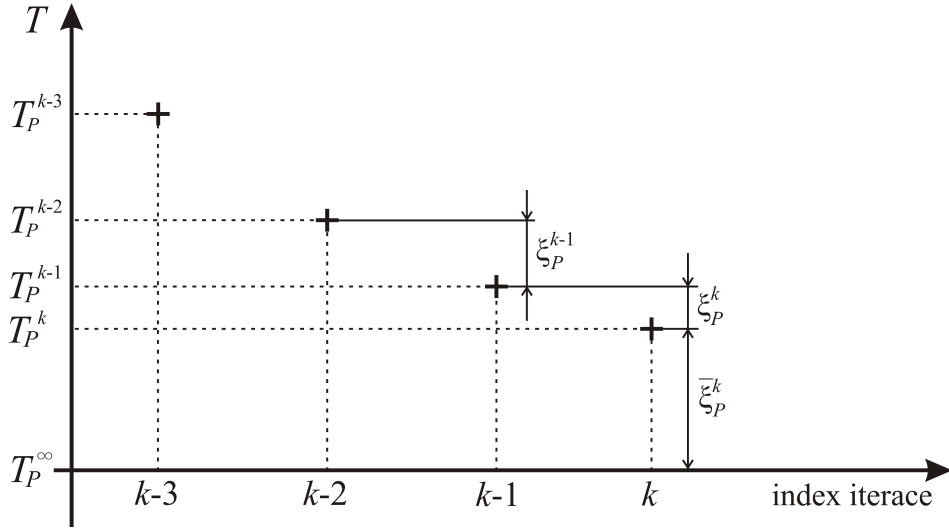
kde $\left\| \bar{\boldsymbol{\xi}}^k \right\|_{\infty}$ má význam maximálního odhadu chyby v teplotním poli vypočítaném ve čtvrtém kroku algoritmu pro k -tou iteraci a symbol T_{ϵ} označuje stanovenou hodnotu tolerance v jednotkách stupně Celsia.

end

Kontrolní kritérium pro ukončení iteračního procesu v daném časovém kroku lze určit pomocí rozdílu teplot v uzlových bodech ve dvou po sobě jdoucích iteracích [7]. Označíme-li \mathbf{T}^k teplotní pole vypočítané v k -té iteraci výpočtu pro daný časový krok a symbolem \mathbf{T}^{k-1} označíme vypočítané teplotní pole z $(k-1)$ -té iterace téhož časového kroku, pak maximální odhad chyby lze s využitím označení P pro libovolný uzlový bod obvykle stanovit jako

$$\left\| \bar{\boldsymbol{\xi}}^k \right\|_{\infty} = \left\| \mathbf{T}^k - \mathbf{T}^{k-1} \right\|_{\infty} = \max_P \left\{ |T_P^k - T_P^{k-1}| \right\}.$$

Při řešení praktických úloh nestacionárního vedení tepla lze pro účely určení kvalitnějšího odhadu chyby využít alternativní přístup. Ten vychází z popisu konvergence iteračního výpočtu a jeho srovnání s konvergentní geometrickou řadou. Základní myšlenka určení odhadu chyby v numerickém výpočtu pak spočívá v předpokladu, že velikost chyby v hodnotě teploty T_P^k vypočítané v k -té iteraci daného časového kroku lze odhadnout pomocí součtu nekonečné geometrické řady. Koncept přitom využívá teoretických hodnot T_P^{∞} , které mají význam teplot vypočítaných po nekonečném počtu iterací [7]. Na obrázku 4.2 je graficky znázorněn princip určení odhadu chyby $\bar{\xi}_P^k$ v uzlovém bodě P pro k -tou iteraci výpočtu v rámci jednoho časového kroku.



Obr. 4.2: Vizualizace odhadu chyby $\bar{\xi}_P^k$ v iteračním výpočtu algoritmu ADI. [7]

Pro odhad chyby $\bar{\xi}_P^k$ pak v souvislosti s nalezením součtu konvergentní geometrické řady platí

$$\begin{aligned} \bar{\xi}_P^k &= \xi_P^{k+1} + \xi_P^{k+2} + \dots + \xi_P^\infty = \frac{\Delta T_P^k}{\left(\Delta T_P^{k-1}/\Delta T_P^k\right)^1} + \frac{\Delta T_P^k}{\left(\Delta T_P^{k-1}/\Delta T_P^k\right)^2} + \dots \\ &\dots + \frac{\Delta T_P^k}{\left(\Delta T_P^{k-1}/\Delta T_P^k\right)^\infty} = \Delta T_P^k \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\left(\Delta T_P^{k-1}/\Delta T_P^k\right)^i} = \frac{\Delta T_P^k}{\left(\Delta T_P^{k-1}/\Delta T_P^k\right) - 1}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

přičemž členy ΔT_P^k a ΔT_P^{k-1} jsou určeny následovně:

$$\Delta T_P^k = |T_P^{k-1} - T_P^k|, \quad \Delta T_P^{k-1} = \frac{|T_P^{k-2} - T_P^{k-1}|}{|T_P^{k-1} - T_P^k|}.$$

Určení maximálního odhadu chyby $\left\|\bar{\xi}^k\right\|_\infty$ pro k -tou iteraci výpočtu následně spočívá v nalezení největší hodnoty $\bar{\xi}_P^k$ vypočítané pro všechny uzlové body P diskretizované domény [7]:

$$\left\|\bar{\xi}^k\right\|_\infty = \max_P \left\{\bar{\xi}_P^k\right\}. \quad (4.6)$$

4.1.3 Numerické metody pro řešení SLR s třídiagonální maticí

V dalších odstavcích budou představeny tři numerické metody, které lze využít pro účely řešení SLR v krocích 2 a 4 iteračního algoritmu ADI. Konkrétně se budeme zabývat řešením SLR¹ tvaru $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{d}$ pro n neznámých s třídiagonální maticí soustavy \mathbf{A} . Tuto matici soustavy budeme s využitím vektoru první poddiagonály \mathbf{a} ,

¹Pro vektor neznámých v příslušných SLR je v následujícím textu použito obecné označení $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ bez vazby na jeho fyzikální význam. Vektor pravé strany je z důvodu ustáleného značení v odborné literatuře označen symbolem \mathbf{d} .

vektoru hlavní diagonály \mathbf{b} a vektoru první naddiagonály \mathbf{c} uvažovat ve tvaru

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & 0 \\ & a_3 & b_3 & c_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n \end{pmatrix}.$$

Thomasův algoritmus

Thomasův algoritmus (v odborné literatuře rovněž označován zkratkou TDMA z anglického *tridiagonal matrix algorithm*) představuje standardní přístup pro řešení SLR s třídiagonální maticí. Metoda původně vychází ze standardní Gaussovy eliminační metody (zkráceně GEM). Díky výhodné struktuře matice \mathbf{A} vyžaduje Thomasův algoritmus pouze $\mathcal{O}(n)$ operací a ve srovnání s asymptotickou složitostí $\mathcal{O}(n^3)$ pro algoritmus GEM se tedy jeho použití jeví jako velmi efektivní. [29]

Algoritmus TDMA sestává ze dvou fází, které se označují jako dopředná eliminace a zpětný chod. V rámci dopředné eliminace jsou nejprve eliminovány prvky první poddiagonály matice \mathbf{A} a příslušně jsou upraveny prvky vektoru pravé strany \mathbf{d} :

$$c'_1 = \frac{c_1}{b_1}, \quad c'_i = \frac{c_i}{b_i - c'_{i-1}a_i}, \quad i = 2, 3, \dots, n-1, \quad (4.7)$$

$$d'_1 = \frac{d_1}{b_1}, \quad d'_i = \frac{d_i - d'_{i-1}a_i}{b_i - c'_{i-1}a_i}, \quad i = 2, 3, \dots, n-1. \quad (4.8)$$

Ve druhé fázi algoritmu je následně formou zpětného chodu proveden výpočet prvků vektoru neznámých \mathbf{x} :

$$x_n = d'_n, \quad x_i = d'_i - c'_i x_{i+1} \quad i = n-1, n-2, \dots, 1. \quad (4.9)$$

Z uvedených předpisů (4.7)-(4.9) pro kroky algoritmu TDMA si lze povšimnout, že metoda se ze své podstaty vyznačuje sekvenčním charakterem. Tato významná vlastnost je spjata jak s oběma kroky dopředné eliminace (výpočet c_i a d_i využívá dříve vypočítané hodnoty c_{i-1} a d_{i-1}) tak i s fází zpětného chodu (výpočet x_i využívá známou hodnotu x_{i+1}) [29].

Tento poznatek o charakteru algoritmu TDMA je klíčový z hlediska časové efektivity výpočtu při řešení příslušných SLR v praktických aplikacích. Požadavky na vysoký počet uzlových bodů diskretizované domény mají za přímý důsledek zvýšení počtu neznámých vystupujících v řešených SLR. Sekvenční charakter algoritmu TDMA pak při výpočtu může představovat zásadní omezení metody. V následujících podkapitolách budou uvedeny dvě metody, které narozdíl od sekvenčního algoritmu TDMA umožňují využití paralelizace výpočtů.

Cyklická redukce

Metodu cyklické redukce (zkráceně CR z anglického *cyclic reduction*) ve svém článku z roku 1965 poprvé představil Hockney [30]. V souvislosti s rapidním vývojem grafických procesorů (dále jen GPU z anglického *graphics processing unit*) nalézá metoda pro svůj paralelní charakter v praktických výpočtech významné uplatnění. Z hlediska teorie výpočetní náročnosti se algoritmus CR vyznačuje asymptotickou složitostí $\mathcal{O}(\log_2 n)$ [29].

Algoritmus CR sestává podobně jako algoritmus TDMA ze dvou fází, které se označují jako dopředná redukce a zpětný chod. V rámci dopředné redukce je nejprve počet neznámých dané SLR v každém kroku snižován na polovinu, přičemž tak dochází k postupnému zmenšování velikosti původní soustavy. Myšlenka konkrétně spočívá v konstrukci lineárních kombinací tří po sobě jdoucích rovnic s indexy $i - 1, i, i + 1$, které následně vedou na takovou soustavu rovnic, v níž vystupují pouze rovnice se sudou hodnotou indexu i . Je-li i -tá rovnice soustavy v k -tém kroku dopředné redukce tvaru

$$a_i^k x_{i-1} + b_i^k x_i + c_i^k x_{i+1} = d_i^k, \quad (4.10)$$

pak lze pro tuto rovnici vypočítat příslušné koeficienty $a_i^{k+1}, b_i^{k+1}, c_i^{k+1}, d_i^{k+1}$, které určují tvar rovnice v následujícím kroku $k + 1$. Hodnoty koeficientů jsou přitom určeny následujícími vztahy:

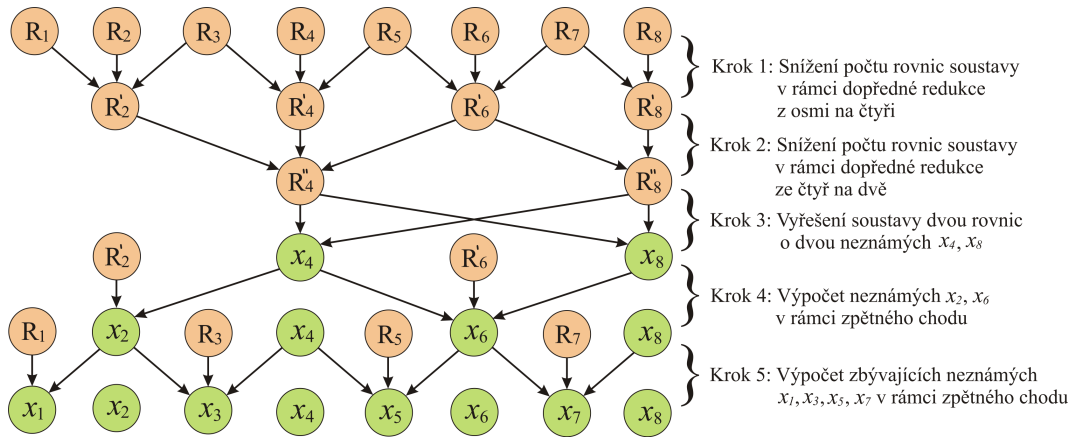
$$\begin{aligned} a_i^{k+1} &= -a_{i-1}^k \ell_1, & b_i^{k+1} &= b_i^k - c_{i-1}^k \ell_1 - a_{i+1}^k \ell_2, \\ c_i^{k+1} &= -c_{i+1}^k \ell_2, & d_i^{k+1} &= d_i^k - d_{i-1}^k \ell_1 - d_{i+1}^k \ell_2, \\ \ell_1 &= \frac{a_i^k}{b_{i-1}^k}, & \ell_2 &= \frac{c_i^k}{b_{i+1}^k}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

V každém dalším kroku se pak s využitím indexu i provede nové očíslování rovnic a proces přepočítávání koeficientů dle vztahů (4.10) a (4.11) pro rovnice se sudým indexem i se opakuje. Fáze dopředné redukce je ukončena tehdy, když postupná eliminace rovnic v konečném důsledku vede na úlohu řešení SLR o dvou neznámých. Nalezené řešení této redukované soustavy pak poskytuje vstup pro fázi zpětného chodu, která realizuje postupné dopočítání poloviny počtu takových neznámých, které byly v rámci dopředné redukce v příslušných krocích eliminovány. S využitím hodnot x_{i-1} a x_{i+1} vypočítaných v některém z předešlých kroků zpětného chodu je pak výpočet neznámé x_i určen vztahem

$$x_i = \frac{d_i^{k+1} - a_i^{k+1} x_{i-1} - c_i^{k+1} x_{i+1}}{b_i^{k+1}}, \quad (4.12)$$

kde horní index $k + 1$ označuje krok dopředné redukce, ve kterém byly příslušné koeficienty vypočítány [29]. Na obrázku 4.3 je znázorněno schéma algoritmu CR pro výpočet řešení SLR pro osm neznámých.

V souvislosti s uvedeným popisem algoritmu CR si lze v přiloženém schématu povšimnout, že při praktické implementaci fáze dopředné redukce je potřeba zvlášť



Obr. 4.3: Schéma algoritmu CR pro SLR pro osm neznámých. [29]

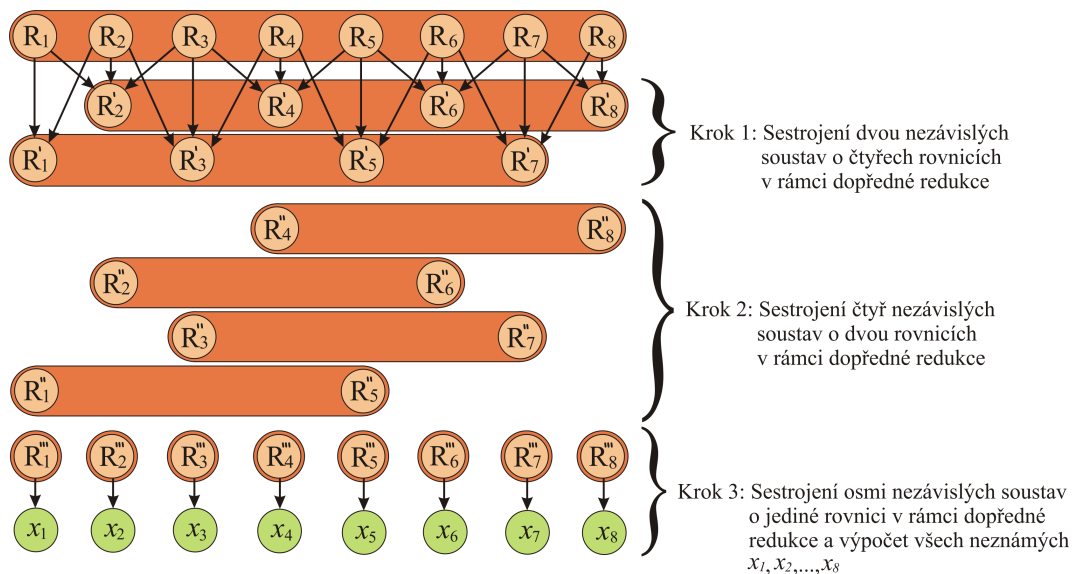
zohlednit konstrukci lineární kombinace pro poslední rovnici soustavy. Modifikaci zřejmě vyžaduje rovněž výpočet neznámé x_1 v posledním kroku zpětného chodu. [29] Koncept paralelizace výpočtů lze v algoritmu CR uplatnit jak ve fázi dopředné redukce tak při výpočtu neznámých ve zpětném chodu. Ze vztahů (4.10) a (4.11) si lze povšimnout, že výpočet koeficientů $a_i^{k+1}, b_i^{k+1}, c_i^{k+1}, d_i^{k+1}$ ($k = 0, 1, 2, \dots, \log_2 n$) lze vzhledem k nezávislosti výsledků jednotlivých lineárních kombinací realizovat paralelně. Podobný poznatek plyne ze vztahu (4.12) rovněž pro výpočet neznámých x_i .

Paralelní cyklická redukce

Algoritmus paralelní cyklické redukce (zkráceně PCR z anglického *parallel cyclic reduction*) vychází z hlediska uplatnění paralelizace výpočtů z podobné myšlenky jako algoritmus CR. Hodnoty všech neznámých pro původní zadanou soustavu jsou však v případě algoritmu PCR vypočítány bezprostředně po ukončení fáze dopředné redukce, bez nutnosti využití fáze zpětného chodu. Algoritmus PCR se vyznačuje asymptotickou složitostí $\mathcal{O}(\log_2 n)$. [29]

Základní princip metody spočívá v postupném převodu původní rozsáhlé SLR na velký počet soustav o malém počtu neznámých. S využitím vztahů (4.10) a (4.11) pro fázi dopředné redukce algoritmu CR jsou pro zadanou soustavu n rovnic nejprve zkonstruovány dvě soustavy o $n/2$ neznámých, následně je každá z těchto dvou soustav dále převedena na dvě menší soustavy o $n/4$ neznámých a podobně jsou velikosti nově zkonstruovaných soustav redukovány i v dalších krocích. Fáze dopředné redukce tak v $\log_2 n$ krocích postupně vede na řešení n soustav o jediné rovnici pro jednu neznámou, jejichž výpočet v konečném důsledku přímo dává hodnoty neznámých x_i ($i = 1, 2, \dots, n$) původní SLR. Na obrázku 4.4 je myšlenka algoritmu PCR schematicky znázorněna pro postup při řešení SLR o osmi neznámých.

