

*Южный федеральный университет
(ЮФУ, г.Ростов-на-Дону)
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН
(ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, г.Москва)
Институт математики, механики и
компьютерных наук им. И.И. Воровича
(ИММиКН, г.Ростов-на-Дону)*



Сборник трудов

**XVI ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ-ШКОЛЫ
МОЛОДЫХ ИССЛЕДОВАТЕЛЕЙ
СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**



Труды

**XVI ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ-ШКОЛЫ
МОЛОДЫХ ИССЛЕДОВАТЕЛЕЙ**

**СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Ответственные редакторы: Крукиер Л.А.
Муратова Г.В.

*Южный федеральный университет
(ЮФУ, г.Ростов-на-Дону)
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН
(ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, г.Москва)
Институт математики, механики и
компьютерных наук им. И.И. Воровича
(ИММиКН, г.Ростов-на-Дону)*

*14-19 сентября 2015г.
Пос. Абрау-Дюрсо*

УДК 519.6:532.5
ББК В 192.1
С56

Серия "Математическое моделирование и современные информационные технологии", выпуск 13

С56 СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ : сборник трудов XVI Всероссийской конференции-школы молодых исследователей ; Южный федеральный университет. – Ростов-на-Дону : Издательство Южного федерального университета, 2015. – 256 с.
ISBN 978-5-9275-1795-4

В сборнике представлены доклады участников XVI Всероссийской конференции-школы молодых исследователей "СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ", организованной Институтом прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН и Институтом математики, механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича Южного федерального университета и проходившей с 14 по 19 сентября 2015 года в поселке Абрау-Дюрсо, Россия. В работе Конференции-школы приняли участие представители научных центров Москвы, Новосибирска, Екатеринбурга, Красноярска, Казани, Краснодар, Ростова-на-Дону и других городов.

*Конференция-школа проходила при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований
(грант № 15-31-10333 мол-г).*

ISBN 978-5-9275-1795-4

УДК 519.6:532.5
ББК В 192.1

© ИММиКН им.И.И.Воровича ЮФУ, 2015
© Южный федеральный университет, 2015

Оглавление

ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИСТЕННОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ В ПЛОСКОМ КАНАЛЕ ДО $Re_m = 21900$ Асфандияров Д.Г.	8
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВАРИАЦИОННЫХ НЕРАВЕНСТВ ТЕОРИИ МЯГКИХ СЕТЧАТЫХ ОБОЛОЧЕК Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Калачева Н.В., Тагиров Р.Р.	13
О ПРИБЛИЖЕННОМ РЕШЕНИИ ФИЗИЧЕСКИ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ О НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ ТРЕХСЛОЙНОЙ ПЛАСТИНЫ С ТРАНСВЕРСАЛЬНО-МЯГКИМ ЗАПОЛНИТЕЛЕМ Бадриев И.Б., Гарипова Г.З., Макаров М.В., Паймушин В.Н. .	17
ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ ФИЗИЧЕСКИ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ОБ ИЗГИБЕ ТРЕХСЛОЙНОЙ ПЛАСТИНЫ С ТРАНСВЕРСАЛЬНО-МЯГКИМ ЗАПОЛНИТЕЛЕМ Бадриев И.Б., Гарипова Г.З., Мартынова О.П., Семенычева М.А.	22
НЕКОТОРЫЕ КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РЕЗУЛЬТАТОВ ВЕРИФИКАЦИИ МОДЕЛИ СКОРОСТИ ВЕТРА В УСЛОВИЯХ СЛОЖНОЙ ТРЕХМЕРНОЙ ГЕОМЕТРИИ ГОРОДСКОЙ ЗАСТРОЙКИ ИЛИ ПРОМЫШЛЕННОГО ОБЪЕКТА. Благодатских Д.В., Дзама Д.В., Сороковикова О.С., Устинов Г.А.	25
МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРОПИЧЕСКОЙ ЦИРКУЛЯЦИИ С ПОМОЩЬЮ МОДЕЛИ ОБЩЕЙ ЦИРКУЛЯЦИИ АТМОСФЕРЫ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ СЛОЖНОСТИ Боровко И.В., Крупчатников В.Н.	30
ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЯВНОЙ СХЕМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА В ПЛОСКИХ ТРЕХМЕРНЫХ ОБЛАСТЯХ Боронина М.А., Вшивков В.А.	34
ГИБРИДНЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ Бураго Н.Г., Никитин И.С., Якушев В.Л.	40
ГИБРИДНАЯ ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ УСКОРЕНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ Вшивкова Л.В., Дудникова Г.И.	46
ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИИ ВИБРИРУЮЩЕЙ ПЛАСТИНЫ НА НАПРАВЛЕННОСТЬ АКУСТИЧЕСКИХ ШУМОВ В БЛИЖНЕЙ ЗОНЕ Глебова Г.М., Мальцева О.А., Харахашьян А.М.	52

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛЕЙ, ВОЗБУЖДАЕМЫХ ПРИ РАССЕЙАНИИ ВОЛНОВЫХ ВОЛН НА КРУГОВЫХ ИНТЕРФЕЙСНЫХ ТРЕЩИНАХ	
Голуб М.В., Дорошенко О.В.	57
МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УПРУГОГО СЛОЯ С ОТСЛОИВШИМСЯ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИМ СЕНСОРом С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И ИНТЕГРАЛЬНОГО ПОДОХОДА	
Голуб М.В., Шпак А.Н.	62
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ С МОДЕЛЬЮ ЭНДОГЕННОЙ КОРРУПЦИИ ВО ВЛАСТНЫХ ИЕРАРХИЯХ	
Горбатиков Е.А.	67
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОЦИРКУЛЯЦИИ КРОВИ	
Городнова Н.О.	73
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ ПОСРЕДСТВОМ АЛГОРИТМА КАБАРЕ	
Данилин А.В., Соловьев А.В.	77
МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЁТА ДОЗ ОБЛУЧЕНИЯ ОТ РАДИОАКТИВНОГО ОБЛАКА ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМЫ С УЧЕТОМ ЭКРАНИРОВАНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ ЗДАНИЯМИ	
Дзама Д.В., Лозинг Н.М., Сороковикова О.С., Семенов В.Н. ...	81
ПАРАЗИТНЫЕ ВОЛНЫ В РАЗНОСТНЫХ СХЕМАХ И МЕТОД ИХ ПРИБЛИЖЕННОГО АНАЛИЗА	
Дородницын Л.В.	87
КВАЗИГАЗОДИНАМИЧЕСКИЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ В ПОЛЯРНОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ	
Елизарова Т.Г., Истомина М.А.	94
СЕМЕЙСТВО ПЕРИОДИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ В ПРОСТРАНСТВЕННО НЕОДНОРОДНОЙ МОДЕЛИ КОНКУРЕНЦИИ ХИЩНИКОВ	
Епифанов А.В., Цибулин В.Г.	100
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕРХМОЩНОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА С ВЕЩЕСТВОМ С ПОМОЩЬЮ РС-МЕТОДА	
Зайцева А.А., Ечкина Е.Ю.	105
ИНФОРМАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕЛЬЧЕНИЯ ЗЕРНОВЫХ КУЛЬТУР В ТЕРМИНАХ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАКЕТА MATHEMATICA	
Золотов Н.Б., Лимаренко Н.В., Семёнов И.Е.	107

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АЭРОПЛАНА С КРЫЛОМ ОБРАТНОЙ СТРЕЛОВИДНОСТИ Козаков Е.А.	113
О НЕКОТОРЫХ ОСОБЕННОСТЯХ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ КОНВЕКЦИИ-ДИФФУЗИИ- РЕАКЦИИ Крукиер Л.А., Крукиер Б.Л., Пичугина О.А.	118
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВОЙ ТЕХНОЛОГИИ РАЗРАБОТКИ МЕСТОРОЖДЕНИЯ С ТРУДНЫМИ ЗАПАСАМИ НЕФТИ Лазарева Г.Г., Федоров Е.А.	123
ПОСТРОЕНИЕ ФУНКЦИИ ТОКА ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ И ВИХРЕ- ВЫХ ТЕЧЕНИЙ Лежнев В. Г., Марковский А. Н.	128
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ ГЕОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ УСТАНОВОК С ОДНИМ И БОЛЕЕ ИСТОЧ- НИКОВ В ЗАДАЧАХ МОРСКОЙ ГЕОФИЗИКИ Мариненко А.В., Эпов М.И.	131
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛО И МАС- СОПЕРЕНОСА ПРИ ДВИЖЕНИИ ТЕПЛООВОГО ФРОНТА В СРЕДЕ С СУБМИКРОННЫМИ ПОРАМИ Марков А.А.	137
ПРЕДОБУСЛОВЛИВАНИЕ МЕТОДОВ ПОДПРОСТРАНСТВ КРЫ- ЛОВА С ПОМОЩЬЮ КОСОЭРМИТОВЫХ ИТЕРАЦИЙ Мартынова Т.С.	141
ИТЕРАЦИОННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ УСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ С СИСТЕМОЙ ЛИНЕЙНЫХ ОГРАНИЧЕНИЙ-РАВЕНСТВ Мартынова Т.С., Крукиер Л.А.	153
МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ТЕП- ЛОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА МАЛОЙ ПЛОТНОСТИ В ПЛАЗМЕ МЕТОДОМ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ Месяц Е.А., Снытников А.В., Лотов К.В.	166
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЙРОННОЙ АКТИВ- НОСТИ Муратова Г.В., Бавин В.В., Андреева Е.М., Белоус М.А.	172
РАЗВИТИЕ ИДЕЙ Г.И.МАРЧУКА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОХРАНЫ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ Пененко В.В.	178
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ПОПОЛНЕНИЯ ПОПУЛЯЦИИ С ПЕРЕМЕННОЙ СКОРОСТЬЮ РОСТА В РАННЕМ ОНТОГЕНЕЗЕ Переварюха А.Ю., Дубровская В.А.	186

КОРРЕКЦИЯ И ВЕРИФИКАЦИЯ НЕЯВНОЙ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ Рязанов А.М., Кондаков В.Г.	192
МЕТОД РЕШЕНИЯ ВНЕШНЕЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ЛАПЛАСА Савченко А.О., Ильин В.П., Бутюгин Д.С.	202
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНТЕНСИВНЫХ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ МЕТОДОМ ИТЕРАЦИЙ ПО ПОДОБЛАСТЯМ Свешников В.М.	208
РЕАЛИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА НА КОМПЬЮТЕРАХ С ГРАФИЧЕСКИМИ УСКОРИТЕЛЯМИ Смолехо И.В., Садовская О.В.	212
МИКРОМАСШТАБНЫЕ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ АТМОСФЕРНОЙ ЦИРКУЛЯЦИИ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ РАДИОАКТИВНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ В УСЛОВИЯХ ГОРОДСКОЙ ИЛИ ПРОМЫШЛЕННОЙ ЗАСТРОЙКИ. ИНТЕГРИРОВАННЫЕ КОДЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ. Сороковикова О.С.	217
ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРЯМЫХ ТРЁХМЕРНЫХ ЗАДАЧ ЭЛЕКТРОТОМОГРАФИИ И ВЭЗ НА GPU Суродина И.В., Неведрова Н.Н., Санчаа А.М.	221
ОДИН ИЗ ПОДХОДОВ К РАСЧЕТУ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛЬДИН Тарелкин А.А., Чикина Л.Г., Шабас И.Н.	226
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА И ТРАНСФОРМАЦИИ МЕТАНА В БАЙКАЛЕ Цветова Е.А.	230
РАСЧЕТ ИЗМЕНЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ СОЛИ В ТАГАНРОГСКОМ ЗАЛИВЕ ПРИ СГОНАХ- НАГОНАХ Чикин А.Л., Клещенков А.В., Чикина Л.Г.	234
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ НЕФТЯНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ В ВОДОЕМЕ С УЧЕТОМ ИЗМЕНЕНИЙ ТЕМПЕРАТУРЫ Шабас И.Н., Чикина Л.Г.	239
УСЛОВИЯ БАЛАНСА ЭФФЕКТИВНОСТИ ЭКОНОМИКИ И СОЦИАЛЬНОЙ СПРАВЕДЛИВОСТИ Шведовский В.А.	244

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЯРКОСТИ ЭВТРОФНЫХ
ВОДОЁМОВ

Шляхова Л.А., Повх В.И..... 249

ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИСТЕННОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ В ПЛОСКОМ КАНАЛЕ ДО $Re_m = 21900$

Асфандияров Д.Г.

*Институт проблем Безопасного Развития Атомной
Энергетики РАН, Москва*

Введение

Начало прямому численному моделированию пристенной турбулентности было положено в 80-е годы прошлого столетия расчетной группой из Стенфорда, в составе Кима, Моина и Мозера (Kim J., Moin P., Moser R. D. 1987). Целью расчетов было изучение фундаментальных механизмов формирования турбулентных пограничных слоев вблизи гладких стенок. Рассматривалась наиболее простая трехмерная задача о течении между двумя параллельными пластинами. Для численного решения уравнений Навье-Стокса в области с прямоугольным сечением был выбран псевдоспектральный метод, предложенный Орзагом, существенно использующий быстрое преобразование Фурье для разрешения квадратичной нелинейности конвективных членов. Использование глобальных базисных функций определяет высокую точность данного метода. Данный метод расчета турбулентных течений получил широкое распространение и применяется во многих современных DNS расчетах в плоском канале в широком диапазоне чисел Рейнольдса. Его основной недостаток состоит в том, что он неприменим к областям с относительно сложной формой. Большое число работ посвящено исследованию пристенных течений посредством конечно-разностных и спектрально-элементных методов, свободных от указанного недостатка [1]. Для исследования пристенной турбулентности в плоском канале при больших числах Рейнольдса методом прямого численного моделирования в [1] предложен новый вычислительный алгоритм на основе явной аппроксимации конвективных потоков по схеме КАБАРЕ и решении двух сеточных уравнений эллиптического типа для обеспечения условия несжимаемости. Для решения этих уравнений большой размерности предлагается использовать быстрый прямой метод, допускающий эффективное распараллеливание. В отличие от большинства методов, в том числе и спектральных, в схеме Кабаре отсутствуют какие-либо настроечные параметры. Схема имеет компактный шаблон, что упрощает задачу граничных условий и повышает эффективность распараллеливания при расчете на многопроцессорных вычислительных комплексах. В работе представлены результаты прямого численного моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости в плоском канале посредством беспараметрического метода на основе схемы Кабаре [1].

Целью работы является демонстрация возможности его применения в качестве прямого численного моделирования течения возле гладких стенок. Приведены результаты прямого численного моделирования пристенной турбулентности в плоском канале на сетках от 4×10^6 до 34×10^6 ячеек для чисел Рейнольдса 5600, 13750, 21950. Полученные характеристики турбулентного течения сравниваются с данными расчета по псевдоспектральному методу Кима, Мойна и Мозера (1999) [2].

I Расчетная область и разрешение сетки

Геометрия области и система координат показаны на рисунке 1. Полностью развитый турбулентный поток в плоском канале однороден в продольном и поперечном направлениях. Вдоль этих направлений используются периодические граничные условия. Использование периодических граничных условий может быть оправданно, если соответствующая длина расчетной области (период) выбрана так, чтобы корректно описывать динамику крупных вихрей. Выбор расчетной области делается исходя из изучения данных двухточечной корреляции. Для чисел Рейнольдса 13750, 21950 размеры области взяты $2\pi\delta$ в продольном направлении и $\pi\delta$ в поперечном, где δ – полувысота канала. Для $Re_m = 5600$ размеры области в периодических направлениях увеличены вдвое. Используется неравномерная по y сетка со сгущением возле границы. Сеточное разрешение пристенной области определяется из спектральных характеристик потока. Расчеты проводились на сетках с подробным разрешением пристенной области. На эту область ($y^+ \leq 50$) приходится около половины ячеек (суммарно для обеих границ). Наибольшая точность вычисления напряжения трения на границе достигается при размерах граничной ячейки $\Delta y^+ = 0.1 - 0.15$. Размеры представлены в пристенных единицах $y^+ = u_\tau y / \nu$, u_τ – динамическая скорость, ν – кинематическая вязкость.

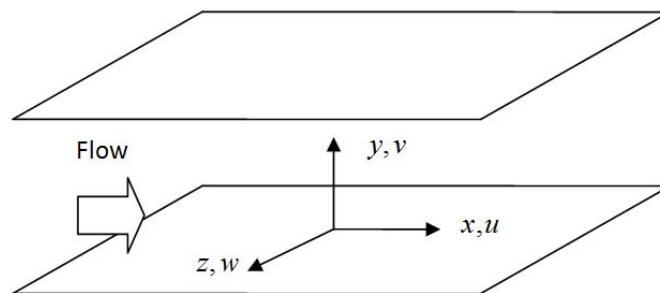


Рис. 1. Координатная система в канале.

II Статистика турбулентного течения

Расчет стартует с ламинарного Пуазелевского профиля во всей области. На первом шаге по времени вносятся небольшие возмущения скорости распределенные по нормальному закону. Дальнейшее развитие потока приводит к срыву в вихревое течение. Вначале расчет ведется на равномерной сетке для ускорения перехода из ламинарного течения в турбулентное. Затем поле скорости интерполируется на сгущающуюся расчетную сетку. Осреднение статистических характеристик турбулентного потока по времени начинается при достижении статистически устойчивого состояния. Это состояние определяется по линейному профилю общего напряжения трения $\tau = -\overline{u'v'} + \partial\bar{u}/\partial y$ и выходу суммарной кинетической энергии на квазипериодический уровень [3]. На предварительных расчетах средний профиль напряжения трения определяется на различных временных интервалах для оптимальной оценки интервала осреднения характеристик течения. Под верхним подчеркиванием подразумевается осреднение по времени t и по двум периодическим направлениям x и z , штрих обозначает флуктуацию соответствующей величины. На рис. 2 и 3 изображены средний профиль скорости и среднеквадратичные флуктуации для числа Рейнольдса 21900.

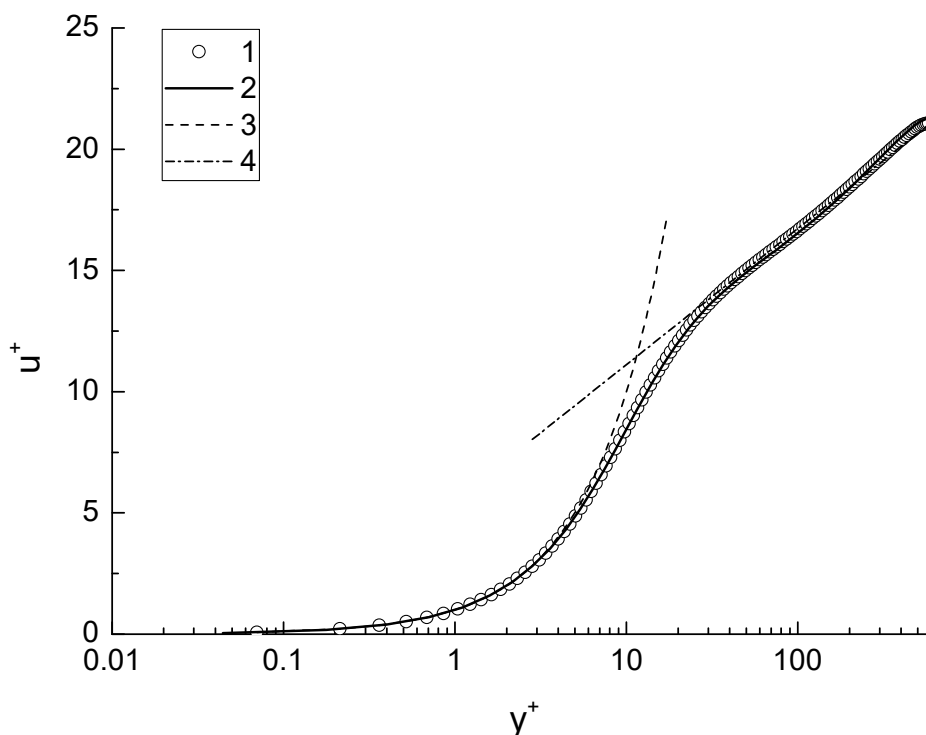


Рис. 2. Профиль продольной средней скорости при $Re_m = 21900$; 1) полученный в работе [1]; 2) данные DNS расчета Мозера (1999) [2] (псевдоспектральный метод); 3) $u^+ = y^+$; 4) $u^+ = 0.41^{-1} \ln y^+ + 5.5$.

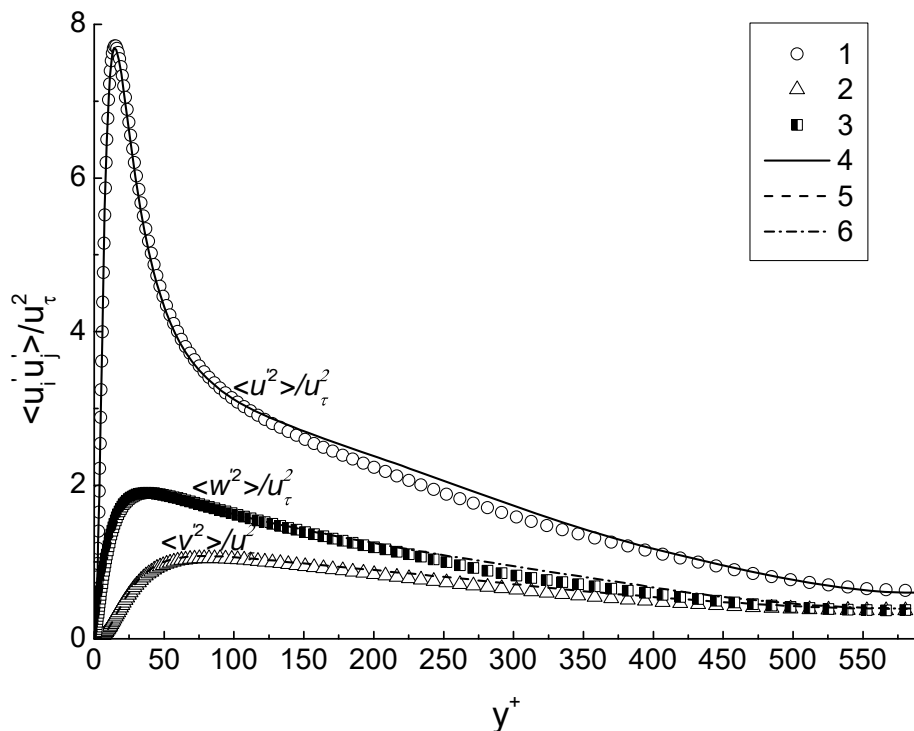


Рис. 3. Среднеквадратичные флуктуации скорости при $Re_m = 21900$; 1) u^2/u_τ^2 ; 2) v^2/u_τ^2 ; 3) w^2/w_τ^2 ; 4),5),6) — u^2/u_τ^2 , v^2/u_τ^2 , w^2/w_τ^2 в работе Мозера (1999) [2] (псевдоспектральный метод).

Заключение

В результате прямого численного моделирования по схеме КАБАРЕ, получены осредненные характеристики турбулентного течения в плоском канале. Результаты показали хорошее совпадение с расчетами по псевдоспектральному методу Кима, Моина и Мозера [2] во всем исследуемом диапазоне. Для достижения заданной точности в определении коэффициента сопротивления, количество узлов сетки в схеме КАБАРЕ по каждому пространственному направлению должно быть примерно в 2 раза больше, чем в псевдоспектральном методе [2]. Данные выводы по размерам сетки подтверждают результаты других расчетных групп [4, 5]. Более грубое разрешение внешней части потока слабо сказывается на значении коэффициента сопротивления, а также на распределение статистических характеристик потока в пристенной области. Оптимальная точность вычисления напряжения трения на границе достигается при размерах граничной ячейки $\Delta y^+ = 0.1 - 0.15$. Псевдоспектральный метод прямого численного моделирования турбулентных течений [2] является, в настоящее время, по-видимому, наиболее экономичным, однако это его преимущество может быть реализовано только в относительно простых областях. Для областей сложной формы исполь-

зуются разностные схемы повышенного порядка аппроксимации [4, 6]. Результаты данной работы показывают, что схема КАБАРЕ, имеющая только второй порядок точности, как по времени, так и по пространству, позволяет уверенно воспроизводить результаты, получаемые с использованием псевдоспектрального метода. Ее обобщение на неортогональные расчетные сетки подробно описано в монографии [7].

Литература

1. *Асфандияров Д. Г., Головизнин В. М.* Беспараметрический метод расчета турбулентного течения в плоском канале в широком диапазоне чисел Рейнольдса // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2015, т. 55, № 9, с. 1545-1558.
2. *Moser R. D., Kim J., Mansour N. N.* Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau = 590$ // Phys. Fluids. 1999. Vol. 10, № 4. P. 943-945.
3. *Kim J., Moin P., Moser R. D.* Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number // J. Fluid. Mech. 1987. Vol. 177, P. 133-166.
4. *Abe H., Kawamura H., Matsuo Y.* Direct numerical simulation of fully developed turbulent channel flow with respect to the Reynolds number dependence // J.Fluid Eng. 2001. Vol. 123, P. 382-393.
5. *Tanashi M., Kangand S.-J., Miyamoto T., Shiokawa S., Miyauchi T.* Scaling law of fine scale eddies in turbulent channel flows up to $Re_\tau = 800$ // Int.J. of Heat and Fluid Flow. 2004. Vol. 25, P. 331-340.
6. *Keyes D., Ecer A., Satofuka N., Fox P., Periaux J.* Parallel computational fluid dynamics: towards teraflops, optimization and novel formulations. Netherlands: North Holland, 2000.
7. *Головизнин В.М., Зайцев М.А., Карабасов С.А., Короткин И.А.* Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов. Издательство Московского университета, 2013 г., 463 стр.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВАРИАЦИОННЫХ НЕРАВЕНСТВ ТЕОРИИ МЯГКИХ СЕТЧАТЫХ ОБОЛОЧЕК¹

Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Калачева Н.В.,
Тагиров Р.Р.

Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Казань

Введение

Работа посвящена численному исследованию вариационных неравенств теории мягких сетчатых оболочек. Приведены обобщенные постановки задач в виде вариационных и квазивариационных неравенств в гильбертовых и банаховых соболевских пространствах. Исследована корректность постановок. Для решения указанных задач предложены приближенные методы. Исследована сходимость методов. Проведены численные эксперименты для модельных задач и анализ этих результаты.

I Постановка задач

Рассматриваются задачи об определении положения равновесия мягких (не воспринимающих сжимающих усилий) сетчатых оболочек [1-7], закрепленных по краям, находящихся под воздействием массовой и поверхностной нагрузки, для плоского (бесконечно длинная цилиндрическая оболочка) и пространственного (осесимметричная оболочка) случаев. Деформации и перемещения оболочек допускаются конечными. В плоском случае допускается также, что оболочка может быть ограничена в перемещении препятствием, материал которого считается абсолютно твердым, а его поверхность – абсолютно гладкой, т.е. препятствие при воздействии на него не деформируется и порождает усилия только в направлении внешней нормали к своей поверхности. Предполагается, что поверхность препятствия описывается достаточно гладкой (не обязательно выпуклой) функцией.

В плоском случае, исходя из уравнений равновесия, записанных в декартовой системе координат, сформулирована поточечная задача. Затем на основе принципа виртуальных перемещений получена вариационная формулировка. Установлена эквивалентность поточечной и вариационных задач. При условии, что функция, определяющая зависимость модуля силы натяжения в оболочке от ее деформации, имеет степенной рост, поставлена обобщенная задача в виде квазивариационного [8] неравенства.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 15-01-05686, 15-38-21099)

Пространственная осесимметричная задача также при условии, что функция, определяющая зависимость модуля силы натяжения в оболочке от ее деформации, имеет степенной рост, сформулирована математически в виде вариационного неравенства с псевдомонотонным [9] оператором. Ограничения в данной задаче возникают из-за естественного условия недопущения самопересечения оболочки. Сформулированы условия на функции, задающие физические соотношения в оболочке, обеспечивающие разрешимость задач. Исследованы свойства решений задач [3-5].

II Итерационные методы

Для решения квазивариационного неравенства с псевдомонотонным, коэрцитивным [10], потенциальным оператором, удовлетворяющим условию типа ограниченной липшиц-непрерывности [11], предлагается итерационный процесс, каждый шаг которого состоит в решении вариационного неравенства с оператором двойственности [9], обладающего лучшими свойствами по сравнению с исходным псевдомонотонным оператором. Установлено, что итерационная последовательность ограничена, и все ее слабо предельные точки являются решениями квазивариационного неравенства [12].

Затем рассматривается смешанное вариационное неравенство (вариационное неравенство второго рода) на выпуклом замкнутом множестве с псевдомонотонным, коэрцитивным, потенциальным оператором, удовлетворяющим условию типа ограниченной липшиц-непрерывности, и собственным, выпуклым, полунепрерывным снизу, вообще говоря, недифференцируемым функционалом. Для решения вариационного неравенства предложен метод итеративной регуляризации [13], позволяющий рассматриваемую задачу к вариационному неравенству второго рода с оператором двойственности вместо исходного псевдомонотонного оператора и регуляризованным функционалом, решение которого можно проводить известными методами. Так же как и выше, доказано, что итерационная последовательность ограничена, и все ее слабо предельные точки являются решениями исходного вариационного неравенства.

В случае гильбертова пространства, когда оператор вместо условия типа ограниченной липшиц-непрерывности и псевдомонотонности удовлетворяет условию обратной сильной монотонности [14] (или ко-коэрцитивности [15]), доказана сходимость всей итерационной последовательности. Отметим, что данный метод итеративной регуляризации особенно привлекателен в случае, когда регуляризованный функционал является дифференцируемым. В этом случае каждый шаг итерационного метода сводится к решению нелинейного уравнения с оператором двойственности.

Для решения вариационного неравенства можно рассматривать итерационный метод без регуляризации функционала. При этом при исследо-

вании сходимости метода можно отказаться от условия потенциальности оператора. Исследование сходимости удалось провести благодаря тому, что оператор перехода этого метода был выписан в явном виде. Этот оператор перехода является проксимальным отображением [10]. Установлено, что множество неподвижных точек оператора перехода совпадает с множеством решений вариационного неравенства. Доказано, что оператор перехода является нестягивающим. Более того, установлено неравенство, более сильное, чем неравенство нестягиваемости, что и позволило доказать его асимптотическую регулярность [16], а также слабую сходимость итерационной последовательности. Если оператор, входящий в вариационное неравенство, удовлетворяет более жестким условиям, чем условие обратной сильной монотонности, а именно, является сильно монотонным и липшиц-непрерывным, доказана сильная сходимость итерационного метода и получена оценка его скорости сходимости [17].

Рассматриваются особенности применения предложенных итерационных методов решения вариационных неравенств к теории мягких сетчатых оболочек. Указанные выше методы были реализованы численно. В среде Matlab был разработан комплекс программ. Для модельных задач были проведены численные эксперименты. Результаты экспериментов соответствуют физической картине процессов. Проведенные эксперименты подтвердили полученные теоретические результаты.

Литература

1. *Гимадиев Р.Ш.* Динамика мягких оболочек парашютного типа. Казань: Казанский государственный энергетический университет, 2006. 208 с.
2. *Ридель В.В., Гулин Б.В.* Динамика мягких оболочек. М.: Наука, 1990. 206 с.
3. *Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Задворнов О.А.* Обобщенная постановка задачи о равновесии мягкой биологической оболочки // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. 2013. Т. 18, № 5-2. С. 2447–2449.
4. *Бадриев И.Б., Задворнов О.А.* Исследование разрешимости осесимметричной задачи об определении положения равновесия мягкой оболочки вращения // Известия высших учебных заведений. Математика. 2005. № 1. С. 25–30.
5. *Абдюшева Г.Р., Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Задворнов О.А., Тагиров Р.Р.* Математическое моделирование задачи о равновесии мягкой биологической оболочки. i. обобщенная постановка // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. 2012. Т. 154, № 4. С. 57–73.

6. *Бадриев И.Б.* Решение вариационных задач нелинейных процессов механики сплошной среды // В книге: Теория управления и математическое моделирование. Тезисы докладов Всероссийской конференции с международным участием, посвященной памяти профессора Н.В. Азбелева и профессора Е.Л. Тонкова. Удмуртский государственный университет. Ижевск, 2015. С. 234–235.
7. *Бадриев И.Б., Бандеров В.В.* Численное моделирование деформирования биокomпозитов // В книге: Материалы XXI Международного симпозиума "Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред" имени А.Г. Горшкова. Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет). Москва, 2015. С. 7–9.
8. *Байокки К., Капелло А.* Вариационные и квазивариационные неравенства. Приложения к задачам со свободной границей. М.: Наука, 1988. 448 с.
9. *Лионс Ж.-Л.* Некоторые методы решения нелинейных краевых задач. М.: Мир, 1972. 588 с.
10. *Экланд И., Темам Р.* Выпуклый анализ и вариационные проблемы. М.: Мир, 1979. 399 с.
11. *Гаевский Х., Греггер К., Захариас К.* Нелинейные операторные уравнения и операторные дифференциальные уравнения. М.: Мир, 1978. 336 с.
12. *Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Задворнов О.А.* О приближенных методах решения квазивариационных неравенств теории мягких сетчатых оболочек // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. 2008. Т. 150, № 3. С. 104–116.
13. *Badriev I.B., Zadvornov O.A., Ismagilov L.N.* On iterative regularization methods for variational inequalities of the second kind with pseudomonotone operators // Computational Methods in Applied Mathematics. 2003. Т. 3. № 2. С. 223.
14. *Гольштейн Е.Г., Третьяков Н.В.* Модифицированные функции Лагранжа. М.: Наука, 1989. 400 с.
15. *Tzeng P.* Futher Applications of a Splitting Algorithm to Decomposition in Variational Inequalities and Convex Programming // Mathematical Programming. 1990. V. 48. P. 249–264.
16. *Opial Z.* Weak convergence of the sequence of successive approximations for nonexpansive mappings // Bulletin of the American Mathematical Society. 1967. V. 73, № 4. P. 591–597.
17. *Бадриев И.Б., Задворнов О.А.* Итерационные методы решения вариационных неравенств в гильбертовых пространствах. Казань: Казанский государственный университет, 2007. 152 с.

О ПРИБЛИЖЕННОМ РЕШЕНИИ ФИЗИЧЕСКИ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ О НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ ТРЕХСЛОЙНОЙ ПЛАСТИНЫ С ТРАНСВЕРСАЛЬНО-МЯГКИМ ЗАПОЛНИТЕЛЕМ¹

Бадриев И.Б.* , Гарипова Г.З.** , Макаров М.В.** ,
Паймушин В.Н.**

* Казанский (Приволжский) Федеральный университет,
Казань

* Казанский (Приволжский) Федеральный университет,
Казань, Казанский национальный исследовательский
технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ, Казань

Введение

Настоящая работа посвящена построению и исследованию конечномерных аппроксимаций геометрически линейной задачи об изгибе трехслойной пластины с трансверсально-мягким наполнителем для физически нелинейного случая. Как правило, конечномерные аппроксимации задач, включающих в себя дифференциальные уравнения, лежат в основе построения приближенных методов решения таких задач.

I Постановка задачи

Разработка, внедрение и постоянное расширение сферы использования композитных материалов стимулируют развитие исследований по методам расчета конструкций из них. В последние десятилетия происходит рост производства искусственных композитов на основе высокопрочных волокон и различных полимерных матриц. Согласно прогнозам такая тенденция сохранится и далее. Интерес к композитным материалам вызван высоким уровнем их конструктивных свойств: прочности, жесткости и т. п. Для того, чтобы облегчить конструкцию, не уменьшив при этом ее несущую способность, используются тонкостенные элементы в виде оболочек. Такие оболочки широко распространены в инженерных сооружениях, машиностроении, судостроении, в авиационной промышленности и ракетной технике [1–5]. Настоящая

¹ Публикация осуществлена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Республики Татарстан в рамках научных проектов № 15-41-02569, 15-38-21099.

работа посвящена исследованию математической модели деформирования трехслойной пластины с трансверсально-мягким наполнителем для физически нелинейного случая, а также методам численной реализации. Приведены результаты расчетов для модельных задач. Отметим, что физически нелинейные задачи об определении положения равновесия мягких сетчатых оболочек и методы их решения изучались в [6-8]. Геометрически нелинейные задачи рассматривались в [9, 10].

Рассматривается одномерная по пространственным координатам геометрически линейная задача об определении напряженно-деформированного состояния трехслойной пластины, состоящей из двух внешних несущих слоев и расположенного между ними трансверсально-мягкого наполнителя, связанного с несущими слоями при помощи клеевого соединения. Для постановки задачи используются соотношения [11, 12], основанные на применении к несущим слоям модели Кирхгофа-Лява, к наполнителю – уравнений теории упругости, упрощенных в рамках принятой модели трансверсально-мягкого слоя. Такие упрощенные уравнения удается [11, 12] проинтегрировать по толщине с удовлетворением кинематическим условиям сопряжения слоев по прогибам, введя в рассмотрение лишь одну дополнительную неизвестную функцию q , представляющую собой поперечные касательные напряжения, постоянные по толщине наполнителя. Считая, что зависимость между касательным напряжением q и деформацией поперечного сдвига соответствует идеальной упруго-пластической модели, задача рассматривается при ограничении $|q| \leq q^*$, где q^* – заданное предельное значение напряжения в наполнителе (в клеевых прослойках). Данное ограничение означает недопущение разрушения конструкции и соответствует взаимному проскальзыванию внешних слоев и наполнителя при $|q| = q^*$, то есть учету физической нелинейности в наполнителе по идеальной упруго-пластической модели.

II Исследование обобщенной постановки

В соответствии с [11-14] введем функционал $L = P - A - A_q$, где $P(U, q)$ – потенциальная энергия деформации, $A(U, q)$ – работа заданных внешних сил и моментов, $A_q(U, q)$ – работа неизвестных контактных касательных напряжений q на соответствующих перемещениях $U = (w^1, w^2, u^1, u^2)$, w^k и u^k , $k = 1, 2$, – прогибы и осевые перемещения точек срединной поверхности k -го несущего слоя соответственно. Решение задачи о равновесии трехслойной пластины есть стационарные точки функционала L .

Для построения обобщенной постановки задачи вводятся соболевские пространства V_j , $j = 1, 2$, финитных на $[0, a]$, где a – длина пластины, функций, имеющих j обобщенных производных, суммируемых с квадратом. Неизвестные функции U и q ищутся в пространствах $W = V_2 \times V_2 \times V_1 \times V_1$ и $V = V_1$. Вводится также множество $K \subset V$, соответствующее ограничениям

на касательные напряжения q в заполнителе. Функционал L представляется в виде

$$L(U, q) = \Phi_0(U) + \Phi_1(U, q) - \Phi_2(q), \quad (1)$$

Φ_0 и Φ_2 – строго выпуклые и непрерывные на W и V функционалы, Φ_1 – билинейный и ограниченный на $W \times V$ функционал. Обобщенная постановка рассматриваемой задачи состоит в нахождении седловой точки на функционала L . Доказана [15, 16] теорема существования и единственности обобщенной задачи. Исследование корректности проведено на основе общих результатов существования седловых точек [17]. С этой целью установлен ряд свойств (выпуклость, непрерывность, коэрцитивность [17]) функционалов, входящих в (1).

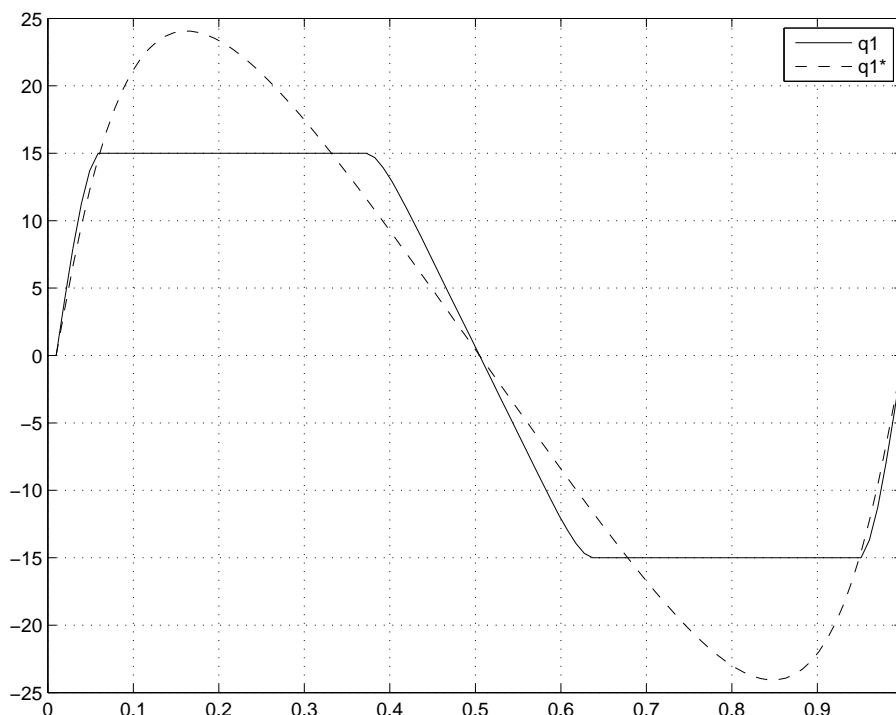


Рис. 1. Касательные напряжения в заполнителе

III Итерационный метод и численные эксперименты

Для решения задачи в [15] был предложен итерационный процесс и исследована его сходимость. Каждый шаг метода сводится к решению линейной задачи теории упругости и нахождению проекции на выпуклое, замкнутое множество. Предложенный метод был реализован численно. Был разработан комплекс программ в среде Matlab, проведены расчеты для модельных задач. В качестве иллюстрации на рис. 1 приведены графики изменения функций q по длине пластины с неподвижно защемленными в торцевых сечениях внешними слоями. Считается, что пластина подвержена действию

равномерно распределенной поперечной нагрузки, приложенной к первому слою. Из приведенных результатов штриховая линия соответствует идеальной упругой модели (при отсутствии ограничений на касательные напряжения q в заполнителе), а сплошная – идеальной упруго-пластической модели заполнителя. Полученные результаты соответствуют физике процесса и свидетельствуют об эффективности предложенного метода.

Литература

1. *Иванов В.А., Паймушин В.Н., Полякова Т.В.* Уточненная теория устойчивости трехслойных конструкций (линеаризованные уравнения нейтрального равновесия и простейшие одномерные задачи) // Известия высших учебных заведений. Математика. 1995. № 3. С. 15–24.
2. *Иванов В.А., Паймушин В.Н.* Уточнение уравнений динамики многослойных оболочек с трансверсально-мягким заполнителем // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 1995. № 3. С. 142–152.
3. *Паймушин В.Н., Шалашилин В.И.* О геометрически нелинейных уравнениях теории безмоментных оболочек с приложениями к задачам о неклассических формах потери устойчивости цилиндра // Прикладная математика и механика. 2006. Т. 70. № 1. С. 100–110.
4. *Paimushin V.N., Polyakova N.V.* The consistent equations of the theory of plane curvilinear rods for finite displacements and linearized problems of stability // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. 2009. Т. 73, № 2. С. 220–236.
5. *Бадриев И.Б., Макаров М.В., Паймушин В.Н.* О взаимодействии композитной пластины, имеющей вибропоглощающее покрытие, с падающей звуковой волной // Известия высших учебных заведений. Математика. 2015. № 3. С. 75–82.
6. *Бадриев И.Б., Задворнов О.А.* Исследование разрешимости стационарных задач для сетчатых оболочек // Известия высших учебных заведений. Математика. 1992. № 11. С. 3–7.
7. *Бадриев И.Б., Задворнов О.А.* О сходимости итерационного метода двойственного типа решения смешанных вариационных неравенств // Дифференциальные уравнения. 2006. Т. 42, № 8. С. 1115–1122.
8. *Бадриев И.Б., Задворнов О.А.* Исследование сходимости итерационного процесса для уравнений с вырождающимися операторами // Дифференциальные уравнения. 1996. Т. 32, № 7. С. 898–901.
9. *Бадриев И.Б., Желтухин В.С., Макаров М.В., Паймушин В.Н.* Численное решение задачи о равновесии трехслойной пластины с трансверсально-мягким заполнителем в геометрически нелинейной постановке // Вестник Ка-занского технологического университета. 2014. Т.17, № 23. С. 393–396.

10. *Badriev I.B., Banderov V.V., Makarov M.V., Paimushin V.N.* Determination of stress-strain state of geometrically nonlinear sandwich plate // Applied Mathematical Sciences. 2015. V. 9, № 78. P. 3887–3895.
11. *Паймушин В.Н.* Нелинейная теория среднего изгиба трехслойных оболочек с дефектами в виде участков непрочлея // Прикладная механика. 1987. Т. 23, № 11. С. 32–38.
12. *Паймушин В.Н., Бобров С.Н.* Уточненная геометрически нелинейная теория трехслойных оболочек с трансверсально-мягким наполнителем средней толщины для исследования смешанных форм потери устойчивости // Механика композитных материалов. 2000. Т. 36, № 1. С. 95–108.
13. *Паймушин В.Н.* К вариационным методам решения нелинейных пространственных задач сопряжения деформируемых тел // Доклады Академии наук. 1983. Т. 273, № 5. С. 1083–1083.
14. *Паймушин В.Н., Шалашилин В.И.* Уточненные уравнения среднего изгиба трехслойных оболочек и сдвиговые формы потери устойчивости // Доклады Академии наук. 2003. Т. 392, № 2. С. 195–200.
15. *Бадриев И.Б., Гарипова Г.З., Макаров М.В., Паймушин В.Н., Хабибуллин Р.Ф.* О решении физически нелинейных задач о равновесии трехслойных пластин с трансверсально-мягким наполнителем // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. 2015. Т. 157, № 1. С. 15–24.
16. *Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Гарипова Г.З., Макаров М.В.* О разрешимости нелинейной задачи о равновесии трехслойной пластины // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. 2015. Т. 20, № 5. С. 1034–1036.
17. *Эккланд И., Темам Р.* Выпуклый анализ и вариационные проблемы. М.: Мир, 1979. 399 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ ФИЗИЧЕСКИ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ОБ ИЗГИБЕ ТРЕХСЛОЙНОЙ ПЛАСТИНЫ С ТРАНСВЕРСАЛЬНО-МЯГКИМ ЗАПОЛНИТЕЛЕМ¹

Бадриев И.Б., Гарипова Г.З., Мартынова О.П.,
Семенычева М.А.

Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Казань

Введение

Настоящая работа посвящена построению и исследованию конечномерных аппроксимаций геометрически линейной задачи об изгибе трехслойной пластины с трансверсально-мягким наполнителем для физически нелинейного случая. Конечномерные аппроксимации построены с помощью метода сумматорных тождеств. Как правило, конечномерные аппроксимации задач, включающих в себя дифференциальные уравнения, лежат в основе построения приближенных методов решения таких задач.

I Постановка задачи

Создание изделий авиационной и космической техники, судостроения, строительства в настоящее время неразрывно связано с применением новых конструкционных материалов и элементов конструкций из них, обладающих высокими прочностными и жесткостными характеристиками. Таким требованиям отвечают слоистые элементы конструкций, в частности, трехслойные. Эти конструкции состоят из материалов с различными физико-механическими свойствами – несущие слои обычно изготавливаются из материалов с высокими механическими характеристиками и предназначены для восприятия основной нагрузки; связующий слой, служащий для образования монолитной конструкции, обеспечивает перераспределение усилий между несущими слоями, выполняет функции защиты от тепловых, химических, радиационных и других нежелательных воздействий. Применение в качестве наполнителя материалов с низкими массовыми характеристиками позволяет при сравнительно небольшом увеличении веса конструкции существенно повысить изгибную жесткость. Тем самым трехслойные конструкции нашли широкое применение в качестве несущих и управляющих

¹ Публикация осуществлена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Республики Татарстан в рамках научных проектов № 15-41-02569, 15-01-05686.

поверхностей летательных аппаратов, обтекателей, теплозащитных и силовых экранов, разного рода панелей и других конструктивных элементов [1–5].

Для описания напряженно-деформированного состояния в несущих слоях используются уравнения модели Кирхгофа-Лява, в заполнителе – уравнения теории упругости, упрощенные в рамках принятой модели трансверсально-мягкого слоя и проинтегрированных по толщине с удовлетворением условий сопряжения слоев по перемещениям. Кроме того, задача рассматривается при ограничении, соответствующем идеальной упруго-пластической модели для заполнителя. Обобщенная постановка задачи формулируется в виде задачи об отыскании седловой точки некоторого функционала. Исследуются свойства этого функционала – слабая полунепрерывность снизу и коэрцитивность относительно основных переменных (перемещений) и слабая полунепрерывность сверху относительно множителя Лагранжа (касательные напряжения в заполнителе). На основе этих свойств доказывается теорема существования решения, исходя из общих результатов о существовании седловых точек (см., например, [6]). Обобщенная постановка задачи в виде седловой задачи, а также метод для ее решения рассмотрены в [7, 8].

II Разностная схема

Построение конечномерных аппроксимаций проводится на основе метода конечных разностей (метода сумматорных тождеств [9]). При исследовании свойств разностных аппроксимаций используются свойства функционалов, входящих в седловую задачу.

Доказана теорема существования и единственности решения построенной разностной задачи. Исследование сходимости разностных схем проводится на основе априорных оценок с последующим предельным переходом с применением теории монотонных операторов и выпуклого анализа [10, 11].

Отметим, что численную реализацию разностных схем можно проводить с помощью методов, предложенных в [7, 12-14].

Литература

1. Иванов В.А., Паймушин В.Н., Полякова Т.В. Уточненная теория устойчивости трехслойных конструкций (линеаризованные уравнения нейтрального равновесия и простейшие одномерные задачи) // Известия высших учебных заведений. Математика. 1995. № 3. С. 15–24.
2. Иванов В.А., Паймушин В.Н. Уточнение уравнений динамики многослойных оболочек с трансверсально-мягким заполнителем // Известия

- Российской академии наук. Механика твердого тела. 1995. № 3. С. 142–152.
3. *Паймушин В.Н., Шалашилин В.И.* О геометрически нелинейных уравнениях теории безмоментных оболочек с приложениями к задачам о неклассических формах потери устойчивости цилиндра // Прикладная математика и механика. 2006. Т. 70. № 1. С. 100–110.
 4. *Paimushin V.N., Polyakova N.V.* The consistent equations of the theory of plane curvilinear rods for finite displacements and linearized problems of stability // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. 2009. Т. 73, № 2. С. 220–236.
 5. *Бадриев И.Б., Макаров М.В., Паймушин В.Н.* О взаимодействии композитной пластины, имеющей вибропоглощающее покрытие, с падающей звуковой волной // Известия высших учебных заведений. Математика. 2015. № 3. С. 75–82.
 6. *Экланд И., Темам Р.* Выпуклый анализ и вариационные проблемы. М.: Мир, 1979. 399 с.
 7. *Бадриев И.Б., Гарипова Г.З., Макаров М.В., Паймушин В.Н., Хабидуллин Р.Ф.* О решении физически нелинейных задач о равновесии трехслойных пластин с трансверсально-мягким наполнителем // Ученые записки Казанского университета. Серия: Физико-математические науки. 2015. Т. 157, № 1. С. 15–24.
 8. *Бадриев И.Б., Бандеров В.В., Гарипова Г.З., Макаров М.В.* О разрешимости нелинейной задачи о равновесии трехслойной пластины // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. 2015. Т. 20, № 5. С. 1034–1036.
 9. *Карчевский М.М., Ляшко А.Д.* Разностные схемы для нелинейных задач математической физики. Казань: Изд-во Казанского университета, 1976. 156 с.
 10. *Лионс Ж.-Л.* Некоторые методы решения нелинейных краевых задач. М.: Мир, 1972. 588 с.
 11. *Бадриев И.Б., Задворнов О.А.* Итерационные методы решения вариационных неравенств в гильбертовых пространствах. Казань: Казан. гос. ун-т, 2007. 152 с.
 12. *Бадриев И.Б., Карчевский М.М.* Применение метода двойственности к решению нелинейных задач теории фильтрации с предельным градиентом // Дифференциальные уравнения. 1982. Т. 18, № 7. С. 1133–1144.
 13. *Бадриев И.Б., Задворнов О.А.* О сходимости итерационного метода двойственного типа решения смешанных вариационных неравенств // Дифференциальные уравнения. 2006. Т. 42, № 8. С. 1115–1122.
 14. *Badriev I.B., Zadvornov O.A., Lyashko A.D.* A study of variable step iterative methods for variational inequalities of the second kind // Differential Equations. 2004. Т. 40, № 7. С. 971–983.

НЕКОТОРЫЕ КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РЕЗУЛЬТАТОВ ВЕРИФИКАЦИИ МОДЕЛИ СКОРОСТИ ВЕТРА В УСЛОВИЯХ СЛОЖНОЙ ТРЕХМЕРНОЙ ГЕОМЕТРИИ ГОРОДСКОЙ ЗАСТРОЙКИ ИЛИ ПРОМЫШЛЕННОГО ОБЪЕКТА. Благодатских Д.В., Дзама Д.В., Сороковикова О.С., Устинов Г.А.

*Институт проблем безопасного развития атомной
энергетики, Москва*

Реальные атмосферные процессы и их характеристики – поля ветра, распространение примесей в атмосфере зависят от многих факторов. Поэтому результаты моделирования этих процессов содержат много неопределенностей. Как правило, для сравнения результатов использования математических моделей с реальными измеренными характеристиками поля ветра используют простое наложение векторов модельного и измеренного ветра (графическое представление) и некоторые простейшие числовые характеристики: средняя абсолютная ошибка при моделировании силы ветра и направления [1]. Упомянутые числовые критерии качества моделирования используются обычно в мезомасштабных моделях прогноза погоды при сопоставлении модельных результатов о силе и направлении ветра с данными измерений в отдельных точках у поверхности земли (метеорологические станции) или вертикальных профилей (в местах расположения аэрологических станций).

В последние годы интенсивно развиваются так называемые микромасштабные [2] метеорологические модели, предназначенные для моделирования аэротермодинамики процессов внутри городской застройки или на территории промышленного объекта. Для верификации этих моделей создается специальная база данных [2]. Данных измерений для каждого эксперимента вполне достаточно для того, чтобы в некоторых двумерных сечениях можно представить полную картину ветрового поля, а не в отдельных точках у поверхности земли или вертикальный профиль ветра так же в отдельных точках. По мере создания такой базы данных стал разрабатываться инструментарий для оценки качества моделирования.

Работа посвящена разработке количественных статистических характеристик качества моделирования для таких микромасштабных метеорологических моделей. Кроме того, изучается чувствительность результатов моделирования к неопределенности входных данных - параметров набегающего потока (вертикальный профиль кинетической энергии турбулентности и скорости диссипации).

В настоящее время используются на практике три статистические характеристики соответствия результатов моделирования и данных измерений скорости ветра в условиях сложной трехмерной геометрии застройки. Характеристика FAC2 (factor of two of observation), представляет долю тех значений, для которых выполняется соотношение

$$FAC2 = \frac{N}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n N_i \text{ для } N_i = \begin{cases} 1, & 0.5 \leq \frac{U_{calc}}{U_{obs}} \leq 2 \\ 1, & |U_{obs}| \leq W \text{ и } |U_{calc}| \leq W \\ 0 & \end{cases}$$

где U_{calc} , U_{obs} – измеренные и рассчитанные компоненты скорости, для которых имеются данные измерений, i – номер точки измерения. Характеристика HR (hit rate)

$$q = \frac{N}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n N_i \text{ где } N_i = \begin{cases} 1, & \text{при } \left| \frac{U_{calc} - U_{obs}}{U_{obs}} \right| \leq D \text{ или } \left| |U_{calc}| - |U_{obs}| \right| \leq W \\ 0 & \end{cases}$$

Значения D и W берутся из [3]. Третья характеристика SAA (Scaled Average Angle differences) [4] используется пока редко, хотя представляется нам очень полезной

$$SAA = \frac{\sum |U_i| |\phi_i|}{\sum |U_i|}$$

где ϕ_i – угол между расчетной и измеренной скоростью и U_i – расчетная скорость в точке i . Применяется, если есть достаточно подробная измерительная сеть, с которой поступает информация о силе и направлении ветра в некоторых сечениях. Характеризует точность моделирования направления ветра с весами, зависящими от скорости ветра. Чем больше скорость ветра, тем больше вклад ошибки моделирования направления ветра в общую количественную оценку ошибки моделирования.

В качестве, дополнительных характеристик качества моделирования предлагаются следующие. Для компонент скорости ветра – коэффициент корреляции Пирсона. Коэффициент корреляции Пирсона P (the Pearson correlation coefficient), определяется как

$$P = \frac{\sum_{i=1}^N (U_{cal_i} - \bar{U}_{cal})(U_{obs_i} - \bar{U}_{obs})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (U_{cal_i} - \bar{U}_{cal})^2 \cdot \sum_{i=1}^N (U_{obs_i} - \bar{U}_{obs})^2}}$$

Значения P находятся в границах от -1 до +1. Идеальный случай $P=1$.

С целью учета смещения рассчитанных значений в терминах пере- или недооценки, многими авторами используются два критерия. Критерий BIAS

оценивает отклонение средних величин рассчитанных значений от измеренных в единицах исследуемой величины (в нашем случае – в единицах компонент силы ветра)

$$BIAS = \bar{C}_{cal} - \bar{C}_{obs} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_{cal_i} - C_{obs_i})$$

Однако, его следует использовать, если отклонение значительно отличается от нуля. Параметр BIAS показывает недооценку или переоценку расчетных значений по отношению к измеренным значениям. Критерий KS (параметр Колмогорова-Смирнова) сравнивает две эмпирические функции распределения, вычисленные для двух выборок, содержащих рассчитанные и измеренные значения. Критерий KS определяется как максимум разности между двумя эмпирическими функциями распределения:

$$KS = \max_i |F_1(U_{cal_i}) - F_2(U_{obs_i})|$$

где $F(U)$ – эмпирическая функция распределения, построенная по нормированной выборке (так называемый вариационный ряд) $U_{1_i}, U_{2_i}, U_{N_i}$, полученной из первоначальной выборки вычитанием среднего значения и делением разности на стандартное отклонение, а затем отсортированной в порядке возрастания. Тогда эмпирическая функция распределения определяется как:

$$F(U) = \frac{K(U)}{N}$$

где $K(U)$ – количество таких U_i , которые удовлетворяют неравенству $U_i < U$, а U – стандартные значения (произвольно заданный ряд).

Критерий KS отличается от остальных рассмотренных критериев тем, что является чисто статистическим и вычисляется из непарных данных. Он показывает насколько хорошо модель отражает распределение измеренных значений, чаще всего концентраций, независимо от места и времени их измерения. Максимальное значение KS не может быть больше 1, наилучшее значение равно нулю.

На рис. 1 показан пример расчета течения вокруг здания прямоугольной формы в одном из сечений. Для данного расчета проведено сравнение с экспериментом на основе ряда статистических критериев, введенных ранее. Результаты сравнения показаны в таб. 1 – 2. В соответствии с [2, 5] модель считается приемлимого качества, если FAC2 превышает 55 %, а hit rate – 66 %.

В качестве входных данных использовался профиль измеренной турбулентной кинетической энергии. Альтернативным подходом является использование профилей k и ε , рассчитанных из одномерной модели для k и ε .