Podobně jako v případě algoritmu CR lze koncept paralelizace využít při konstrukci redukováných soustav v rámci vztahů (4.10) a (4.11). Díky vzájemné nezávislosti soustav lze paralelizaci výpočtů rovněž využít při řešení n soustav o jediné rovnici získaných v posledním kroku dopředné redukce. [29]



Obr. 4.4: Schéma algoritmu PCR pro SLR pro osm neznámých. [29]

4.2 Metoda sdružených gradientů

Metoda sdružených gradientů (anglicky *conjugate gradient method*) se řadí mezi významné iterační metody pro řešení SLR tvaru² $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ se symetrickou a pozitivně definitní maticí soustavy \mathbf{A} . Ve svém článku z roku 1952 metodu poprvé představili Magnus R. Hestenes a Eduard Stiefel [22].

4.2.1 Odvození metody

Koncept metody sdružených gradientů byl původně vyvinut v úzké souvislosti s řešením minimalizačních problémů z oblasti nelineární optimalizace. V dalších odstavcích bude nejprve vysvětlena souvislost mezi úlohou na řešení SLR a problémem hledání lokálních extrémů kvadratické formy. Následně bude na principu tzv. metody největšího spádu představen iterační proces, který spočívá v konstrukci posloupnosti přibližných řešení $\{\mathbf{x}_k\}_{k \geq 1}$ dané úlohy. V návaznosti na popis zásadních nevýhod metody největšího spádu bude konečně uveden algoritmus metody sdružených gradientů.

1. Úloha minimalizace kvadratické formy

Nechť $f(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ je kvadratická funkce n reálných proměnných tvaru

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{b}^T \mathbf{x} + c, \quad (4.13)$$

kde \mathbf{A} je symetrická a pozitivně definitní čtvercová matice řádu n , symbol \mathbf{b} označuje vektor délky n a $c \in \mathbb{R}$ je reálný skalár. Zabýváme-li se úlohou hledání extrémů reálné

²Použití jednotlivých symbolů v soustavě $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ respektuje ustálené označení, které se v souvislosti s metodou sdružených gradientů běžně využívá v odborné literatuře.

kvadratické formy $f(\mathbf{x})$, pak pro gradient $\nabla f(\mathbf{x})$ z předpisu (4.13) dostáváme

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{A}^T \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}. \quad (4.14)$$

Matice \mathbf{A} je navíc symetrická, z čehož plyne

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b} \quad (4.15)$$

a z nutné podmínky existence lokálního extrému pak dostáváme

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b} = \mathbf{0}, \quad (4.16)$$

kde $\mathbf{0}$ je nulový vektor délky n . Z uvedeného postupu tedy plyne, že přesné řešení \mathbf{x}^* dané SLR tvaru $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ je rovněž stacionárním bodem kvadratické formy (4.13). Díky pozitivní definitnosti matice \mathbf{A} lze však navíc ukázat, že \mathbf{x}^* je jediným stacionárním bodem dané kvadratické formy a určuje její globální minimum. [23], [24]

2. Metoda největšího spádu

Uvedme několik dalších souvislostí mezi iteračním procesem hledání řešení SLR $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ a úlohou na hledání globálního minima kvadratické formy v \mathbb{R}^n . Reziduum $\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}_k$ pro k -tou iteraci výpočtu umožňuje posoudit kvalitu k -tého přibližného řešení \mathbf{x}_k ve smyslu vyjádření polohy vektoru $\mathbf{A} \mathbf{x}_k$ vůči vektoru \mathbf{b} . Pro zvolenou kladnou konstantu ϵ_{tol} se tak v praxi běžně využívá podmínka tvaru $\|\mathbf{r}_k\| < \epsilon_{tol}$ pro ukončení iteračního výpočtu, je-li nalezeno dostatečně přesné řešení úlohy.

Ve vztahu ke kvadratické formě (4.13) lze navíc ukázat, že $\mathbf{r}_k = -\nabla f(\mathbf{x}_k)$. Vektor rezidua tedy současně označuje směr největšího spádu pro daný bod \mathbf{x}_k . Při hledání globálního minima kvadratické formy (4.13) tedy na vstupu algoritmu zvolíme počáteční odhad řešení \mathbf{x}_0 a v každém k -tém iteračním kroku ($k = 0, 1, 2, \dots$) konstruujeme přibližná řešení \mathbf{x}_{k+1} právě při využití vektorů \mathbf{r}_k vyjadřujících směr největšího spádu. Je-li předpis pro nalezení přibližného řešení \mathbf{x}_{k+1} tvaru

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{r}_k, \quad (4.17)$$

hovoříme o algoritmu pro tzv. metodu největšího spádu [23]. Parametr $\alpha_k \in \mathbb{R}$ vystupující ve vztahu (4.17) přitom určuje optimální velikost kroku z \mathbf{x}_k ve směru prohledávání prostoru, který je určený vektorem \mathbf{r}_k . Dá se ukázat, že vzorec pro výpočet hodnoty α_k je tvaru

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{A} \mathbf{r}_k}, \quad (4.18)$$

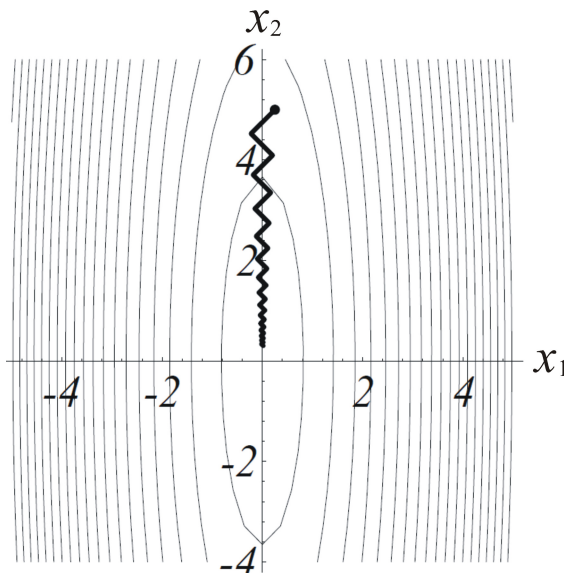
přičemž jeho odvození spočívá ve využití ortogonality vektorů reziduí:

$$\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_k = 0. \quad (4.19)$$

Formální odvození této vlastnosti vektorů reziduí je podrobněji popsáno v [23].

Hlavní nevýhoda metody největšího spádu spočívá v její pomalé konvergenci při

řešení takových úloh, které se vyznačují velkým číslem podmíněnosti matice \mathbf{A} . Iterační výpočet se pak projevuje tzv. cik-cak efektem, který má za důsledek, že počet kroků potřebný k dosažení přijatelně přesného řešení je neúnosně velký. Obrázek 4.5 na příkladu minimalizační úlohy v \mathbb{R}^2 názorně ilustruje pomalou konvergenci metody největšího spádu způsobenou cik-cak efektem. [23]



Obr. 4.5: Vizualizace cik-cak efektu u metody největšího spádu v \mathbb{R}^2 . [23]

3. Metoda sdružených gradientů

Pro urychlení konvergence iterační metody je s ohledem na poznatky o metodě největšího spádu účelné zabývat se otázkou, jak lze vhoději zvolit vektory určující směry prohledávání. Především je žádoucí, aby počet kroků vykonaných při procesu hledání přesného řešení úlohy $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ byl co nejmenší, tedy nejvýše roven n . [23]

Metoda sdružených gradientů, která z principů odvození metody největšího spádu vychází, využívá pro účely konstrukce vektorů určujících optimální směry prohledávání tzv. \mathbf{A} -ortogonalitu vektorů: dva vektory \mathbf{p}_k a \mathbf{p}_l jsou podle definice \mathbf{A} -ortogonální, pokud platí

$$\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_l = 0. \quad (4.20)$$

Při využití poznatku (4.19) o ortogonalitě vektorů reziduí lze odvodit následující vyjádření pro postupnou konstrukci n vektorů $\{\mathbf{p}_k\}_{k=0}^{n-1}$, které vyjadřující směry prohledávání prostoru \mathbb{R}^n a jsou vzájemně \mathbf{A} -ortogonální:

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0, \quad \mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k, \quad k = 0, 1, \dots, n-1, \quad (4.21)$$

kde β_k má význam optimální délky kroku ve směru vektoru \mathbf{p}_k . S využitím posloupnosti vektorů $\{\mathbf{p}_k\}_{k=0}^{n-1}$ a parametru α_k pak konstrukce přibližných řešení probíhá dle vztahu

$$\mathbf{x}_0 \text{ jako vstup, } \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k, \quad k = 0, 1, \dots, n-1. \quad (4.22)$$

Úpravou předpisu (4.22) lze dále odvodit vztah pro výpočet vektoru reziduí:

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{p}_k. \quad (4.23)$$

Konečně, kombinací předpisů (4.21), (4.22) a (4.23) lze pomocí úprav s využitím vztahů $\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_{k+1} = 0$ a $\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_{k+1} = 0$ odvodit vyjádření pro výpočet hodnot parametrů α_k a β_k :

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_k}, \quad (4.24)$$

$$\beta_k = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}. \quad (4.25)$$

Posloupnost jednotlivých kroků výpočtu, které využívá metoda sdružených gradientů při řešení SLR se symetrickou a pozitivně definitní maticí soustavy \mathbf{A} , popisuje níže uvedený algoritmus CG [25]:

Algoritmus CG (metoda sdružených gradientů)

1. Vstup: \mathbf{A} , \mathbf{b} , \mathbf{x}_0 , ϵ_{tol} .
2. $\mathbf{r}_0 := \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}_0$; $\mathbf{p}_0 := \mathbf{r}_0$
3. **if** $\|\mathbf{r}_0\| < \epsilon_{tol}$, nalezené řešení: \mathbf{x}_0 , **exit**
4. **for** $k := 0, 1, \dots$ **do**
5. $\alpha_k := \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_k}$
6. $\mathbf{x}_{k+1} := \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$
7. $\mathbf{r}_{k+1} := \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{p}_k$
8. **if** $\|\mathbf{r}_{k+1}\| < \epsilon_{tol}$, **break**
9. $\beta_k := \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}$
10. $\mathbf{p}_{k+1} := \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k$
11. **end**
12. Nalezené řešení: \mathbf{x}_{k+1} , **exit**

V případě teoreticky přesného provádění operací pro algoritmus metody sdružených gradientů platí, že proces výpočtu přesného řešení $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$ pro SLR tvaru $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ skončí po nejvýše n krocích [25]. Z tohoto důvodu byla metoda z počátku klasifikována jako přímá metoda. Při počítačové implementaci algoritmu však v rámci výpočtu dochází k postupnému hromadění zaokrouhlovacích chyb; navíc z důvodu tzv. jevu zrušení platných cifer (anglicky *cancellation error*) ztrácejí vektory $\{\mathbf{p}_k\}_{k=0}^{n-1}$ svou vlastnost \mathbf{A} -ortogonality. V takovém případě pak počet iterací při výpočtu může být značně vyšší než n a o metodě sdružených gradientů se proto běžně hovoří jako o metodě iterační. [23]

Podobně jako v případě metody největšího spádu závisí rychlost konvergence metody sdružených gradientů na čísle podmíněnosti matice \mathbf{A} . Při řešení SLR, jejichž matice soustavy se vyznačuje velkým číslem podmíněnosti, může být počet iterací

rovněž při použití algoritmu CG značně vysoký. V praktických úlohách se pro účely urychlení konvergence obvykle využívá technika tzv. předpodmínění.

4.2.2 Předpodmínění

Základní myšlenka předpodmínění spočívá ve vhodné transformaci dané SLR tvaru $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ na obecně jinou soustavu $\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}}$, jejíž řešení $\tilde{\mathbf{x}}^*$ je ovšem stejné jako řešení \mathbf{x}^* původní soustavy. Hlavním cílem této transformace je přitom snížit číslo podmíněnosti matice \mathbf{A} a v důsledku toho docílit urychlení konvergence prováděného iteračního výpočtu. [26]

V případě řešení SLR se symetrickou a pozitivně definitní maticí \mathbf{A} je účelné, aby transformace soustavy obě tyto významné vlastnosti matice soustavy zachovala. V rámci předpodmínění se proto využívá tzv. oboustranná transformace a úloha tak vede na řešení SLR tvaru

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}\mathbf{P}^T\mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b}, \quad (4.26)$$

kde v souvislosti s použitým označením transformované soustavy pomocí symbolu vlnky je $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}$, $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{P}^T\mathbf{x}$, $\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b}$.

Matice $\mathbf{M} = \mathbf{P}\mathbf{P}^T$ se nazývá předpodmiňovací matice. Zabýváme-li se řešením transformované SLR (4.26) pomocí metody sdružených gradientů, hovoříme o metodě sdružených gradientů s předpodmíněním (zkráceně PCG z anglického *preconditioned conjugate gradient method*). Příslušný algoritmus PCG lze pomocí vhodných úprav odvodit z algoritmu pro metodu sdružených gradientů. [25]

Algoritmus PCG (metoda sdružených gradientů s předpodmíněním)

1. Vstup: $\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{x}_0, \epsilon_{tol}$
2. $\mathbf{r}_0 := \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$
3. Řešení soustavy $\mathbf{M}\mathbf{z}_0 = \mathbf{r}_0$; $\mathbf{p}_0 := \mathbf{z}_0$
4. **if** $\|\mathbf{r}_0\| < \epsilon_{tol}$, nalezené řešení: \mathbf{x}_0 , **exit**
5. **for** $k := 0, 1, \dots$ **do**
6. $\alpha_k := \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{z}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{A} \mathbf{p}_k}$
7. $\mathbf{x}_{k+1} := \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k$
8. $\mathbf{r}_{k+1} := \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{p}_k$
9. **if** $\|\mathbf{r}_{k+1}\| < \epsilon_{tol}$, **break**
10. Řešení soustavy $\mathbf{M}\mathbf{z}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1}$
11. $\beta_k := \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{z}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{z}_k}$
12. $\mathbf{p}_{k+1} := \mathbf{z}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k$
13. **end**
14. Nalezené řešení: \mathbf{x}_{k+1} , **exit**

Rychlost konvergence iteračního procesu při výpočtu řešení předpodmíněné SLR podstatně závisí na konstrukci a vlastnostech předpodmiňovací matice \mathbf{M} , tedy pro danou úlohu je účelné zabývat se volbou vhodné předpodmiňovací matice. Obecně lze identifikovat několik základních společných rysů, kterými se běžně používané předpodmiňovací matice vyznačují [25]:

1. \mathbf{M} je pozitivně definitní,
2. \mathbf{M} je dobrá aproximace \mathbf{A} , tedy $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A} \sim \mathbf{I}$, kde \mathbf{I} je jednotková matice,
3. konstrukce matice \mathbf{M} je výpočetně nenáročná,
4. řešení soustav $\mathbf{M}\mathbf{z}_k = \mathbf{r}_k$ v rámci algoritmu PCG je výpočetně nenáročné.

V dalším textu budou uvedeny dvě techniky předpodmínění, které výše uvedené vlastnosti pro předpodmiňovací matici splňují. V kombinaci s algoritmem metody sdružených gradientů pak tyto přístupy představují nástroj, který lze efektivně využít v rámci řešení SLR odvozených pro 2D úlohy nestacionárního vedení tepla.

Neúplný Choleského rozklad - algoritmus IC(0)

Pro účely zohlednění techniky předpodmínění v používaném označení bude v dalším textu předpodmiňovací matice sestavená pomocí algoritmu IC(0) označena symbolem $\mathbf{M}_{\text{IC}(0)}$. Příslušný typ předpodmínění uvažuje tuto matici ve tvaru

$$\mathbf{M}_{\text{IC}(0)} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T, \quad (4.27)$$

kde \mathbf{L} je dolní trojúhelníková matice sestavená pomocí tzv. neúplného Choleského rozkladu matice soustavy \mathbf{A} . Metody pro konstrukci matice \mathbf{L} se označují zkratkou IC (z anglického *incomplete Cholesky factorization*), v praxi se lze zejména setkat s využitím algoritmu IC(0) (anglicky nazývaného *incomplete Cholesky factorization with zero-fill*).