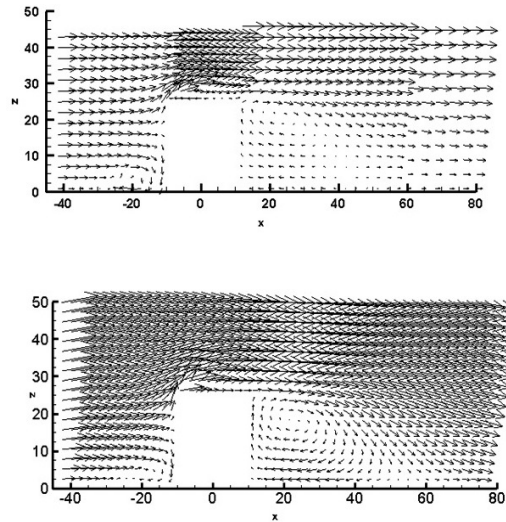


Рис. 1. Скорость в плоскости $y=0$ м. Сверху – экспериментальные данные, снизу – данные расчёта

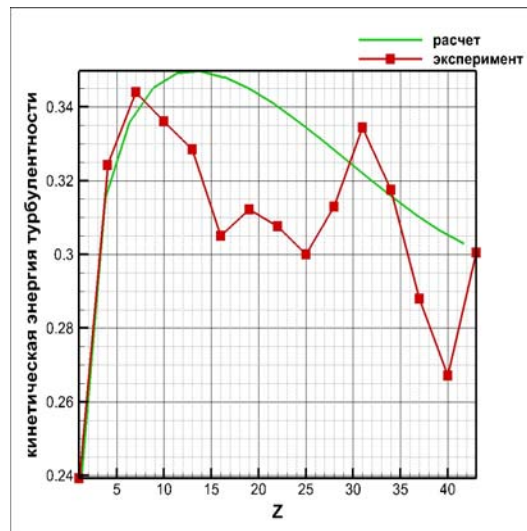


Рис. 2. Экспериментальный и расчетный профили турбулентной кинетической энергии

Уравнения для этой модели представлены ниже

$$\frac{\partial k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z_j} \left[\frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial z_j} \right] + S - \varepsilon$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z_j} \left[\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z_j} \right] + \frac{\varepsilon}{k} C_{\varepsilon 1} S - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k}$$

Система решается явным методом до выхода на стационар. Результаты расчетов с профилями k и ε , полученными из одномерной модели, показали, что расхождение незначительно и не превосходит 1–2 %. Сравнение профилей кинетической энергии, рассчитываемой из одномерной модели и полученной из эксперимента, показано на рис.2.

Таблица 1. Результаты верификации для u -компоненты скорости в сечении $z=7\text{м}$

Критерий	Результат	Эталон
FA-2	87 %	100 %
HR	70 %	100 %
BIAS	-0.47947	
PCC	0.93905	1
SAA	8.17483	0
KS	0.08398	0

Таблица 2. Результаты верификации для v -компоненты скорости в сечении $z=7\text{м}$

Критерий	Результат	Эталон
FA-2	51 %	100 %
HR	21 %	100 %
BIAS	-0.05317	
PCC	0.88797	1
SAA	8.17483	0
KS	0.06065	0

Литература

1. *Rubinshtein K. G., Nabokova E. V., Egorova E. N., Vasil'ev A. A.* Analysis of results of numerical experiments with an atmospheric general circulation model with allowance for peculiarities of the underlying surface in megalopolises . Russian Meteorology and Hydrology, 2009. Vol. 34 , P. 650 – 656.
2. *Schatzmann M., Olesen H. and Franke J.* COST 732 model evaluation case studies: approach and results. University of Hamburg. 2010.
3. *Denise Hertwig, George C. Efthimiou, John G. Bartzis and Bernd Leitl* CFD-RANS model validation of turbulent flow in a semi-idealized urban canopy // Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 2012. Vol. 111. P. 61–72.
4. *Calhoun, R., F. Gouveia, J. Shinn et al.* Flow around a complex building: comparisons between experiments and a Reynolds-averaged Navier-Stokes approach. // J. Appl. Meteor. 2004. Vol. 43. P. 696–710.
5. VDI (2005). Environmental meteorology - Prognostic microscale windfield models - Evaluation for flow around buildings and obstacles. 2005. Beuth Verlag, Berlin

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРОПИЧЕСКОЙ ЦИРКУЛЯЦИИ С ПОМОЩЬЮ МОДЕЛИ ОБЩЕЙ ЦИРКУЛЯЦИИ АТМОСФЕРЫ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ СЛОЖНОСТИ¹

Боровко И.В. *, Крупчатников В.Н. **

* *Институт вычислительной математики и математической геофизики, Новосибирск*

** *СибНИГМИ, Новосибирск*

Введение

Основной циркуляционной структурой в тропиках является ячейка Гадлея (ЯГ). Данные реанализа атмосферы указывают на интенсификацию циркуляции Гадлея во второй половине 20-го столетия [1]. Однако это не обнаруживается ни в данных радиозондирования, ни в большинстве совместных моделей общей циркуляции атмосферы и океана, ни в моделях общей циркуляции атмосферы [2]. Простые физические соображения (например, [3]) показывают, что при глобальном потеплении должно происходить замедление тропической циркуляции. Существует несколько механизмов расширения ячейки Гадлея. В [6] установлено, что ширина ЯГ определяется широтой, на которой режим конвективной неустойчивости сменяется режимом бароклинной неустойчивости. При глобальном потеплении происходит увеличение статической устойчивости и высоты тропопаузы и, соответственно, область бароклинности (шторм-треков) сдвигается к северу. Эти сдвиги могут оказать значительное влияние на региональные энергетические и гидрологические циклы. Влияние изменений температуры на интенсивность ячейки Гадлея и положение ее границы оценено методом сценарного с помощью модели промежуточной сложности "Planet Simulator", разработанной в Метеорологическом институте Гамбургского университета.

I Реакция тропической циркуляции на потепление в тропической стратосфере

При увеличении концентрации CO_2 увеличивается перенос влаги в тропическую стратосферу и, в результате парникового эффекта, увеличивается её температура. Представляет интерес отклик общей циркуляции атмосферы на потепление в тропической стратосфере. Численный эксперимент, в котором была использована модель общей циркуляции атмосферы "Planet

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ(проект №13-05-00480)

Simulator", показал что изменение удельной влажности в стратосфере при удвоении концентрации CO_2 достигает 60%. При этом максимальное увеличение температуры стратосферы составило 3К.

Температура радиационного равновесия в контрольном эксперименте:

$$T_r = T_0(\sigma) + h(\sigma, \varphi),$$

φ – широта в тропосфере, $T_0(\sigma)$ определяется значением на поверхности $T_{gr} = 288\text{K}$ и вертикальным градиентом $\alpha = 6,5 * 10^{-3} (\text{K/м})$, $h(\sigma, \varphi) = \sin(0,5\pi(\sigma - \sigma_T)/(1 - \sigma_T))(\Delta T_1 \sin\varphi + \Delta T_2 \sin^2\varphi)$.

В стратосфере T_r постоянна.

В эксперименте, моделирующем потепление в тропической стратосфере, к температуре радиационного равновесия было прибавлено слагаемое $\Delta T \cos\varphi$, где $\Delta T = 3$.

Для анализа были взяты поля за 20 лет с частотой записей 10 суток.

Удобной характеристикой для оценки интенсивности ячейки Гадлея является функция тока, определяемая следующим образом

$$\Phi(\lambda, \mu, \sigma) = \frac{2\pi a \mu}{g} \int_0^\sigma \overline{p_s v} d\sigma.$$

Возмущение относится к полюсам атмосферной циркуляцией. Градиент температуры уменьшается, что приводит к замедлению циркуляции Гадлея. Струйное течение в стратосфере ослабляется и смещается к полюсам. Усиление полярного вихря наблюдается только в северном полушарии. В результате ослабления тропической циркуляции в стратосферу выносятся меньшее количество водяного пара, что может уменьшить разогрев тропической стратосферы.

II Реакция ячейки Гадлея на изменения температуры тропосферы

Была исследована чувствительность ячейки Гадлея к изменениям температуры тропосферы. Основные черты изменения климата - это увеличение температуры верхней тропосферы в тропиках, и, соответственно, увеличение статической устойчивости, а также уменьшение зонального градиента температуры в приземном слое. Для того, чтобы оценить влияние климатических изменений на циркуляцию тропосферы, была использована спектральная модель общей циркуляции атмосферы. Преимуществом таких моделей является то, что они хорошо описывают крупномасштабные волновые процессы в атмосфере. Поскольку интересно посмотреть сезонные изменения ячейки Гадлея, была построена параметризация температуры радиационного равновесия с учетом сезонного хода. В данном эксперименте были заданы граничные условия, учитывающие орографические неоднородности на поверхности Земли.

В контрольном эксперименте температура радиационного равновесия имела вид:

$$T_R = T_{tr} + (T_s - T_{tr}) \frac{\sigma - \sigma_T}{1 - \sigma_T},$$

$$T_s = \begin{cases} 243 + 60 \cos(\varphi) + 30 \sin(\varphi) \sin(t^*), & \varphi > 0 \\ 228 + 75 \cos(\varphi) + 25 \sin(\varphi) \sin(t^*), & \varphi < 0 \end{cases}, T_{tr} = 210,$$

t^* – фаза вращения Земли вокруг Солнца.

В эксперименте, моделирующем глобальное потепление, максимальное изменение приземной температуры составляло 5^0C , максимальное изменение температуры в верхней тропосфере – 6^0C .

$$T_R = T_{tr} + (T'_s - T_{tr}) \frac{\sigma - \sigma_T}{1 - \sigma_T} + \Delta T,$$

$$T'_s = \begin{cases} 248 + 55 \cos(\varphi) + 30 \sin(\varphi) \sin(t^*), & \varphi > 0 \\ 233 + 70 \cos(\varphi) + 25 \sin(\varphi) \sin(t^*), & \varphi < 0 \end{cases},$$

$$\Delta T = \begin{cases} 6 * (\sigma - \sigma_T) / (\sigma_0 - \sigma_T) \cos(\varphi/2), & |\varphi| \leq \pi/4, \sigma_T \leq \sigma \leq \sigma_0 \\ 6 * (1 - \sigma) / (1 - \sigma_0) \cos(\varphi/2), & |\varphi| \leq \pi/4, \sigma \geq \sigma_0 \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

$\sigma_0 = 0,25$ уровень, на котором происходит максимальное потепление.

Для данного эксперимента динамические поля были посчитаны на 18 лет и взяты с частотой записей 10 дней.

III Результаты моделирования.

Интенсивность переноса в ячейке Гадлея уменьшается при потеплении в нижней тропосфере внетропических широт и верхней тропосфере тропиков.

В работе [4]) для диагностики движения границ ячейки Гадлея было предложено использовать расстояние между нулевыми изолиниями функции тока на высоте 500 мб.

Эксперимент показал смещение границ северной ячейки Гадлея к полюсу приблизительно на 3 градуса. Смещение границ южной ЯГ на графике за июнь-август менее заметно, однако, оно значительно по сравнению с межгодовыми вариациями широты границы ЯГ, которые в южном полушарии составляют около одного градуса. Таким образом, увеличение статической устойчивости в тропических широтах приводит к расширению циркуляции Гадлея. Разница в отклике северной и южной ячеек Гадлея позволяет сделать вывод, что меридиональные термические и орографические неоднородности оказывают сильное влияние на вариации ЯГ. Это показывает необходимость дальнейшего исследования причин различия между данными наблюдения и результатами моделирования.

Данная модель не показывает усиления циркуляции Гадлея при увеличении статической устойчивости в тропиках. Это согласуется с результатами других исследователей, использующих модели "сухой" атмосферы. Однако в моделях, учитывающих влажность атмосферы, при увеличении статической устойчивости происходит интенсификация ячейки Гадлея [5]. Это позволяет сделать вывод, что влажность в условиях глобального потепления играет ключевую роль в динамике ЯГ.

Литература

1. *Mitas C.M., Clement A.* Has the Hadley cell been strengthening in recent decades? // *Geophys. Res. Lett.*, 2005,32, L03809.
2. *Mitas C.M., and Clement A.* Recent behavior of the Hadley cell and tropical thermodynamics in climate models and reanalyses // *Geophys. Res. Lett.*, 2006, 33, L01810
3. *Held I.M., and Soden B.J.* Robust responses of the hydrological cycle to global warming // *J. Climate*, 2006,19, p.5686-5699.
4. *Johanson, C. M., Fu Q.* Hadley Cell Widening: Model Simulations versus Observations. // *J. Climate*, 2009, 22, 2713–2725.
5. *Walker, C. C., and T. Schneider* Eddy influences on Hadley circulations: Simulations with an idealized GCM. // *J. Atmos. Sci.*,2006, 63, 3333–3350.
6. *Held, I. M* The general circulation of the atmosphere. Geophysical Fluid Dynamics Program, Woods Hole Oceanographic Institute,

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЯВНОЙ СХЕМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА В ПЛОСКИХ ТРЕХМЕРНЫХ ОБЛАСТЯХ¹

Боронина М.А., Вшивков В.А.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

I Введение

Работа посвящена исследованию новой схемы для задач физики электрических и магнитных полей с целью увеличения устойчивости алгоритма. Необходимость в такой схеме возникла при численном моделировании динамики ультрарелятивистских пучков заряженных частиц в суперколлайдерах [1], где пучки представляют собой длинные тонкие иглы, соотношение их размеров $\sigma_x : \sigma_y : \sigma_z$ может достигать $1 : 1000 : 500000$. Использование параллельных алгоритмов с балансировкой загрузки процессоров для решения трехмерной динамики частиц [2] позволяет проводить расчеты с соотношением размеров пучков $1:100:1000$. Уравнения Максвелла решаются с помощью схемы с перешагиванием, имеющей второй порядок точности по времени и по пространству. Условие устойчивости схемы имеет вид $c\tau/h < 1$, где τ – временной шаг, $h = \min(h_x, h_y, h_z)$ – шаги по пространственным переменным, c – скорость света. То есть в случае плоских пучков временной шаг для всей задачи выбирается из условия для наименьшего пространственного шага. Таким образом, уменьшение сетки в поперечном направлении ведет не только к увеличению количества действий, связанных с количеством узлов сетки, но и к увеличению количества временных шагов программы.

Предлагается сделать схему неявной по направлению наименьшего размера пучка. При этом необходимо исследовать такие основные качества схемы как аппроксимацию, сохранение амплитуд и частот волн, инвариантность относительно угла по отношению к осям координат.

II Построение и исследование схемы

В связи со структурой уравнений Максвелла для их решения применяется схема с перешагиванием, в которой значения величин записываются на разнесенных сетках (сдвиг на полшага по времени и/или пространству):

$$\frac{H^{m+1/2} - H^{m-1/2}}{\tau} = -rot_h E^m,$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 14-01-00392

$$\frac{E^{m+1} - E^m}{\tau} = j^{m+1/2} + \text{rot}_h H^{m+1/2},$$

где

$$\text{rot}_h H = \begin{vmatrix} \frac{Hz_{i,k,l-1/2} - Hz_{i,k-1,l-1/2}}{h_y} - \frac{Hy_{i,k-1/2,l} - Hy_{i,k-1/2,l-1}}{h_z} \\ \frac{Hx_{i-1/2,k,l} - Hx_{i-1/2,k,l-1}}{h_z} - \frac{Hz_{i,k,l-1/2} - Hz_{i-1,k,l-1/2}}{h_x} \\ \frac{Hy_{i,k-1/2,l} - Hy_{i-1,k-1/2,l}}{h_x} - \frac{Hx_{i-1/2,k,l} - Hx_{i-1/2,k-1,l}}{h_y} \end{vmatrix},$$

$$\text{rot}_h E = \begin{vmatrix} \frac{Ez_{i-1/2,k+1/2,l} - Ez_{i-1/2,k-1/2,l}}{h_y} - \frac{Ey_{i-1/2,k,l+1/2} - Ey_{i-1/2,k,l-1/2}}{h_z} \\ \frac{Ex_{i,k-1/2,l+1/2} - Ex_{i,k-1/2,l-1/2}}{h_z} - \frac{Ez_{i+1/2,k-1/2,l} - Ez_{i-1/2,k-1/2,l}}{h_x} \\ \frac{Ey_{i+1/2,k,l-1/2} - Ey_{i-1/2,k,l-1/2}}{h_x} - \frac{Ex_{i,k+1/2,l-1/2} - Ex_{i,k-1/2,l-1/2}}{h_y} \end{vmatrix}.$$

При этом все производные, участвующие в уравнениях, как по времени, так и по пространству, записываются через центральные разности, что обеспечивает второй порядок аппроксимации по времени и по пространству. Рассмотрим одну из компонент электрического поля в отсутствие тока:

$$\frac{Ex_{i,l-1/2,k-1/2}^{m+1} - Ex_{i,l-1/2,k-1/2}^m}{\tau} = \frac{Hz_{i,l,k-1/2}^{m+1/2} - Hz_{i,l-1,k-1/2}^{m+1/2}}{h_y} - \frac{Hy_{i,l-1/2,k}^{m+1/2} - Hy_{i,l-1/2,k-1}^{m+1/2}}{h_z}$$

Исключив вычитанием значения магнитного поля на предыдущем шаге, можно получить:

$$\frac{Ex_{i,l-1/2,k-1/2}^{m+1} - 2Ex_{i,l-1/2,k-1/2}^m + Ex_{i,l-1/2,k-1/2}^{m-1}}{\tau^2} =$$

$$\frac{Ex_{i+1,l-1/2,k-1/2}^m - 2Ex_{i,l-1/2,k-1/2}^m + Ex_{i-1,l-1/2,k-1/2}^m}{h_x^2} +$$

$$\frac{Ex_{i,l+1/2,k-1/2}^m - 2Ex_{i,l-1/2,k-1/2}^m + Ex_{i,l-3/2,k-1/2}^m}{h_y^2} +$$

$$\frac{Ex_{i,l-1/2,k+1/2}^m - 2Ex_{i,l-1/2,k-1/2}^m + Ex_{i,l-1/2,k-3/2}^m}{h_z^2}$$

Это уравнение является гиперболическим, и выглядит аналогично для каждой из компонент электрического и магнитного полей. В одномерном случае схема имеет вид:

$$\frac{y_i^{m+1} - 2y_i^m + y_i^{m-1}}{\tau^2} = \frac{y_{i+1}^m - 2y_i^m + y_{i-1}^m}{h^2}$$

Для исследования схемы подставим в схему решение вида $y_l^m = \lambda^m e^{ial}$ и получим условие устойчивости:

$$\frac{\tau^2}{h^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2} \leq \frac{\tau^2}{h^2} \leq 1 \quad (1)$$

Записав решение в виде $y_l^m = A \exp(-i(\omega t m - k l h))$, можем получить дисперсионное соотношение:

$$\sin \frac{\omega \tau}{2} = \frac{\tau}{h} \sin \frac{kh}{2},$$

откуда, разложив в ряд Тейлора по τ и h

$$\omega = \frac{2}{\tau} \arcsin \left(\frac{\tau}{h} \sin \frac{kh}{2} \right),$$

получим выражение для скорости распространения волн:

$$u = \frac{\omega}{k} = 1 + k^2 \left(\frac{\tau^2 - h^2}{24} \right) + O(h^3, \tau^3, h\tau^2, h^2\tau)$$

Таким образом, при выполнении критерия устойчивости (1), скорость распространения волны будет меньше, чем скорость света. Скорость распространения будет тем меньше, чем больше волновое число k . Заметим, что максимальное значение волнового числа для длины области L определяется количеством узлов n для описания волны, а поэтому $k_{max} = 2\pi n/L = 2\pi/h$, и скорость волны отрицательна при выполнении условия $1 + 4\pi^2(\tau^2 - h^2)/24h^2 < 0$, то есть при $\tau^2/h^2 < 1 - 6/\pi^2 \sim 0.4$. Таким образом схема накладывает ограничения на использование шагов для коротковолновых гармоник.

В качестве модификации схемы с целью повысить запишем схему с весами [3]. Для сохранения второго порядка точности по времени, запишем схему, симметричную по времени:

$$\frac{y_i^{m+1} - 2y_i^m + y_i^{m-1}}{\tau^2} = \delta \Delta_{xx} y_i^{m+1} + (1 - 2\delta) \Delta_{xx} y_i^m + \delta \Delta_{xx} y_i^{m-1}$$

где

$$\Delta_{xx} y_i^m = \frac{y_{i+1}^m - 2y_i^m + y_{i-1}^m}{h^2},$$

и $0 \leq \delta \leq 1/2$. При $\delta = 0$ получаем исходную явную схему, а при $\delta = 1/4$ – неявную схему.

Проводя аналогичные выкладки, можно получить доказательство абсолютной устойчивости схемы при $\delta \geq 1/4$. При этом амплитуды волн также сохраняются. Как и в предыдущем случае, можно выписать дисперсионное соотношение и получить, что скорость распространения волн:

$$u = \frac{\omega}{k} = 1 + k^2 \left(\frac{\tau^2 - h^2}{24} + \frac{\delta\tau^2}{2} \right) + O(h^3, \tau^3, h\tau^2, h^2\tau)$$

Аналогично, скорость распространения волн зависит от волнового числа k , при этом колебания с большим волновым числом при определенном соотношении временного и пространственного шагов могут иметь отрицательную скорость. Так, для $\delta = 1/4$ и $k = k_{max}$ при $\tau^2/h^2 < (\pi^2 - 6)/4\pi^2 \sim 0.09$ колебания распространяются в обратную сторону. Заметим, что оптимальным соотношением шагов для явной схемы является $\tau/h = 1$, для неявной – $\tau/h = 0.5$, в этом случае порядок точности возрастает.

Для исследования трехмерного случая запишем схему

$$\begin{aligned} & \frac{Ex_{i,l,k}^{m+1} - 2Ex_{i,l,k}^m + Ex_{i,l,k}^{m-1}}{\tau^2} = \\ & \delta\Delta_{xx}Ex_{i,l,k}^{m+1} + (1 - 2\delta)\Delta_{xx}Ex_{i,l,k}^m + \delta\Delta_{xx}Ex_{i,l,k}^{m-1} \\ & + \delta\Delta_{yy}Ex_{i,l,k}^m + \delta\Delta_{zz}Ex_{i,l,k}^m. \end{aligned}$$

Подставив решение в виде $Ex_{j,l,k}^m = \lambda^m \exp(i(\alpha j + \beta l + \gamma k))$, получаем, что в отличие от условия устойчивости явной схемы $\tau^2/h_x^2 + \tau^2/h_y^2 + \tau^2/h_z^2 \leq 1$ условие устойчивости схемы с неявностью не имеет зависимости от h_x : $\tau^2/h_y^2 + \tau^2/h_z^2 \leq 1$, то есть не зависит от величины минимального пространственного шага. Таким образом, неявная схема позволяет использовать в расчетах больший шаг по времени, при этом несущественно изменяя такие характеристики решения, как амплитуда и скорость волн.

Аналогичные результаты можно получить в случае необходимости и для других компонент полей.

Конечный вариант предлагаемой к использованию трехмерной выглядит следующим образом:

$$\frac{Hx^{m+1/2} - Hx^{m-1/2}}{\tau} = \Delta_z Ey^m - \Delta_y Ez^m$$

$$\frac{Hy^{m+1/2} - 2Hy^{m-1/2} + Hy^{m-3/2}}{\tau^2} = \Delta_{yy} Hy^{m-1/2} + \Delta_{zz} Hz^{m-1/2} +$$

$$+ \frac{1}{4} \Delta_{xx} Hy^{m+1/2} + \frac{1}{2} \Delta_{xx} Hy^{m-1/2} + \frac{1}{4} \Delta_{xx} Hy^{m-3/2}$$

$$\frac{Hz^{m+1/2} - 2Hz^{m-1/2} + Hz^{m-3/2}}{\tau^2} = \Delta_{yy} Hz^{m-1/2} + \Delta_{zz} Hz^{m-1/2} +$$

$$+ \frac{1}{4} \Delta_{xx} Hz^{m+1/2} + \frac{1}{2} \Delta_{xx} Hz^{m-1/2} + \frac{1}{4} \Delta_{xx} Hz^{m-3/2}$$

$$\frac{Ex^{m+1} - Ex^m}{\tau} = \Delta_y Hz^{m+1/2} - \Delta_z Hy^{m+1/2}$$

$$\frac{Ey^{m+1} - Ey^m}{\tau} = \Delta_z Hx^{m+1/2} - \Delta_x Hz^{m+1/2}$$

$$\frac{Ez^{m+1} - Ez^m}{\tau} = \Delta_x Hy^{m+1/2} - \Delta_y Hx^{m+1/2}$$

Для данной схемы выполняется разностный аналог уравнений $div H = 0$:

$$\frac{1}{4} \Delta_x \left(Hx^{m+1/2} + 2Hx^{m-1/2} + Hx^{m-3/2} \right) + \Delta_y Hy^{m-1/2} + \Delta_z Hz^{m-1/2} = 0$$

и $div E = 4\pi\rho$:

$$\Delta_x Ex^m + \Delta_y Ey^m + \Delta_z Ez^m = 4\pi\rho^m.$$

III Заключение

В работе предложена новая схема для решения уравнений Максвелла в плоских трехмерных областях. Схема разработана на основе известной схемы с перешагиванием, но в отличие от исходной, является неявной по направлению наименьшего размера области и позволяет проводить расчеты с более крупным временным шагом. Исследован порядок аппроксимации схемы в одномерном и трехмерном случаях, а также изменение схемой амплитуды волн, скорости их распространения, также в зависимости скоростей волн от волнового числа.

Литература

1. *M.A. Boronina, G. Dudnikova, and V.A. Vshivkov* 3D Computer Simulations of the Ultrarelativistic Beam Dynamics in Super Colliders // Proc. of IPAC2015, Richmond, VA, USA. 2015. MOPJE023. P.326-329.
2. *M.A. Boronina, A.V. Snytnikov*. Parallel template implementation of a Particle-in-Cell code for the simulation of ultrarelativistic beam dynamics// Bull. Nov. Comp. Center, Num. Anal., 17(2015), 7-15.
3. *Самарский А.А. Гулин А.В.* Численные методы: Учеб.пособие для вузов. - М.:Наука, Гл.ред.физ-мат.лит., 1989. - 432 с. - ISBN 5-02-013996-3

ГИБРИДНЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ¹

Н.Г.Бураго*, И.С.Никитин**, В.Л.Якушев**

* *Институт проблем механики РАН, Москва*

** *Институт автоматизации проектирования РАН, Москва*

Введение

В основе применяемого гибридного метода решения лежит идея сквозного счета эволюции течения сплошной среды по модифицированной схеме SUPG FEM на произвольно подвижных адаптивных и наложенных сетках.

I Метод решения

Из большого множества существующих способов решения задач механики сплошных сред в областях сложной переменной геометрии (обзор [1]) в данной работе предпочтение отдано подходу адаптивных наложенных сеток из-за его достаточной робастности, неплохой точности с одной стороны и из-за относительной простоты реализации и легкости адаптации к разнообразным задачам. Расчет выполняется на основной сетке, окаймляющей (покрывающей с запасом) область решения. Основная сетка является произвольно подвижной и адаптивной к решению. Целью движения узлов является: 1) уменьшение ошибок аппроксимации около скачков и в пограничных слоях, 2) отслеживание подвижных контактных и межфазных границ. Подвижность узлов основной сетки ограничена требованиями невырожденности ячеек и отсутствия резких изменений размеров и формы ячеек. Все это реализуется приближенно с помощью метода упругих сеток [2, 3].

Для упрощения задания входной информации о геометрии области решения и для исключения известных трудностей генерации сеток в многосвязных областях сложной переменной геометрии применены дополнительные наложенные сетки для исключения из расчета тех узлов и ячеек основной сетки, которые накрыты наложенными сетками в зонах, недоступных для течения. Вариационная формулировка позволяет единообразно без особых проблем учитывать условия на подвижных, контактных, межфазных и внешних границах и рассчитывать их движение.

Отметим далее основные особенности применяемого метода решения.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ по проекту 15-08-02392-а

Основные законы сохранения приняты в вариационной форме метода Галеркина-Петрова, полученной с использованием интегрирования по частям и содержащей производные от искомым функций не выше первого порядка. Определяющие соотношения для твердых деформируемых, жидких и газообразных сплошных сред записаны единообразно с использованием векторов и тензоров в актуальной конфигурации, равно пригодной для всех сред без ограничения по времени процесса. Эти соотношения включают описание фазовых переходов, пригодное для методов сквозного счета процессов разрушения и консолидации с определением поверхностей локализации переходов. Подробности можно найти в [4, 5, 6, 7].

Используются простейшие аппроксимации решения и его первых производных, интегралы вариационных уравнений вычисляются простейшими квадратурами Гаусса. Благодаря этому применяемые алгоритмы являются очень простыми и гибкими (легко модифицируемыми при изменениях в постановках задач). Наши эксперименты показали, что применение аппроксимаций более высокой точности делает алгоритмы решения трудно модифицируемыми при изменениях в постановке задач, а выигрыш в точности не оправдывает требуемых затрат труда.

Дополнительные условия, такие, например, как контактные условия, условия разрушения/консолидации учитываются в сквозном счете [1, 6, 7, 8] модификацией вариационных уравнений с применением методов множителей Лагранжа и штрафных функций.