Použití algoritmu IC(0) v souvislosti s předpodmíněním je velmi vhodné při řešení takových SLR, jejichž matice soustavy \mathbf{A} se vyznačuje řídkou strukturou. V takovém případě je z hlediska snížení paměťové náročnosti výpočtu účelné požadovat stejnou vlastnost rovněž po matici \mathbf{L} . Princip konstrukce dolní trojúhelníkové matice \mathbf{L} pomocí algoritmu IC(0) spočívá v jednoduché modifikaci standardního Choleského rozkladu: pro všechny nulové prvky $a_{ij} = 0$ původní matice \mathbf{A} klademe pro prvky matice \mathbf{L} na odpovídajících pozicích $\ell_{ij} = 0$. Vztahy pro výpočet prvků dolní trojúhelníkové matice \mathbf{L} pak lze podle základního algoritmu IC(0) pro $k = 1, 2, \dots, n$ zapsat následovně [25]:

$$\ell_{kk} = \left(a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} \ell_{kj}^2 \right)^{1/2},$$

$$\ell_{ik} = \begin{cases} \frac{1}{\ell_{kk}} \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} \ell_{ij} \ell_{kj} \right) & \text{pro } a_{ik} \neq 0, \\ 0 & \text{pro } a_{ik} = 0, \end{cases} \quad i = k + 1, k + 2, \dots, n.$$

Konstrukce předpodmiňovací matice $\mathbf{M}_{\text{IC}(0)} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ pomocí algoritmu IC(0) může v praxi pro některé symetrické a pozitivně definitní matice soustavy \mathbf{A} zhavarovat. Je-li však matice \mathbf{A} navíc ryze diagonálně dominantní nebo má-li všechny mimodiagonální prvky nekladné, pak lze odpovídající předpodmiňovací matici s využitím algoritmu IC(0) sestrojít. [25]

Aproximativní inverze - metoda TNS

Ve svém článku [27] z roku 1995 představili Gustaffson a Lindskog techniku předpodmínění, která v souvislosti s urychlením numerického řešení SLR umožňuje efektivní využití paralelních výpočtů. Odvození této metody původně vychází z tzv. symetrické horní relaxace metody předpodmínění (zkráceně SSOR z anglického *symmetric successive over-relaxation*), která uvažuje předpodmiňovací matici ve tvaru

$$\mathbf{M}_{\text{SSOR}} = (\omega^{-1}\mathbf{D} + \mathbf{L}) (\omega^{-1}\mathbf{D})^{-1} (\omega^{-1}\mathbf{D} + \mathbf{L}^T), \quad (4.28)$$

kde $\mathbf{D} = \text{diag}(\mathbf{A})$ je diagonální matice, jejíž prvky jsou určeny vztahem $d_{kk} = a_{kk}$ ($k = 1, 2, \dots, n$), symbol \mathbf{L} označuje matici odpovídající striktně dolní trojúhelníkové části matice \mathbf{A} a $0 < \omega < 2$ je relaxační parametr. V dalším výkladu se budeme zabývat odvozením pro konkrétní volbu $\omega = 1$, která dává tzv. symetrickou Gaussovu-Seidelovu metodu předpodmínění (zkráceně SGS). Předpodmiňovací matice je pak tvaru

$$\mathbf{M}_{\text{SGS}} = (\mathbf{D} + \mathbf{L}) \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{D} + \mathbf{L})^T, \quad (4.29)$$

přičemž z vyjádření (4.29) lze následně odvodit vztah pro inverzní matici $\mathbf{M}_{\text{SGS}}^{-1}$:

$$\mathbf{M}_{\text{SGS}}^{-1} = (\mathbf{I} + \mathbf{L}\mathbf{D}^{-1})^{-T} \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{I} + \mathbf{L}\mathbf{D}^{-1})^{-1}. \quad (4.30)$$

V dalším kroku odvození se využije možnost vyjádření matice $(\mathbf{I} + \mathbf{L}\mathbf{D}^{-1})^{-1}$ ve tvaru tzv. Neumannovy řady, která představuje zobecnění pojmu geometrické řady pro případ, kdy členy nekonečné řady představují operátory (v konečněrozměrných prostorech reprezentovány maticemi). S využitím poznatků z funkcionální analýzy o spojitých lineárních operátorech v konečněrozměrných normovaných prostorech lze odvodit vztah

$$(\mathbf{I} + \mathbf{L}\mathbf{D}^{-1})^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1})^k, \quad (4.31)$$

přičemž konvergence nekonečné řady na pravé straně rovnosti je zaručena například v případě, že matice $\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1}$ je ryze diagonálně dominantní [28]. Pro účely využití vztahu (4.31) v numerických výpočtech se v praxi běžně uplatňuje pouze prvních $s+1$ členů nekonečné řady ($s = 0, 1, 2, \dots$). Vyjádření tak obecně vede na aproximaci matice $(\mathbf{I} + \mathbf{L}\mathbf{D}^{-1})^{-1}$ maticovým polynomem stupně s :

$$(\mathbf{I} + \mathbf{L}\mathbf{D}^{-1})^{-1} \approx \mathbf{I} - \mathbf{L}\mathbf{D}^{-1} + (\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1})^2 - \dots + (-1)^s (\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1})^s. \quad (4.32)$$

Pro běžnou volbu $s = 2$ pak dostáváme v kombinaci se vztahem (4.30) následující vyjádření pro inverzní matici $\mathbf{M}_{\text{TNS}}^{-1}$, která je aproximací matice $\mathbf{M}_{\text{SGS}}^{-1}$:

$$\mathbf{M}_{\text{TNS}}^{-1} = \left(\mathbf{I} - \mathbf{L}\mathbf{D}^{-1} + (\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1})^2 \right)^T \mathbf{D}^{-1} \left(\mathbf{I} - \mathbf{L}\mathbf{D}^{-1} + (\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1})^2 \right). \quad (4.33)$$

Uvedená metoda bývá z hlediska principu konstrukce matice $\mathbf{M}_{\text{TNS}}^{-1}$ obvykle klasifikována do třídy technik předpodmínění založených na výpočtu aproximativní inverze (anglicky *preconditioning based on approximate inversion*). Konkrétně bývá metoda v souvislosti s využitím konečného počtu členů Neumannovy řady v anglické literatuře nazývána *truncated Neumann series preconditioning*, zkráceně TNS. [27], [28] S ohledem na uplatnění předpodmiňovací matice v algoritmu PCG si lze povšimnout, že explicitní konstrukce matice \mathbf{M}_{TNS} není vyžadována. Známý předpis pro matici $\mathbf{M}_{\text{TNS}}^{-1}$ totiž umožňuje v krocích 3 a 10 uvedeného algoritmu PCG snadný výpočet řešení soustav dle vztahu $\mathbf{z}_k = \mathbf{M}_{\text{TNS}}^{-1} \mathbf{r}_k$. Bližší poznatky o efektivní implementaci předpodmiňovače s ohledem na možnost využití paralelizace a další vlastnosti metody TNS lze nalézt v článku [27].

5 PROSTŘEDKY KE ZVÝŠENÍ EFEKTIVITY NUMERICKÝCH VÝPOČTŮ

Z hlediska implementace počítačových simulací se v praxi lze zabývat možnostmi využití sériového nebo paralelního přístupu při provádění výpočtů. V souvislosti s poznatky o metodě střídavých směrů a metodě sdružených gradientů s předpokmáním budou v následujících podkapitolách vysvětleny techniky, které lze za účelem numerického řešení úloh vedení tepla při uplatnění sériového nebo paralelního přístupu efektivně využít. Zohledněny budou rovněž charakteristické znaky dvou různých typů procesorových jednotek, kterými jsou centrální procesorové jednotky (dále jen zkráceně CPU) a grafické akcelerátory (dále jen GPU).

5.1 Významné aspekty sériového přístupu

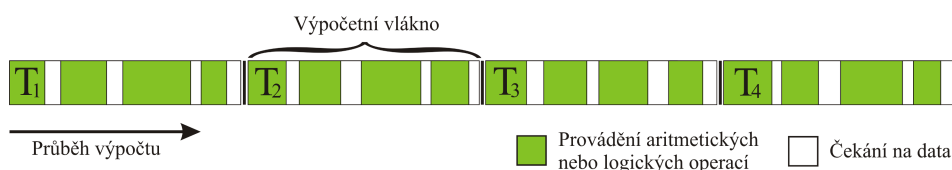
V dalších odstavcích budou uvedeny obecné poznatky související s organizací výpočtů při využití CPU. Následně výklad shrne vybrané aspekty o možnostech efektivní implementace metody střídavých směrů a metody sdružených gradientů pro sériový přístup.

5.1.1 Využití CPU v numerických výpočtech

Přestože v současné době umožňují CPU provádění numerických výpočtů pomocí 4 až 16 souběžně aktivních výpočetních vláken [2], v rámci dalšího výkladu o sériovém přístupu nebude uplatnění této schopnosti CPU předpokládáno. Přístup tak bude výhradně reprezentován realizací počítačových simulací při využití sekvenčního řazení jednotlivých výpočetních vláken.

Snížení časové prodlevy

Významným charakteristickým rysem CPU je významné zastoupení tzv. cache paměti, která je integrovaná na čipu procesoru. Tato rychlá paměť umožňuje výrazně snížit časovou prodlevu, která je jinak způsobena přístupem na pomalou mimočipovou paměť v průběhu realizovaného výpočtu. V důsledku toho nemusí aktivní výpočtové vlákno dlouho „čekat“ na požadovaná data, což vede na snížení výpočetního času prováděné simulace. Na obrázku 5.1 je znázorněno schéma pro organizaci řazení výpočetních vláken CPU a jsou popsány stavy, ve kterých se vlákna v průběhu výpočtu mohou nacházet.



Obr. 5.1: Sekvenční řazení výpočetních vláken na CPU. [31]

5.1.2 Možnosti pro efektivní využití metody střídavých směrů v sériovém přístupu

Využití CPU v souvislosti se sériovým charakterem výpočtu lze v rámci metody střídavých směrů uplatnit u příslušného iteračního algoritmu i v rámci algoritmu TDMA pro řešení SLR s třídiagonální maticí.

Sériový přístup v iteračním algoritmu ADI

Sériový přístup v algoritmu metody střídavých směrů se vyznačuje sekvenčním postupem při formulaci diskretizovaných 1D úloh. Ty jsou následně řešeny postupně řádek po řádku (nebo sloupec po sloupci), přičemž sestavené SLR vždy využívají nejaktuálnější hodnoty pro teplotu spočítanou při řešení úlohy pro předchozí řádek (nebo sloupec). Díky této vlastnosti lze následně očekávat pokles v počtu iterací potřebných k ustálení vývoje teplotního pole v rámci časového kroku. V důsledku toho pak sériový přístup rovněž umožňuje snížit celkový výpočetní čas pro řešení úlohy.

Vhodnost algoritmu TDMA

Algoritmus TDMA pro řešení SLR s třídiagonální maticí řádu n se vyznačuje lineární časovou složitostí $\mathcal{O}(n)$. Konkrétně platí, že výpočet neznámých příslušené soustavy je ukončen po $2n$ krocích [29]. Pro tyto vlastnosti se algoritmus TDMA v rámci sériového přístupu s oblibou využívá jako efektivní nástroj pro řešení SLR příslušného tvaru.

5.1.3 Možnosti pro efektivní využití metody sdružených gradientů v sériovém přístupu

Prostor pro uplatnění sériového přístupu provádění výpočtů nabízí v rámci metody sdružených gradientů zejména efektivní implementace algoritmu IC(0) pro daný typ předpokládání.

Vhodnost algoritmu IC(0)

Algoritmus IC(0) pro konstrukci předpodmiňovací matice $\mathbf{M}_{\text{IC}(0)} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ se vyznačuje sekvenčním charakterem. Nabízí se tak možnost jeho implementace na CPU. Při kombinaci nízkého počtu nenulových prvků matice soustavy \mathbf{A} , využití kompresního formátu pro ukládání řídkých matic a díky zanedbatelné časové prodlevě příslušného zařízení umožňuje algoritmus IC(0) zkonstruovat dolní trojúhelníkovou matici \mathbf{L} z hlediska časové náročnosti velmi efektivně.

5.2 Významné aspekty paralelního přístupu

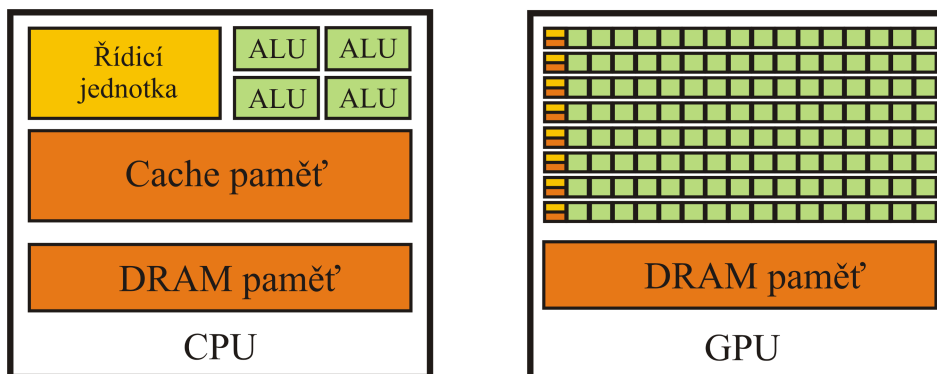
V rámci výkladu o paralelním přístupu budou nejprve uvedeny poznatky o architektuře příslušného hardwarového vybavení. Dále budou vysvětleny některé významné vlastnosti numerických metod, které s paralelizací výpočtů souvisejí.

5.2.1 Využití GPU v numerických výpočtech

Nedílnou součástí paralelizace výpočtů je využití takových prostředků výpočetní techniky, jejichž architektura je pro tyto účely dobře uzpůsobená. V praxi se v této souvislosti nejčastěji využívají GPU akcelerátory. V následujících odstavcích budou shrnuty jejich významné charakteristické rysy z hlediska způsobu provádění numerických výpočtů.

Základní poznatky o architektuře GPU

Z důvodu nároků na snížení časové náročnosti výpočtů v oblasti vědy a výzkumu se v posledních letech stále častěji využívají GPU akcelerátory. Výhodnost jejich uplatnění vychází především z architektury tohoto typu zařízení. Na obrázku 5.2 je uvedeno schematické zjednodušení architektury pro CPU a GPU. Lze si povšimnout, že zatímco čip pro CPU sestává z bloků pro cache paměť, řídicí jednotku a relativně nízkého počtu aritmeticko-logických jednotek (zkráceně ALU z anglického *arithmetic logic unit*), architektura pro GPU se vyznačuje vysokým počtem ALU na úkor zastoupení bloků pro rychlou paměť a řízení.



Obr. 5.2: Schematická vizualizace architektury CPU a GPU. [31]

Z hlediska funkcionality představuje ALU v hardwarových zařízeních komponentu, která umožňuje provádění veškerých aritmetických a logických operací. Z významného zastoupení těchto jednotek na čipech GPU pak plyne potenciál pro uplatnění tohoto typu zařízení v rámci provádění rozsáhlých numerických výpočtů.

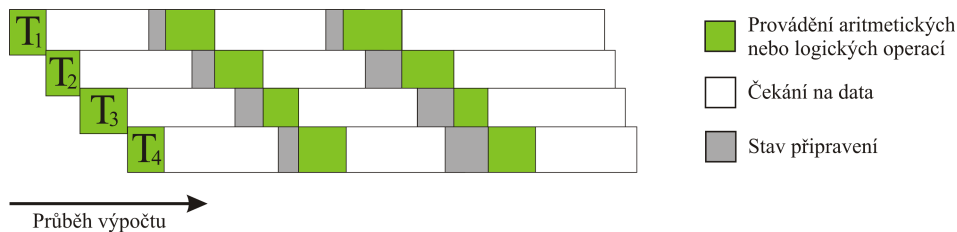
Paralelizace výpočtů a prostředky jejich implementace

Z hlediska účelného využití vysokého počtu bloků ALU pro GPU akcelerátory je logické vyžadovat, aby tyto elementární výpočetní jednotky mohly v rámci realizovaných simulací „pracovat“ souběžně a prováděné výpočty byly vzájemně nezávislé. Tento koncept se označuje jako paralelizace výpočtů.

V souvislosti s implementací paralelních výpočtů byly vyvinuty speciální aplikační rámce (anglicky *frameworks*), které využítí GPU pro tyto účely umožňují. Mezi ně se řadí zejména multiplatformní standard OpenCL (z anglického *Open Computing Language*) a aplikační rámec CUDA, který byl vyvinut výhradně pro GPU na platformě NVidia [32].

Skrývání časové prodlevy

GPU disponují technikami, které umožňují efektivní skrývání časové prodlevy vznikající v rámci přístupů na mimočipovou paměť. Díky podpoře stovek aktivních výpočetních vláken a zanedbatelným časovým nákladům na jejich správu lze zajistit, aby jednotlivé výpočetní jednotky byly v průběhu výpočtu zaneprázdněné prováděním požadovaných aritmetických a logických operací. Princip řízení výpočtů na výpočetních jednotkách GPU v souvislosti s přepínáním aktivních vláken schematicky ilustruje obrázek 5.3.



Obr. 5.3: Způsob řazení aktivních výpočetních vláken za účelem skrývání časové prodlevy na GPU. [31]

Kromě časové prodlevy, která vzniká v rámci komunikace mezi pamětí a ALU uvnitř GPU akcelérátoru, je v počítačových simulacích nutno zohlednit rovněž vliv zanedbatelné časové náročnosti přenosů dat mezi CPU a GPU. Praktické výpočty ukazují, že tento aspekt má velmi často vliv na výhodnost využití GPU, a paralelizace výpočtů při řešení menších úloh pak obecně nemusí být z hlediska časové náročnosti přínosná [31] [32].

5.2.2 Možnosti pro efektivní využití metody střídavých směrů v paralelním přístupu

Uplatnění paralelních výpočtů lze u metody střídavých směrů využít jak v rámci iteračního algoritmu metody při odvození příslušných SLR s třídiagonální maticí

pro jednotlivé 1D úlohy vedení tepla, tak rovněž při samotném numerickém řešení těchto soustav.

Nezávislost 1D úloh vedení tepla

Publikace [2] vysvětluje přístup, díky kterému lze vhodnou implementací metody ADI zajistit, aby jednotlivé úlohy 1D vedení tepla v horizontálním a vertikálním směru byly v rámci jedné iterace vzájemně nezávislé. V takovém případě lze s využitím výpočetních jednotek GPU provádět výpočet řešení jednotlivých SLR souběžně a v důsledku toho snížit časovou náročnost procesu řešení původní úlohy.

Vhodnost algoritmů CR a PCR

Algoritmy CR a PCR, které byly představeny v textu kapitoly 4.1.3, umožňují koncept paralelizace využít rovněž na úrovni řešení dílčích SLR s třídiagonální maticí. Vyznačují-li se řešené soustavy dostatečně vysokým počtem neznámých, pak lze výpočetní sílu GPU účelně zužitkovat ke snížení časové náročnosti prováděných numerických simulací.

5.2.3 Možnosti pro efektivní využití metody sdružených gradientů v paralelním přístupu

Základní podstata akcelerace výpočtů v rámci metody sdružených gradientů s předpokládáním vychází z paralelizace provádění jednoduchých aritmetických operací. Paralelní přístup nalézá své důležité uplatnění zejména u těchto typů operací:

1. Operace $\alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{y}$, kde α, β jsou reálné skaláry a symboly \mathbf{x}, \mathbf{y} označují vektory (z hlediska IT terminologie je lze v obecnějším slova smyslu chápat jako lineární pole),
2. Operace $\mathbf{A}\mathbf{x}$ pro součin řídké matice \mathbf{A} a (hustého) vektoru \mathbf{x} ,
3. Operace $\mathbf{x}^T\mathbf{y}$ pro skalární součin vektorů.

Tyto základní tři typy operací jsou intenzivně využívány nejen v rámci jednotlivých iterací algoritmu metody sdružených gradientů, ale představují rovněž prostředky k realizaci předpokládání pomocí aproximativní inverze $\mathbf{M}_{\text{TNS}}^{-1}$ [27].

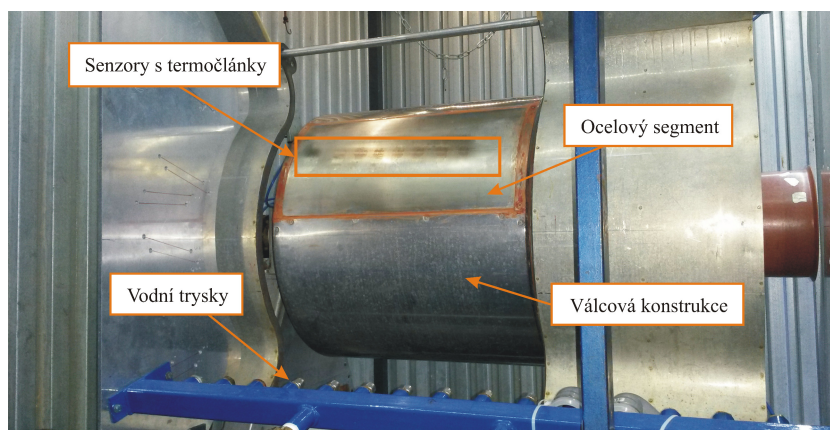
Paralelizaci s využitím GPU lze rovněž uplatnit při výpočtu normy rezidua $\|\mathbf{r}_k\|$ při kontrole dosažené přesnosti výpočtu v k -tém iteračním kroku algoritmu metody sdružených gradientů. V praktické části diplomové práce je v této souvislosti implementována maximová norma $\|\mathbf{r}_k\|_\infty$, jejíž výpočet spočívá v nalezení maximálního prvku vektoru \mathbf{r}_k .

6 EXPERIMENTÁLNÍ MĚŘENÍ

V Laboratoři přenosu tepla a proudění FSI VUT v Brně (dále jen LPTaP) bylo provedeno laboratorní měření, při kterém byl zkoumán vliv vodního chlazení ostříkem na přehřátý ocelový segment válcového povrchu. Experiment byl uskutečněn v rámci aplikovaného výzkumu v oblasti optimalizace chlazení pracovních válců používaných při válcování ocelových produktů za tepla. Získané výstupy měření a navazujícího výpočtu inverzní úlohy vedení tepla jsou dále zohledněny v kapitole 7 při formulaci modelové přímé úlohy vedení tepla pro praktickou část diplomové práce. Diskretizovaný tvar této úlohy je následně využit pro účely počítačové simulace, testování a vzájemného srovnání efektivity numerických metod popsanych v kapitole 4.

6.1 Příprava experimentu

Před uskutečněním experimentálního měření byl obdélníkový segment nerezové oceli 1.4301 umístěn na dutou konstrukci tvaru válce o obvodu 2 m. Použitý ocelový segment tak vytvářel část stěny dutého válce, přičemž tloušťka této stěny byla 25 mm. Pro účely vyhodnocení chladících účinků vodního ostříku na horkou válcovou plochu byla dále provedena montáž termočlánků typu K pod povrch zkoumaného ocelového segmentu. Pro uchycení termočlánků v této části stěny válce byla použita stříbrná pájka Ag40. Na obrázku 6.1 je zachycena válcová konstrukce experimentálního zařízení. Polohu umístění termočlánků ve válcové stěně vyznačují kruhové stopy vzniklé při montáži laboratorních snímačů teploty do stěny ocelového segmentu.



Obr. 6.1: Konstrukce válcového tvaru pro experimentální měření.

6.2 Průběh měření

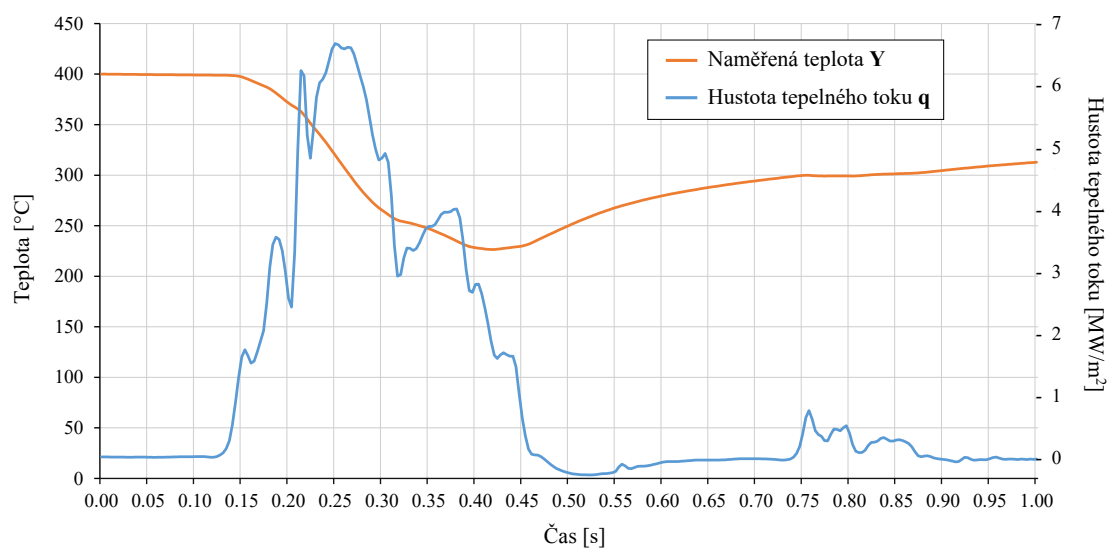
V úvodní fázi měření byl zkoumaný ocelový segment zahřát na teplotu 400 °C. Po dosažení této teploty byla nastavena rychlost otáčení povrchu válcové plochy na 2 m/s a souběžně byly seřizeny parametry vodního chlazení. V následující fázi experimentu byla odstraněna přepážka oddělující vodní trysky od válcové konstrukce a pomocí

teplotních senzorů ve stěně ocelového segmentu byl s frekvencí 300 Hz snímán vývoj teploty v čase při probíhající chlazení povrchu. Obrázek 6.2 zachycuje průběh experimentu ve fázi chlazení zkoumaného ocelového segmentu.



Obr. 6.2: Průběh experimentu ve fázi chlazení ocelového segmentu.

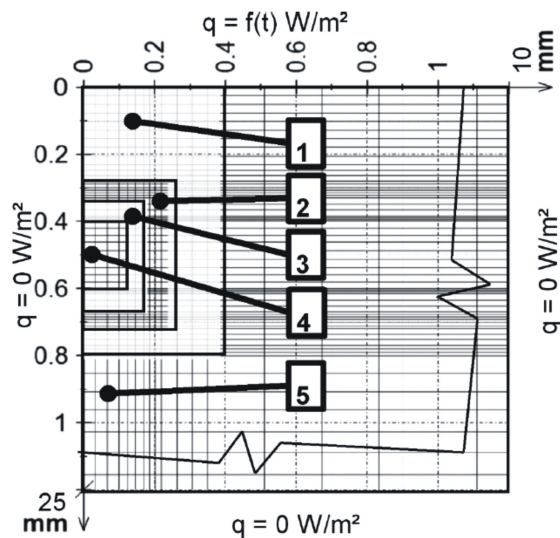
Po ukončení měření byly z paměti dataloggeru získány naměřené hodnoty Y pro teplotu pod povrchem chlazeného povrchu ocelového segmentu. S využitím technik výpočtů inverzních úloh vedení tepla byl následně vypočítán odhad hodnot q pro veličinu hustoty tepelného toku, pomocí níž lze účinek vodního chlazení v provedeném experimentu kvantifikovat. Konkrétně byla pro tyto účely numericky zpracována sekvence teplot z intervalu jedné sekundy po zahájení procesu chlazení. Tento časový úsek současně odpovídá době pro jednu otáčku válcové konstrukce okolo své osy. Obrázek 6.3 zachycuje hodnoty naměřených teplot Y z jednoho vybraného termočlánku v průběhu sledovaného intervalu jedné sekundy měření. Modrou barvou je pak znázorněna křivka pro vypočítané odhady hustoty tepelného toku q na chlazeném ocelovém povrchu.



Obr. 6.3: Časový průběh naměřené teploty a vypočítané hustoty tepelného toku.

7 MODELOVÁ ÚLOHA

V návaznosti na provedený experiment z kapitoly 6 a výpočet příslušné sekvence odhadů pro hustotu tepelného toku q byla v LPTaP sestavena formulace pro modelovou úlohu, která slouží pro účely vývoje a testování efektivních algoritmů pro numerické řešení přímých úloh vedení tepla. Schéma geometrie modelu, včetně znázornění materiálové nehomogenity zkoumaného tělesa a charakteru okrajových podmínek je uvedeno na obrázku 7.1. Bližšímu vysvětlení jednotlivých aspektů modelu, které schéma zachycuje, se věnují následující odstavce.



Označení materiálů:

1. stříbrná pájka Ag40
2. štít termočlánu Inconel 600
3. elektrická izolace MgO
4. termočlánek typu K
5. nerezová ocel 1.4301

Obr. 7.1: Schéma výpočetního 2D modelu pro přímou úlohu vedení tepla.

Základní popis modelu

Fyzikální jev přenosu tepla při chlazení ocelového segmentu při experimentálním měření lze modelovat pomocí 2D úlohy nestacionárního vedení tepla. Princip takové přímé úlohy pak spočívá ve výpočtu vývoje teplotního pole ve oblasti popsané pomocí dvou prostorových souřadnic, které z hlediska vazby na provedený experiment mají význam popisu polohy ve směru tečném k ploše chlazeného povrchu a ve směru kolmém k této ploše.

Geometrie a materiálový popis modelu

Geometrie 2D modelu je reprezentována výřezem ocelového segmentu, který z hlediska materiálové nehomogenity tělesa zohledňuje kromě nerezové oceli 1.4301 rovněž vliv připájeného termočlánu typu K. Celkově tak model při popisu struktury chlazeného tělesa zahrnuje pět různých materiálů, jejichž seznam je uveden napravo od schématu 7.1.

Z hlediska tematického zaměření diplomové práce uvažuje popisovaný model teplotní nezávislost materiálových vlastností, přičemž pro všechny látky byly využity

hodnoty materiálových vlastností pro počáteční teplotu 400 °C. Seznam použitých hodnot pro materiálové vlastnosti příslušných látek je uveden v tabulce 7.1.

Materiál	Hustota [kg/m³]	Součinitel tepelné vodivosti [W/m·K]	Specifické teplo [J/kg·K]
Stříbrná pájka Ag40	8957	111,5	402
Štít termočlátku Inconel 600	8470	20,5	519
Elektrická izoloace MgO	3150	9,8	1130
Termočlánek typu K	8200	24,7	528
Nerezová ocel 1.4301	7610	21	565

Tab. 7.1: Materiálové vlastnosti látek v modelové úloze pro teplotu 400 °C.

S využitím symetrického charakteru zkoumané domény se navíc lze omezit na modelování vedení tepla v dílčí oblasti o rozměrech 10 x 25 mm, přičemž rozměr 25 mm odpovídá skutečné tloušťce stěny ocelového segmentu. Mírné zakřivení desky pak lze při popisu geometrie dílčího výřezu o rozměrech 10 x 25 mm zanedbat a prostorovou doménu tak lze modelovat pomocí oblasti obdélníkového tvaru.

Diskretizace prostorové domény

V LPTaP byla sestrojena strukturovaná obdélníková síť s nerovnoměrným dělením, která umožňuje geometrii prostorové domény reprezentovat v diskrétním tvaru. Použití obdélníkové sítě bylo zvoleno z důvodů možnosti využití metody střídavých směrů při řešení příslušné modelové 2D úlohy vedení tepla. Přístup je navíc plně v souladu s výkladem metody kontrolních objemů pro diskretizaci 2D úloh. Zejména v případě popisu kruhové geometrie termočlátku je však nutno přistoupit k jistému zjednodušení, kdy příslušné subdomény jsou reprezentovány pomocí kontrolních objemů obdélníkového tvaru.

Diskretizace časové domény

Sledovaný časový interval jedné sekundy, pro který byla v rámci laboratorního měření získána data, byl v rámci řešené modelové úlohy diskretizován při využití časového kroku $\Delta t = 1/300$ s. Tato hodnota přímo odpovídá vzorkovací frekvenci 300 Hz pro snímání teploty pod povrchem chlazeného ocelového segmentu.

Počáteční podmínka

Počáteční podmínka úlohy je dána teplotou 400 °C, která byla v rámci experimentu dosažena při zahřívání ocelového segmentu před zahájením fáze vodního chlazení.

Okrajové podmínky

Formulace okrajových podmínek vychází ze známého popisu pro číselné vyjádření hustoty tepelného toku na příslušných částech hranice. Z hlediska terminologie počátečně-okrajových úloh tedy uplatnění v modelu nalézá Neumannova podmínka. Z charakteru provedeného experimentu vyplývá, že pro boční stěny obdélníkového modelu lze v úloze předepsat podmínku nulové hustoty tepelného toku odpovídající dokonalé tepelné izolaci. Stejnou podmínku lze rovněž využít při popisu situace na spodní straně domény. V případě horní strany, která v modelu reprezentuje část chlazeného povrchu ocelového segmentu, vyžaduje úloha předepsání časově proměnné okrajové podmínky, která číselně vyjadřuje vliv účinků vodního chlazení v průběhu jedné sekundy měření. Pro tyto účely je využita sekvence vypočítaných odhadů pro hustotu tepelného toku \mathbf{q} (viz modrá křivka v grafu na obrázku 6.3).

8 IMPLEMENTACE NUMERICKÉHO ŘEŠENÍ MODELOVÉ ÚLOHY

V rámci praktické části diplomové práce byla modelová 2D úloha vedení tepla z kapitoly 7 převedena pomocí technik metody kontrolních objemů do diskrétního tvaru. Ten pak představuje základ pro využití metod z kapitoly 4 pro řešení SLR v rámci dané přímé úlohy.

V následujících odstavcích budou vysvětleny jednotlivé fáze postupu při vypracování praktické části diplomové práce. Konkrétně bude vysvětlen přístup při řešení tří základních problémů, které počítačová implementace numerického řešení modelové 2D úlohy vedení tepla obnáší:

1. převod úlohy do diskrétního tvaru pomocí metody kontrolních objemů,
2. řešení úlohy pomocí metody střídavých směrů,
3. řešení úlohy pomocí metody sdružených gradientů s předpokládáním.

8.1 Implementace převodu úlohy do diskrétního tvaru

V programovém prostředí Matlab R2017b byly vytvořeny dva spustitelné skripty, které realizují sestavení vektorů a matic vystupujících v odvození SLR při řešení modelové 2D úlohy vedení tepla:

- Soubor `ADI_2D_Formulation.m` umožňuje vytvoření vektorů a matic, jejichž tvar vychází z formulace energetických bilancí pomocí metody kontrolních objemů pro 1D úlohy vedení tepla. Získané matice a vektory pak umožňují sestavit příslušné SLR s třídiagonální maticí a úlohu lze následně řešit pomocí iteračního výpočtu metody střídavých směrů.
- Soubor `PCG_2D_Formulation.m` realizuje konstrukci vektorů a matic, které vystupují v energetických bilancích v metodě kontrolních objemů pro 2D úlohy vedení tepla. Sestavení SLR s pětdiagonální maticí pak při řešení úlohy vede na možnost využití metody sdružených gradientů s předpokládáním.

Detailní popis postupu při odvození diskrétního tvaru modelové 2D úlohy je pro oba přístupy uvedený v textech komentářů, které pro přehlednost doplňují zdrojový kód příslušných skriptů. Oba tyto soubory jsou součástí přílohy diplomové práce.

V rámci obou spustitelných skriptů jsou zahrnuty některé další prvky funkcionality, které s postupem implementace modelové úlohy pro numerické výpočty souvisejí:

Volba nastavení velikosti úlohy z hlediska počtu uzlových bodů

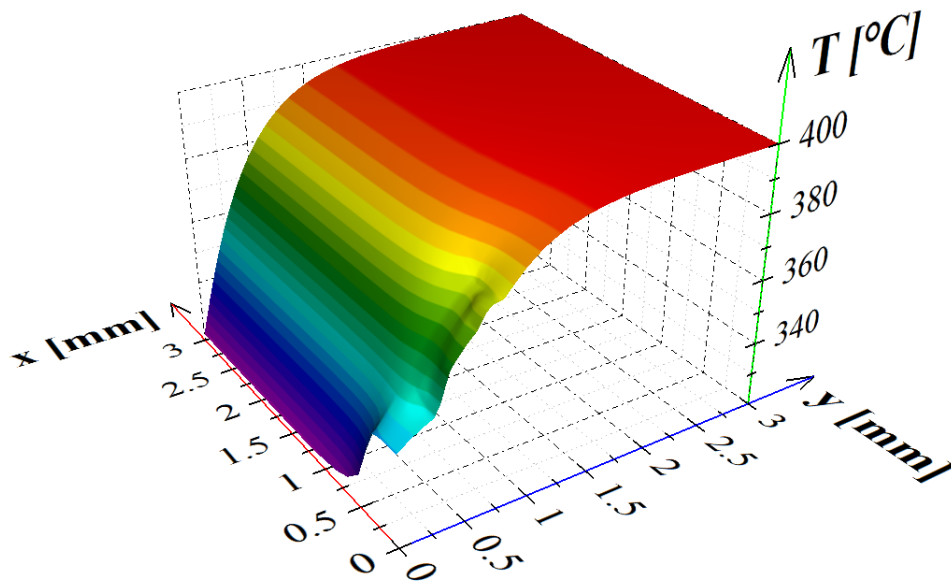
V úvodní části obou skriptů pro Matlab, v rámci níž se realizuje vytvoření datových struktur souvisejících s popisem nerovnoměrné diskretizační sítě, lze pomocí řídicího

parametru `problem_size` zvolit jednu ze tří možností pro nastavení velikosti řešené úlohy:

- Volba 'S' (z anglického *small*) realizuje spuštění výpočtu pro malou úlohu s diskretizační sítí o rozměrech 32x128 uzlových bodů (tj. celkem 4096 uzlových bodů). V dalším textu bude tato velikost úlohy označována symbolickou zkratkou S32x128.
- Volba 'M' (z anglického *medium*) realizuje spuštění výpočtu pro středně velkou úlohu s diskretizační sítí o rozměrech 64x256 uzlových bodů (tj. celkem 16384 uzlových bodů). V dalším textu bude tato velikost úlohy označována symbolickou zkratkou M64x256.
- Volba 'L' (z anglického *large*) realizuje spuštění výpočtu pro velkou úlohu s diskretizační sítí o rozměrech 256x256 uzlových bodů (tj. celkem 65536 uzlových bodů). V dalším textu bude tato velikost úlohy označována symbolickou zkratkou L256x256.

Řešení odvozených SLR a vizualizace vypočítaných teplotních polí

Pomocí příkazu `linsolve` pro řešení SLR v prostředí Matlab lze realizovat numerický výpočet teplotních polí v modelové úloze. S využitím vhodných nástrojů pro vizualizaci získaných výsledků pak lze sledovat časový vývoj teploty v různých místech zkoumané 2D domény. Obrázek 8.1 zachycuje výřez pro teplotní pole v místě usazeného termočlánku, které bylo pro řešenou modelovou úlohu vypočítáno v čase 0,2 s (v rámci zkoumaného časového intervalu jedné sekundy). Pro účelnou grafickou reprezentaci získaných výsledků byl využit program Chart3D, který poskytuje sadu nástrojů pro vizualizaci numerických dat.