В зависимости от скорости эволюционные задачи рассчитываются по явным, явно-неявным и неявным двухслойным схемам первого и квази-второго порядков точности. Неявные схемы реализованы итерационно, так что в любом случае порядок расчета полностью соответствует явным схемам. Поэтому никаких матриц жесткости вычислять и запоминать не требуется и никаких матричных операций не проводится. Память ЭВМ расходуется очень экономно, а быстродействие достигается применением эффективных итераций по методу сопряженных градиентов [9], требующего для решения конечного числа операций, пропорционального $N\sqrt{N}$, где N – число неизвестных. Для предобуславливания используется диагональная составляющая матрицы жесткости, вычисление которой не составляет труда. Потребная память ЭВМ для такого итерационного процесса составляет $5N$.

Консервативность алгоритмов обеспечивается вариационной формой применяемых законов сохранения и конечно-элементной аппроксимацией решения. Применяемые схемы расчета по времени (физическому или фиктивному в итерациях) аналогичны центрально-разностным двухслойным схемам. Устойчивость обеспечивается искусственной вязкостью, величина которой в каждой ячейке определяется по способу схемы SUPG FEM [10] так, чтобы уравновесить по норме вклад от диффузионных членов и вклад от прочих членов однородной части в каждом законе сохранения (в каждом балансом уравнении). Такую разновидность схемы называем "схемой уравновешивающей вязкости". В зонах сжатия ($\nabla \cdot \mathbf{v} < 0$) и сверхзвукового

течения ($M > 1$) коэффициент уравнивающей вязкости специально уменьшается вдвое, что улучшает расчет скачков. Физическая составляющая вязкости при этом корректируется (уменьшается с ростом искусственной вязкости) по методу экспоненциальной подгонки [11].

Для монотонизации и устранения мелкомасштабных паразитных возмущений применяется консервативное покоординатное сглаживание в редких расчетных узлах, которые 1) принадлежат одному и тому же ребру и 2) имеют разный знак второй производной по координатному направлению (ребро расположено произвольно). Реально эта процедура проводится в крайне малом количестве узлов. Ориентация ребра относительно координатного направления роли не играет.

Описанная совокупность приемов, обосновать которые удастся только на уровне правдоподобных рассуждений, совместно с адаптацией произвольно подвижной расчетной сетки по методу упругих сеток дает удивительно хорошие результаты. Легко проверить.

II Результаты

Ниже приводятся решения характерных задач с подвижными границами раздела сред и скачками с помощью подвижных адаптивных и наложенных сеток. На Рис. 1, а-б для моментов времени 0.5 и 4.0 показана адаптивная упругая сетка в известной проверочной задаче о течении идеального совершенного газа в канале (3.0×1.0) со ступенькой высоты 0.4, расположенной на расстоянии 0.6 от входа в канал. Скорость на входе характеризуется числом Маха 3.0, показатель адиабаты 1.4. Скачки видны по сгущению адаптивной сетки. Согласование с известным решением отличное.

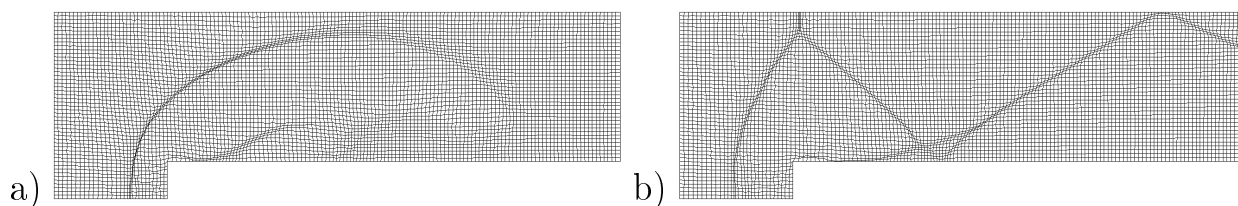


Рис. 1. Течение идеального газа в канале $M = 3$, $\gamma = 1.4$, адаптивная сетка для моментов времени $t = 0.5$ (а), $t = 4.0$ (б)

На Рис. 2, а-б для моментов времени 0.45 и 7.0 представлены изолинии местного числа Маха (число изолиний и диапазон изменения показаны на рисунках) для задачи о нестационарном сверхзвуковом обтекании двух цилиндров. Окаймляющая сетка сначала была равномерной. Цилиндры заданы наложенными сетками. В процессе решения основная подвижная адаптивная сетка двигалась, подстраиваясь и отлавливая положение границ наложенных сеток и подвижные разрывы решения (скачки). Окаймляющая сетка содержала 160×160 квадратных ячеек. Поток набегал снизу с числом

Маха 3.0. Показатель адиабаты 1.4. Размер области решения 5.0x5.0. Радиусы цилиндров 0.2. Скачки и их взаимодействие рассчитаны отлично.

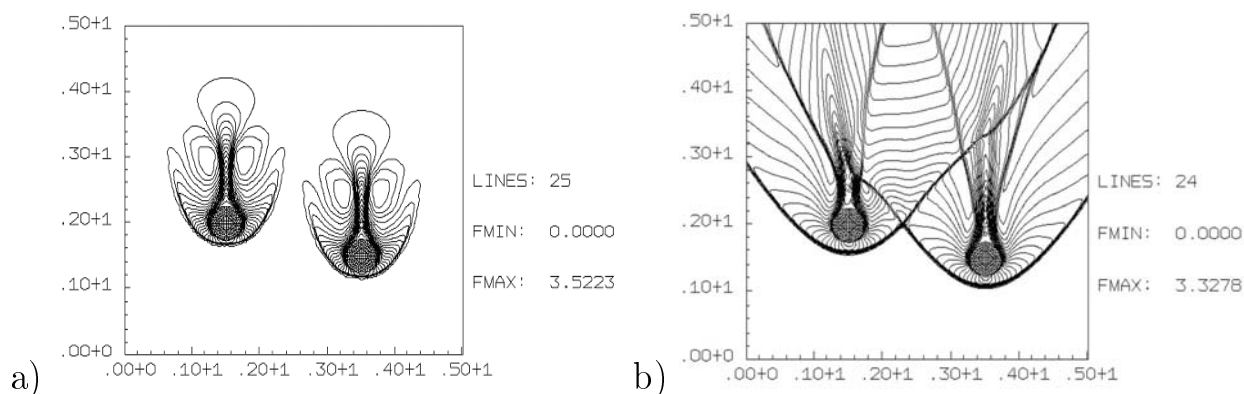


Рис. 2. Изолинии местного числа Маха при $t = 0.45$ (a) и $t = 7.0$ (b)

На Рис. 3, а-в показано поведение подвижной адаптивной сетки в упруго-пластической задаче формования лопатки турбины из цилиндрической заготовки под действием абсолютно жестких штампов. В течение всего процесса размер ячеек сетки поддерживался равномерным, чтобы избежать уменьшения шага по времени из-за сплющивания ячеек в зонах сжатия, что имеет место при использовании лагранжевых сеток.

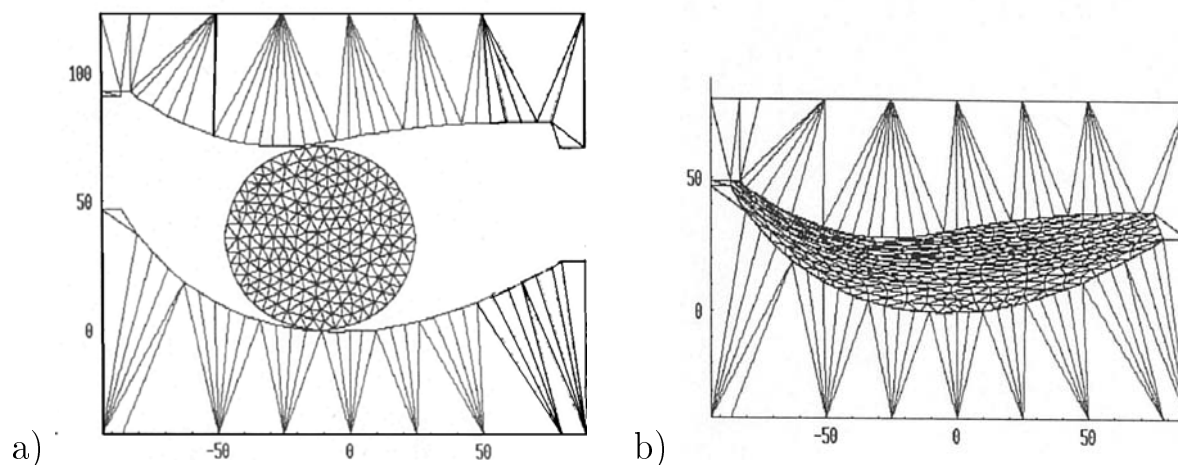


Рис. 3. Упругопластическая задача о формовании лопатки турбины жесткими штампами. Адаптивная сетка в начале (a) и конце (b) процесса.

В заключение отметим что все составляющие рассмотренного подхода к решению уже многократно по отдельности обсуждались в литературе. Здесь лишь показано, насколько привлекательным является одновременное использование этой коллекции находок в области вычислительных методов. Набор приемов не претендует на оптимальность, но имеет ряд очевидных положительных качеств. В частности к достоинствам данного подхода следует отнести отсутствие необходимости для каждой новой задачи заново

подбирать значения каких-либо параметров алгоритмов решения кроме мониторинговой функции.

Литература

1. Бураго Н.Г., Кузуджанов В.Н. Обзор контактных алгоритмов // Изв. РАН, МТТ. 2005. No. 1. С. 44-85.
2. Бураго Н.Г. Формулировка основных уравнений механики сплошной среды в подвижных адаптивных координатах. Численные методы в механике твердого деформируемого тела, М.: ВЦ АН СССР, 1984. С. 32-49.
3. Бураго Н.Г., Иваненко С.А. Применение уравнений теории упругости к построению адаптивных сеток // Труды Всеросс. Конф. по прикладной геометрии, построению сеток и высокопроизводительным вычислениям, Москва, ВЦ РАН, 28 июня - 1 июля 2004г. / Ред. В.А. Гаранжа - М.: ВЦ РАН, 2004. С. 107-118.
4. Бураго Н.Г., Глушко А.И., Ковшов А.Н. Термодинамический метод вывода определяющих соотношений для моделей сплошных сред // Известия РАН Механика твердого тела. 2000. No. 6. С. 4-15.
5. Бураго Н.Г. Моделирование разрушения упругопластических тел // Вычислительная механика сплошных сред, 2008. Т. 1, N. 4, С. 5-20.
6. Бураго Н.Г., Никитин И.С. Моделирование спекания с помощью теории пластичности // Инженерный журнал: наука и инновации, 2013, вып. 8. URL:<http://engjournal.ru/catalog/mathmodel/hidden/883.html>
7. Бураго Н.Г., Никитин И.С., Якушев В.Л. Численное моделирование спекания порошковых материалов под действием подвижного лазерного импульса // Вестник кибернетики. 2014. N. 3. С. 12-23. (ISSN 1811-7430)
8. Самарский А.А., Моисеенко Б.Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // ЖВМиМФ, т.5, N.5, 1965, С.816-827.
9. Wilkinson J.H., Reinsch C. Handbook for Automatic Computation. Linear Algebra. Heidelberg New York Springer-Verlag Berlin. (Рус.пер.: Уилкинсон, Райнш Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. Пер. С.П.Забродина, В.Г.Потемкина, П.И.Рудакова. Ред. Ю.И.Толчеев. М., Машиностроение, 1976. 390 с.)
10. Le Beau G.J., Ray S.E., Aliabadi S.K. and Tezduyar T.-E. SUPG finite element computation of compressible flows with the entropy and conservation variables formulations // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1993. V. 104. P. 397-422.

11. *Doolan, E.P., Miller, J.J.H., Schilders, W.H.A.* Uniform numerical methods for problems with initial and boundary layers, Boole Press, Dublin, 1980. (Рус.пер.: Э. Дулан, Дж. Миллер, У. Шилдерс, Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем, М., "Мир 1983, 200 с.)

ГИБРИДНАЯ ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ УСКОРЕНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ¹

Вшивкова Л.В.* , Дудникова Г.И.**

* *Институт вычислительной математики и
математической геофизики СО РАН, Новосибирск*

** *Институт вычислительных технологий СО РАН,
Новосибирск*

Введение

Происхождение космических лучей, оказывающих существенное влияние на процессы в околоземном космическом пространстве, в настоящее время точно не установлено и является одним из главных вопросов космологии. Наблюдательные астрономические данные позволяют говорить о том, что источником таких лучей являются взрывы сверхновых и механизмом генерации может быть ускорение на фронте бесстолкновительной ударной волны. Трудность подтверждения этого предположения усложняется в связи с последними наблюдениями, проведенными с использованием сложнейшей и современной аппаратуры, которые поставили ряд новых вопросов и необходимость пересмотра общепринятых гипотез и теорий. Детальное исследование механизма ускорения космических лучей бесстолкновительными ударными волнами и его зависимость от параметров окружающей среды возможно может быть основано на численном моделировании основных закономерностей изучаемых процессов.

Численные модели, используемые при исследовании проблемы генерации и динамики космических лучей [1], делятся на три типа и связаны с кинетическим или магнитогидродинамическим приближением. Наиболее полное описание возможно на основе кинетического уравнения Власова и системы уравнений Максвелла. Однако трудности численной реализации такой модели, связанные с большой разницей в пространственных и временных масштабах для электронной и ионной компонент плазмы, затрудняют их использование при проведении расчетов даже на современных вычислительных системах. Часто используются МГД-модели, которые, тем не менее, не позволяют описать нарушение однопоточности течений при отражении частиц от фронта ударной волны. Исследование на основе гибридных (комбинированных) моделей [2]-[4] позволяет существенно уменьшить требования к вычислительным ресурсам и в настоящее время является наиболее перспективным с точки зрения вычислительного эксперимента. Для своей реализации они требуют применения метода частиц-в-ячейках [5] и практики решения больших задач на основе алгоритмов параллельных вычислений.

¹Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ 14-01-31304 и 14-01-00392

В данной работе представлена двумерная гибридная численная модель генерации и структуры бесстолкновительных ударных волн в плазме и ускорения ионов на ее фронте. При моделировании ударная волна формируется путем отражения сверхзвукового потока от границы области. Взаимодействие между входящим и отражающимся потоками плазмы приводит к формированию и распространению волн, структура которых зависит от скорости потока. Гибридное приближение уменьшает вычислительные затраты по сравнению с использованием полностью кинетической модели и, с другой стороны, моделирует движение ионов с большей точностью, чем это позволяет МГД-приближение. Для данной модели предлагается новая вычислительная схема, условие устойчивости для которой позволяет проводить расчеты при более широком наборе вычислительных и физических параметров по сравнению с имеющимися схемами [6].

I Постановка задачи

Рассмотрим двумерную задачу (в декартовых координатах) вхождения потока плазмы в область с однородным магнитным полем \mathbf{B} через левую границу расчетной области ($x = 0$) и отражения от ее правой границы ($x = x_{max}$). Входящий со скоростью $\mathbf{v} = \mathbf{v}_0$ поток квазинейтральной плазмы, состоящий из ионов водорода и электронов, имеет плотность n и температуру T_e .

II Исходная система уравнений

Выпишем исходную систему уравнений предлагаемой комбинированной (гибридной) модели. Движение ионов описывается уравнениями, которые являются характеристиками кинетического уравнения Власова и имеют вид

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}_\alpha, \quad m_\alpha \frac{d\mathbf{v}_\alpha}{dt} = Z_\alpha e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v}_\alpha \times \mathbf{B} \right) + \mathbf{R}_\alpha. \quad (1)$$

Здесь Z_α – степень ионизации ионов сорта α , \mathbf{E} и \mathbf{B} – напряженности электрического и магнитного полей, $\mathbf{R}_\alpha = -ecZ_\alpha \nabla \times \mathbf{B} / (4\pi\sigma)$ представляет собой силу трения между ионами сорта α и электронами. Ее функциональный вид будет рассмотрен ниже. Плотность и средняя скорость ионов сорта α определяются из функции распределения ионов по скоростям: $n_\alpha = \int f_\alpha d\mathbf{v}_\alpha$, $\mathbf{V}_\alpha = (\int f_\alpha \mathbf{v}_\alpha d\mathbf{v}_\alpha) / n_\alpha$. Система уравнений, описывающая движение электронной компоненты плазмы, имеет вид

$$m_e \left(\frac{\partial \mathbf{V}_e}{\partial t} + (\mathbf{V}_e \cdot \nabla) \mathbf{V}_e \right) = -e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{V}_e \times \mathbf{B} \right) - \frac{\nabla p_e}{n_e} + \mathbf{R}_e, \quad (2)$$

$$n_e \left(\frac{\partial T_e}{\partial t} + (\mathbf{V}_e \cdot \nabla) T_e \right) + (\gamma - 1) p_e \nabla \cdot \mathbf{V}_e = (\gamma - 1) (Q_e - \nabla \cdot \mathbf{q}_e), \quad (3)$$

где n_e , \mathbf{V}_e – плотность и скорость электронной компоненты, $p_e = n_e T_e$ – давление электронной компоненты, $\mathbf{R}_e = -\sum_{\alpha} \mathbf{R}_{\alpha}$ – сила трения между электронами и ионами, T_e – температура электронов, $Q_e = j^2/\sigma$ – нагрев электронов в результате столкновений с ионами (здесь $\sigma = n_e e^2/(m_e \nu)$), $\mathbf{q}_e = -k_1 \nabla T_e$, – поток тепла, где k_1 – коэффициент теплопроводности. К этим уравнениям добавляются следующие уравнения Максвелла

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (4)$$

Здесь \mathbf{j} – плотность тока, которая в случае многокомпонентной плазмы подсчитывается по формуле $\mathbf{j} = e(\sum_{\alpha} Z_{\alpha} n_{\alpha} \mathbf{V}_{\alpha} - n_e \mathbf{V}_e)$. Плазма является квазинейтральной, т. е. $n_e = \sum_{\alpha} Z_{\alpha} n_{\alpha}$. Поэтому в системе уравнений Максвелла не учитывается уравнение $\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$, где $\rho = e(\sum_{\alpha} Z_{\alpha} n_{\alpha} - n_e)$ – объемный заряд, $\mathbf{V}_{\alpha} = (V_{\alpha x}, V_{\alpha y}, V_{\alpha z})$, $\mathbf{V}_{\alpha} = (\sum_{\alpha} Z_{\alpha} n_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha})/n_e$ – средняя скорость ионов.

III Алгоритм вычислений

Решение рассматривается в области $0 \leq x \leq x_{\max}$, $0 \leq y \leq y_{\max}$. В соответствии с поставленной задачей начальные данные при $t = 0$ имеют вид: $n = n_0 = \text{const}$, $B_x = B_y = 0$, $B_z = B_0 = \text{const}$, $T_e = T_0 = 0$, $v_x = v_0$, $v_y = v_z = 0$ и $E_x = E_y = E_z = 0$. Граничные условия имеют вид: для частиц (ионов) – условия отражения по x и периодические условия по y ; для сеточных функций – $E_x = 0$, $\partial E_y/\partial x = \partial E_z/\partial x = 0$, $\partial n/\partial x = 0$, $\partial T_e/\partial x = 0$ по x и периодические условия по y .

В расчетной области введена равномерная сетка с шагами h_1 , h_2 по осям x и y , соответственно. Сеточная функция B_z определяется в узлах сетки $x_i = ih_1$, $y_k = kh_2$, функции V_x, V_{ex}, E_x, B_y – в точках $x_i, y_{k-1/2} = (k-0.5)h_2$, функции V_y, V_{ey}, E_y, B_x – в точках $x_{i-1/2} = (i-0.5)h_1, y_k$, а функции n, T_e, V_z, V_{ez}, E_z – в серединах ячеек $x_{i-1/2}, y_{k-1/2}$.

Для краткости запишем схему в безразмерном векторном виде. В качестве нормировок для плотности, напряженности магнитного поля, температуры, скорости, координаты и времени выбраны значения $n_0, B_0, B_0^2/(8\pi), V_A = B_0^2/\sqrt{4\pi n_0 e^2}$, $c/\omega_{pi} = c\sqrt{m_i}/\sqrt{4\pi n_0 e^2}$ и $1/\omega_{ci} = m_i c/(eB_0)$, соответственно.

На первом этапе решаются уравнения движения модельных частиц

$$\frac{\mathbf{v}^{m+1} - \mathbf{v}^m}{\tau} = \hat{E}^m + \mathbf{v}^m \times \mathbf{B}^m, \quad \frac{\mathbf{r}^{m+1} - \mathbf{r}^m}{\tau} = \mathbf{v}^{m+1}. \quad (5)$$

Плотность и средняя скорость ионов вычисляются на втором этапе по формулам метода частиц-в-ячейках:

$$n^{m+1}(\mathbf{r}) = \sum_j q_j \bar{R}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^{m+1}), \quad (6)$$

$$\mathbf{V}^{m+1}(\mathbf{r}) = \sum_j q_j \mathbf{v}_j^{m+1} \bar{R}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^{m+1}) / n^{m+1}(\mathbf{r}), \quad (7)$$

где $\bar{R}(\mathbf{r}) = \bar{R}(x) \bar{R}(y)$ и

$$\bar{R}(f) = \begin{cases} 1 - |f|/h, & \text{где } |f| \leq h, \\ 0, & \text{где } |f| > h, \end{cases} \quad (8)$$

где $f = \{x, y\}$ и $h = \{h_1, h_2\}$, соответственно.

По средним скоростям ионов, на третьем этапе, вычисляются скорости электронов на эйлеровой сетке:

$$\mathbf{V}_e^{m+1} = \mathbf{V}^{m+1} - \nabla \times \mathbf{B}^m / n^{m+1}. \quad (9)$$

Электрическое поле можно выразить из уравнения движения для электронов:

$$\hat{\mathbf{E}}^{m+1} = -\mathbf{V}_e^{m+1} \times \mathbf{B}^{m+1} - \frac{1}{n^{m+1}} \nabla (n^{m+1} T_e^m) - \beta \mathbf{s}^{m+1}, \quad (10)$$

где $\beta = m_e/m_i$, $\mathbf{s}^{m+1} = (\mathbf{V}_e^{m+1} - \mathbf{V}_e^m) / \tau + (\mathbf{V}_e^{m+1} \cdot \nabla) \mathbf{V}_e^{m+1}$. В уравнении (10) используется магнитное поле на временном шаге $m+1$. Для его вычисления на четвертом этапе решается уравнение

$$\frac{\mathbf{B}^{m+1} - \mathbf{B}^m}{\tau} = -\nabla \times (\hat{\mathbf{E}}^{m+1} + \mathbf{R}_e), \quad (11)$$

где $\mathbf{R}_e = \alpha \nabla \times \mathbf{B}^{m+1} / n^{m+1}$, $\alpha = m_e \nu c / (B_0 e)$.

Неявная схема (11) решается методом расщепления по направлениям и реализуется с помощью скалярных прогонок. Далее находится $\hat{\mathbf{E}}^{m+1}$ по формуле (10) и вычисляется окончательное значение электрического поля (пятый этап):

$$\mathbf{E}^{m+1} = \hat{\mathbf{E}}^{m+1} + \mathbf{R}_e. \quad (12)$$

На заключительном этапе решается уравнение для температуры:

$$\begin{aligned} \frac{T_e^{m+1} - T_e^m}{\tau} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) T_e^{m+1} + (\gamma - 1) n^{m+1} T_e^{m+1} \nabla \cdot \mathbf{V}_e^{m+1} = \\ = (\gamma - 1) (Q_e^{m+1} - \nabla \cdot q_e^{m+1}). \end{aligned} \quad (13)$$

Неявная схема для температуры также решается методом расщепления и реализуется методом прогонки.

IV Заключение

Особенность новой схемы заключается в неявном вычислении напряженности магнитного поля и связанного с ним электрического поля. Это существенно повышает устойчивость схемы и позволяет проводить расчеты при более широком наборе, как вычислительных, так и физических параметров. Серия тестовых расчетов показала эффективность созданной схемы.

Результаты численного моделирования, представленные на Рис. 1, получены при значении скорости входящего потока $v_0 = 1.5$. На данном графике приведено распределение ионов на фазовой плоскости (v_x, x) в момент времени $t = 6$, которое демонстрирует структуру ударной волны с нерегулярными колебаниями порядка c/ω_{pi} . Скорость ударной волны $u = 2.6$ и максимальное значение скорости отраженных от ее фронта ионов $v_x = 3.5$.

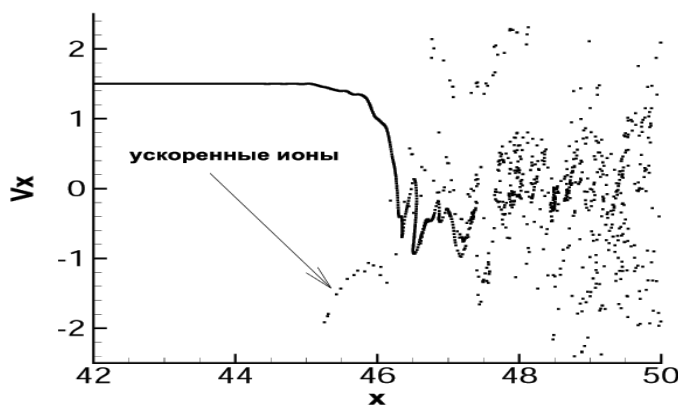


Рис. 1. Распределение ионов на фазовой плоскости

Литература

1. *Riquelme M.A. and Spitkovsky A.* Magnetic amplification by magnetized cosmic rays in supernova remnant shocks // *Astrophys. J.* 2010. Vol. 717. P. 1054–1066.
2. *Вшивкова Л.В.* Численное моделирование динамики многокомпонентной плазмы // *Вестник Новосибирского Государственного Университета.* 2003. Т. 3. Вып. 2. С. 3–20.
3. *Vshivkova L.V.* Numerical simulation of plasma using a hybrid MHD-kinetic model // *Bull. Nov. Comp. Center, Num. Analysis.* 2009. Issue: 14. P. 95–114.
4. *Vshivkova L.V., Dudnikova G.I.* Numerical modeling of plasma phenomena using the PIC-method // *Discharges and Electrical Insulation in Vacuum (ISDEIV), 2012 25th International Symposium on.* 2012. P. 398–400.

5. *Березин Ю.А., Вшивков В.А.* Метод частиц в динамике разреженной плазмы. Новосибирск: Наука, 1980. 96 с.
6. *Березин Ю.А., Вшивков В.А., Дудникова Г.И., Федорук М.П.* О бесстолкновительном торможении плазменного облака в неоднородном замагниченном фоне // Физика плазмы. 1992. Т. 18. Вып. 12. С. 812–815.

ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИИ ВИБРИРУЮЩЕЙ ПЛАСТИНЫ НА НАПРАВЛЕННОСТЬ АКУСТИЧЕСКИХ ШУМОВ В БЛИЖНЕЙ ЗОНЕ

Глебова Г.М., Мальцева О.А., Харахашьян А.М.

НИИ Физики ЮФУ, Ростов-на-Дону

Введение

В последнее время с целью повышения помехоустойчивости приемных систем интенсивно исследуются векторно-скалярные приемные системы, способные измерять не только скалярную, но и векторную компоненту акустического поля. При разработке алгоритмов, оптимальным образом подавляющих шумы, необходимо знать характеристики векторно-скалярных шумов. Для антенн, устанавливаемых на борту носителя, преобладающим шумом является шум, издаваемый самим носителем. Однако известно, что расчет параметров вибрационных и акустических полей для приемных антенн, расположенных на небольшом волновом расстоянии от поверхности шумящего борта, встречается со значительными математическими трудностями.

В данной работе на основе компьютерного моделирования исследуется направленность излучения шума, создаваемого вибрациями борта носителя, который принято рассматривать в виде пластины конечных размеров шарнирно закрепленной на краях. Рассмотрено 2 варианта геометрии пластины: квадратная и прямоугольная пластина. Направленность излучения рассчитывается с использованием линейной антенны, состоящей из 11 векторно-скалярных датчиков. Анализируется направленность излучения для 3-х различных компонент акустического поля: скалярной, векторно-скалярной и потоковой.

I Методика расчета

Для расчета вибрационных и акустических полей используется упрощенный подход, изложенный в работах [1, 2]. Соответствие данного подхода строгой теории [3] при расчете различных векторно-скалярных характеристик поля шумов, разработанной для реальных инженерных конструкций, показано в работе [1]. На рис.1. представлена система координат, использованная при расчете давления, возникающего при колебаниях пластины конечных размеров на m -м датчике приемной системы, находящемся в точке с координатами $A_m(x_m, y_m, z_m)$.

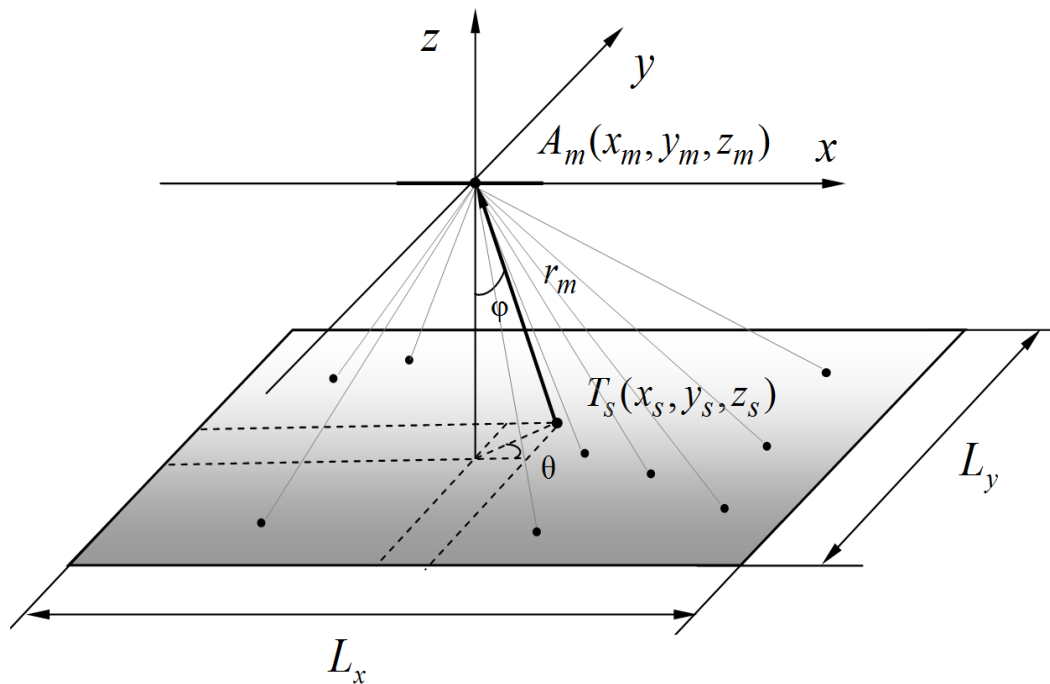


Рис. 1. Общий вид рассматриваемой задачи в выбранной системе координат.