Obr. 8.1: Vizualizace vypočítaného teplotního pole v oblasti usazeného termočlánku v čase 0,2 s.

Z hlediska výpočetní efektivity nedosahuje výpočet SLR při použití příkazu `linsolve` takových kvalit jako programové implementace metody střídavých směrů a metody sdružených gradientů s předpokmáněním, kterým se věnují podkapitoly 8.2 a 8.3. V rámci srovnávání časové náročnosti testovaných přístupů tak nebudou výsledky získané při výpočtu v programovém prostředí Matlab dále prezentovány.

Export datových struktur do externího souboru

Součástí obou spustitelných skriptů jsou rovněž procedury, které realizují uložení vybraných datových struktur do externího souboru. Ty jsou využity při načítání vstupních dat úlohy ve spustitelných programech popsanych v podkapitolách 8.2 a 8.3. Popis významu jednotlivých struktur ukládaných do externího souboru lze nalézt v textech komentářů uvedených v příslušných skriptech spustitelných v prostředí Matlab.

8.2 Implementace metody střídavých směrů

Pro účely řešení modelové 2D úlohy vedení tepla pomocí metody střídavých směrů byl ve vývojovém prostředí Visual Studio 2017 vytvořen program `vypocetADI`. Ten ze své podstaty představuje modifikaci a současně rozšíření knihovny `oclTridiagonal`, která byla vyvinuta společností NVidia a poskytuje nástroje pro efektivní implementaci algoritmů TDMA, CR a PCR pro řešení SLR s třídiagonální maticí. Mezi hlavní nástroje knihovny `oclTridiagonal` se řadí zejména

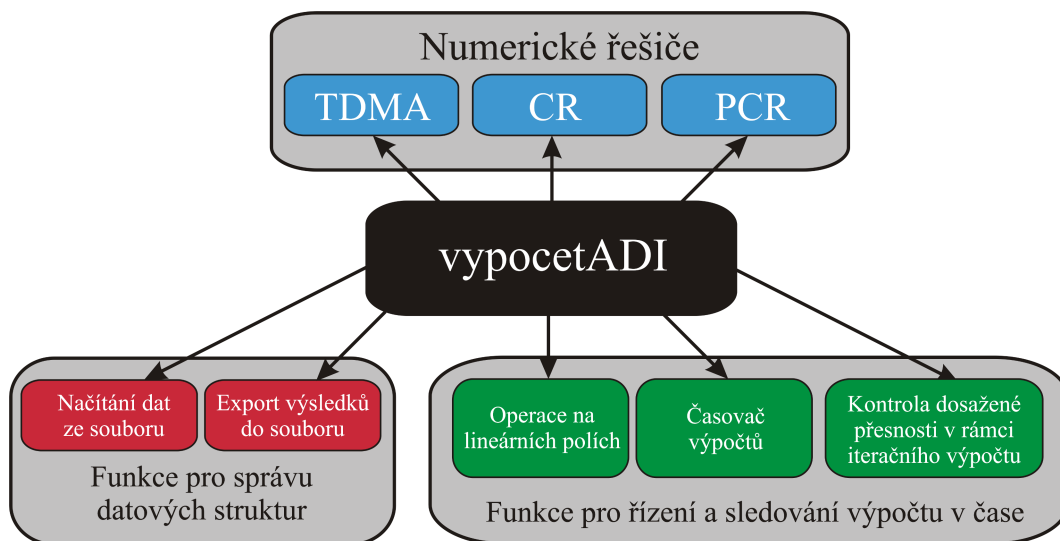
- zdrojový kód algoritmu TDMA uzpůsobený pro účely provádění sériových výpočtů při řešení SLR s třídiagonální maticí,
- zdrojový kód algoritmů CR a PCR uzpůsobený pro účely provádění paralelních výpočtů při řešení SLR s třídiagonální maticí,
- rozšířená sada příkazů pro efektivní organizaci paralelních výpočtů na GPU pomocí rozhraní OpenCL.

Při vytváření programu `vypocetADI` byla knihovna doplněna o některé doprovodné procedury a takové funkce, které iterační charakter metody střídavých směrů ve svém výpočtu využívá. Jedná se zejména o tyto prvky funkcionality:

- načítání hodnot z externího souboru,
- úprava vektorů pravé strany řešených SLR v iteračním výpočtu úlohy,
- transpozice lineárního pole (vyžadována z hlediska optimalizace přístupu do paměti při skládání dílčích řešení 1D úloh v horizontálním a vertikálním směru),
- implementace kritéria pro ukončení iteračního výpočtu algoritmu ADI,
- uložení časového průběhu teploty vypočítané ve zvoleném uzlovém bodě,
- uložení informací o efektivitě výpočtu z hlediska dosaženého výpočetního času.

Na obrázku 8.2 je znázorněna základní obsahová struktura programu `vypocetADI` z hlediska obsažených numerických řešičů a typového rozdělení funkcí, které program

využívá pro účely manipulace s daty nebo při řízení výpočtů.



Obr. 8.2: Základní obsahová struktura programu vypocetADI.

Návod ke spuštění programu vypocetADI a ukázka nastavení vstupních parametrů numerického výpočtu v příkazovém řádku operačního systému Windows jsou součástí přílohy diplomové práce.

8.3 Implementace metody sdružených gradientů s předpokládáním

Spustitelný program vypocetPCG, který je součástí přílohy diplomové práce, realizuje výpočet řešení modelové 2D úlohy pomocí metody sdružených gradientů s předpokládáním. Funkcionalita programu vychází z nástrojů specializované knihovny PARALUTION [33], která poskytuje rozsáhlou sadu iterativních řešičů pro řešení SLR s řídkou maticí, včetně možnosti implementace několika druhů předpokládání. Knihovna navíc podporuje provádění numerických výpočtů na procesorových jednotkách typu CPU i GPU.

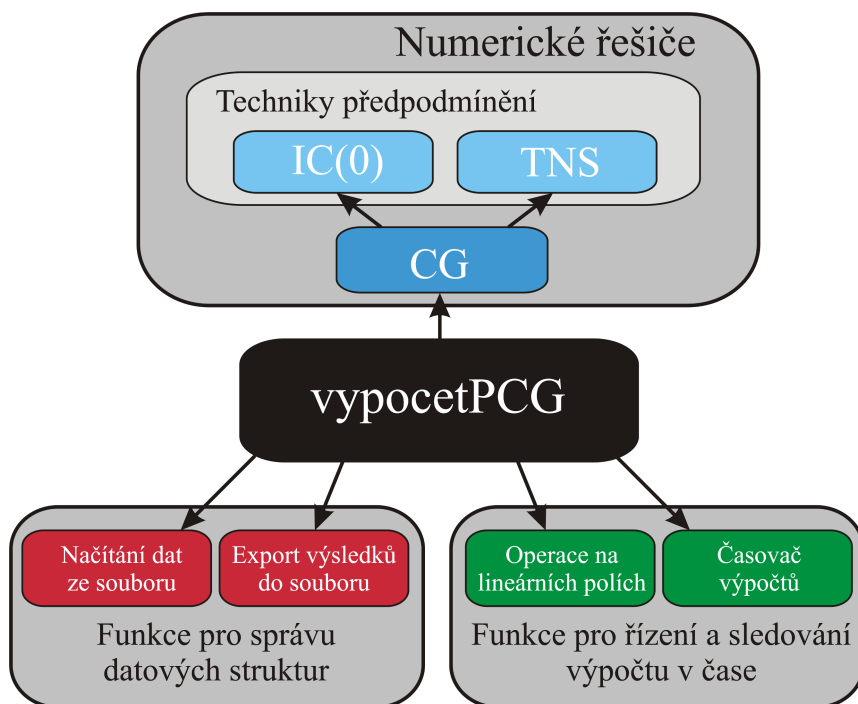
Obrázek 8.3 shrnuje poznatky o struktuře programu vypocetPCG ve formě jednoduchého schématu. Konkrétně vytvořený program využívá zejména tyto funkční prvky knihovny PARALUTION:

- zdrojový kód algoritmů CG a PCG uzpůsobený pro účely sériového i paralelního výpočtu řešení SLR se symetrickou a pozitivně - definitní maticí soustavy,
- zdrojový kód algoritmů pro realizaci předpokládání IC(0) a TNS (pro sériový i paralelní přístup),
- sada příkazů pro snadnou přípravu a efektivní organizaci výpočtů.

Pro účely využití metody sdružených gradientů s předpokládáním v modelové úloze byla knihovna PARALUTION doplněna o tyto prvky funkcionality:

- úprava vektorů pravé strany řešených SLR v jednotlivých časových krocích,

- uložení časového průběhu teploty vypočítané ve zvoleném uzlovém bodě,
- uložení informací o efektivitě výpočtu z hlediska dosaženého výpočetního času.



Obr. 8.3: Základní obsahová struktura programu vypocetPCG.

Návod k obsluze spustitelného programu vypocetPCG včetně ukázky nastavení požadovaných parametrů, které jsou uživatelem voleny před spuštěním výpočtu, jsou uvedeny v příloze diplomové práce.

9 VÝSLEDKY NUMERICKÝCH VÝPOČTŮ

S využitím diskretizovaného tvaru modelové úlohy popsané v kapitole 7 byla pomocí numerických metod implementovaných v programech `vypocetADI` a `vypocetPCG` provedena série počítačových simulací, jejichž význam spočíval ve výpočtu teplotních polí dané přímé úlohy.

V rámci této kapitoly budou nejprve představeny hardwarové prostředky výpočetní techniky, které byly pro účely realizace výpočtů v diplomové práci využity. Dále budou uvedeny poznatky o nastavení přesnosti numerických výpočtů a bude provedeno srovnání sekvence vypočítaných hodnot v místě usazeného termočlánku s hodnotami, které byly naměřeny při laboratorním měření. V další části pak budou dosažené výsledky diskutovány a vzájemně srovnány z hlediska výpočetního času simulací.

9.1 Využití hardwarové prostředky

Pro účely vzájemného srovnání sériového a paralelního přístupu při provádění numerických výpočtů byly v praktické části diplomové práce využity tyto procesorové jednotky:

- CPU zařízení Intel Core i7-6700K, které se vyznačuje základní frekvencí procesoru 4 GHz a má k dispozici 4 fyzická jádra (8 vláken) [34]. Hodnota 81 GFlops charakterizuje zařízení z hlediska teoretického výpočetního výkonu pro výpočty ve dvojitě přesnosti. V souvislosti s využitím CPU pro testování sériového přístupu bylo při výpočtech využito pouze jedno fyzické jádro tohoto zařízení.
- GPU akcelerátor AMD Radeon HD 7970, pro který se v technické dokumentaci uvádí základní frekvence grafického čipu 925 MHz a celkový počet 32 výpočetních jednotek, které dohromady sestávají z 2048 stream procesorů [35]. Pro výpočty ve dvojitě přesnosti zařízení disponuje teoretickým výpočetním výkonem 1075 GFlops. GPU lze využít při provádění paralelních výpočtů, které jsou naprogramovány a řízeny pomocí aplikačního rámce OpenCL.

9.2 Nastavení přesnosti numerických výpočtů

Metoda střídavých směrů i metoda sdružených gradientů s předpokládáním se ze své podstaty vyznačují iteračním charakterem, který vyžaduje nastavení hodnoty tolerance pro kontrolu přesnosti výpočtu. Při řešení modelové úlohy byly pro uvedené dva přístupy použity tyto hodnoty pro toleranci:

- Pro metodu střídavých směrů byla v rámci kontroly dosažené přesnosti výpočtů použita hodnota $T_e = 0,01$ °C, která označuje maximální tolerovanou chybu ve vypočítaném teplotním poli v každém časovém kroku.

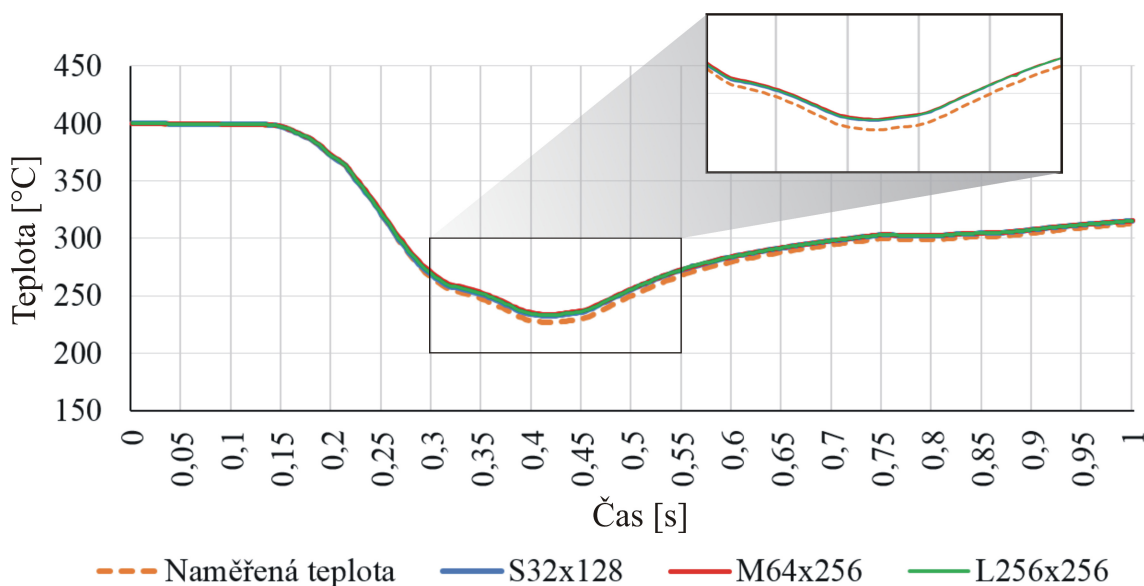
- Pro metodu sdružených gradientů byla hodnota tolerance odvozena z nastavení pro metodu střídavých směrů, a to především z důvodu rigorózního srovnání dosažených výpočetních časů pro oba tyto přístupy. Z hlediska fyzikálního rozměru členů vystupujících v SLR řešených pomocí metody sdružených gradientů je navíc nutno vyjádřit danou toleranci v jednotce W/m.

Pro danou modelovou úlohu a charakter příslušné diskretizační sítě byla vypočítána hodnota $q_\epsilon = 9,7 \cdot 10^{-4}$ W/m. Ta implicitně rovněž zaručuje, že chyba v hodnotách teploty vypočítaných v jednotlivých uzlových bodech nebude v žádném z časových kroků vyšší než 0,01 °C.

9.3 Srovnání naměřených a vypočítaných teplot

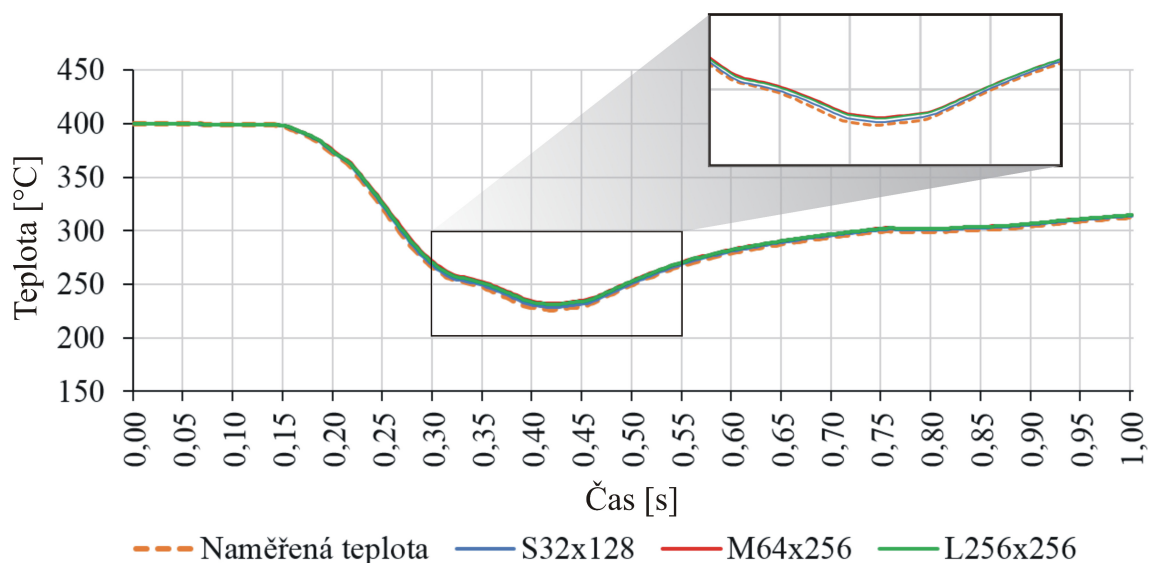
Realizovaný numerický výpočet ze své podstaty umožňuje sledovat časový vývoj teploty v libovolném uzlovém bodě diskretizační sítě. Z hlediska vazby řešení modelové úlohy na provedené laboratorní měření se lze možností srovnání vypočítaných hodnot pro teplotu v místě termočlánu s teplotami, které byly v průběhu experimentu pomocí daného termočlánu naměřeny.

Na obrázku 9.2 je křivkou oranžové barvy znázorněn průběh naměřené teploty v místě termočlánu. Graf rovněž zahrnuje další tři křivky, které zachycují sekvenci vypočítaných hodnot v uzlovém bodě, jehož poloha v diskretizační síti odpovídá právě umístění termočlánu. Tyto sekvence teplot byly vypočítány pomocí přístupů založených na metodě střídavých směrů. Označení S32x128, M64x256 a L256x256 v uvedené legendě grafu pak mají význam velikosti úlohy, v rámci které byly hodnoty pro příslušnou křivku vypočítány.



Obr. 9.1: Srovnání naměřených a vypočítaných teplot v místě termočlánu pro přístup řešení modelové úlohy pomocí metody střídavých směrů.

Při prvním pohledu graf v obrázku 9.1 si lze povšimnout velmi dobré shody v hodnotách pro naměřené a vypočítané teploty. Zejména v první čtvrtině uvedeného sekundového intervalu, kdy teplota v místě termočlánku přesahuje 300 °C, umožňuje sestavený 2D model téměř dokonale popisovat skutečný vývoj teploty v daném místě tělesa. Pozorovatelné neshody v naměřených a vypočítaných teplotách, které detailně zachycuje uvedený výřez hodnot z intervalu 0,30 s až 0,55 s, jsou zřejmě způsobeny charakterem modelové úlohy, která uvažuje teplotně nezávislé materiálové vlastnosti látek obsažených v tělese. Vzájemné odlišnosti ve tvaru křivek pro různé velikosti řešené úlohy pak pravděpodobně plynou z rozdílných jemností dělení při vytváření diskretizačních sítí. Obrázek 9.2 zachycuje velmi podobné poznatky pro srovnání naměřených teplot a hodnot, které byly vypočítány při řešení modelové úlohy o příslušné velikosti pomocí metody sdružených gradientů.



Obr. 9.2: Srovnání naměřených a vypočítaných teplot v místě termočlánku pro přístup řešení modelové úlohy pomocí metody sdružených gradientů.

9.4 Vyhodnocení výsledků z hlediska dosaženého urychlení numerických výpočtů

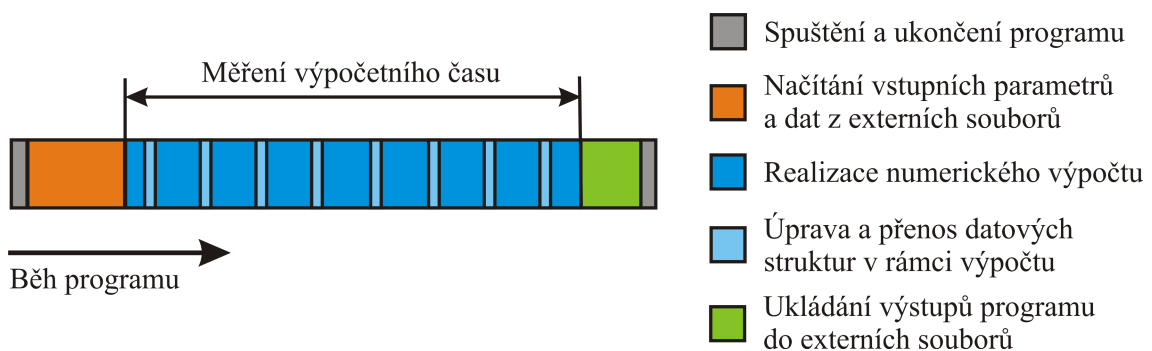
V následujících odstavcích budou provedené počítačové simulace vyhodnoceny z hlediska časové náročnosti výpočtů.

9.4.1 Výpočetní čas

Pro účely číselného vyjádření časové náročnosti výpočtu byl v diplomové práci zvolen tzv. výpočetní čas. V následujících odstavcích budou uvedeny některé poznatky, které s využitím výpočetního času v prováděných numerických výpočtech souvisejí.

Vymezení pojmu výpočetní čas

V rámci diplomové práce popisuje výpočetní čas celkovou dobu, kterou daný přístup pro řešení modelové úlohy vyžaduje k výpočtu všech teplotních polí v intervalu sledované jedné sekundy (při velikosti časového kroku $\Delta t = 1/300$ s). Do výpočetního času tak nejsou zahrnuty úkony programu související s načítáním vstupních dat úlohy a ukládáním výsledků do externího souboru. V případě využití kombinace paralelních algoritmů a grafického procesoru jsou v rámci výpočetního času zohledněny rovněž úkony související s přenosem datových struktur mezi CPU a GPU, které představují nedílnou součást počítačové simulace při využití paralelizace výpočtů. Vymezení pojmu výpočetní čas v rámci běhu spustitelného programu schematicky znázorňuje obrázek 9.3.



Obr. 9.3: Fáze pro měření výpočetního času při běhu programu.

Měření výpočetního času

Pro účely měření výpočetního času byly v programech `vypocetADI` a `vypocetPCG` využity implementované funkce pro časovač výpočtů, které jsou součástí výchozích knihoven `oclTridiagonal` a `PARALUTION`. Časovače umožňují vyjádřit naměřený výpočetní čas pomocí datového typu `double` pro dvojitou přesnost, který zajišťuje dostatečnou kvalitu naměřených hodnot. V rámci diplomové práce budou hodnoty pro výpočetní čas uváděny v sekundách s přesností na dvě desetinná místa.

Metodologie pro vyhodnocení výpočetního času

Z podstaty praktické realizace počítačových simulací plyne, že při opakovaném provádění téhož numerického výpočtu se mohou naměřené hodnoty pro výpočetní čas měnit. Z tohoto důvodu bylo pro každý z prezentovaných výpočetních přístupů realizováno pět simulací. Výsledný výpočetní čas, který číselně charakterizuje časovou náročnost každého z testovaných přístupů, pak byl určen jako aritmetický průměr pěti dosažených výpočetních časů pro daný přístup.

9.4.2 Vyhodnocení časové efektivity výpočtů pro metodu střídavých směrů

Numerický výpočet pomocí metody střídavých směrů byl realizován v rámci série počítačových simulací, které byly provedeny pro různé testované přístupy.

Testované přístupy

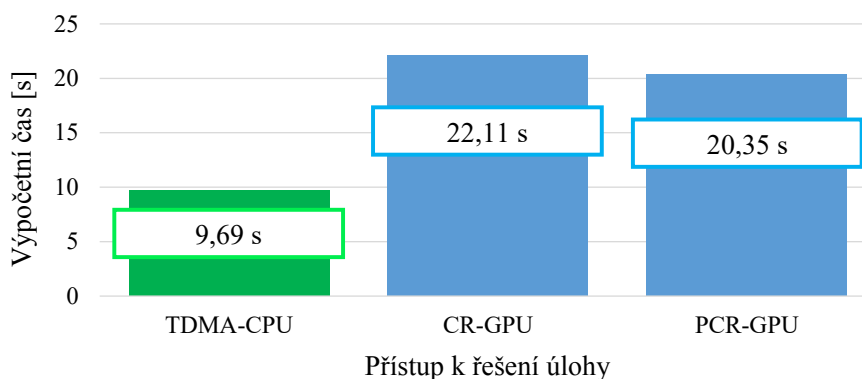
Jednotlivé testované přístupy lze charakterizovat podle kombinace použitého algoritmu pro řešení SLR s třídiagonální maticí (TDMA, CR nebo PCR) a typu zařízení, které bylo při provádění numerických výpočtů primárně využito (CPU nebo GPU). Konkrétně byly v diplomové práci zkoumány tyto tři přístupy:

- sériový přístup spočívající v implementaci metody střídavých směrů na CPU při využití algoritmu TDMA pro řešení SLR s třídiagonální maticí (dále označován zkratkou TDMA-CPU),
- paralelní přístup spočívající v implementaci metody střídavých směrů na GPU při využití algoritmu CR pro řešení SLR s třídiagonální maticí (dále jen zkráceně CR-GPU),
- paralelní přístup spočívající v implementaci metody střídavých směrů na GPU při využití algoritmu PCR pro řešení SLR s třídiagonální maticí (dále jen zkráceně PCR-GPU).

Tato tři nastavení pro realizaci výpočtu byla testována pro tři uvažované velikosti modelové úlohy z hlediska počtu uzlových bodů diskretizační sítě (S32x128, M64x256 a L256x256).

Přehled dosažených výpočetních časů a diskuze výsledků

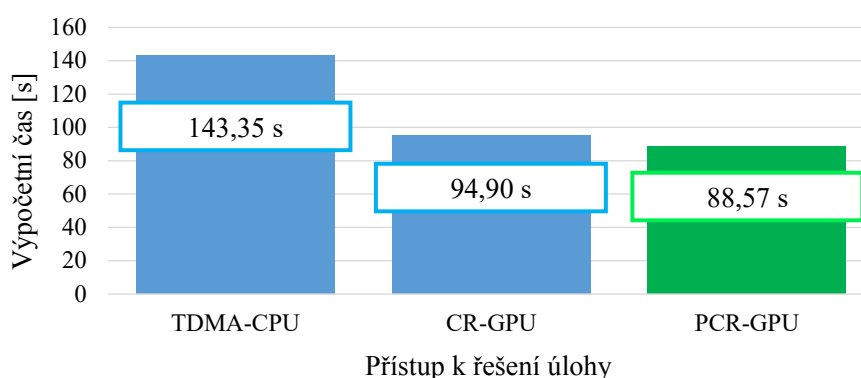
Na obrázku 9.4 jsou uvedeny hodnoty výpočetních časů pro sérii výpočtů, v rámci nichž byla modelová úloha řešena při využití diskretizační sítě S32x128. Pro tuto



Obr. 9.4: Srovnání dosažených výpočetních časů pro různé přístupy k řešení úlohy S32x128 pomocí metody střídavých směrů.

velikost řešené úlohy bylo z hlediska akcelerace numerického výpočtu dosaženo nejlepších výsledků při využití algoritmu TDMA a sériového přístupu k řešení dané úlohy. Tento výsledek plyne především z časové efektivity sekvenčního postupu při formulaci a následném řešení diskretizovaných 1D úloh na CPU (viz kapitola 5.1.2). Řešená úloha S32x128 pro 4096 uzlových bodů navíc neumožňuje efektivní využití výpočetních prostředků GPU, přičemž významný podíl na celkovém výpočetním čase zřejmě mají zejména procesy související s přenosem datových struktur mezi CPU a GPU.

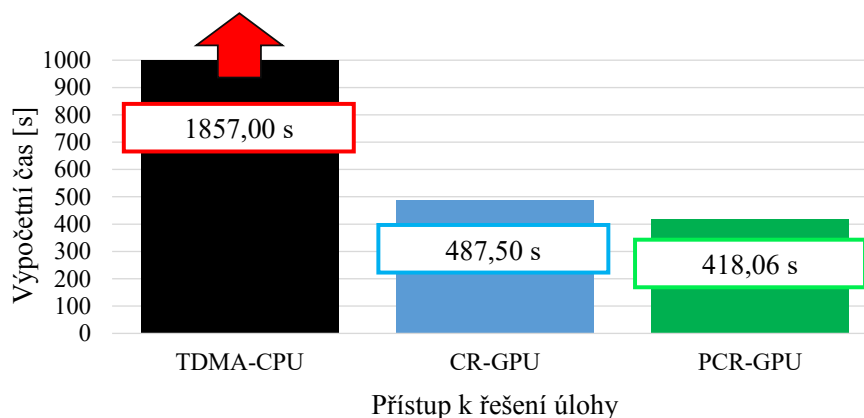
Zcela odlišné výsledky lze pozorovat ve sloupcovém grafu na obrázku 9.5. Ten uvádí výpočetní čas pro jednotlivé přístupy při řešení úlohy M64x256 pro 16384 uzlových bodů diskretizační sítě.



Obr. 9.5: Srovnání dosažených výpočetních časů pro různé přístupy k řešení úlohy M64x256 pomocí metody střídavých směrů.

Ve srovnání s výsledky, které byly dosaženy při řešení úlohy S32x128, si lze povšimnout nárůstu v hodnotě výpočetního času pro všechny tři uvažované přístupy. Zatímco v případě malé úlohy nalézá své efektivní uplatnění zejména sériový přístup, při řešení úlohy M64x256 bylo nejlepších výsledků dosaženo u kombinací, které spočívají ve využití paralelizace výpočtů. Tyto poznatky lze oddůvodnit výpočetní silou GPU, kterou lze při řešení úlohy M64x256 dostatečně zužitkovat a docílit tak významné akcelerace numerických výpočtů. Výhody přístupu TDMA-CPU jsou při řešení dané úlohy naopak potlačeny, a to zřejmě z důvodu neefektivního sériového zpracování rozsáhlých datových struktur při sekvenčním řazení výpočetních vláken. Podobné výsledky lze pozorovat rovněž v grafu na obrázku 9.6, který shrnuje poznatky o dosažené akceleraci výpočtů při řešení velké úlohy L256x256.

Z uvedených výsledků pro úlohu L256x256 si lze povšimnout, že sériový přístup je z důvodu významné časové náročnosti výpočtu neefektivní. Ze stejných důvodů jako v případě úlohy M64x256 představuje naopak zajímavější výpočetní nástroj využití kombinací PCR-GPU a CR-GPU. Nejlepších výsledků pak bylo rovněž dosaženo při využití algoritmu PCR (418,06 s pro úlohu L256x256).



Obr. 9.6: Srovnání dosažených výpočetních časů pro různé přístupy k řešení úlohy L256x256 pomocí metody střídavých směrů.

9.4.3 Vyhodnocení časové efektivity výpočtů pro metodu sdružených gradientů

V dalším textu budou uvedeny a vzájemně srovnány hodnoty výpočetních časů, které byly dosaženy při řešení modelové úlohy pomocí přístupů založených na metodě sdružených gradientů s předpokládáním.

Testované přístupy

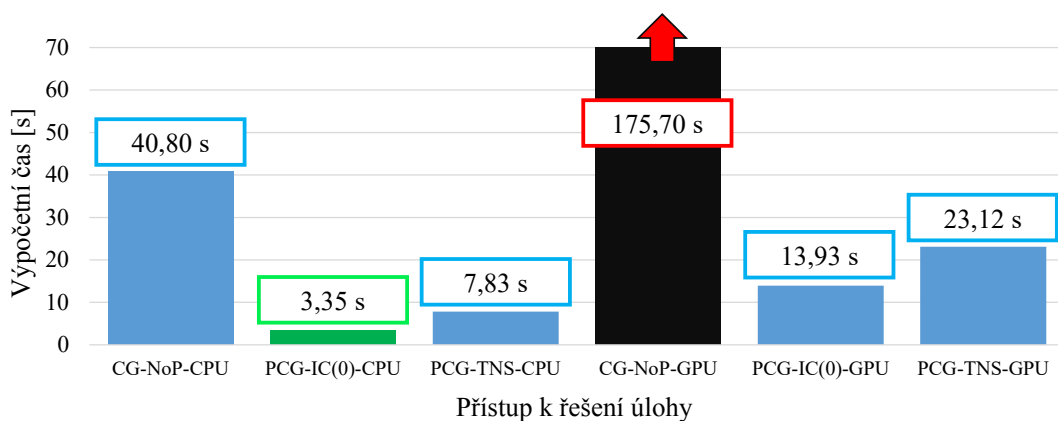
V rámci stanovení časové náročnosti výpočtů realizovaných pomocí metody sdružených gradientů byla provedena série výpočtů pro různé kombinace využitého hardwarového zařízení (CPU nebo GPU) a jedné ze tří možností pro volbu předpokládání:

1. výpočet pomocí metody sdružených gradientů bez předpokládání (dále označován zkratkou CG-NoP),
2. výpočet pomocí metody sdružených gradientů s předpokládáním podle algoritmu IC(0) (dále jen PCG-IC(0)),
3. výpočet pomocí metody sdružených gradientů s předpokládáním podle metody TNS (dále jen PCG-TNS).

S ohledem na funkcionalitu knihovny PARALUTION, jejíž algoritmy byly v rámci provedených výpočtů využity, lze navíc provádět simulace s libovolným z uvedených typů předpokládání na zařízeních CPU i GPU. Celkově se tedy lze u metody sdružených gradientů zabývat možností akcelerace výpočtů pro šest různých přístupů k řešení úlohy. Podobně jako u metody střídavých směrů byly výpočty provedeny pro tři uvažované velikosti modelové úlohy (S32x128, M64x256 a L256x256).

Přehled dosažených výpočetních časů a diskuze výsledků

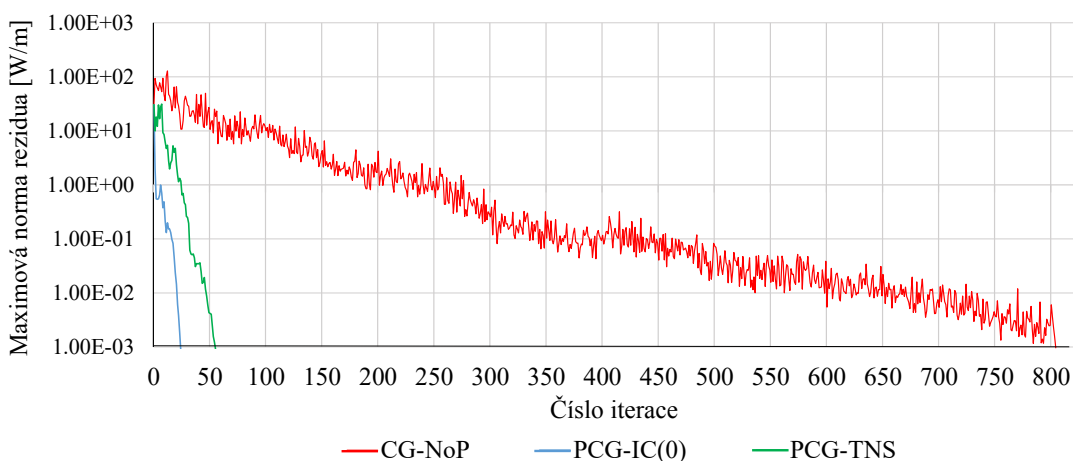
Sloupcový graf na obrázku 9.7 uvádí srovnání hodnot pro výpočetní časy dosažené při řešení úlohy S32x128 pomocí šesti testovaných přístupů. Lze si povšimnout, že



Obr. 9.7: Srovnání dosažených výpočetních časů pro různé přístupy k řešení úlohy S32x128 pomocí metody sdružených gradientů.

nejlepších výsledků po stránce časové efektivity lze docílit u přístupu, který využívá kombinaci předpodmínění pomocí algoritmu IC(0) a realizace výpočtu na CPU. Vysvětlení pro nízký výpočetní čas 3,35 s u tohoto přístupu spočívá zejména v efektivitě algoritmu IC(0). Ten díky velmi řídké struktuře matice soustavy \mathbf{A} v řešených SLR tvaru $\mathbf{AT} = \mathbf{b}$ umožňuje zkonstruovat příslušnou předpodmiňovací matici $\mathbf{M}_{\text{IC}(0)} = \mathbf{LL}^T$ ve velmi malém počtu kroků, přičemž při využití výhodného formátu pro ukládání řídkých matic jsou prvky dolní trojúhelníkové matice \mathbf{L} počítány pouze pro takové pozice, ve kterých se nacházejí nenulové prvky matice \mathbf{A} .

Předpodmínění podle algoritmu IC(0) se navíc vyznačuje významnou efektivitou z hlediska snížení počtu iterací výpočtu v algoritmu metody sdružených gradientů. Na obrázku 9.8 je graficky znázorněno srovnání pro rychlost konvergence iteračního výpočtu při řešení SLR v konkrétním časovém kroku úlohy.