Относительно приемного элемента, находящегося в точке $A_m(x_m, y_m, z_m)$, положение точки излучения $T_s(x_s, y_s, z_s)$ в цилиндрической системе координат определяется тройкой величин r_m , θ и φ (расстояние между точкой наблюдения и точкой излучения, азимут и угол наклона соответственно). Под воздействием внешних сил в пластине возбуждаются колебания, которые создают акустическое поле, при этом давление на m -ом приемном элементе P_m рассчитывается в виде совокупности сигналов от случайных источников с равномерной плотностью распределения по поверхности пластины [1]:

$$P_m(A_m) = \sum_{i=1}^{\infty} S_i \cdot e^{-j \cdot k \cdot r_m} / r_m. \quad (1)$$

Здесь S_i – амплитуды случайных источников, k – волновое число, равное $2\pi/\lambda$, λ – длина волны, соответствующая частоте принимаемых сигналов f .

Полагается, что амплитуды случайных источников S_i распределены по Рэлею, а начальные фазы – равномерно в интервале $(0 - 2\pi)$. Мнимые и действительные части таких сигналов распределены по нормальному закону. Для 4-компонентного векторного приемника, состоящего из приемника давления и трех ортогональных векторных приемников V_x , V_y и V_z , расчет сигналов на векторных приемниках выполняется путем умножения скалярной составляющей, обусловленной вибрациями s -й точки пластины, на $\cos \theta \cdot \sin \varphi$, $\sin \theta \cdot \cos \varphi$ и $\cos \varphi$ соответственно. Такой подход позволяет рассчитать различные характеристики поля помех на векторно-скалярной антенне, расположенной вблизи вибрирующей поверхности.

Сигналы, принимаемые антенной, состоящей из M векторно-скалярных модулей, представляются в виде вектора-столбца:

$$U = \begin{pmatrix} P \\ V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где P , V_x , V_y , V_z – векторы размерностью M (для рассматриваемой задачи $M = 11$), компоненты которых соответствуют сигналам, принимаемым векторно-скалярной приемной системой. Для звукового давления это $P = (P_1, P_2, \dots, P_M)$. Для V_i – это сигналы, соответствующие i -й проекции колебательной скорости. Анализируется направленность излучения для 3-х различных компонент акустического поля: скалярной, векторно-скалярной и потоковой. При этом вектор U будет иметь вид (2) для векторно-скалярной компоненты, для скалярной и потоковой компонент вектор U имеет вид

$$U = P, \quad U = \begin{pmatrix} PV_x \\ PV_y \\ PV_z \end{pmatrix} \text{ соответственно.}$$

Для определения пространственной направленности излучения используется *метод Бартлетта*. Математически этот метод эквивалентен разложению измеренных сигналов в виде суперпозиции пространственных волн, приходящих с разных направлений на одной частоте. Для плоских волн это разложение позволяет определить угловые координаты источника (азимут и угол возвышения).

II Результаты моделирования и их обсуждение

Рассматривается 2 варианта геометрии пластины: квадратная пластина размерами 3 на 3 метра и прямоугольная пластина размерами 3 на 6 метров. Линейная антенна состоит из 11 векторно-скалярных датчиков, расположенных эквидистантно, межэлементные расстояния равны 0.16 м. Антенна расположена по центру пластины вдоль оси X на расстоянии 0.7 м от поверхности пластины. Моделирование проводится на частоте $f = 3000$ Гц в водной среде, скорость распространения звука в воде 1500 м/с. Нормировка пространственных спектров производится на максимальное значение выходного сигнала при работе со скалярной компонентой поля. Диапазон сканирования 0–180 градусов.

Из представленных ниже графиков видно, что антенна, расположенная вблизи поверхности вибрирующей пластины принимает шум, направленность которого распределена в пространстве в достаточно широком диапазоне.

При расчете направленности излучения по скалярной компоненте акустического поля наибольший шум приходит с боковых направлений как для

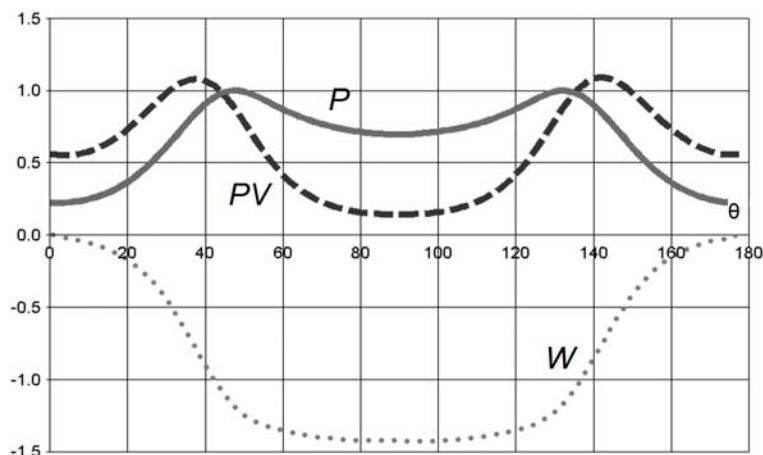


Рис. 2. Направленность излучения, рассчитанная для скалярной (P), векторно-скалярной (PV) и потоковой (W) компонент акустического поля, рассматривается квадратная пластина размерами 3×3 метра.

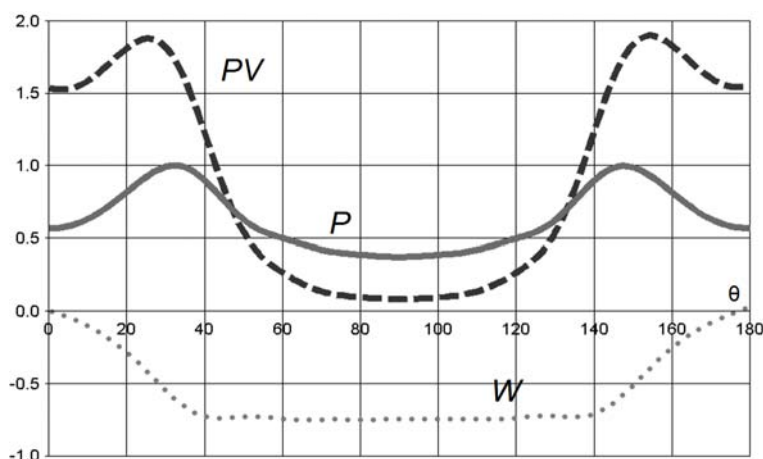


Рис. 3. Направленность излучения для прямоугольной пластины, длинная сторона вытянута вдоль оси X.

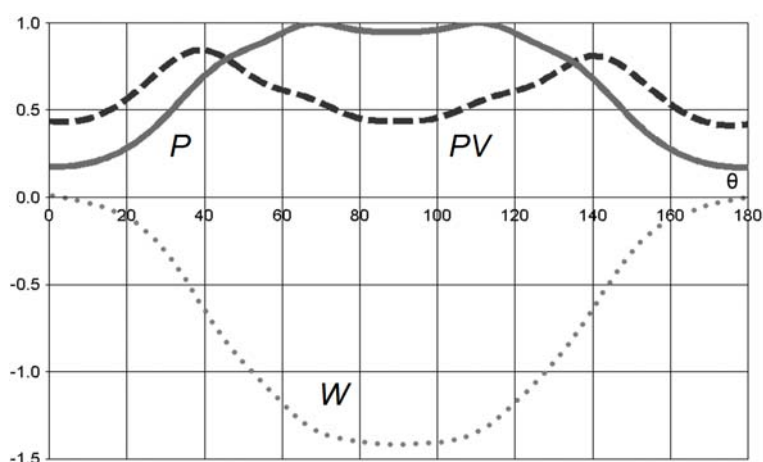


Рис. 4. Направленность излучения для прямоугольной пластины, длинная сторона вытянута вдоль оси Y.

изотропного (квадратная пластина), так и для анизотропного (прямоугольная пластина, вытянутая вдоль оси X) поля шумов. Для квадратной пластины максимальный шум приходит с направлений $40^\circ - 50^\circ$ и $120^\circ - 130^\circ$, а для пластины, вытянутой вдоль оси X, с направлений $30^\circ - 40^\circ$ и $130^\circ - 140^\circ$. Такая разница в положении максимумов, как бы подчеркивает, что для пластины, вытянутой вдоль оси X, мощность излучения от источников, находящихся сбоку, возросла за счет увеличения размера пластины. Для пластины, вытянутой вдоль оси Y, максимальный уровень выходного сигнала наблюдается на 90° , что также соответствует интенсивности излучения от источников, расположенных на пластине по направлениям, близким к 90° .

Характер направленности излучения при работе с векторно-скалярными компонентами для изотропного и анизотропного поля носит такой же характер, как и при работе со скалярной антенной. Но, несмотря на использование векторных компонент антенна не различает, идет ли сигнал со стороны поверхности пластины (т.е. создается вибрирующими конструктивными элементами носителя) или с противоположной, внешней стороны.

Использование потоковой компоненты позволяет определить не только направление, с которого идет наибольший шум, характеризующий изотропию или анизотропность акустического поля, но также и установить идет ли шум со стороны вибрирующей пластины или он обусловлен воздействием внешних источников.

III Выводы

Таким образом, направленность вибрирующей пластины распределена в пространстве в достаточно широком диапазоне углов, различна для различных компонент акустического поля и зависит от размеров пластины, что необходимо учитывать при разработке алгоритмов пространственной фильтрации, выполняющих эффективное подавление шумов носителя.

Литература

1. *Глебова Г.М., Жбанков Г.А., Селезнев И.А., Харахашьян А.М.* Векторно-скалярные акустические поля в ближней зоне вибрирующей пластины. // Научно-техн. сб. Гидроакустика. 2015. Вып. 21(1). С. 37–45.
2. *Клячкин В.И., Селезнев И.А.* Вероятностные задачи статистической гидроакустики. Т.2. СПб.: СПбГЭТУ "ЛЭТИ". 2011. 656 с.
3. *Маслов В.Л., Будрин С.В.* Методы управления акустическими полями в инженерных конструкциях. ЦНИИ им. Акад. А.Н. Крылова. СПб, 2010. 328 с.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛЕЙ, ВОЗБУЖДАЕМЫХ ПРИ РАССЕЙНИИ ВОЛНОВЫХ ВОЛН НА КРУГОВЫХ ИНТЕРФЕЙСНЫХ ТРЕЩИНАХ¹

Голуб М.В., Дорошенко О.В.

*Институт математики, механики и информатики,
Кубанский государственный университет, г. Краснодар*

Введение

Идентификация трещин и зон нарушения сплошности между элементами структур входит в круг первоочередных задач, решаемых при ультразвуковом неразрушающем контроле и мониторинге состояния конструкций [1]. Область нарушения сплошности может представлять собой распределенный набор микротрещин, трещину с контактирующими берегами или область неидеального контакта [2], которые нередко являются предвестниками разрушения всей конструкций. Задача идентификации сложнее в том случае, если элементы структур изготовлены из различных материалов.

Решение этих задач требует разработки соответствующих математических и компьютерных моделей. При этом важно различать открытые трещины, поверхности которых свободны от нормальных и касательных напряжений, и отслоения, которые описываются более сложными граничными условиями [2]. Под отслоением нередко подразумевают более сложные дефекты по сравнению с идеальной трещиной, например, отслоения могут иметь взаимодействующие поверхности или являться зонами неидеального контакта. Раскрытая трещина математически описывается как бесконечно тонкий разрез с нулевыми нормальными и касательными напряжениями, которые выражаются через перемещения согласно закону Гука. При моделировании неидеального контакта или частично отслоившихся интерфейсов соответствующие зоны могут быть описаны набором микротрещин, путем замены поврежденного интерфейса тонким вязкоупругим слоем или с помощью граничных условий пружинного типа. Дифракция упругих волн на круговых трещинах и отслоениях между двумя одинаковыми полупространствами достаточно полно изучена [2, 3], в настоящей работе изучается случай двух разнородных слоев.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке (проект №13-01-96516)

I Постановка задачи

Рассматриваются два упругих изотропных слоя $\{-h_2 < z < 0\}$ и $\{0 < z < h_1\}$, на границе соединения которых предполагаются непрерывными перемещения и напряжения всюду за исключением круговой области Ω , в которой расположена трещина радиуса a . Центр декартовой и цилиндрической систем координат совпадают с центром трещины, ось Oz ортогональна границе раздела двух сред. Падающее волновое поле с перемещениями u_i^{in} предполагается заданным, например, в виде бегущих волн Лэмба, возбуждаемых нагрузкой [4].

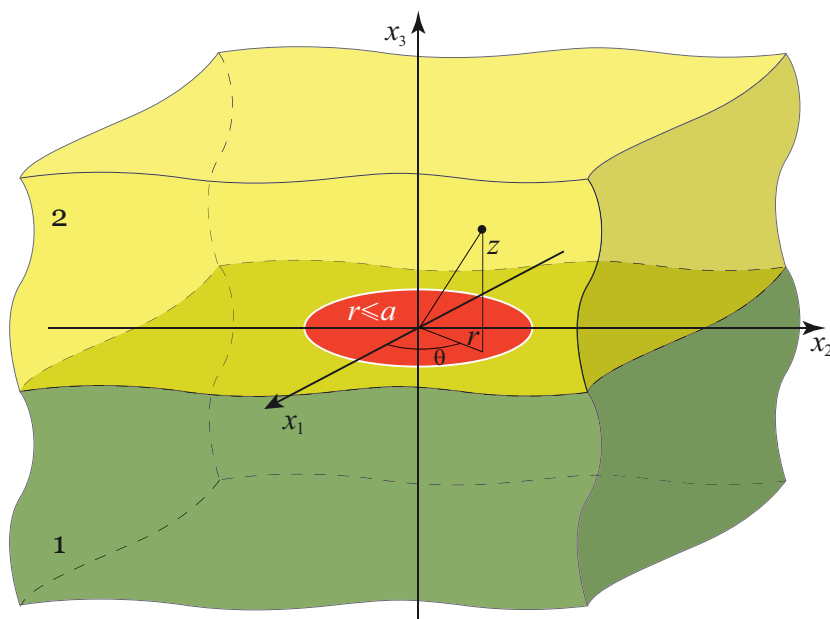


Рис. 1. Постановка задачи

Решение нестационарной задачи $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ удовлетворяет уравнениям Ляме и может быть представлено в виде преобразования Лапласа гармонического решения $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \omega)$ [4]. Для описания волнового поля, рассеянного круговой трещиной, удобно перейти в цилиндрическую систему координат, где компоненты вектора перемещений в каждом из слоев $j = 1, 2$, записанные в терминах потенциалов ψ_i , удовлетворяют волновым уравнениям

$$\nabla^2 \psi_3 + k_{1j}^2 \psi_3 = 0, \quad \nabla^2 \psi_i + k_{2j}^2 \psi_i = 0, \quad i = 1, 2. \quad (1)$$

Здесь k_{1j} – волновое число для продольных волн, а k_{2j} для поперечных волн j -й среде. Выражения, связывающие потенциалы, перемещения и напряжения могут быть найдены, к примеру, в [4, 5]

II Общая схема решения

Для потенциалов справедливо представление в виде рядов [3]

$$\chi^{1m}(\theta) = \cos m\theta, \quad \chi^{2m}(\theta) = \sin m\theta.$$

$$\psi_1(r, \theta, z) = - \sum_{m=0}^{\infty} \psi_1^{2m}(r, z) \chi^{1m}(\theta) + \sum_{m=0}^{\infty} \psi_1^{1m}(r, z) \chi^{2m}(\theta),$$

$$\psi_i(r, \theta, z) = \sum_{n=1}^2 \sum_{m=0}^{\infty} \psi_i^{nm}(r, z) \chi^{nm}(\theta), \quad i = 2, 3.$$

Подстановка разложений в волновые уравнения и применение интегрального преобразования Ханкеля позволяет получить следующие выражения:

$$\psi_i^{nm}(r, z) = \int_0^{\infty} \Psi_i^{nm}(\alpha, z) J_m(\alpha r) \alpha d\alpha.$$

Используя свойства преобразования Ханкеля удобно использовать модифицированный для цилиндрических координат вектор перемещений

$$\mathbf{w} = \{u_r + u_\theta, u_r - u_\theta, u_z\}$$

и вектор нормальных и касательных перемещений

$$\hat{\boldsymbol{\tau}} = \{\tau_{rz} + \tau_{\theta z}, \tau_{rz} - \tau_{\theta z}, \tau_{zz}\},$$

а рассеянное поле может быть записано в компактном виде через образы матриц Грина $\mathbf{K}_j^n(\alpha, z)$ [4, 5] для каждого из слоев

$$\mathbf{w}^{sc, nm}(r, z) = \begin{cases} \mathbf{w}_1^{sc, nm}(r, z) = \int_0^{\infty} \mathbf{J}^{nm}(\alpha r) \mathbf{K}_1^n(\alpha, z) \mathbf{Q}^{nm}(\alpha) \alpha d\alpha, & z < 0 \\ \mathbf{w}_2^{sc, nm}(r, z) = \int_0^{\infty} \mathbf{J}^{nm}(\alpha r) \mathbf{K}_2^n(\alpha, z) \mathbf{Q}^{nm}(\alpha) \alpha d\alpha, & z > 0 \end{cases}, \quad (2)$$

$$\mathbf{J}^{ml}(\alpha r) = \begin{pmatrix} J_{m+(-1)^n}(\alpha r) & 0 & 0 \\ 0 & J_{m-(-1)^n}(\alpha r) & 0 \\ 0 & 0 & J_m(\alpha r) \end{pmatrix},$$

и вектора, составленного из нормальных и касательных напряжений в области дефекта Ω

$$\mathbf{q}(r, \theta) = \sum_{n=1}^2 \sum_{m=0}^{\infty} \mathbf{q}^{nm}(r) \chi^{nm}(\theta), \quad \mathbf{Q}^{nm}(\alpha) = \int_0^{\infty} \mathbf{J}^{nm}(\alpha r) \mathbf{q}^{nm}(r) r dr.$$

Прямой подстановкой образов в граничные условия на трещине нетрудно получить

$$\mathbf{Q}^{nm}(\alpha) = \mathbf{L}^n(\alpha) \Delta \mathbf{W}^{nm}(\alpha),$$

$$\mathbf{L}^n(\alpha) = [\mathbf{K}_2^n(\alpha, 0) - \mathbf{K}_1^n(\alpha, 0)]^{-1}, \quad n = 1, 2.$$

связь с Фурье-символом скачка перемещений на трещине

$$\Delta \mathbf{W}^{nm}(\alpha) = \int_0^{\infty} \mathbf{J}^{nm}(\alpha r) \Delta \mathbf{w}^{nm}(r) r dr.$$

Подстановка интегральных представлений (2) в граничные условия отсутствия напряжений приводит к системе интегральных уравнений

$$\int_0^{\infty} \mathbf{J}^{nm}(\alpha r) \mathbf{L}^n(\alpha) \Delta \mathbf{W}^{nm}(\alpha) \alpha d\alpha = -\widehat{\boldsymbol{\tau}}^{\text{in},nm}(r),$$

относительно скачка смещений

$$\Delta \mathbf{w}(r, \theta) = \mathbf{w}_2^{\text{sc}}(r, \theta, 0) - \mathbf{w}_1^{\text{sc}}(r, \theta, 0) = \sum_{n=1}^2 \sum_{m=0}^{\infty} \Delta \mathbf{w}^{nm}(r) \chi^{nm}(\theta). \quad (3)$$

который отыскивается в виде разложения в ряд по присоединенным полиномам Лежандра P_n^m [3]:

$$\begin{aligned} \phi_{3,t}^{2m}(r) &= \phi_{3,t}^{1m}(r) = \frac{P_{m+2t+1}^m \left(\sqrt{1 - r^2/a^2} \right)}{P_{m+2t+1}^{m+1}(0)}, \\ \phi_{3/2 \mp 1/2, t}^{2m}(r) &= \phi_{3/2 \pm 1/2, t}^{1m}(r) = \frac{P_{m \pm 1 + 2t + 1}^{m \pm 1} \left(\sqrt{1 - r^2/a^2} \right)}{P_{m \pm 1 + 2t + 1}^{m \pm 1 + 1}(0)}. \end{aligned}$$

После применения к интегральному уравнению схемы Галеркина для численной реализации можно получить систему уравнений

$$\sum_{t=0}^T \mathbf{A}_{tt'}^{nm} \boldsymbol{\beta}_t^{nm} = -\mathbf{g}_{t'}^{nm}, \quad t' = 0, \dots, T. \quad (4)$$

Здесь в левой части находятся блоки 3 на 3

$$\mathbf{A}_{tt'}^{nm} = \int_0^{\infty} \boldsymbol{\Phi}_{t'}^{nm}(\alpha) \mathbf{L}^n(\alpha) \boldsymbol{\Phi}_t^{nm}(\alpha) \alpha d\alpha, \quad \mathbf{g}_{it'}^{nm} = \int_0^a \widehat{\boldsymbol{\tau}}_i^{\text{in},nm}(r, 0) \phi_{j_n(i)t'}^m(r) r dr,$$

для построения которых используются две диагональные матрицы, составленные из образов базисных функций $\boldsymbol{\Phi}_{t'}^{2m} = \text{diag}(\Phi_{1t'}^m, \Phi_{2t'}^m, \Phi_{3t'}^m)$, $\boldsymbol{\Phi}_{t'}^{1m} = \text{diag}(\Phi_{2t'}^m, \Phi_{1t'}^m, \Phi_{3t'}^m)$, здесь индекс j_n : $j_2(i) = i$, $j_1(\{1, 2, 3\}) = \{2, 1, 3\}$.

$$\Phi_{3t}^{2m}(\alpha a) = (-1)^t \sqrt{\frac{\pi a}{2}} \frac{J_{m+2t+1+3/2}(\alpha a)}{\alpha^{3/2}},$$

$$\Phi_{kt}^{2m}(\alpha a) = (-1)^t \sqrt{\frac{\pi a}{2}} \frac{J_{m+2t+9/2-2k}(\alpha a)}{\alpha^{3/2}}, \quad k = 1, 2.$$

Для проверки корректности построенной математической и компьютерной модели было выполнено сравнения с [3], где рассматривалось два изотропных одинаковых полупространства ($h_1 = h_2 = \infty$). Было получено небольшое различие в амплитудах рассеянных объемных волн, которое обусловлено использованием в настоящей модели большего количества базисных функций.

Авторы благодарят проф. Глушкова Е.В. и Глушкову Н.В. за обсуждение результатов и ценные замечания.

Литература

1. *Ostachowicz W., Guemes A.* New Trends in Structural Health Monitoring. Verlag: Springer Vienna, 2013, 427 p.
2. *Bostrom A., Wickham G.R.* On the boundary conditions for ultrasonic transmission by partially closed cracks // Journal of Nondestructive Evaluation. 1991. Vol. 10. P. 139–149.
3. *Krenk S., Schmidt H.* Elastic Wave Scattering by a Circular Crack // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. 1982. Vol. 308. P. 167–198.
4. *Глушков Е.В., Глушкова Н.В.* Резонансные частоты рассеяния упругих волн пространственными трещинами // Прикладная математика и механика. 1998. Вып. 62. С. 866–870.
5. *Гринченко В.Г., Мелешко В.В.* Гармонические колебания и волны в упругих телах. Киев: Наукова Думка, 1981, 284 С.
6. *Глушков Е.В., Глушкова Н.В., Кривонос А.С.* Возбуждение и распространение упругих волн в многослойных анизотропных композитах // Прикладная математика и механика. 2010. Вып. 74. С. 419–432.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ УПРУГОГО СЛОЯ С ОТСЛОИВШИМСЯ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИМ СЕНСОРОМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И ИНТЕГРАЛЬНОГО ПОДХОДА¹

Голуб М.В., Шпак А.Н.

*Институт математики, механики и информатики,
Кубанский государственный университет, г. Краснодар*

Введение

В настоящее время получили широкое распространение системы оценки целостности объектов в режиме online, и значительная их часть связана с использованием упругих волн для неразрушающего контроля. Такие системы предполагают разработку и внедрение алгоритмов выявления дефектов на основе полученных сигналов. В этом случае часто используется набор встроенных в систему на этапе производства или эксплуатации пьезоэлектрических сенсоров, способных под действием электрического поля возбуждать и принимать сигналы [1]. Поэтому изучение динамического поведения актуаторов, а также зависимости генерируемых актуатором в упругом слое волн от области контакта представляется актуальной задачей, которая, несомненно, требует математического и компьютерного моделирования.

Задача моделирования пьезоэлектрической накладки, приклеенной к упругому слою, решена с использованием интегрального подхода в [2]. В работе [3] решалась похожая проблема в трехмерном случае с использованием точечных сил. Хотя подход, описанный авторами в [3], может быть использован для моделирования отслоения между актуатором и слоем, точность полученного решения уменьшается с увеличением частоты, что связано с невозможностью моделирования динамики актуатора на высоких частотах с использованием дельта-функций Дирака. В то же время, интегральный подход позволяет качественно моделировать динамическое поведение актуатора на более высоких частотах, но для описания отслоения между актуатором и слоем модель должна быть адаптирована под каждый отдельный случай отслоения.

Цель данной работы заключается в создании математической модели, описывающей динамическое поведение системы актуатор-слой на различных частотах с возможностью моделирования отслоения. Для этого авторами была разработана связанная модель, в которой пьезоактуатор описывается с помощью метода конечных элементов высокого порядка точности [4], а

¹Работа выполнена при финансовой поддержке (проект №14-08-00370)

упругий слой описывается с помощью полуаналитического интегрального подхода [2]. Преимущество метода конечных элементов заключается в простоте и эффективности моделирования отслоившегося актуатора, причем область отслоения может быть сложной, в то время как волновые колебания в дальней от актуатора зоне, представляющей наибольший практический интерес, будут описываться наиболее эффективным в этом случае полуаналитическим интегральным подходом. Далее модель связывается на основе условия непрерывности перемещений и напряжений между актуатором и слоем на границе контакта, которая в случае отслоения может иметь сложную форму.

I Математическая модель

Геометрия проблемы представлена на Рис. 1. На упругий слой $\Omega_1 = \{-\infty < x_1 < \infty, -H < x_2 < 0\}$, приклеен пьезоэлектрический актуатор занимающий область $\Omega_2 = \{a < x_1 < b, c < x_2 < c\}$, с областью контакта S_c между пьезоактуатором и слоем $S_c = \{a < x_1 < b, x_2 = 0\}$. Далее все обозначения, относящиеся к области Ω_1 , записываются с верхним индексом 1, а к области Ω_2 соответственно с верхним индексом 2.