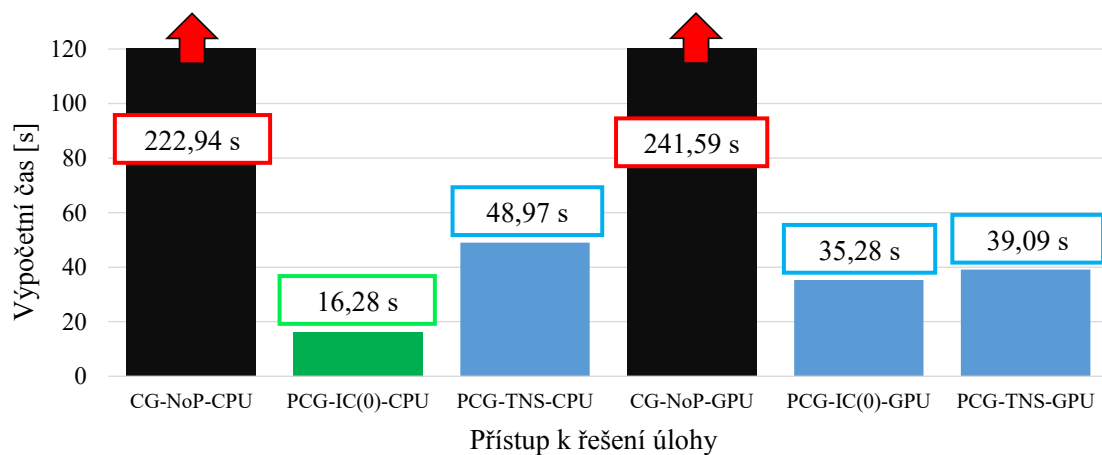
Obr. 9.8: Vizualizace závislosti normy rezidua na indexu iterace pro různé typy předpodmínění v metodě sdružených gradientů při řešení úlohy S32x128.

Uvedené křivky popisují vývoj hodnoty pro normu rezidua v závislosti na číselném indexu iterace pro uvažované tři typy předpodmínění. Lze si povšimnout, že algo-

rytmus IC(0) představuje ve srovnání s přístupy CG-NoP a PCG-TNS nástroj pro nejvýraznější snížení počtu iterací, které výpočet vyžaduje k dosažení požadované přesnosti $9,4 \cdot 10^{-4}$ W/m. Z této schopnosti algoritmu IC(0) pak následně plyne pozorovaný poznatek o nízkém výpočetním čase pro daný přístup.

Z průběhu křivek na obrázku 9.8 lze rovněž oddůvodnit vysoké hodnoty pro výpočetní čas, kterými se vyznačují přístupy CG-NoP-CPU a CG-NoP-GPU. Bez využití předpokládání se proces řešení SLR pomocí metody sdružených gradientů projevuje značně vysokým počtem iterací, které jsou vyžadovány pro dosažení požadované přesnosti výpočtu. Podobně jako v případě metody střídavých směrů navíc platí, že využití GPU není pro účely řešení úlohy S32x128 přínosné, a to především z důvodu nedostatečného vytížení výpočetní síly GPU.

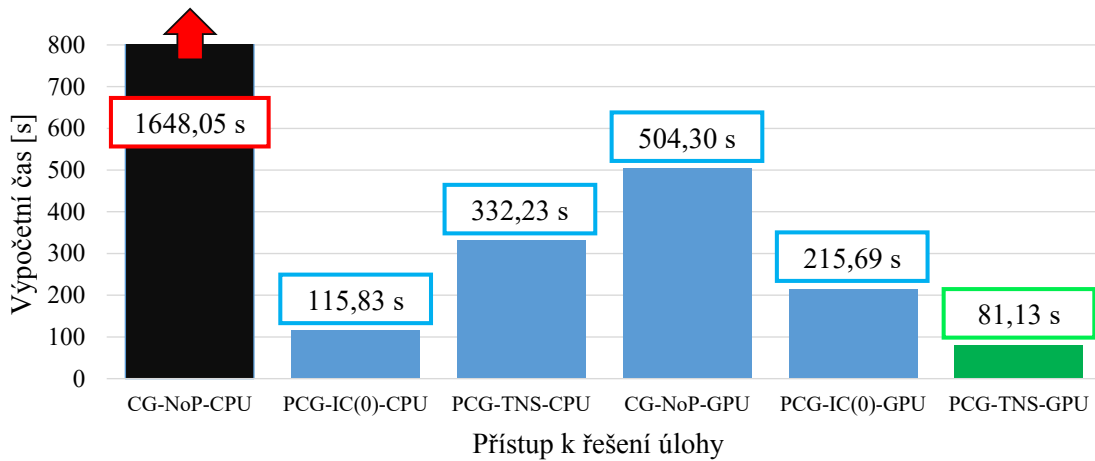
Výsledné hodnoty pro časovou efektivitu šesti uvažovaných přístupů k řešení úlohy M64x256 graficky zachycuje obrázek 9.9. Dosažené výsledky opět poukazují na významnou akceleraci výpočtů při využití přístupu PCG-IC(0)-CPU a vysoké výpočetní časy pro kombinace CG-NoP-CPU a CG-NoP-GPU.



Obr. 9.9: Srovnání dosažených výpočetních časů pro různé přístupy k řešení úlohy M64x256 pomocí metody sdružených gradientů.

Z uvedeného grafu si lze navíc povšimnout relativního zlepšení v časové efektivitě pro kombinaci PCG-TNS-GPU, která ve srovnání s testovaným přístupem PCG-TNS-CPU dosahuje při řešení úlohy M64x256 nižších výpočetních časů. Pro tuto úlohu tedy lze využití GPU při uplatnění přístupu PCG-TNS považovat za přínosné. Podobný poznatek byl rovněž pozorován při měření výpočetních časů pro úlohu L256x256. Dosažené výsledky jsou uvedeny na obrázku 9.10.

Ze sloupcového grafu na obrázku 9.10 je patrné, že využití GPU při řešení úlohy L256x256 nalézá své efektivní uplatnění. Nejlepších výsledků z hlediska akcelerace výpočtů bylo dosaženo pro přístup PCG-TNS-GPU, v rámci kterého byl stanoven výsledný výpočetní čas 81,13s. Tento výsledek lze oddůvodnit vhodností metody TNS pro paralelní výpočty (viz kapitola 5.2.3) a plným využitím výpočetní síly GPU.



Obr. 9.10: Srovnání dosažených výpočetních časů pro různé přístupy k řešení úlohy M64x256 pomocí metody sdružených gradientů.

9.4.4 Celkové srovnání dosažených výsledků

V tabulce 9.1 jsou zapsány hodnoty výpočetních časů, které byly dosaženy v rámci testování přístupů založených na metodě střídavých směrů pro řešení úlohy S32x128, M64x256 a L256x256. Tabulka 9.2 podobně uvádí výsledky pro výpočty, které byly prováděny s využitím technik metody sdružených gradientů a různých typů předpokládání. V obou tabulkách je zelenou barvou ve sloupcích pro každou z úloh vždy označen přístup, u kterého bylo dosaženo nejnižšího výpočetního času.

Přístup	Výpočetní čas pro úlohu S32x128 [s]	Výpočetní čas pro úlohu M64x256 [s]	Výpočetní čas pro úlohu L256x256 [s]
TDMA-CPU	9,69	143,35	1857,00
CR-GPU	22,11	94,60	487,50
PCR-GPU	20,35	88,57	418,06

Tab. 9.1: Hodnoty dosažených výpočetních časů pro testované přístupy založené na metodě střídavých směrů.

Přístup	Výpočetní čas pro úlohu S32x128 [s]	Výpočetní čas pro úlohu M64x256 [s]	Výpočetní čas pro úlohu L256x256 [s]
CG-NoP-CPU	40,80	222,94	1648,05
PCG-IC(0)-CPU	3,35	16,28	115,83
PCG-TNS-CPU	7,83	48,97	332,23
CG-NoP-GPU	175,70	241,59	504,30
PCG-IC(0)-GPU	13,93	35,28	215,69
PCG-TNS-GPU	23,12	39,09	81,13

Tab. 9.2: Hodnoty výpočetních časů pro testované přístupy založené na metodě sdružených gradientů.

Shrnující poznatky o výhodnosti sériových a paralelních přístupů

Z hlediska efektivity využití CPU a GPU zařízení z dosažených výsledků plyne, že volba nejvhodnějšího přístupu pro řešení modelové úlohy do značné míry závisí na její velikosti. Tuto závislost lze pozorovat jak u přístupů založených na metodě střídavých směrů (efektivní využití TDMA-CPU pro úlohu S32x128, PCR-GPU pro úlohy M64x256 a L256x256), tak i u testovaných kombinací pro metodu sdružených gradientů s předpokládáním (efektivní využití PCG-IC(0)-CPU pro úlohy S32x128 a M64x256, PCG-TNS-GPU pro úlohu L256x256). Vysvětlení pro tuto skutečnost spočívá v poznatku, že realizace paralelních výpočtů nalézá své efektivní uplatnění pouze při řešení takových úloh, jejichž velikost umožňuje dostatečné využití výpočetní síly použitého GPU zařízení.

Shrnující poznatky o výhodnosti testovaných numerických metod

V celkovém zhodnocení lze z hodnot uvedených v tabulkách 9.1 a 9.2 usoudit, že z hlediska akcelerace výpočtů dosahují nejlepších výsledků takové přístupy, které jsou založené na metodě sdružených gradientů s předpokládáním. V případě malé úlohy S32x128 bylo nejvýznamnějšího urychlení výpočtů dosaženo u přístupu PCG-IC(0)-CPU, pro úlohy M64x256 a L256x256 bylo vyhodnoceno jako nejefektivnější použití přístupu PCG-TNS-GPU. Výhodnost těchto přístupů ve srovnání s testovanými kombinacemi pro metodu střídavých směrů plyne ze způsobu implementace obou metod:

Metoda sdružených gradientů s předpokládáním

Pro princip řešení modelové 2D úlohy vedení tepla pomocí metody sdružených gradientů platí, že v rámci jednoho časového kroku dané úlohy je teplotní pole v celé zkoumané oblasti určeno na základě řešení jediné SLR s pětdiagonální maticí. Přestože se řešená soustava vyznačuje velmi vysokým počtem neznámých (4096 neznámých pro úlohu S32x128, 16384 neznámých pro úlohu M64x256, 65536 neznámých pro úlohu L256x256), díky kombinaci výpočetních nástrojů specializované knihovny PARALUTION a výkonného hardwarového vybavení lze tyto rozsáhlé soustavy řešit velmi efektivně. Řešení modelové úlohy v postupujících časových okamžicích pak kromě výpočtu neznámých v SLR využívá pouze jedinou dodatečnou funkci provádějící výpočty, která spočívá v úpravě vektoru pravé strany řešených soustav.

Metoda střídavých směrů a příslušné řešiče SLR s třídiagonální maticí

Při využití přístupů, které jsou založeny na metodě střídavých směrů, jsou v rámci řešení každé ze SLR s třídiagonální maticí vypočítána pouze dílčí teplotní pole pro jeden řádek či sloupec uzlových bodů v obdélníkové diskretizační síti. Sestrojené matice soustavy se pak vyznačují výhodnou třídiagonální strukturou a relativně nízkým počtem neznámých. Metoda střídavých směrů však kromě využití algoritmů

TDMA, CR nebo PCR využívá několik dalších funkcí, které vlastní výpočet neznámých teplot „zatěžují“. Těmi jsou zejména

- funkce pro úpravu vektoru pravé strany,
- funkce pro transpozici lineárního pole, ve kterém jsou uchovávány hodnoty vypočítaných teplot,
- funkce pro výpočet odhadů chyb v každém z uzlových bodů,
- funkce pro nalezení maximální hodnoty odhadu chyby v uzlových bodech.

Všechny tyto funkce, které byly v rámci diplomové práce v programu `vypocetADI` implementovány, jsou využívány mnohonásobně v rámci každého časového kroku, a to z důvodu iteračního charakteru výpočtu. Tím je potlačena významná výhoda metody střídavých směrů, která je založena na výpočetní efektivitě algoritmů TDMA, CR a PCR, a následně tak lze očekávat vyšší hodnoty naměřených výpočetních časů.

ZÁVĚR

Diplomová práce shrnuje problematiku související s numerickým řešením úloh vedení tepla a blíže se zabývá přístupy, které jsou z hlediska časové efektivity pro řešení přímých úloh výhodné.

V úvodní části práce jsou shrnuty poznatky o třech základních způsobech přenosu tepla s důrazem na přenos tepla vedením. Dále je s využitím metody kontrolních objemů vysvětlen postup odvození soustav lineárních rovnic, které jsou sestaveny v rámci numerického řešení přímých úloh nestacionárního vedení tepla v jedné a dvou prostorových proměnných. Význam přímých úloh v inverzních úlohách vedení tepla je následně vysvětlen v souvislosti s poznatkami o algoritmu sekvenční metody, která se pro řešení inverzních úloh v praxi obvykle používá.

V návaznosti na odvození soustav lineárních rovnic pro přímé úlohy jsou představeny dvě numerické metody, které lze při výpočtu teplotních polí pro 2D úlohy vedení tepla efektivně využít. Z tohoto hlediska se významná část diplomové práce věnuje odvození a popisu metody střídavých směrů a metody sdružených gradientů s předpokládáním. Zdůrazněny jsou rovněž významné poznatky o efektivitě obou metod s ohledem na jejich uplatnění při řešení 2D úloh vedení tepla.

V aplikační části práce je nejprve popsán průběh laboratorního měření, při kterém byl zkoumán vliv sprchového chlazení na horký povrch ocelové desky. Je rovněž představen 2D výpočetní model, který umožňuje provedené měření formálně popsat jako přímou úlohu nestacionárního vedení tepla v tuhém tělese. Následně jsou uvedeny poznatky o testování časové náročnosti provedených počítačových výpočtů, které spočívaly v numerickém řešení sestavené modelové úlohy pomocí přístupů založených na metodě střídavých směrů nebo metodě sdružených gradientů s předpokládáním. Při implementaci výpočtů byly z hlediska počtu uzlových bodů realizovány simulace pro tři různé velikosti modelové úlohy a zohledněna byla rovněž možnost využití CPU nebo GPU zařízení.

Bylo zjištěno, že metoda sdružených gradientů představuje v kombinaci s vhodnými typy předpokládání přístup, který z hlediska časové efektivity dosahuje ve srovnání s implementacemi metody střídavých směrů lepších výsledků. Pro úlohu o velikosti 4096 uzlových bodů byla nejnižší časová náročnost výpočtu vyhodnocena pro kombinaci metody sdružených gradientů s předpokládáním podle neúplného Choleského rozkladu (algoritmus IC(0)) při využití CPU zařízení. V případě řešených úloh o velikosti 16384 a 65536 uzlových bodů bylo nejnižších výpočetních časů dosaženo pro přístup, který představuje kombinaci metody sdružených gradientů s předpokládáním podle aproximativní inverze (metoda TNS) a akcelerace výpočtů na GPU zařízení. Dosažené výsledky pro testované přístupy navíc jednoznačně poukazují na přínos GPU zařízení, jehož výpočetní sílu lze při řešení rozsáhlých praktických úloh pro účely paralelizace numerických výpočtů efektivně využít.

V návaznosti na získané poznatky o možnostech urychlení výpočtů se lze dále zabý-

vat efektivitou numerického řešení přímých úloh vedení tepla, v rámci kterých jsou materiálové vlastnosti látek uvažovány jako teplotně závislé. Z hlediska využití jiných technik ke snížení časové náročnosti prováděných výpočtů se v dalším postupu nabízí implementace metody sdružených gradientů v kombinaci s nestrukturovanou sítí, která ve srovnání s obdélníkovou sítí umožňuje přesněji a současně efektivněji popisovat danou prostorovou doménu.

LITERATURA

- [1] HORÁK, Aleš. *Návrh experimentu pro řešení inverzní úlohy vedení tepla*. Brno, 2010. Dizertační práce. Vysoké učení technické v Brně.
- [2] POHANKA, Michal a Jana ONDROUŠKOVÁ. Implicit numerical multi-dimensional heat-conduction algorithm parallelization and acceleration on a graphics card. *Materiali in Tehnologije*. 2016, **50**(2), 183-187. DOI: 10.17222/mit.2014.128.
- [3] PAVELEK, Milan. *Termomechanika*. Vyd. 3., přeprac. / v Akademickém nakladatelství CERM 1. vyd. Brno: Akademické nakladatelství CERM, 2003, 284 s. : il. ISBN 80-214-2409-5.
- [4] FRANČŮ, Jan. *Parciální diferenciální rovnice*. 4., dopl. vyd. Brno: Akademické nakladatelství CERM, 2011, 160 s. : il. ; 30 cm. ISBN 978-80-214-4399-0.
- [5] KOMÍNEK, Jan. *Heuristické algoritmy pro optimalizaci*. Vysoké učení technické v Brně. Fakulta strojního inženýrství, 2012.
- [6] HŘIBOVÁ, Veronika. *Vývoj inverzní sub-doménové metody pro výpočet okrajových podmínek vedení tepla*. Brno, 2015. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně.
- [7] POHANKA, Michal. *Technical Experiment Based Inverse Tasks in Mechanics = Inverzní úlohy mechaniky s vazbou na technický experiment*. 2006, 142 s. Přílohy teze, pojednání k SDZ.
- [8] ÖZISIK, M. Necati. *Heat Conduction*. 2nd Edition. New York: Wiley, John & Sons, Incorporated, 1993. ISBN 978-0-471-53256-9.
- [9] VERSTEEG, Henk Kaarle a Weeratunge MALALASEKERA. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. 2nd Edition. London: Pearson Education Limited, 2007. ISBN 978-0-13-127498-3.
- [10] SALIH, Abdusamad A. *Finite Element Method*[online]. Thiruvananthapuram: Department of Aerospace Engineering, Indian Institute of Space Science and Technology [cit. 2019-01-30]. Dostupné z: <https://www.iist.ac.in/sites/default/files/people/IN08026/FEM.pdf>
- [11] GURTIN, M.E. *Variational principles for linear initial-value problems*. Quarterly of Applied Mathematics. 1964, **22**(3), 252-256.
- [12] PATANKAR, Suhas V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980. ISBN 0-07-048740-5.

- [13] HASAN, Ammar, Eric C. KERRIGAN a George A. CONSTANTINIDES. Solving a positive definite system of linear equations via the matrix exponential. In: *50th IEEE Conference on Decision and Control and European Control Conference*. Orlando, FL, USA: IEEE, 2011, s. 2299-2304. DOI: 10.1109/CDC.2011.6160593. ISBN 978-1-61284-800-6. ISSN 0191-2216.
- [14] BADY, Mahmoud. Fundamentals of Direct Inverse CFD Modeling to Detect Air Pollution Sources in Urban Areas. *Computational Water, Energy, and Environmental Engineering*. 2013, **2**, 31-42. DOI: <http://dx.doi.org/10.4236/cweee.2013.22004>.
- [15] KENDRICKS, Kimberly. *Solving the Inverse Kinematic Robotics Problem: A Comparison Study of the Denavit-Hartenberg Matrix and Groebner Basis Theory* [online]. Auburn, Alabama, USA, 2007 [cit. 2019-02-13]. Dostupné z: <https://etd.auburn.edu/handle/10415/940>. Dizertační práce. Auburn University.
- [16] BERTERO, Mario a Michele PIANA. Inverse problems in biomedical imaging: modeling and methods of solution. QUARTERONI, Alfio, Luca FORMAGGIA a Alessandro VENEZIANI. *Complex Systems in Biomedicine*. 1. Milan: Springer, 2006, s. 1-33. ISBN 978-88-470-0394-1.
- [17] BECK, James V., Ben BLACKWELL a Charles R. St. CLAIR, JR. *Inverse Heat Conduction: Ill-posed Problems*. New York: John Wiley, 1985. ISBN 0-471-08319-4.
- [18] GADALA, M. S., VAKILI, S. Assessment of Various Methods in Solving Inverse Heat Conduction Problems. In: *Heat Conduction - Basic Research*. Rijeka, 2011, 26 s. ISBN 978-953-307-404-7.
- [19] POHANKA, Michal a Petr KOTRBÁČEK. Design of cooling units for heat treatment. In: *Heat Treatment - Conventional and Novel Applications*. Rijeka, Croatia: InTech, 2012, s. 1-20. DOI: 10.5772/50492. ISBN 978-953-51-0768-2.
- [20] ŽITNÝ, Rudolf. NAP10 - Numerická analýza procesů. In: *Bílá kniha / ČVUT Fakulta strojní - Numerická analýza procesů* [online]. Praha [cit. 2019-05-20]. Dostupné z: users.fs.cvut.cz/zitnyrud/NAP10.ppt
- [21] DOUGLAS, JR., Jim a H. H. RACHFORD, JR. On the Numerical Solution of Heat Conduction Problems in Two and Three Space Variables. *Transactions of the American Mathematical Society*. 1956, **82**(2), 421-439. DOI: 10.2307/1993056.
- [22] HESTENES, Magnus R. a Eduard STIEFEL. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*. 1952, **49**(6), 409-435. DOI: <http://dx.doi.org/10.6028/jres.049.044>.

- [23] SHEWCHUK, Jonathan Richard. *An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain* [online]. Edition 1 $\frac{1}{4}$. Technical report CMU-CS-94-125. Pittsburgh, PA, USA: Carnegie Mellon University, 1994. [cit. 2019-04-07]. Dostupné z: <https://www.cs.cmu.edu/~quake-papers/painless-conjugate-gradient.pdf>
- [24] BRYAN, Kurt. Conjugate Gradient Methods. In: *Rose-Hulman Institute of Technology* [online]. Terre Haute: Department of Mathematics, Rose-Hulman Institute of Technology, 2011 [cit. 2019-04-07]. Dostupné z: <https://www.rose-hulman.edu/~bryan/lottamath/congrad.pdf>
- [25] ČERMÁK, Libor. Vybrané statě z numerických metod. In: *Ústav matematiky - math.fme.vutbr.cz* [online]. Brno: Ústav matematiky FSI VUT v Brně, 2019 [cit. 2019-04-07]. Dostupné z: http://math.fme.vutbr.cz/download.aspx?id_file=266871977
- [26] SAAD, Yousef. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems* [online]. 2nd Edition. Philadelphia, PA, USA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003 [cit. 2019-04-07]. ISBN 0898715342. Dostupné z: https://www-users.cs.umn.edu/~saad/IterMethBook_2ndEd.pdf
- [27] GUSTAFSSON, Ivar a Gunhild LINDSKOG. Completely parallelizable preconditioning methods. *Numerical Linear Algebra with Applications*. 1995, **2**(5), 447-465. DOI: <https://doi.org/10.1002/nla.1680020506>.
- [28] BENZI, Michele a Miroslav TŮMA. A comparative study of sparse approximate inverse preconditioners. *Applied Numerical Mathematics*. 1999, **30**(2-3), 305-340. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-9274\(98\)00118-4](https://doi.org/10.1016/S0168-9274(98)00118-4).
- [29] HWU, Wen-mei W. *GPU Computing Gems: Jade Edition*. Waltham, Massachusetts, USA: Morgan Kaufmann, 2011. ISBN 978-0-12-385963-1.
- [30] HOCKNEY, R. W. A fast direct solution of Poisson's equation using Fourier analysis. *Journal of the ACM*. 1965, **12**(1), 95-113. DOI: 10.1145/321250.321259.
- [31] ONDROUŠKOVÁ, Jana. *Rozvoj inverzních úloh vedení tepla řešených s využitím optimalizačních postupů a vysokého stupně paralelizace* [online]. Vysoké učení technické v Brně. Fakulta strojního inženýrství, 2015 [cit. 2019-05-11]. Dostupné z: <https://dspace.vutbr.cz/handle/11012/43284>.
- [32] THOMPSON, Jonathan a Kristofer SCHLACHTER. *An Introduction to the OpenCL Programming Model*. NYU: Media Research Lab, 2012.

- [33] *PARALUTION - The Library for Iterative Sparse Methods on CPU and GPU* [online]. Gaggenau: PARALUTION Labs UG (haftungsbeschränkt) & Co., 2015 [cit. 2019-05-23]. Dostupné z: <https://www.paralution.com/>
- [34] Intel® Core™ i7-6700K Processor 8M Cache, up to 4.20 GHz Product Specifications. *Intel | Data Center Solutions, IoT, and PC Innovation* [online]. Santa Clara, CA, USA: © Intel Corporation [cit. 2019-05-21]. Dostupné z: <https://ark.intel.com/content/www/us/en/ark/products/88195/intel-core-i7-6700k-processor-8m-cache-up-to-4-20-ghz.html>
- [35] ADVANCED MICRO DEVICES, INC. *AMD Accelerated Parallel Processing: OpenCL Programming Guide*. Rev2.7. Sunnyvale, CA, USA, 2013. Dostupné také z: http://developer.amd.com/wordpress/media/2013/07/AMD_Accelerated_Parallel_Processing_OpenCL_Programming_Guide-rev-2.7.pdf

SEZNAM SYMBOLŮ, VELIČIN A ZKRATEK

Symbol	Popis
a	První poddiagonála ve třídiagonální matici
A	Matice soustavy v soustavě lineárních rovnic
b	Hlavní diagonála ve třídiagonální matici
\mathbf{b}	Vektor pravé strany v soustavě lineárních rovnic
c	Měrná tepelná kapacita
c	První naddiagonála ve třídiagonální matici
\mathbf{d}	Vektor pravé strany v soustavě lineárních rovnic s třídiagonální maticí
D	Diagonální matice
E	Hustota zářivého toku
f	Skalární funkce
f_w	Váhový faktor v odvození metody kontrolních objemů
h	Součinitel přestupu tepla
$\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$	Bázové vektory prostoru \mathbb{R}^3
I	Jednotková matice
L	Tloušťka testovací desky
L	Dolní trojúhelníková matice zkonstruovaná v rámci neúplného Choleského rozkladu
M	Předpokmiňovací matice
Q	Vnitřní zdroje tepla
Q_C, Q_P	Koeficienty linearizované závislosti vnitřních zdrojů na teplotě
m, n, n_x, n_y	Symboly pro vyjádření celkového počtu
\mathbf{p}	Vektor označující směr prohledávání v algoritmu CG
q, \mathbf{q}	Hustota tepelného toku
r	Počet dopředných kroků sekvenční metody
\mathbf{r}	Vektor reziduí
\mathbb{R}	Množina reálných čísel
w	Váhová funkce vystupující v metodě vážených reziduí
S	Funkce pro součet čtverců odchylek v sekvenční metodě
t	Čas
x, y, z	Prostorové souřadnice kartézského souřadného systému
\mathbf{x}^*	Přesné řešení soustavy lineárních rovnic $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
X	Matice koeficientů citlivosti
Y	Vektor naměřených teplot pod povrchem tělesa
V	Objem tělesa
\mathbf{z}	Vektor vystupující v algoritmu PCG při konstrukci vektorů pro směry prohledávání a výpočtu parametrů α, β

α, β	Parametry pro délku kroku v algoritmech CG a PCG
$\delta x, \delta y$	Vzdálenost dvou sousedních uzlových bodů v odvození metody kontrolních objemů
Δt	Velikost časového kroku
$\Delta x, \Delta y$	Velikost stěny kontrolního objemu
$\Delta \phi$	Prvek matice koeficientů citlivosti
ϵ	Emisivita nedokonalého zářiče
ϵ_{tol}	Tolerance přesnosti výpočtu v algoritmech CG a PCG
λ	Součinitel tepelné vodivosti
$\bar{\xi}, \bar{\xi}$	Odhad chyby v iteračním výpočtu metody střídavých směrů
ρ	Hustota
σ_0	Stefanova-Boltzmannova konstanta
ϕ	Suma citlivostních koeficientů v sekvenční metodě
ω	Relaxační parametr pro metodu předpodmínění SSOR
∇	Nabla operátor

Použité dolní indexy

i, j, k, M	Číselné indexy
e, w, n, s	Poloha stěny kontrolního objemu vůči uzlovému bodu P v odvození metody kontrolních objemů
E, W, N, S, P	Uzlový bod v odvození metody kontrolních objemů
0	Počáteční hodnota
∞	Označení veličiny vztahující se k volnému proudu tekutiny

Použité horní indexy

0	Hodnota z předchozího časového kroku nebo z minulé iterace
$\frac{1}{2}$	Mezivýsledná hodnota v rámci jedné iterace výpočtu podle metody střídavých směrů
1	Hodnota pro aktuální časový krok nebo iteraci
k	Index iterace v algoritmu metody střídavých směrů

Zkratky pro obecně ustálená názvosloví

1D	Označení pro úlohu v jednorozměrném souřadném systému
2D	Označení pro úlohu ve dvourozměrném souřadném systému
SLR	Soustava lineárních rovnic

Zkratky pro originální anglická názvosloví

ADI	Alternating direction implicit
CG	Conjugate gradients
CPU	Central processing unit
FLOPS	Floating-point operations per second
GEM	Gauss elimination method

GPU	Graphics processing unit
IC(0)	Incomplete Cholesky factorization with zero-fill
PCG	Preconditioned conjugate gradients
SGS	Symmetric Gauss-Seidel
SSOR	Symmetric successive over-relaxation
TNS	Truncated Neumann series

SEZNAM PŘÍLOH

A	Návod k obsluze spustitelných programů	93
A.1	Obsluha programu vypocetADI	93
A.2	Obsluha programu vypocetPCG	94
B	Obsah přiloženého CD	96

A NÁVOD K OBSLUZE SPUSTITELNÝCH PROGRAMŮ

Spustitelné programy `vypocetADI` a `vypocetPCG` jsou uzpůsobeny pro účely provádění počítačových simulací na prostředcích výpočetní techniky, které byly v rámci diplomové práce poskytnuty Laboratoří přenosu tepla a proudění FSI VUT v Brně. Výpočty jsou spouštěny prostřednictvím nástroje příkazového řádku operačního systému Windows (`cmd.exe`).

A.1 Obsluha programu `vypocetADI`

Program `vypocetADI` realizuje numerické výpočty na základě příkazu, který spočívá v nastavení čtyř vstupních parametrů pro volbu přístupu k řešení úlohy:

1. **program**: parametr s hodnotou `vypocetADI.exe`
2. **problem**: parametr pro volbu velikosti řešené úlohy
 - S: malá úloha S32x128
 - M: středně velká úloha M64x256
 - L: velká úloha L256x256
3. **method**: parametr pro volbu algoritmu pro řešení SLR s třídiagonální maticí
 - TDMA: algoritmus TDMA s využitím CPU
 - CR: algoritmus CR s využitím GPU
 - PCR: algoritmus PCR s využitím GPU
4. **output**: parametr pro volbu polohy uzlového bodu, pro který je v průběhu výpočtu zaznamenáván a vypisován časový vývoj teploty:
 - SENSOR: výpis teploty v místě usazeného termočlánku pod povrchem
 - SURFACE: výpis teploty na chlazeném povrchu (nad termočlánkem)

Modelové ukázky nastavení výpočtů

Níže jsou uvedeny tři ukázky pro nastavení vstupních parametrů výpočtů. Příkazy jsou vepisovány do příkazového řádku, přičemž aktuální adresář, který je v okně příkazového řádku zobrazen, odpovídá umístění souboru `vypocetADI.exe`.

1. Numerické řešení úlohy S32x128 s využitím algoritmu TDMA a výpisem teplot v místě usazeného termočlánku:
`vypocetADI.exe -problem=S -method=TDMA -output=SENSOR`
2. Numerické řešení úlohy M64x256 s využitím algoritmu CR a výpisem teplot na chlazeném povrchu (nad termočlánkem):
`vypocetADI.exe -problem=M -method=CR -output=SURFACE`
3. Numerické řešení úlohy L256x256 s využitím algoritmu PCR a výpisem teplot v místě usazeného termočlánku:
`vypocetADI.exe -problem=L -method=PCR -output=SENSOR`

Ukládání výstupů do externího souboru

V rámci běhu programu `vypocetADI` jsou získané výstupy uloženy ve formě externího souboru s příponou `.dat`:

- označení `temp-sequence` identifikuje soubor, který obsahuje vypočítané hodnoty pro teploty v místě určeném volbou parametru `output`,
- označení `info-stats` identifikuje soubor, ve kterém je uložen údaj o výpočetním čase provedené simulace.

Kromě těchto identifikátorů jsou názvy výstupních souborů dále složeny z kombinace zvolených hodnot pro vstupní parametry `problem`, `method` a `output`. Po ukončení výpočtu lze tyto soubory nalézt ve složce `Outputs`, která je umístěna ve stejném adresáři jako soubor `vypocetADI.exe`.

A.2 Obsluha programu vypocetPCG

Spouštění simulačních výpočtů s využitím programu `vypocetPCG` je podobně jako v případě programu `vypocetADI` prováděno prostřednictvím rozhraní příkazového řádku. Uživatel přitom nastavuje pět vstupních parametrů:

1. `program`: parametr s hodnotou `vypocetPCG.exe`
2. `device`: parametr pro volbu typu zařízení
 - `H`: CPU (Host device)
 - `A`: GPU (Accelerator)
3. `problem`: parametr pro volbu velikosti řešené úlohy
 - `S`: malá úloha `S32x128`
 - `M`: středně velká úloha `M64x256`
 - `L`: velká úloha `L256x256`
4. `precond`: parametr pro volbu typu předpodmínění
 - `ICZ`: algoritmus `IC(0)` (neúplný Choleského rozklad)
 - `TNS`: metoda `TNS` (aproximativní inverze)
 - `NOP`: výpočet bez předpodmínění
5. `output`: parametr pro volbu polohy uzlového bodu, pro který je v průběhu výpočtu zaznamenáván a vypisován časový vývoj teploty:
 - `SENSOR`: výpis teploty v místě usazeného termočlánku pod povrchem
 - `SURFACE`: výpis teploty na chlazeném povrchu (nad termočlánkem)

Modelové ukázky nastavení výpočtů

Pro účely objasnění formulace příkazů pro nastavení výpočtů slouží tři názorné ukázky. Příslušné příkazy jsou spouštěny v rozhraní příkazového řádku, jehož aktuální adresář odpovídá umístění souboru `vypocetPCG.exe`.

1. Využití CPU pro účely řešení úlohy S32x128 s předpokládáním podle algoritmu IC(0) a výpisem teplot na chlazeném povrchu (nad termočlánkem):
`vypocetPCG.exe -device=H -problem=S -precond=ICZ -output=SURFACE`
2. Využití CPU pro účely řešení úlohy M64x256 s předpokládáním podle metody TNS a výpisem teplot v místě usazeného termočlánku:
`vypocetPCG.exe -device=H -problem=M -precond=TNS -output=SENSOR`
3. Využití GPU pro účely řešení úlohy L256x256 bez předpokládání a s výpisem teplot v místě usazeného termočlánku:
`vypocetPCG.exe -device=A -problem=L -precond=NOP -output=SENSOR`

Ukládání výstupů do externího souboru

V rámci běhu programu `vypocetPCG` jsou získané výstupy uloženy ve formě externího souboru s příponou `.dat`:

- označení `temp-sequence` identifikuje soubor, který obsahuje vypočítané hodnoty pro teploty v místě určeném volbou parametru `output`,
- označení `info-stats` identifikuje soubor, ve kterém je uložen údaj o výpočetním čase provedené simulace.

Kromě těchto identifikátorů jsou názvy výstupních souborů dále složeny z kombinace zvolených hodnot pro vstupní parametry `precond`, `device`, `problem` a `output`. Po ukončení výpočtu lze tyto soubory nalézt ve složce `Outputs`, která je umístěna ve stejném adresáři jako soubor `vypocetPCG.exe`.

B OBSAH PŘILOŽENÉHO CD

Na přiloženém CD jsou uloženy tyto adresáře:

- Matlab: Adresář obsahuje spustitelné skripty `ADI_Problem_Formulation.m` a `PCG_Problem_Formulation.m`, které v souvislosti s metodou střídavých směrů a metodou sdružených gradientů s předpokmáněním realizují převod řešené 2D modelové úlohy do diskrétního tvaru. V adresáři je rovněž umístěn soubor `mmwrite.m`, který ve skriptu `PCG_Problem_Formulation.m` slouží k ukládání sestavených řádkových matic ve formátu CSR do externího souboru. K uchování veškerých datových struktur, které jsou ve skriptech ukládány do externího souboru, slouží podadresář `Outputs`.
- `vypocetADI`: Adresář obsahuje soubory, které souvisejí s vytvářením a vývojem spustitelného programu `vypocetADI` pro řešení modelové úlohy pomocí metody střídavých směrů. Návod k obsluze programu je vysvětlen v rámci textu přílohy A.
- `vypocetPCG`: Adresář obsahuje soubory, které souvisejí s vytvářením a vývojem spustitelného programu `vypocetPCG` pro řešení modelové úlohy pomocí metody sdružených gradientů s předpokmáněním. Návod k obsluze programu je vysvětlen v rámci textu přílohy A.