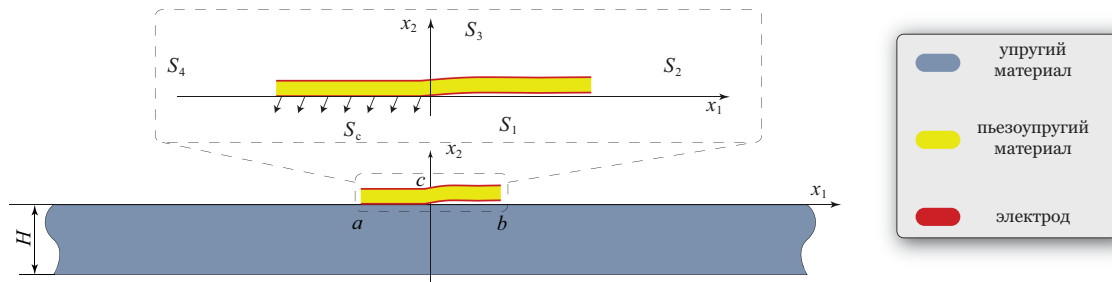


Рис. 1. Геометрия проблемы: пьезоактуатор на упругом слое

Перемещения в слое описываются уравнениями Ляме:

$$(\lambda + \mu)\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \mu\Delta\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) - \rho\frac{\partial^2\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2} = 0$$

здесь λ , μ и ρ — упругие константы Ляме и плотность материала в упругом слое, а $\mathbf{x} = \{x_1, x_2\}$. В качестве граничных условий в состоянии покоя можно записать отсутствие перемещений и скоростей перемещений в слое:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t < 0) = 0, \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t < 0) = \frac{\partial\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t < 0)}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

до момента времени $t = 0$, когда на актуатор подается электрический сигнал $p(t)$. А также отсутствие напряжений на нижней и верхней границах слоя:

$$\sigma_{ij} \cdot n_j = 0, i, j = \{1, 2\}, \quad \mathbf{x} = \{|x_1| < \infty, x_2 = 0\}/S_c$$

за исключением области контакта S_c между слоем и актуатором, где напряжения равны некоторой функции $\mathbf{q}(x_1, t)$. Кроме того, в пределах S_c наблюдается непрерывность в перемещениях

$$\sigma_{i2}^1(x_1, 0, t) = \sigma_{i2}^2(x_1, 0, t) = q_i(x_1, t), x_1 \in S_c$$

и напряжениях между слоем и актуатором

$$u_i^1(\mathbf{x}, t) = u_i^2(\mathbf{x}, t), \mathbf{x} \in S_c.$$

В то же время поведение актуатора описывается уравнениями состояния для пьезоэлектрического материала:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= C_{ijkl}u_{k,l} + e_{kij}\phi_{,k} \\ D_i &= e_{ikl}u_{k,l} - \epsilon_{ik}\phi_{,k} \quad i, j, k, l = \overline{1, 3} \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь σ_{ij} – компоненты тензора напряжений, u_k – вектор перемещений вдоль оси, $u_{k,l}$ – компоненты тензора деформаций, E_k – компоненты вектора электрического поля, D_i – компоненты вектора электрических смещений, причем $E_k = -\nabla\phi$. Свойства материала задаются тензором упругих констант пьезоматериала C , тензором констант пьезоэлектрических напряжений материала e , тензором диэлектрической проницаемости ϵ и плотностью ρ_2 . Нестационарные колебания в пьезоупругом материале описываются уравнениями движения и уравнениями электростатики:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij,j} &= \rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} \\ D_{i,i} &= 0 \quad i, j = \overline{1, 3} \end{aligned} \quad (3)$$

В качестве граничных условий для пьезоактуатора помимо описанных выше можно записать, что все границы актуатора свободны от напряжений, кроме области контакта S_c :

$$\sigma(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \mathbf{x} \in S_2 \cup S_3 \cup S_c$$

условия отсутствия электрического поля на боковых границах

$$D \cdot \nu = 0 \quad \mathbf{x} \in S_2 \cup S_4$$

а также наличие на нижней и верхней границах электрического потенциала начиная с момента времени $t = 0$:

$$\phi(\mathbf{x}, t < 0) = 0, \mathbf{x} \in S_1 \cup S_3$$

$$\phi(\mathbf{x}, t \geq 0) = V_1, \mathbf{x} \in S_1 \quad \phi(\mathbf{x}, t \geq 0) = V_2, \mathbf{x} \in S_3$$

Решение сначала находится в частотной области, т.е. рассматриваются гармонические колебания. Преобразование Фурье от гармонического решения $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \omega)$ в слое имеет вид:

$$\mathbf{U}^1(\mathbf{x}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K(\alpha, x_2, \omega) \mathbf{Q}(\alpha, \omega) e^{-i\alpha x_1} d\alpha$$

здесь $K(\alpha, x_2, \omega)$, $\mathbf{Q}(\alpha, \omega)$ – преобразования Фурье от матрицы Грина слоя и функции напряжений $\mathbf{Q}(x_1, \omega)$, заданной на границе S_c . Помимо решения связанной задачи нередко используется замена действия актуатора дельта-функцией Дирака $\mathbf{q} = \{0, \delta(x)\}$ [3]. Решение во временной области можно найти с помощью интегрального преобразования Лапласа:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \mathbf{U}^1(\mathbf{x}, \omega) P(\omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$

здесь $P(\omega)$ – преобразование Фурье от входного электрического сигнала $p(t)$. Для пьезоактуатора строится конечноэлементная модель с аппроксимацией на элементах полиномами Гаусса-Лежандра-Лобатто [4]. После чего для удовлетворения граничным условиям в узловых точках конечные элементы связывается с интегральными представлениями для слоя на основе равенства перемещений и напряжений в области контакта (1).

II Верификация модели

Для верификации математической модели во временной области был проведен эксперимент. На алюминиевую пластину толщиной мм с размерами мм был приклеен прямоугольный вытянутый пьезоактуатор из материала PIC 155 производства PI Ceramic GmbH. На актуатор подается электрический сигнал $p(t)$, который благодаря пьезоэлектрическим материалам преобразуется в механические перемещения, которые измеряются на поверхности пластины с помощью лазерного виброметра. В качестве входного электрического сигнала используются N циклов косинуса, сглаженных окном Ханна, на центральной частота 80 и 180 кГц.

$$p(t) = \frac{1}{2} \cos(2\pi f_0 t) \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi f_0 t}{N}\right) \right), 0 < t < \frac{N}{f_0}. \quad (4)$$

Были произведены две серии измерений с разной степенью контакта между пьезоактуатором и пластиной. В первом случае актуатор был частично приклеен к пластине, а во втором он был приклеен полностью. Таким образом, были получены данные для одинаковой экспериментальной установки, но для разной степени контакта между пьезоактуатором и слоем.

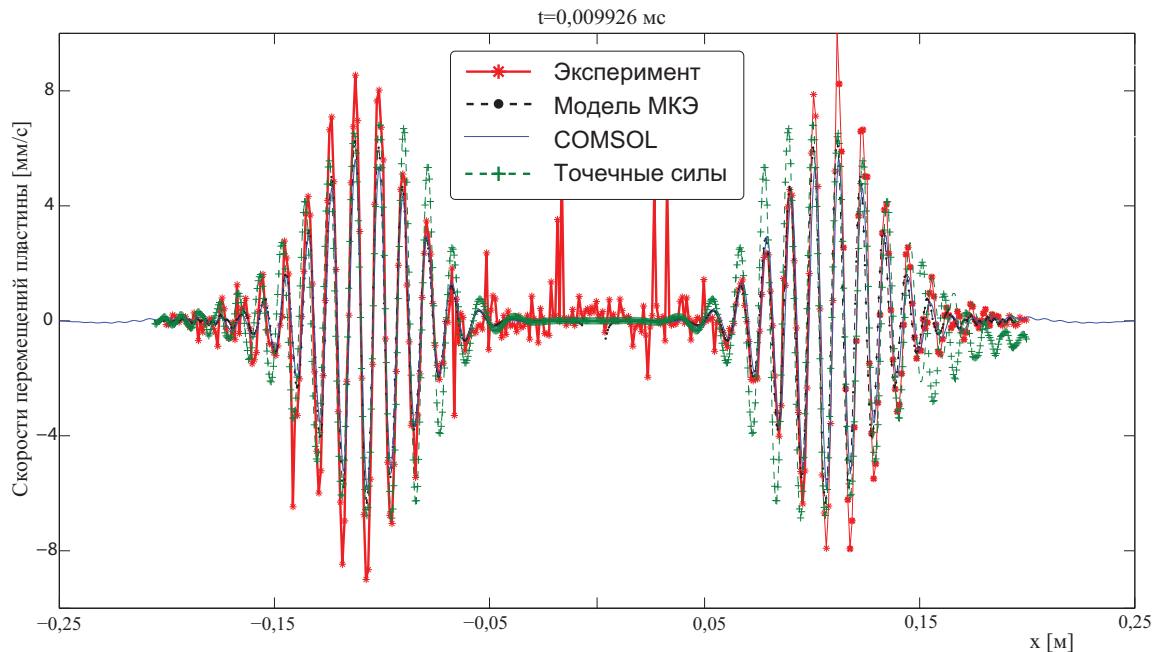


Рис. 2. Сравнение результатов численного моделирования с экспериментальными данными.

В частотной области была произведена верификация модели путем сравнения результатов расчетов с аналогичными результатами, полученными при решении гармонической задачи в коммерческой среде COMSOL. Для верификации математической модели во временной области был проведен эксперимент. График сравнения скоростей перемещений пластины $\partial u/\partial t$ в заданный момент времени, рассчитанных с помощью данной математической модели и полученных экспериментально, представлен на Рис. 2.

Литература

1. *Giurgiutiu V.* Structural Health Monitoring with Piezoelectric Wafer Active Sensors. Elsevier Academic Press, 2007. 740 p.
2. *Glushkov E., Glushkova N., Kvasha O., Seemann W.* Integral equation based modeling of the interaction between piezoelectric patch actuators and an elastic substrate // Smart Materials and Structures. 2007. Vol. 16. P. 650-664.
3. *Moll J., Golub M., Glushkov E., Glushkova N., Fritzen C.-P.* Non-axisymmetric Lamb wave excitation by piezoelectric wafer active sensors. Sensors and Actuators: A. Physical // 2012. Vol. 130. P. 113-121.
4. *Бубенчиков А.М., Попонин В.С., Мельникова В.Н.* Математическая постановка и решение пространственных краевых задач методом спектральных элементов // Вестник томского государственного университета. Математика и механика. 2008. №3(4). С. 70-76.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ С МОДЕЛЬЮ ЭНДОГЕННОЙ КОРРУПЦИИ ВО ВЛАСТНЫХ ИЕРАРХИЯХ¹

Горбати́ков Е.А.

*Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН,
Москва*

Введение

С середины 1980х годов в математической литературе, посвященной изучению феномена коррупции, доминирует подход, связанный с задачами о недобросовестном поведении (moral hazard) для нескольких агентов. Базовая модель взаимодействия принципал-агент-супервайзер была предложена в [6] и впоследствии развивалась в различных направлениях ([5]).

В настоящей работе разрабатывается альтернативный подход к рассмотрению коррумпированных государственных институтов. Его основой является системно-социальный подход, описывающий поведение властных иерархий, предложенный Михайловым в [2] и разработанный в [1]. Он позволяет принимать во внимание персональные характеристики каждой инстанции в иерархии, а также ее топологию, и рассматривать влияние этих характеристик на распределение властных полномочий в иерархии. В [3] системно-социальный подход был расширен на случай коррумпированных иерархий.

Уровень коррумпированности инстанций не является экзогенным (как предполагалось в исходной модели [3]) и зависит как от антикоррупционного законодательства, так и от интенсивности антикоррупционных мер. В [4] был предложен способ объединения теоретико-игрового и системно-социального подходов в рамках одной модели. В данной работе предполагается, что стационарный уровень коррумпированности инстанций является решением соответствующего дифференциального уравнения, учитывающего как собственные стремления чиновников, так и влияние окружающих. Основной целью работы является сравнение эффективностей антикоррупционных стратегий.

I Математическая модель

Исходная модель "Власть-общество" рассматривает иерархии как совокупности институтов, которые получают приказы от начальников и отдают приказы подчиненным. Передаваемые приказы понимаются как порции властных полномочий. В итоге, каждая инстанция в иерархии обладает

¹Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РГНФ №15-03-00435

неким объемом властных полномочий $p(x, t)$ (x – координата инстанции, t – время)². Уравнение исходной модели, решение которого описывает стационарное распределение властных полномочий в иерархии, выглядит следующим образом:

$$n(x) \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(n(x) \kappa(x) \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \right) + n(x) k(x) (p^0(x, t) - p(x, t)), \quad (1)$$

$0 \leq x \leq l$, с граничными условиями

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{x=0} = 0; \quad \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{x=l} = -\kappa(l)p. \quad (2)$$

Здесь $n(x)$ – число инстанций на уровне x , $p^0(x)$ – желаемый, с точки зрения гражданского общества, уровень полномочий инстанции³.

Степень коррумпированности инстанции определяется как доля приказов, которые инстанция отдает за взятку, от общего числа приказов в законопослушном случае. При этом эти приказы могут быть как законными ("обычная" коррупция), так и незаконными (коррупция сверхдействия), кроме того, инстанция может за взятку не отдать законный приказ (коррупция бездействия)⁴. В данной работе рассматриваются только иерархии, подверженные "обычной" коррупции⁵.

Уровни коррумпированности инстанций должны зависеть от характеристик инстанций, от их властных полномочий, а также от принимаемых антикоррупционных мер. В настоящей работе предполагается, что стационарные уровни коррумпированности инстанций определяются следующим дифференциальным уравнением:

$$n(x) \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(n(x) \xi^2(x) \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \right) + n(x) \mu(x, p) (c^0(x, t) - c(x, t)), \quad (3)$$

$0 \leq x \leq l$, с граничными условиями

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x=0} = \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x=l} = 0. \quad (4)$$

Здесь $\xi(x)$ – характеристика, отвечающая за восприимчивость инстанции к уровню коррумпированности ее окружения, $\mu(x, p)$ отвечает за собственные стремления инстанций. Уровень $c^0(x, t)$ является неким результирующим желаемым уровнем коррупции инстанции и зависит, в числе прочего, от применяемых антикоррупционных мер.

²Подробное описание модели см. в [1].

³Смысл граничных условий разъясняется в [4].

⁴Подробнее о типах коррупции см. [1], [3]. Возможны также другие определения степеней коррумпированности. Различные определения степеней коррумпированности могут быть интерпретированы как различные реакции инстанций на антикоррупционные меры. Однако в случае наличия только "обычной" коррупции различные определения приводят к идентичным результатам.

⁵В этом случае уравнение баланса властных полномочий (1) не претерпевает изменений, при наличии других типов коррупции это не так, см. [1].

Основной задачей работы является сравнение эффективностей антикоррупционных стратегий. Стратегия характеризуется начальным и конечным стационарными состояниями коррупции в иерархии. Обозначим эти состояния как C_1 и C_2 , а желаемые профили коррумпированности – как C_1^0 и C_2^0 . Эффективностью антикоррупционной стратегии назовем следующую величину

$$E = \frac{D(C_2) - D(C_1)}{V(C_2^0) - V(C_1^0)}, \quad (5)$$

где D и V – ущерб от действий иерархии и стоимость полного подавления коррупции в иерархии ⁶, вычисляемые по формулам

$$D = \frac{\int_0^l c(x) \kappa(x) \frac{\partial p}{\partial x} dx}{\int_0^l \kappa(x) \frac{\partial p}{\partial x} dx}; \quad V = \frac{\int_0^l c^0(x) \kappa(x) \frac{\partial p}{\partial x} p(x) dx}{\int_0^l \kappa(x) \frac{\partial p}{\partial x} dx \cdot \int_0^l p^0(x) dx}. \quad (6)$$

Эффективность стратегии, таким образом – отношение изменения ущерба к изменению стоимости полного подавления коррупции. Чем больше эффективность – тем дешевле оказывается избавление от единицы ущерба в иерархии.

II Численный эксперимент

В этом разделе представлены результаты численного вычисления эффективностей ряда стратегий для разных типов иерархий с различными параметрами.

Исходное состояние иерархий характеризуется уровнем желаемой коррумпированности $c^0(x) = 0,5$ для всех инстанций (то есть, инстанции хотели бы выполнять за взятку каждое второе свое действие). Четверем основным антикоррупционным стратегиям соответствуют четыре конечных состояния уровня желаемой коррумпированности инстанций: подавлению старших чиновников соответствует конечное состояние $c^0(x) = 0,5x$; подавлению младших – состояние $c^0(x) = 0,5(1-x)$, подавлению средних – $c^0(x) = |0,5-x|$, подавлению крайних – $c^0(x) = 0,5 - |0,5-x|$.

В Таблицах 1 и 2 приведены эффективности описанных антикоррупционных стратегий для цепочечных иерархий ($n(x) \equiv 1$) различной централизации ⁷. В Таблицах 3 и 4 представлены аналогичные расчеты эффективностей для иерархий сильной централизации и различных разветвленностей ⁸.

⁶ Ущерб и стоимость в (6) нормируются на суммарные полезные действия иерархии. Смысл этой нормировки подробно разъясняется в [1]

⁷ Под сильной централизацией понимается выпуклая функция желаемых властных полномочий $p^0(x)$, под средней – линейная, под слабой – вогнутая. В расчетах: $p_{strong}^0(x) = \frac{1}{1+9x}$, $p_{semi}^0(x) = 1 - 0,9x$, $p_{weak}^0(x) = \sqrt{1-0,99x}$ соответственно

⁸ $n(x) = 1$ – слабая разветвленность, $n(x) = 1+x$ – средняя разветвленность, $n(x) = e^{2x}$ – сильная разветвленность. Численные значения остальных параметров следующие: $m = 1$, $l = 1$, $k(x) \equiv 1$, $\kappa(x) \equiv 0,05$

Таблица 1. Эффективности стратегий. Цепочечная иерархия, $\mu(x, p) = mp$

	Централиз.	Младших	Старших	Средних	Крайних	E_{max}/E_{min}
$\xi = 0, 25$	Слабая	1.0164	1.0415	0.9008	1.2255	1.3604
	Средняя	1.0272	0.9716	0.8636	1.2000	1.3895
	Сильная	1.0820	0.7393	0.8142	0.8640	1.4636
$\xi = 0, 1$	Слабая	1.0979	0.9637	0.9611	1.1380	1.1840
	Средняя	1.1057	0.9117	0.9331	1.0948	1.2129
	Сильная	1.0571	0.7555	0.8540	0.8339	1.3992
$\xi = 0, 05$	Слабая	1.1168	0.9441	0.9918	1.0921	1.1829
	Средняя	1.1229	0.8956	0.9734	1.0326	1.2538
	Сильная	1.0357	0.7618	0.8973	0.7896	1.3596

Таблица 2. Эффективности стратегий. Цепочечная иерархия, $\mu(x, p) = \frac{m}{p}$

	Централиз.	Младших	Старших	Средних	Крайних	E_{max}/E_{min}
$\xi = 0, 25$	Слабая	1.1363	0.9213	0.8915	1.2393	1.3902
	Средняя	1.1841	0.8508	0.8898	1.1619	1.3918
	Сильная	1.1297	0.7271	0.9448	0.7495	1.5537
$\xi = 0, 1$	Слабая	1.1286	0.9323	0.9682	1.1258	1.2106
	Средняя	1.1468	0.8828	0.9648	1.0502	1.2990
	Сильная	1.0549	0.7590	0.9405	0.7548	1.3976
$\xi = 0, 05$	Слабая	1.1279	0.9344	0.9959	1.0850	1.2070
	Средняя	1.1420	0.8875	0.9885	1.0152	1.2868
	Сильная	1.0445	0.7635	0.9405	0.7551	1.3833

Результаты численного эксперимента позволяют сформулировать следующие выводы:

1) Подавление коррупции среди младших чиновников всегда оказывается выгоднее ее подавление среди старших. Для иерархий слабой централизации и небольшой разветвленности наиболее эффективной стратегией может оказаться подавление крайних, однако для иерархий сильной централизации эта стратегия, напротив, наименее эффективна.

2) При увеличении параметра ξ , то есть при относительном увеличении влияния окружения на коррумпированность, для всех рассмотренных типов иерархий увеличивается чувствительность к выбору стратегии (см. последний столбец таблиц).

3) Выбор антикоррупционной стратегии почти не зависит от типа зависимости $\mu(x, p)$ от уровня власти p .

В дальнейшем предполагается провести численные исследования аналогичной модели, учитывающей все три возможные типа коррупции.

Таблица 3. Эффективности стратегий. Сильная централизация, $\mu(x, p) = tr$

	Централиз.	Младших	Старших	Средних	Крайних	E_{max}/E_{min}
$\xi = 0, 25$	Слабая	1.0820	0.7393	0.8142	0.8640	1.4636
	Средняя	1.6431	1.0160	1.1683	1.2621	1.6173
	Сильная	3.5490	1.8010	2.2000	2.7070	1.9705
$\xi = 0, 1$	Слабая	1.0571	0.7555	0.8540	0.8339	1.3992
	Средняя	1.5665	1.0612	1.2223	1.2195	1.4762
	Сильная	3.2653	1.9852	2.3380	2.5783	1.6448
$\xi = 0, 05$	Слабая	1.0357	0.7618	0.8973	0.7896	1.3596
	Средняя	1.5122	1.0816	1.2836	1.1495	1.3981
	Сильная	3.0761	2.0767	2.4853	2.3833	1.4812

Таблица 4. Эффективности стратегий. Сильная централизация, $\mu(x, p) = \frac{m}{p}$

	Централиз.	Младших	Старших	Средних	Крайних	E_{max}/E_{min}
$\xi = 0, 25$	Слабая	1.1297	0.7271	0.9448	0.7495	1.5537
	Средняя	1.6356	1.0301	1.3501	1.0883	1.5878
	Сильная	3.2610	1.9764	2.6072	2.2524	1.6500
$\xi = 0, 1$	Слабая	1.0549	0.7590	0.9405	0.7548	1.3976
	Средняя	1.5258	1.0823	1.3476	1.0928	1.4098
	Сильная	3.0472	2.1022	2.6345	2.2266	1.4495
$\xi = 0, 05$	Слабая	1.0445	0.7635	0.9405	0.7551	1.3833
	Средняя	1.5096	1.0903	1.3472	1.0939	1.3846
	Сильная	3.0139	2.1229	2.6378	2.2251	1.4197

Литература

1. Михайлов А.П. Моделирование системы "Власть-общество". Москва: Физматлит, 2006. 144 с.
2. Mikhailov A.P. Mathematical Modeling of Power Distribution in State Hierarchical Structures Interacting with Civil Society // Proceedings of 14th IMACS World Congress, Atlanta, USA, 1994. Vol. II, P. 831-834
3. Mikhailov A.P. Efficient Strategies of Corruption Suppression in State Power Hierarchies // Proceedings of 15th IMACS World Congress, Berlin, Germany, 1997. Vol. III, P. 727-733
4. Mikhailov A.P., Gorbatikov E.A., Kornilina E.D. A System-Social Approach to the Modelling of Corruption. // Mediterranean Journal of Social Sciences, 2013. Vol. 4. N 9. P. 332-342.
5. Rose-Ackerman S. Corruption: A study in political economy. // Academic Press, 2013. 615 p. Corruption: A study in political economy. ? Academic Press, 2013.

6. *Tirole J.* Hierarchies and bureaucracies: On the role of collusion in organizations. // Journal of Law, Economics, and Organization, 1986. P. 181-214.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОЦИРКУЛЯЦИИ КРОВИ

Городнова Н.О.

Институт Вычислительной Математики, Москва

Введение

Среди причин смертности населения в развитых странах ведущее место занимают рак и болезни системы кровообращения. В связи с этим становятся особо актуальными исследования развития и влияния на организм опухолевого ангиогенеза. К подобным исследованиям относится и моделирование динамики микроциркуляторного русла.

В данной работе планируется создать модель микроциркуляторного русла в области опухолевого ангиогенеза. Ангиогенез – процесс образования новых кровеносных сосудов в органе или ткани [1]. В здоровом организме процессы ангиогенеза протекают с умеренной интенсивностью. В опухолевых же тканях, особенно в тканях злокачественных опухолей, ангиогенез протекает постоянно и очень интенсивно.

В [2] подробно описаны части микроциркуляторной системы, полученной с помощью методов с высоким разрешением, такие как МКТ (микрокомпьютерная томография является компьютерной томографией исключительно высокого разрешения, достигающего уровня микронов или даже сотен нанометров.) До недавнего времени моделирование этого типа кровотока в опухоли было затруднено по причине ограниченной информации относительно подробной 3D морфологии сосудистой опухоли. Методы с высоким разрешением могут обеспечить такие 3D данные с большей точностью и проложить путь для использования вычислительных модели кровотока в медицине. В частности, пространственная визуализация с высоким разрешением, охватывающая сосудистую сеть всей опухоли позволит проводить реалистичное моделирование кровотока в каждом сегменте сети сосудистой опухоли. Математическое моделирование, основанное на результатах изучения гемодинамики, может помочь в детальном понимании распределения крови в сосудистой сети в различных пространственных масштабах.

I Методика построения сети

На основе приведенных в [2] моделях построен 3D граф сосудистой сети. Сосудистая сеть строится в единичном кубе. На первом этапе в кубе

произвольно размещаются узлы графа, так что их координаты подчиняются равномерному распределению. После этого для каждого узла находятся три ближайших узла и связываются с ним сосудами. Далее из распределения каждому сосуду присваивается диаметр. Микрососудистая сеть строится из предположения о равномерном распределении питательных веществ, переносимых кровью по органам и тканям. Чтобы обеспечить такое распределение сосудов по объему используется "силовой" алгоритм, основанный на следующих уравнениях:

Направляющий вектор между двумя вершинами :

$$\overrightarrow{p_u p_\nu} = \frac{p_\nu - p_u}{\|p_\nu - p_u\|} \quad (1)$$

Сила пружины, действующая между каждой парой смежных вершин:

$$\overrightarrow{f_{spring}(p_u, p_\nu)} = c_{spring} \log \frac{\|p_\nu - p_u\|}{l} \overrightarrow{p_\nu p_u} \quad (2)$$

Сила отталкивания действует между каждой парой несмежных вершин u , ν :

$$\overrightarrow{f_{rep}(p_u, p_\nu)} = \frac{c_{rep}}{\|p_\nu - p_u\|^2} \overrightarrow{p_u p_\nu} \quad (3)$$

Для каждого узла вычисляется результирующая сила и узел передвигается, что позволяет обеспечить равномерное распределение узлов и ребер по объему. На полученной сети достраиваются капиллярные сосуды.

II Математическая модель кровотока

На построенным таким образом графе вычисляется распределение кровотока в области микроциркуляции по следующим формулам:

$$G_{ij} = \frac{\pi \cdot D_{ij}^4}{128 \cdot \mu_{ij} \cdot L_{ij}} \quad (4)$$

$$Q_{ij} = G_{ij} \cdot (P_i - P_j) \quad (5)$$

$$\sum_{i,j=1}^N Q_{ij} = 0 \quad (6)$$

Где G_{ij} – гидравлическая проводимость сегмента, Q_{ij} – скорость потока, μ_{ij} – вязкость. В ближайшее время планируется, учесть в дано математической модели нелинейные эффекты связанные с микроциркуляцией.

В процессе роста злокачественной опухоли сеть сосудов вокруг нее изменяется (растут новые сосуды и исчезают некоторые старые), соответственно построенный граф так же меняется в несколько этапов. Совмещая ее

с существующей моделью зависимости изменения опухоли от поступающих питательных веществ [3] можно ответить на вопрос, насколько влияет ангиогенез на рост опухоли, и проанализировать эффективность антиангиогенной терапии.

Литература

1. Шмидт Р., Тевс Г. Физиология человека: учебник для вузов: в 2 ч. Москва: Мир, 1996, Ч. 2
2. Axel R. Pries, Bettina Reglin, Timothy W. Secomb. Modeling of angioadaptation: insights for vascular development // Int. J. Dev. Biol. 55: 399-405
3. Spyros K. Stamatelos, Eugene Kim, Arvind P. Pathak, Aleksander S. Popel. A bioimage informatics based reconstruction of breast tumor microvasculature with computational blood flow predictions // Microvascular Research 91 (2014) 8-21.
4. Холодов А.С. Некоторые динамические модели внешнего дыхания и кровообращения с учетом их связности и переноса веществ. // в сб. под ред. Белоцерковский О.М., Холодов А.С., Компьютерные модели и прогресс медицины, С.127-163. М.: Наука, 2001.
5. Симаков С.С. Численное исследование динамики системного кровотока при кровопотере. // Информационные технологии моделирования и управления, 8(33):931-938, 2006.
6. Симаков С.С. А.С. Холодов, А.В. Евдокимов Методы расчета глобального кровотока в организме человека с использованием гетерогенных вычислительных моделей // В кн.: Медицина в зеркале информатики. М.: Наука, 2008. С. 124-170.
7. Абакумов М.В. Методика математического моделирования сердечно-сосудистой системы. / М. В. Абакумов, Н. В. Соснин, А. П. Фаворский, и др. // Математическое моделирование, 12:106-117, 2000.
8. Ашметков И.В. Исследование эволюции пульсовых волн на графе эластичных сосудов: дис. канд. физ.-мат. наук / МГУ. Москва, 2003. 146 с.
9. Каро К., Педли Т., Шротер Р. и др. Механика кровообращения / М.: Издательство Мир, 1981. Ч. 2. 605 с.
10. Formaggia L. Mathematical Modeling and Numerical Simulation of the Cardiovascular System / L. Formaggia, A. Quarteroni // Computational Models for the Human Body, Special Volume (N. Ayache, Guest Editor) of Handbook of Numerical Analysis. 2004. Vol. XII. Pp. 3-127.

11. *Formaggia, L., Nobile, F., Quarteroni, A., Veneziani, A.* Multiscale modelling of the circulatory system: a preliminary analysis. *Computing, Visualization in Science*, 2:75-83, 1999.
12. *Andereeva ES, Panuncev VS, Ivanova NE.* Delayed results of the cerebral AVM embolisation treatment by hystoacryl. *Bulletin of the Siberian medicine* 2009; 3(2):97(100) (In Russian).
13. *Rjabukhin VE, Klimov AB, Orlov KYu, Krylov VV.* Endovascular treatment of cerebral arteriovenous malformations. In *Surgery of cerebral aneurysms*, in 3 volumes, vol. 3, Krylov VV. (ed.). T. A. Alekseeva: Moscow, 2012.
14. *Гайдар Б.В., Семенютин В.Б., Парфенов В.Е., Свистов Д.В.* Транскраниальная доплерография в нейрохирургии. Санкт-Петербург, 2008.
15. *Guglielmi G.* Analysis of the hemodynamic characteristics of brain arteriovenous malformations using electrical models: baseline settings, surgical extirpation, endovascular embolization, and surgical bypass. *Neurosurgery*. 2008.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ ПОСРЕДСТВОМ АЛГОРИТМА КАБАРЕ

Данилин А.В.* , Соловьев А.В.**

*Институт проблем Безопасного Развития Атомной
Энергетики РАН, Москва*

Введение

В настоящей работе представлен явный численный алгоритм для расчета течений смесей идеальных газов в двумерных областях, построенный на основе одномерного прототипа, предложенного в работе [1]. Приведены физическая модель и уравнения движения смеси в консервативной и характеристической формах. Дискретизация уравнений движения произведена по методике "кабаре" [2]-[6]. Алгоритм испытан на задаче о прохождении ударной волны в воздухе через неоднородность из тяжелого газа, начальные условия для которого адаптированы из рассмотренных другими авторами натуральных и численных экспериментов [7],[8]. Показано хорошее совпадение расчетов по предложенному алгоритму с результатами этих экспериментов.

I Уравнения движения

Описываемая физическая модель газовой смеси строится в следующих предположениях. Смесь состоит из N идеальных газов с постоянными удельными теплоемкостями при постоянном объеме и показателями адиабаты. Смесь находится в условиях, когда проскальзыванием её отдельных компонентов можно пренебречь, что приводит к так называемой односкоростной модели. Также предполагается локальное термодинамическое равновесие, то есть однотемпературность модели. Смесь существует в условиях отсутствия фазовых и химических превращений. Внешние силы отсутствуют. Вязкость и диффузия отсутствуют. Исходя из вышеописанного очевидным образом следует набор уравнений движения газовой смеси. Уравнения неразрывности для компонентов и законы сохранения импульса и энергии для смеси:

$$\frac{\partial \rho \xi_f}{\partial t} + \frac{\partial \rho \xi_f u}{\partial x} + \frac{\partial \rho \xi_f v}{\partial y} = 0, f = \overline{1, N}; \sum_{f=1}^N \xi_f \equiv 1; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial \rho u v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0; \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho v u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v^2}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} = 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial u(\rho E + p)}{\partial x} + \frac{\partial v(\rho E + p)}{\partial y} = 0; \quad (4)$$

где ξ_f — массовые доли отдельных компонентов смеси, (u, v) — вектор скорости смеси, ρ — общая плотность газовой смеси, p — давление смеси, E — полная энергия единицы массы смеси.

Уравнение состояния смеси задается следующим соотношением:

$$p = (\bar{\gamma} - 1)\rho(E - u^2/2 - v^2/2); \quad (5)$$

где $\bar{\gamma} = \frac{\sum_{f=1}^N \gamma_f C_f \xi_f}{\sum_{f=1}^N C_f \xi_f}$ — эффективный показатель адиабаты смеси, в котором γ_f, C_f — показатели адиабаты и удельные теплоемкости при постоянном объеме отдельных компонентов смеси соответственно.

II Результаты расчетов

Начальные условия данной задачи взяты из работы [7], прототипом для которой послужил эксперимент из [8]. Расчетная область — прямоугольник $[0, L_x] \times [0, L_y] = [0, 0.45] \times [0, 0.2]$. В расчетной области задана расчетная сетка $N_x \times N_y = 720 \times 320$ расчетных ячеек. В начальный момент времени в прямоугольнике $[0.1, 0.25] \times [0, 0.1]$ находится тяжелый газ — фторид серы VI (SF_6), в остальной части расчетной области находится воздух. Пузырь SF_6 и окружающая воздушная среда находятся в статическом и термодинамическом равновесии. На левой грани задаются условия входа ударной волны. На верхней, нижней и правой гранях задается условие стенки со свободным проскальзыванием. Точные физические параметры задачи в начальный момент времени приведены в таблице 1.

На рис.6 представлены распределения модуля градиента плотности смеси в различные моменты времени: $(a-b)$ — первоначальная ударная волна при прохождении через область с тяжелым газом порождает горизонтально движущуюся ударную волну, имеющую меньшую в сравнении с первоначальной скорость, а при прохождении над этой областью порождает на границе раздела сред ударную волну, движущуюся вниз; (c) — на границе раздела сред развивается неустойчивость Релея-Тейлора, справа от области с тяжелым газом — искривленный фронт отраженной от правой стенки ударной волны; $(d-f)$ — турбулизация течения в области с тяжелым газом после прохождения отраженной ударной волны. Сравнение результатов расчетов, приведенных на рис.6, с приведенными в [7], как и в предыдущем эксперименте, показывает хорошее совпадение эволюции границы раздела двух фаз и распределения отраженных ударных волн вплоть до выраженной турбулизации течения.

Таблица 1. Начальные параметры течения в тестовой задаче

Вел.	Уд. волна	Воздух	SF_6	Ед. изм.
ρ	1.6672	1.153	5.805	кг/м ³
γ	1.4	1.4	1.076	1
u	133.273	0	0	м/с
p	163256	96856	96856	Па
C_v	720.0	720.0	613.46	Дж/(кг К)

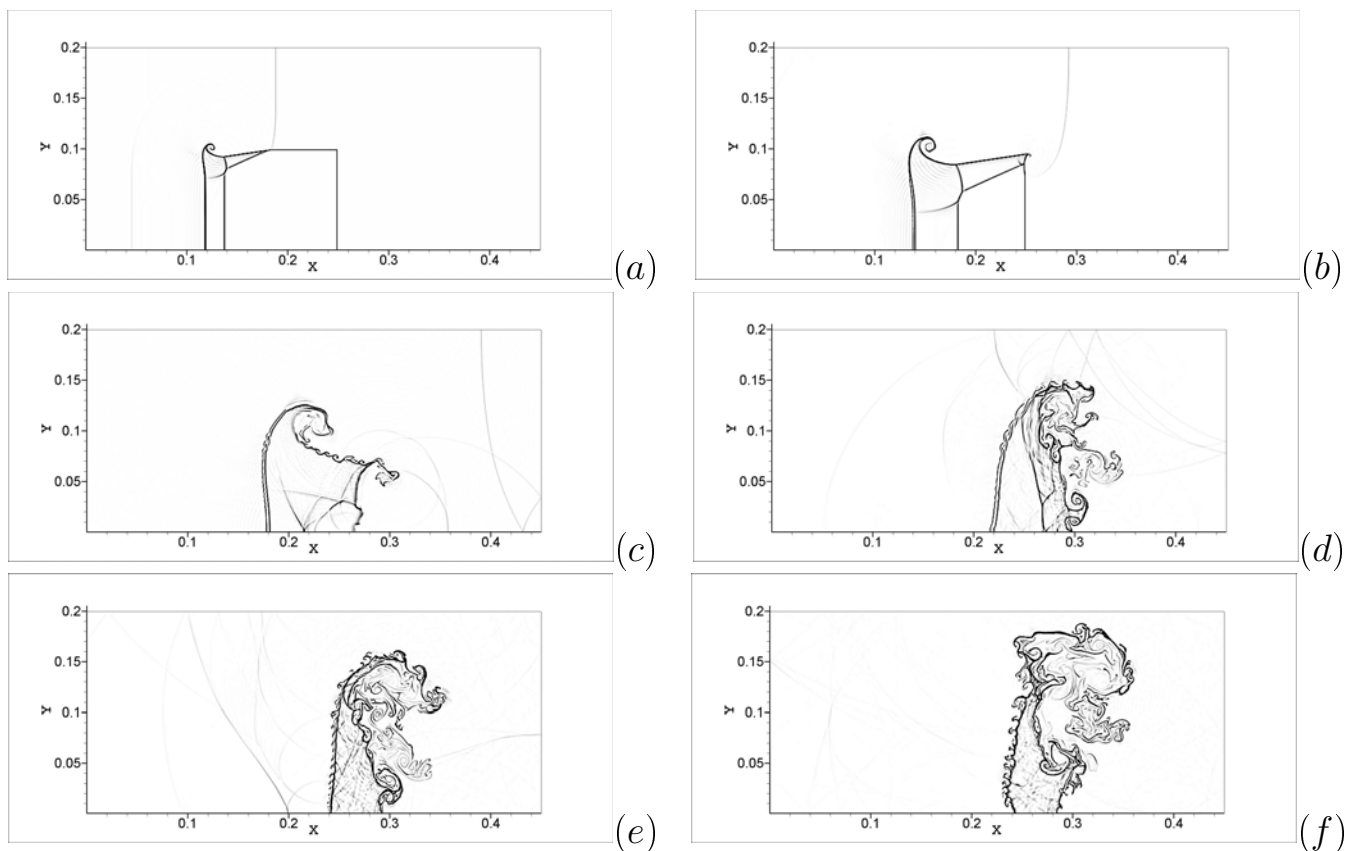


Рис. 1. Эволюция прямоугольной неоднородности при прохождении через нее ударной волны на моменты времени $T = 206$ мс (a), 446 мс (b), 726 мс (c), 1726 мс (d), 2046 мс (e), 2846 мс (f). Время отсчитывается от момента столкновения ударной волны с неоднородностью. $CFL = 0.45$

Заключение

В настоящей работе построен явный численный алгоритм для решения задач многокомпонентной газовой динамики в прямоугольных двумерных областях на основе методики "кабаре". На сравнении проведенных численных экспериментов с работами других авторов показало высокое качество решений, получаемых при помощи приведенного алгоритма, что позволяет использовать результаты данной работы при обобщении многокомпонент-

ного алгоритма "кабаре" на трехмерный случай со структурированными и неструктурированными пространственными сетками.

Литература

1. Данилин А. В., Соловьев А. В. Модификация схемы <кабаре> для расчета течения многокомпонентных газовых смесей // Вычислительные методы и программирование. 2015. 16. 18-25.
2. Головизнин В. М., Самарский А. А. Некоторые свойства разностной схемы Кабаре // Математическое моделирование. 1998. 10, №1. 101-116.
3. Головизнин В. М., Карабасов С. А. Нелинейная коррекция схемы Кабаре // Математическое моделирование. 1998. 10, №12. 107-123.
4. Головизнин В. М., Карабасов С. А., Кобринский И. М. Балансно-характеристические схемы с разделенными консервативными и потоковыми переменными // Математическое моделирование. 2003. 15, №9. 29-48.
5. Головизнин В. М. Балансно-характеристический метод численного решения одномерных уравнений газовой динамики в эйлеровых переменных // Математическое моделирование. 2006. 18, №11. 14-30.
6. Кондаков В. Г. Обобщение схемы КАБАРЕ на многомерные уравнения задач газовой динамики, Диссертация на соискание степени кандидата ф.-м. наук. Москва. 2014.
7. Bates K.R., Nikiforakis N., Holder D. Richtmyer - Meshkov instability induced by the interaction of a shock wave with a rectangular block of SF_6 // Physics of Fluids. 2007. 19. P. 123-321
8. Holder D. A. et al. Shock tube experiments on Richtmyer-Meshkov instability growth using an enlarged double bump perturbation // Laser Part. Beams. 2003. 21, №3. P.411-418.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЁТА ДОЗ ОБЛУЧЕНИЯ ОТ РАДИОАКТИВНОГО ОБЛАКА ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМЫ С УЧЕТОМ ЭКРАНИРОВАНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ ЗДАНИЯМИ

Дзама Д.В., Лозинг Н.М., Сороковикова О.С.,
Семенов В.Н.

*Институт проблем безопасного развития атомной
энергетики, Москва*

Введение

Атмосферный перенос радиоактивной примеси является основным фактором распространения радиоактивных веществ при выбросах на объектах с использованием ядерной энергии (ОИЯЭ). Для таких объектов актуальной является задача обоснования безопасности, поддержка принятия решений при возникновении аварийной ситуации разной степени тяжести в пределах самого промышленного объекта. Их решение требует прогнозирования процессов атмосферной дисперсией газо-аэрозольной примеси с последующей оценкой радиационной обстановки. В масштабе промышленного объекта (или городского квартала) характерный размер облака примеси сопоставим с размерами зданий. Здания в своей совокупности формируют сложное трёхмерное поле ветра вокруг себя, включая такие эффекты, как аэротермодинамические тени, циркуляционные зоны, и так далее. Решению этой задачи посвящены работы зарубежных специалистов [1, 2]. В России так же развивается это направление численного моделирования [3–5].

Необходимо на основе временной динамики трёхмерных полей объёмной и поверхностной концентрации радиоактивных веществ при, вообще говоря, нестационарном выбросе, произвести расчёт радиационной обстановки: рассчитать мощность дозы и дозу от внешнего облучения (расчёт мощности дозы по ингаляционному пути тривиален). На данный момент не существует методик расчёта мощности доз облучения от облака произвольной формы, не говоря о загрязнённой произвольным образом произвольной поверхности. Этой проблеме и попытке её решения посвящена данная работа.

I Математическая модель расчёта мощности дозы от внешнего облучения

Рассмотрим расчётную область в виде прямоугольного параллелепипеда и застройку произвольной формы – некоторый массив замкнутых объёмных объектов, моделирующих промышленную застройку. Будем считать, что эти

объекты непроницаемы для ветра, примеси и ионизирующего излучения. В воздухе и на поверхностях объектов произвольным образом распределён какой-либо радионуклид. Будем предполагать, что мощность дозы от точечного источника пропорциональна $1/r^2$ (в модели пренебрегается эффектами рассеяния, поглощения и переизлучения) [6], где r – расстояние от точечного источника до точки наблюдения. Тогда мощность дозы от облака и поверхности в точке \vec{r}_0 вычисляется следующим образом:

$$d_v(\vec{r}_0) = \gamma^P \iiint \frac{O(\vec{r}, \vec{r}_0) C^V(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}_0|^2} dx dy dz \quad (1)$$

$$d_s(\vec{r}_0) = \gamma^P \iint \frac{O(\vec{r}, \vec{r}_0) C^S(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}_0|^2} dS \quad (2)$$

В этих уравнениях: \vec{r}_0 – точка наблюдения; d_v и d_s – мощность дозы облучения от облака и поверхности, Зв/с; γ^P – мощность дозы облучения от точечного источника активностью 1 Бк на расстоянии 1 м от него; C^V – объёмная концентрация радионуклида в воздухе, Бк/м³; C^S – поверхностная концентрация радионуклида на поверхности зданий и земли, Бк/м²; $O(\vec{r}, \vec{r}_0)$ – так называемый фактор (оптической) видимости. Он является индикатором видимости точки \vec{r} из точки \vec{r}_0 : отрезок между ними не пересекает зданий. В уравнении 1 интегрирование производится по расчётной области, в уравнении 2 – по поверхности зданий и земли. $O(\vec{r}, \vec{r}_0)$ принимает значение 1 для видимых из точки \vec{r}_0 точек, и значение 0 – в обратном случае. Введение этого множителя позволяет учесть эффект экранирования облака зданиями.

В численной постановке, при использовании декартовых прямоугольных (и равномерных) сеток, реальные здания застройки аппроксимируются ступенчатым образом: совокупностью непроницаемых в указанном выше смысле, так называемых фиктивных, ячеек. Аппроксимационная геометрия зданий может сильно искажать их реальный прототип. Особенно искажаются те поверхности, размер которых сопоставим с размером ячейки). Множество точек наблюдения, то есть точек, в которых рассчитывается мощность дозы, – все воздушные ячейки приземного расчётного слоя.

II Учёт эффекта экранирования

Необходимо для каждой точки наблюдения вычислить свой массив факторов видимости остальных ячеек сетки. Было разработано две версии алгоритма. В первой версии точка наблюдения соединялась со всеми ячейками расчётной сетки. Рассматривался каждый полученный отрезок. Если полученный отрезок пересекл твёрдые грани, то исследуемая ячейка считалась

невидимой, и видимой – в обратном случае. Время расчёта массива видимости значительно превосходило время исполнения самой процедуры суммирования по всем ячейкам сетки. Сам расчёт мощности дозы занимал порядка часа на типичных сетках – и это только для одного момента времени.

В связи с этим была предложена более опертивная версия: идея заключалась в максимальном сокращении количества отрезков для определения факторов видимости: точка наблюдения соединялась не с каждой ячейкой сетки, а только с расположенными на границе расчётной области. Все воздушные ячейки, котрые пересёк отрезок по мере удаления от точки наблюдения до пересечения твёрдой грани, считаются видимыми. Процедура повторяется для всех отрезков. По умолчанию все ячейки невидимы.

Ускоренный вариант алгоритма оправдал себя: время расчёта мощности дозы сократилось в 20 раз для той же типичной задачи. Новый алгоритм был распараллелен по множеству точек наблюдения, что дало почти линейное дополнительное ускорение в зависимости от количества ядер компьютера.

III Верификация

Разработанная численная методика расчёта мощности доз, как от трёхмерного облака, так и от загрязнённой поверхности, нуждалась в верификации. В данной работе представлены результаты верификации методики расчёта мощности дозы от облака: в присутствии застройки и без неё. В качестве облака рассмотрим шар радиусом $R = 30$ м, расположенный в точке $\vec{r}_0 = (66; 59; 45)$ и расчётную область $[0; 100] \times [0; 100] \times [0; 100]$. Пусть концентрация условного радиоактивного вещества в расчётной области вне шара равно 0, а внутри шара:

$$c(\vec{r}) = \exp \left\{ -\frac{|\vec{r} - \vec{r}_0|^2}{2(R/2)^2} \right\} \quad (3)$$

Допустим, что в расчётной области отсутствует какая-либо застройка. Несложен математический расчёт мощности дозы от шара со сферически-симметричным распределении концентрации активности в нём:

$$d_v(L) = \frac{2\pi\gamma^P}{L} \int_0^R r \cdot c(r) \ln \frac{L+r}{L-r} dr \quad (4)$$

Здесь L – расстояние от точки наблюдения до центра шара. Интегрирование производится по расстоянию до центра шара r . Интеграл в уравнении 4, вообще говоря, не берётся аналитически. В данной работе он брался численно, с точностью результата 10^{-10} . Для верификации, значение мощности дозы, полученное численно на декартовой сетке, сравнивалось со значением мощности дозы, рассчитанным по уравнению 4. На рисунке 1 приведены графики отнормированных на дозовый коэффициент γ^P мощностей доз, вдоль

отрезков, соединяющих точки $(25; 100; 1)$ и $(100; 25; 1)$ для двух разрешений сетки: 1 м и 5 м. Графики на рисунке 1 показывают сходимость результата

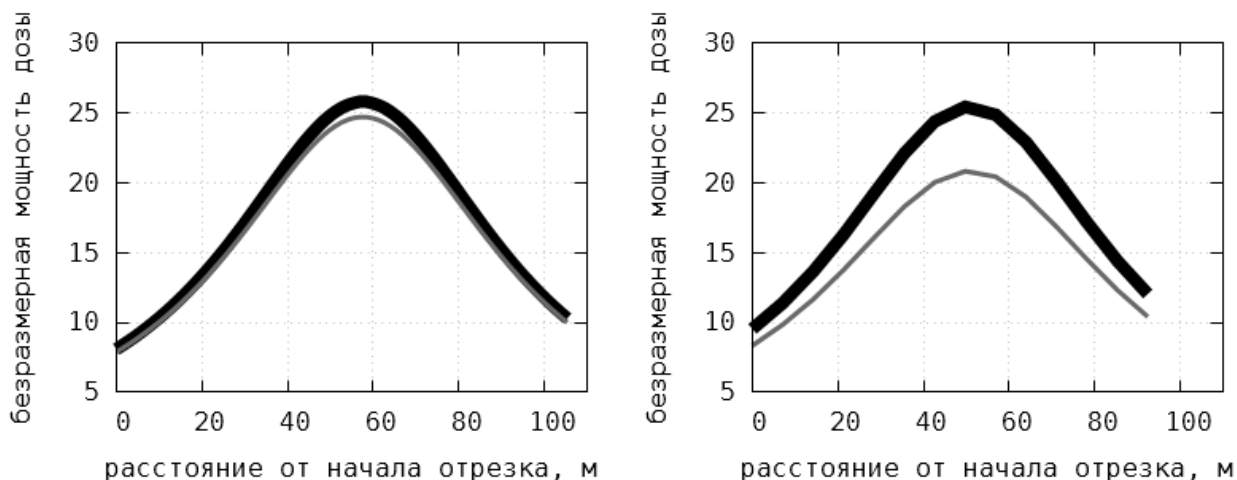


Рис. 1. Зависимость относительной мощности дозы, рассчитанной путём численного взятия интеграла 5 (чёрная линия), с рассчитанной численно на декартовой сетке (серая линия). Слева – график на сетке с разрешением 1 м, справа – с разрешением 5 м.

при измельчении сетки. Но и при разрешении сетки 5 м результат остаётся приемлемым.

Пусть теперь в расчётной области присутствует застройка. Необходимо ответить на вопрос: на сколько снижается точность расчёта при использовании более оптимального алгоритма расчёта массива видимости? В качестве застройки был рассмотрен конус с круговым сечением, ось симметрии которого была близка к вертикальному направлению. Взаимное расположение облака в виде шара и препятствия в виде конуса показано на рисунке 2:

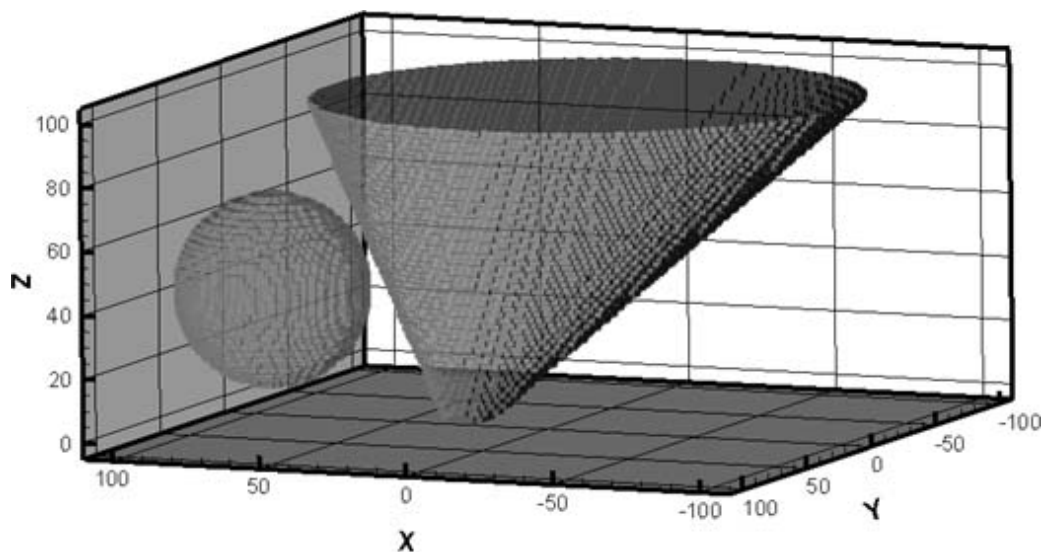


Рис. 2. Взаимное расположение шара и конического препятствия в расчётной области.

На рисунке 3 показаны абсолютные ошибки (разница между мощностью дозы, полученной с помощью первоначальной и ускоренной версий алгоритма). В первоначальной версии алгоритма при определении видимости двух точек использовалось аналитическое уравнение конуса, а в оперативной – его ступенчатое приближение. График слева был получен для разреше-

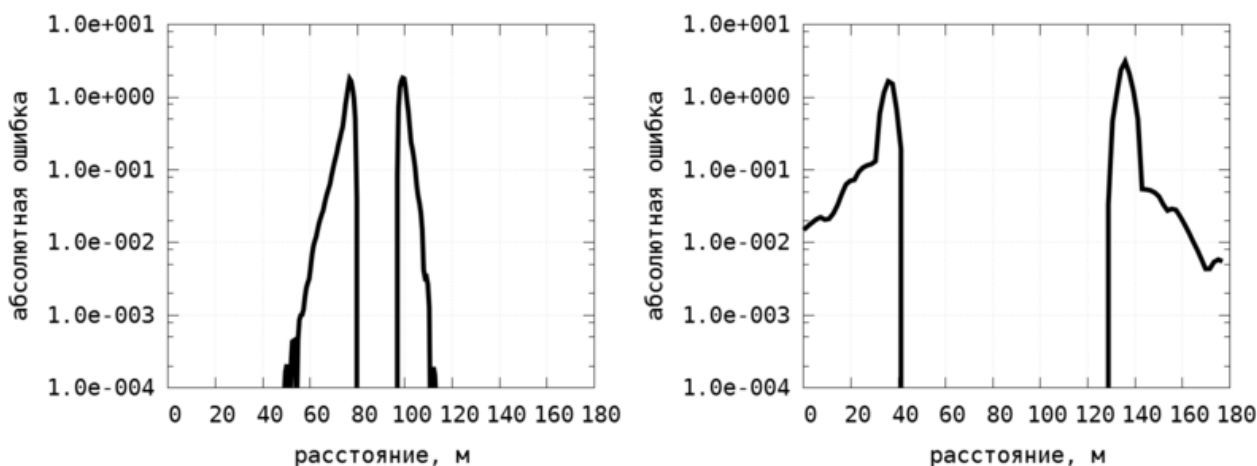


Рис. 3. Абсолютная ошибка определения мощности дозы вдоль двух отрезков, при использовании разных разрешений сетки.

ния расчётной сетки 2 м вдоль отрезка, соединяющего точки $(-45; 80; 1)$ и $(80; -45; 1)$. График справа – для разрешения 5 м вдоль отрезка между точками $(-45; 80; 60)$ и $(80; -45; 60)$. Оба отрезка пересекали конус (провал в графиках – внутри конуса) и проходили вблизи его оси симметрии. Максимальные значения мощностей доз вдоль этих отрезков – 6,6 и 5,3 соответственно. Из графиков видно, что ошибка незначительна на основном пути отрезка, становится большой лишь при приближении к конусу, где искажением его формы играет существенную роль. Что касается самого подхода к сокращению количества отрезков, то он приводит лишь к незначительным погрешностям.

Таким образом, использование более оптимального по времени счёта алгоритму, оказалось оправданным, а численную модель, с учётом проведённого распараллеливания, можно назвать оперативной.

Литература

1. *S.T. Chan, M.J. Leach* August 29, 2006. A Validation of FEM3MP with Joint Urban 2003 Data, Journal of Applied Meteorology, UCRL-JRNL-220878-REV-1.
2. *Schatzmann M., Olesen H. and Franke J.* COST 732 model evaluation case studies: approach and results. University of Hamburg, 2010.

3. *Сороковикова О.С., Семёнов В.Н., Дзама Д.В.* RANS модель атмосферной дисперсии для оценки радиационной обстановки в условиях сложной трёхмерной геометрии объекта... *Современные проблемы математического моделирования*. ЮГИНФО ЮФУ, г. Ростов-на-Дону, ИПМ РАН, г. Москва. 16-21 сентября 2013 г. Пос. Дюрсо. сс. 233-240.
4. *Blagodatskykh D.V., Dzama D.V., Sorokovikova O.S.* Simulations of radioactive contamination within an industrial site. Southern Federal University. Proceeding of fourth China-Russia Conference Numerical algebra with applications. 26-29 June 2015 Rostov on Don, RUSSIA pp. 84-87.
5. *Dzama D.V., Sorokovikova O.S., Blagodatskykh D.V.* A verification of the blocks for 3D aerothermodynamics modeling and doses calculation from a cloud of arbitrary geometry... Southern Federal University. Proceeding of fourth China-Russia Conference Numerical algebra with applications. 26-29 June 2015 Rostov on Don, RUSSIA pp. 92-96.
6. Generic procedures for assessment and response during a radiological emergency. IAEA, VIENNA, 2000. IAEA-TECDOC-1162. ISSN 1011-4289.

ПАРАЗИТНЫЕ ВОЛНЫ В РАЗНОСТНЫХ СХЕМАХ И МЕТОД ИХ ПРИБЛИЖЕННОГО АНАЛИЗА

Дородницын Л.В.

Московский государственный университет

имени М.В. Ломоносова, Москва

Многим разностным схемам — прежде всего, предназначенным для моделирования гиперболических систем уравнений — свойственны нефизические частые осцилляции в получаемых решениях. Вычислители применяют различные методы подавления таких колебаний, о чём имеется обширная литература. Однако данный феномен, имеющий дискретную природу, нуждается в детальном изучении. Это помогло бы выяснить, следует ли вообще искусственно подавлять схемные осцилляции, и если да, то находить наиболее эффективный способ.

Математически строгий анализ решений разностных систем уравнений обычно оказывается довольно затруднительным. Более традиционный объект — дифференциальные уравнения математической физики. Одним из «прикидочных» способов оценки свойств разностных схем является метод дифференциального приближения [1]. Мы предлагаем новый подход, расширяющий применение данного метода на быстроосциллирующие решения.

Далее речь будет идти только об осцилляциях по пространству, причем о *пилообразных* колебаниях — вида $u(x_j) = (-1)^j v(x_j)$.

Возьмем в качестве примера схему с центральными разностями для уравнения переноса

$$\partial u / \partial t + \partial u / \partial x = 0 \quad \mapsto \quad du_j / dt + (u_{j+1} - u_{j-1}) / (2h) = 0. \quad (1)$$

Будем рассматривать задачу, дифференциальную по времени, имея в виду, что в численном алгоритме вместо выражения $\partial u / \partial t$ применяется, например, схема Кранка–Николсон.

Гармоническое решение (1) содержит «физическую» моду и паразитную пилообразную осцилляцию:

$$u(x_j, t) = a_1 \exp\{i\omega t - ikx_j\} + a_2 (-1)^j \exp\{i\omega t + ikx_j\},$$

где

$$k = k(\omega, h) = \arcsin(\omega h) / h = \omega + h^2 \omega^3 / 6 + O(h^4).$$

I Метод дифференциального приближения

Описанный в [1] метод дифференциального приближения, который назовем классическим, заключается в замене разностной схемы дифференциальными уравнениями с помощью формулы Тейлора. Эти уравнения аппроксимируются схемой с более высокой точностью, чем исходная задача.

Яркий пример: схема с направленными разностями для уравнения переноса превращается в уравнение конвекции-диффузии, содержащее шаг сетки h :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{h}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = O(h^2).$$

Применимость метода встречает проблемы.

1. Требование плавности:

$$\frac{h}{\|u\|} \frac{du}{dx} \rightarrow 0, \quad h \rightarrow 0.$$

2. Дифференциальный порядок может не совпадать с разностным.

3. Краевая задача в дискретном и континуальном случае может требовать различное число граничных условий.

Для той же схемы с центральной разностью (1) в первом дифференциальном приближении

$$\partial u / \partial t + \partial u / \partial x = O(h^2)$$

осциллирующее решение не обнаруживается.

Выпишем второе дифференциальное приближение:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = O(h^4).$$

Преобразование Фурье–Лапласа $u = \exp\{i\omega t - ikx\}$ выявляет следующие три моды:

$$k_1(\omega) \approx \omega + \frac{h^2}{6}\omega^3, \quad k_2(\omega) \approx \frac{\sqrt{6}}{h} - \omega, \quad k_3(\omega) \approx -\frac{\sqrt{6}}{h} - \omega.$$

В разностной задаче существует всего две моды, хотя здесь вторая и третья моды совпали бы в узлах сетки, если бы в выражениях для k_2 и k_3 вместо $\sqrt{6}$ фигурировало число π . Итак, k_1 правильно описывает дисперсию физических мод, тогда как паразитные моды дают неприемлемую относительную ошибку $O(1)$.

Классический метод дифференциального приближения не позволяет анализировать спектральную устойчивость начально-краевых задач для разностных моделей переноса, поскольку задача Штурма–Лиувилля для дифференциального уравнения переноса не имеет нетривиального решения.

II Дифференциальное приближение осциллирующих схем

Математический инструмент для исследования разностных схем с быстроосциллирующими решениями был предложен в [2]. Он основан на гипотезе

о фоне и «пиле», т.е. разложении решения в виде

$$u(x_j, t) = \bar{u}(x_j, t) + (-1)^j a(x_j, t), \quad (2)$$

где $\bar{u}(x, t)$, $a(x, t)$ — гладкие функции непрерывных аргументов, удовлетворяющие свойству

$$\frac{h}{\|\bar{u}\|} \frac{d\bar{u}}{dx} \rightarrow 0, \quad \frac{h}{\|a\|} \frac{da}{dx} \rightarrow 0, \quad h \rightarrow 0, \quad (3)$$

которое одновременно является апостериорным условием применимости (2).

Покажем методику на примере того же центрально-разностного уравнения переноса (1). Подстановка (2) дает

$$\frac{d\bar{u}_j}{dt} + \frac{\bar{u}_{j+1} - \bar{u}_{j-1}}{2h} + (-1)^j \left(\frac{da_j}{dt} - \frac{a_{j+1} - a_{j-1}}{2h} \right) = 0.$$

Из гипотезы плавности (3) следует, что выполняются сразу два уравнения, которые, в свою очередь, подвергаются дифференциальному приближению. В итоге получаем:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{h^2}{6} \frac{\partial^3 \bar{u}}{\partial x^3} = O(h^4), \quad \frac{\partial a}{\partial t} - \frac{\partial a}{\partial x} = O(h^2).$$

Пусть дана дискретная задача Дирихле для разностного уравнения переноса:

$$\begin{aligned} du_j/dt + (u_{j+1} - u_{j-1})/(2h) &= 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, \\ u_0 = u_N = 0, \quad u_j(0) &= \varphi(x_j). \end{aligned} \quad (4)$$

В ее решении наблюдается следующий феномен. Начальный гладкий импульс (например, гауссиан) движется вправо, затем отражается от границы влево в виде пакета с пилообразной несущей и плавной огибающей, а потом на левой границе формируется повторный гладкий импульс, не имеющий физической природы.

Модифицированный метод дифференциального приближения способен объяснить суть описанного явления. Для задачи (4) приближение первого порядка имеет вид:

$$\begin{aligned} \partial \bar{u}/\partial t + \partial \bar{u}/\partial x &= 0, \quad \partial a/\partial t - \partial a/\partial x = 0, \quad 0 < x < L, \\ \bar{u}(0, t) + a(0, t) &= 0, \quad \bar{u}(L, t) + (-1)^N a(L, t) = 0, \\ \bar{u}(x, 0) = \varphi(x), \quad a(x, 0) &= 0. \end{aligned}$$

Данная задача имеет точное решение. Напомним, что здесь нет разностной сетки, параметр N потерял смысл числа узлов и лишь определяет коэффициент (+1) либо (-1).

Компактная трехточечная центрально-разностная схема $O(h^4)$ для уравнения переноса [3] приводится к системе

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = O(h^4), \quad \frac{\partial a}{\partial t} - 3 \frac{\partial a}{\partial x} = O(h^2).$$

Пилообразная мода движется втрое быстрее, чем в обычной схеме с центральными разностями.

Предложенный метод помогает оценивать собственные значения стационарных разностных задач: прежде всего, условие устойчивости $\operatorname{Re} \lambda_k < 0$. Так, центрально-разностная схема для уравнения переноса с краевыми условиями 1-го рода принимает вид:

$$(u_{j+1} - u_{j-1})/(2h) + \lambda u_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, \\ u_0 = u_N = 0.$$

Подстановка $u(x_j) = \bar{u}(x_j) + (-1)^j a(x_j)$ дает с точностью до $O(h^2)$ систему 2-го порядка

$$d\bar{u}/dx + \lambda \bar{u} = 0, \quad da/dx - \lambda a = 0, \quad 0 < x < L, \\ \bar{u}(0) + a(0) = 0, \quad \bar{u}(L) + (-1)^N a(L) = 0.$$

Обе спектральные задачи имеют аналитические решения, и умеренные по величине собственные значения $\lambda_k = i\omega_k$ совпадают с точностью до $O(h^2)$.

Более интересные результаты получаются для других вариантов краевых условий, в частности, условия 1-го рода слева и 2-го рода справа:

$$(u_{j+1} - u_{j-1})/(2h) + \lambda u_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, \\ u_0 = 0, \quad (u_N - u_{N-1})/h = 0.$$

Дифференциальное приближение первого порядка выглядит как

$$d\bar{u}/dx + \lambda \bar{u} = 0, \quad da/dx - \lambda a = 0, \quad 0 < x < L, \\ \bar{u}(0) + a(0) = 0, \quad \left(\frac{d\bar{u}}{dx} + (-1)^N \frac{2a}{h} \right)_{x=L} = 0.$$

Решение представляется следующими собственными функциями и уравнением для собственного числа λ :

$$\bar{u}(x) = e^{-\lambda x}, \quad a(x) = -e^{\lambda x}, \quad \lambda h = 2(-1)^{N-1} e^{2\lambda L}.$$

В частности, вещественное λ существует только при четном числе узлов в исходной задаче: $(-1)^N = 1$, причем $\lambda < 0$ и справедлива формула

$$h(\lambda) = \frac{2}{|\lambda|} \exp\{-2|\lambda|L\},$$

хорошо подтверждаемая расчетами (рис. 1). Сеточная комбинация собственных функций (рис. 2) есть

$$u_j = \exp\{|\lambda|x_j\} - (-1)^j \exp\{-|\lambda|x_j\}.$$

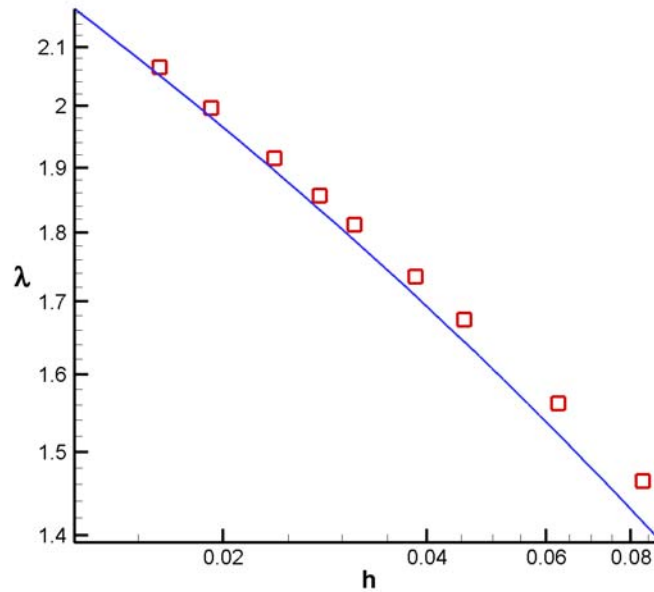


Рис. 1. Функция $h(\lambda)$ и вычисленные значения $\lambda(h)$ разностной задачи

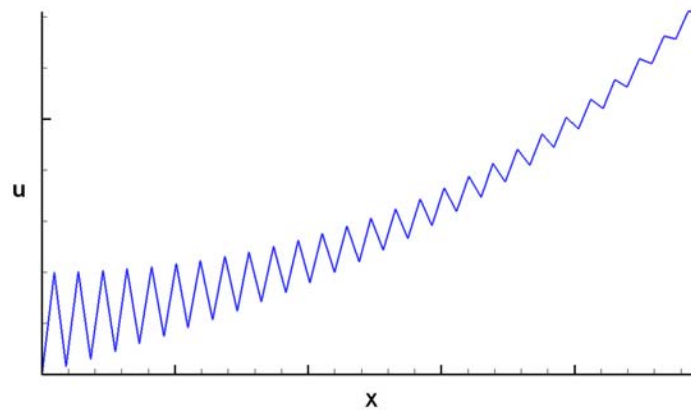


Рис. 2. Вид собственной функции, полученный на основе дифференциального приближения

III Обобщения

Данный метод легко обобщается на схемы с переменными коэффициентами — если только коэффициенты дифференциальной задачи являются медленно меняющимися функциями.

Неравномерные сетки с постепенным изменением шага (*квазиравномерные* сетки) трактуются аналогично: шаг сетки вводится как непрерывная функция пространства $h(x)$.

В системах уравнений решение подвергается разложению вида (2), но для векторных функций \mathbf{U} , $\bar{\mathbf{U}}$, \mathbf{A} :

$$\mathbf{U} = (u^1, u^2, \dots, u^m) = \bar{\mathbf{U}}(x_j, t) + (-1)^j \mathbf{A}(x_j, t).$$

Пространственно-многомерные задачи также подвластны предложенной

методике. Так, центрально-разностная схема для двумерного уравнения переноса на прямоугольной сетке

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c_1 \frac{\partial u}{\partial x} + c_2 \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \mapsto \frac{du_{jk}}{dt} + c_1 \frac{u_{j+1,k} - u_{j-1,k}}{2\Delta x} + c_2 \frac{u_{j,k+1} - u_{j,k-1}}{2\Delta y} = 0$$

приводится к разложению по функциям четырех видов

$$u(x_j, y_k, t) = \bar{u}(x_j, y_k, t) + (-1)^j a_1(x_j, y_k, t) + (-1)^k a_2(x_j, y_k, t) + (-1)^{j+k} a_{12}(x_j, y_k, t)$$

и к задаче для системы из четырех уравнений в частных производных.

IV Нелинейные задачи

Описанный выше метод впервые был использован в [2] именно для нелинейного случая, о котором говорилось также в [4]. Будем применять то же разложение (2) в сочетании с гипотезой (3) при дополнительном предположении о малости амплитуды осцилляции

$$|a| \ll |\bar{u}|.$$

В качестве примера выберем центрально-разностную схему для уравнения Хопфа и правое краевое условие в виде релаксации к u_∞ , которое аппроксимируется с использованием направленной разности:

$$\frac{du_j}{dt} + \frac{1}{2} \frac{u_{j+1}^2 - u_{j-1}^2}{2h} = 0, \quad \frac{u_N - u_{N-1}}{h} = \beta (u_\infty - u_N).$$

Разложение дает два уравнения для фоновой и осциллирующей компонент и граничное соотношение между ними. Последнее означает релаксацию решения к измененному значению u_∞^* :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (\bar{u}^2) + \frac{h^2}{12} \frac{\partial^3}{\partial x^3} (\bar{u}^2) = O(h^4 + a^2), \quad \frac{\partial a}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} (\bar{u}a) = O(h^4 + a^2),$$

$$\left. \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right|_{x=L} = \beta \left(u_\infty^* - \bar{u} \Big|_{x=L} \right), \quad u_\infty^* = u_\infty - (-1)^N \frac{2a}{\beta h}.$$

Факт «неправильной асимптотики» подтверждается количественно расчетами [2], где также предложено альтернативное граничное условие, уменьшающее данный эффект.

Выводы

- Всякий метод дифференциального приближения не является математически строгим.
- Разновидность метода, работающая с пилообразными функциями, успешно проходит ряд вычислительных тестов.
- Аналитические решения, не известные в дискретном случае, позволяют судить о свойствах численного решения, в том числе обнаруживать неустойчивости.
- Новый метод позволяет проводить селекцию граничных условий и выделить их варианты, улучшающие качество решения задачи.

Литература

1. Шокин Ю.И., Яценко Н.Н. Метод дифференциального приближения. Применение к газовой динамике. Новосибирск: Наука, 1985.
2. Дородницын Л.В. Искусственные граничные условия при численном моделировании дозвуковых течений газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2005. Т.45. №7. С.1251–1278.
3. Толстых А.И. Компактные разностные схемы и их применение в задачах аэрогидродинамики. М.: Наука, 1990.
4. Дородницын Л.В. Локальные неотражающие граничные условия в дифференциальных и разностных задачах // Современные проблемы математического моделирования. Сборник трудов XV Всероссийской конференции-школы молодых исследователей. Ростов-на-Дону: Изд-во ЮФУ, 2013, с.77–83.

КВАЗИГАЗОДИНАМИЧЕСКИЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ В ПОЛЯРНОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ¹

Елизарова Т.Г., Истомина М.А.

*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша,
г. Москва*

I Введение

Ряд инженерных и технологических течений удобно описывать в полярной системе координат, в том числе задачи геофизики и астрофизики.

Для численного моделирования уравнений газовой динамики в работе предлагается использование метода конечного объема для уравнений, записанных в полярной системе координат. При этом при построении разностной аппроксимации все газодинамические величины относятся к расчетным узлам сетки, а потоки вычисляются на границах ячеек в полуцелых узлах. Для аппроксимации граничных условий используется аппарат фиктивных ячеек. Такой подход является классическим. Новым является применение сглаженных или КГД уравнений. Такой подход позволяет использовать центральные разности для аппроксимации всех потоковых величин в сочетании с явной по времени разностной схемой. τ -вязкость обеспечивает точность и условную устойчивость алгоритма. Использование естественных граничных условий периодичности позволяет единообразно рассчитывать искусственные границы, возникающие при переходе через точку 2π и точку полюса.

Рассмотрены варианты течения в аккреционном диске, вращающемся вокруг притягивающего центра.

Построенная методика может быть расширена на полные уравнения газовой динамики, записанной в сферической системе координат.

II Уравнения газовой динамики в баротропном приближении в полярной системе координат

Система уравнений газовой динамики в баротропном приближении в полярной системе координат (r, φ) без учета компонент тензора вязких напряжений Навье-Стокса записывается следующим образом

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial (r \rho u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (\rho u_\varphi)}{\partial \varphi} = 0, \quad (1)$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ 13-01-00703, 15-01-03654

$$\frac{\partial \rho u_r}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial (r \rho u_r^2)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (\rho u_r u_\varphi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{\rho u_\varphi^2}{r} = \rho f_r, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho u_\varphi}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 \rho u_r u_\varphi)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (\rho u_\varphi^2)}{\partial \varphi} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \varphi} = \rho f_\varphi, \quad (3)$$

где $\rho(r, \varphi, t)$ – плотность жидкости, $\mathbf{u} = \{u_r(r, \varphi, t), u_\varphi(r, \varphi, t)\}$ – скорость жидкости, $p = k\rho^\gamma$ – давление газа, k – коэффициент, $\gamma = const$ – показатель политропы, f_r и f_φ – радиальная и азимутальная компоненты внешней силы.

III Регуляризованная система в полярной системе координат

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial (r j_{mr})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (j_{m\varphi})}{\partial \varphi} = 0, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho u_r}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial (r j_{mr} u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (j_{m\varphi} u_r)}{\partial \varphi} + \frac{\partial (k\rho^\gamma)}{\partial r} - \frac{\rho u_\varphi^2}{r} = \\ & = (\rho - \tau \operatorname{div}(\rho \mathbf{u})) f_r + \frac{1}{r} \frac{\partial (r u_r \rho w_r^*)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (\rho u_\varphi w_r^*)}{\partial \varphi} + \\ & + \frac{\partial}{\partial r} (k\gamma \rho^{\gamma-1} \tau \operatorname{div}(\rho \mathbf{u})) - \tau \frac{u_\varphi^2}{r} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) - 2\rho \frac{u_\varphi}{r} w_\varphi^* + \\ & + \frac{\partial \Pi_{rr}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Pi_{r\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\Pi_{rr} - \Pi_{\varphi\varphi}}{r}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho u_\varphi}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 j_{mr} u_\varphi)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (j_{m\varphi} u_\varphi)}{\partial \varphi} + \frac{1}{r} \frac{\partial (k\rho^\gamma)}{\partial \varphi} = \\ & = (\rho - \tau \operatorname{div}(h\mathbf{u})) f_\varphi + \frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 \rho u_r w_\varphi^*)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (\rho u_\varphi w_\varphi^*)}{\partial \varphi} + \\ & + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} (k\gamma \rho^{\gamma-1} \tau \operatorname{div}(\rho \mathbf{u})) + \frac{\partial \Pi_{\varphi r}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Pi_{\varphi\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{2}{r} \Pi_{r\varphi}, \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) &= \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho r u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho u_\varphi)}{\partial \varphi}, \\ j_{mr} &= \rho(u_r - w_r), \\ j_{m\varphi} &= \rho(u_\varphi - w_\varphi), \\ w_r &= \frac{\tau}{\rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho u_r^2)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho u_r u_\varphi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{\rho u_\varphi^2}{r} - \rho f_r \right], \\ w_\varphi &= \frac{\tau}{\rho} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \rho u_r u_\varphi)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho u_\varphi^2)}{\partial \varphi} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} - \rho f_\varphi \right], \\ w_r^* &= \tau \left[u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{1}{r} u_\varphi \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{u_\varphi^2}{r} - f_r \right], \\ w_\varphi^* &= \tau \left[\frac{1}{r} u_r \frac{\partial(r u_\varphi)}{\partial r} + \frac{1}{r} u_\varphi \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{1}{r \rho} \frac{\partial p}{\partial r} - f_\varphi \right], \\ p &= k \rho^\gamma, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Pi_{rr} &= 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{u}, \\ \Pi_{\varphi\varphi} &= 2\mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_r}{r} \right) - \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{u}, \\ \Pi_{r\varphi} &= \Pi_{\varphi r} = \mu \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r} \right). \end{aligned}$$

IV Равновесные решения

Пусть $\rho = \rho(r)$, $u_\varphi = u_\varphi(r)$, $u_r = 0$, производные по времени равны нулю $\frac{\partial}{\partial t} = 0$. Тогда от исходной системы остается уравнение

$$\frac{\partial p}{\partial r} - \frac{\rho u_\varphi^2}{r} = \rho f_r, \quad (7)$$

из которого при задании скорости $u_\varphi(r)$ и притягивающей силы $f_r(r, z)$ вычисляется плотность $\rho(r, z)$.

В соответствии с [2] в качестве начальной задается стационарная трехмерная (r, φ, z) газовая конфигурация с границей в виде тора, зависящей только от координаты r

$$Z(r) = \pm a r e^{-b(r-r_0)^2}. \quad (8)$$

Тогда скорость $u_\varphi(r)$ получается

$$u_\varphi(r)^2 = \frac{1 + a^2 e^{-2b(r-r_0)^2} (1 - 2br(r-r_0))}{r \left(\sqrt{1 + a^2 e^{-2b(r-r_0)^2}} \right)^3}. \quad (9)$$

Согласно уравнению (7) для силы $f_r = -\frac{r}{\sqrt{r^2 + Z_*(r)}^2}^{3/2}$, где $Z_* \in [0, Z(r)]$, плотность $\rho(r, z)$ распределена согласно соотношению

$$\rho(r, z) = \left(\frac{\gamma - 1}{k\gamma} \left(\frac{1}{\sqrt{r^2 + z^2}} - \frac{1}{\sqrt{r^2 + a^2 r^2 e^{-2b(r-r_0)^2}}} \right) \right)^{\frac{1}{\gamma-1}}. \quad (10)$$

В соответствии с [2] двумерным уравнения газовой динамики соответствуют осредненные по z трехмерные конфигурации

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(r, \varphi) &= 2 \int_0^{Z(r)} \rho(r, \varphi, z) dz, \\ \tilde{p}(r, \varphi) &= 2 \int_0^{Z(r)} p(r, \varphi, z) dz, \end{aligned} \quad (11)$$

Давление удобно вычислять как $\tilde{p}(r, \varphi) = k\tilde{\rho}(r, \varphi)^\gamma$.

Расчеты.

Параметры задачи в целом соответствуют [2] и равны $a = 0.01, b = 9.0, r_0 = 0.8, \gamma = 5/3, k = 0.012$.

В начальный момент плотность и давление имеют равновесные распределения (11), скорость u_φ вычисляется в соответствии с (9).

Граничные условия r для численного расчета выбраны такие

$$\frac{\partial \rho}{\partial r} \Big|_{r=0.2, 1.4} = 0, \quad u \Big|_{r=0.2, 1.4} = 0,$$

по φ – периодические граничные условия.

Область расчета

$$0.2 \leq r \leq 1.4, \varphi \in [0, 2\pi].$$

На Рис. 1-6 приведены результаты двумерного расчета для плотности (10), проинтегрированной по z и компонент скорости с параметрами задачи из [2]. Расчет приведен на момент времени $t = 1.0$. Равновесное состояние практически не изменилось.

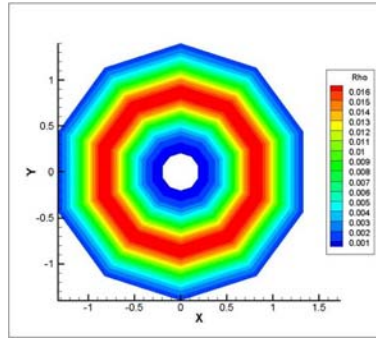
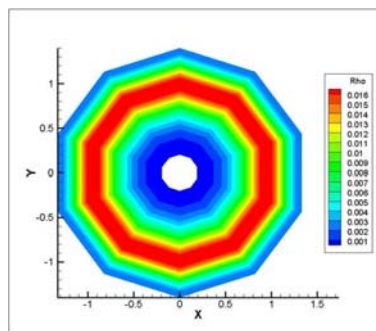
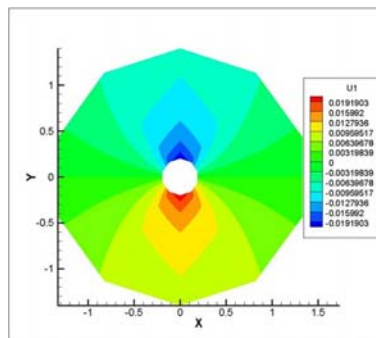
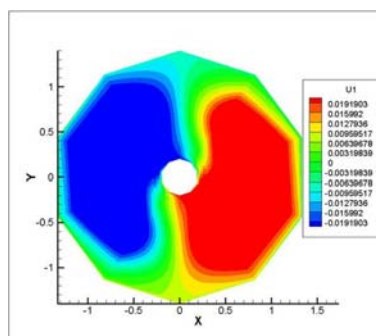


Рис. 1. Плотность в начальный момент времени.

Рис. 2. Плотность при $t = 1.0$.Рис. 3. Скорость u_r в начальный момент времени.Рис. 4. Скорость u_r при $t = 1.0$.

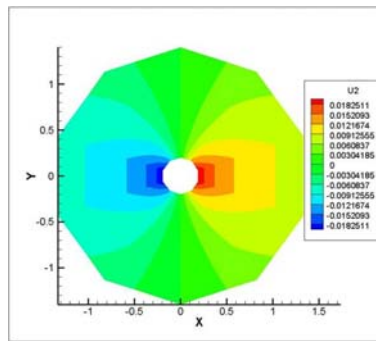


Рис. 5. Скорость u_φ в начальный момент времени.

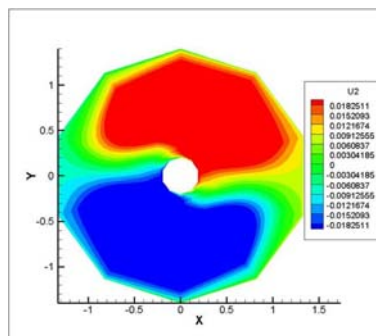


Рис. 6. Скорость u_φ при $t = 1.0$.

Литература

1. *Elizarova T.G.* Quasi Gas Dynamic Equation. Springer, 2009.
2. *М.В. Абакумов, С.И. Мухин, Ю.П. Попов, В.М. Четкин* Газодинамические процессы в аккреционном диске двойной звездной системы. – Москва: Математическое моделирование, 1998 г., т. 10, № 5, с. 35 – 47.
3. *Т.Г. Елизарова, М.А. Истомина* Квазигазодинамический алгоритм решения уравнений мелкой воды в полярной системе координат. Препринт ИПМ № 65 за 2014 г.

СЕМЕЙСТВО ПЕРИОДИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ В ПРОСТРАНСТВЕННО НЕОДНОРОДНОЙ МОДЕЛИ КОНКУРЕНЦИИ ХИЩНИКОВ¹

Епифанов А.В., Цибулин В.Г.

Институт математики, механики и компьютерных наук ЮФУ, Ростов-на-Дону

Введение

Для анализа экологических сценариев в настоящее время активно исследуются модели, учитывающие пространственную неоднородность ресурсов и распределения популяций [1]. При изучении возникающих колебательных процессов в ряде работ была продемонстрирована возможность сосуществования конкурирующих популяций хищников [2]. Однако в этих исследованиях пренебрегалось имеющейся в реальных системах направленной миграцией видов, вызванной неравномерностью жизненных условий.

В данной работе рассматривается модель взаимодействия популяций хищников и жертв с учетом случайного блуждания особей по ареалу и направленной миграции. Рост каждой популяции жертв пропорционален квадрату плотности популяции при малых плотностях и ограничивается при достижении предельных значений переменного по ареалу ресурса. Показано, что рассматриваемая модель является косимметричной при выполнении дополнительных условий на параметры системы. В этом случае в численном эксперименте установлено возникновение семейства колебательных режимов, отвечающих сосуществованию конкурирующих хищников.

I Модель динамики популяций хищников и жертв

Распределения видов на кольцевом ареале описываются функциями плотностей $u_i(x, t)$, $i = 1, 2, \dots, m$ (жертвы), $i = m + 1, m + 2, \dots, n$ (хищники), $x \in [0, 1]$, t — время. Уравнения баланса видов записываются через миграционные потоки q_i и функции роста f_i :

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\frac{\partial q_i}{\partial x} + f_i \equiv F_i, \quad q_i = -k_i \frac{\partial u_i}{\partial x} + u_i \frac{\partial \varphi_i}{\partial x}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1)$$

$$f_i = \mu_i u_i^2 f_0 - u_i \sum_{j=m+1}^n l_{ij} u_j, \quad f_0 = 1 - \frac{1}{p} \sum_{j=1}^m u_j, \quad i = 1, \dots, m. \quad (2)$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-01-00470

Естественный рост плотностей популяций жертв определяется «логистическим» законом с коэффициентом $\mu_i > 0$ и переменной по пространству положительной функцией ресурса $p(x)$. Убыль из-за присутствия популяций хищников дается слагаемыми с коэффициентами $l_{ij} > 0$. Изменение плотностей популяций хищников в точке ареала определяется согласно:

$$f_i = u_i g_i, \quad g_i = \sum_{j=1}^m \mu_{ij} u_j - l_i, \quad i = m + 1, \dots, n. \quad (3)$$

В определении потока (1) первое слагаемое отвечает однородной диффузии, а второе — направленной миграции, где

$$\varphi_i = \alpha_i p + \sum_{j=1}^n \beta_{ij} u_j, \quad i = 1, \dots, n. \quad (4)$$

Миграционные коэффициенты α_i, β_{ij} отвечают влиянию соответственно неравномерности распределения ресурса и самих популяций на ареале. Для $i = m + 1, \dots, n$ $\alpha_i = 0$. Знаки коэффициентов определяют разные виды реакции на распределения ресурса и видов. На границе ареала ставятся условия периодичности:

$$u_i(0, t) = u_i(1, t), \quad q_i(0, t) = q_i(1, t), \quad i = 1, \dots, n. \quad (5)$$

Система (1)-(5) дополняется начальными распределениями плотностей популяций:

$$u_i(x, 0) = u_i^0(x), \quad i = 1, \dots, n.$$

При дополнительных условиях на параметры рассматриваемая система относится к классу косимметричных динамических систем [3], для которых возможно возникновение непрерывных семейств решений. Для уравнения $\dot{Y} = F(Y)$ косимметрия L представляет собой нетривиальный оператор, который ортогонален F в каждой точке фазового пространства. Существование косимметрии для (1)-(5) устанавливает следующая лемма.

Лемма 1. *Косимметрией системы (1)-(5) является вектор-функция $L = (0, 0, \dots, 0, \zeta_{m+1}, \zeta_{m+2}, \dots, \zeta_n)^T$, $\zeta_i = e^{-\varphi_i/k_i} \sum_{j=m+1}^n \text{sign}(i-j) k_j u_j$, $i = m + 1, m + 2, \dots, n$, если выполнены условия на параметры модели $k_i/k_j = \varphi_i/\varphi_j = g_i/g_j$, $i, j = m + 1, \dots, n$.*

II Результаты

Для проведения вычислительных экспериментов развит подход на основе смещенных сеток. Аппроксимация уравнений по пространственной переменной получена с применением интегро-интерполяционного метода. Для

интегрирования по времени использовался метод Рунге-Кутты. Вычисление мультипликаторов периодических режимов производилось при помощи метода Флоке.

Далее представлены результаты расчетов для системы двух популяций хищников и популяции жертвы. Вводятся обозначения $u_1 = u$, $u_2 = v$, $u_3 = w$. В качестве функции ресурса использовалась функция $p(x) = 1 + 0.2 \sin(2\pi x)$.

Значения параметров были выбраны следующим образом: $k_1 = 0.2$, $k_2 = 0.3$, $\mu_1 = 3$, $\mu_2 = 2.5$, $\mu_3 = 2$, $l_{12} = l_{13} = l_2 = 1$, $l_3 = 0.8$, $\alpha = 0.1$, $\beta_{11} = \beta_{22} = \beta_{23} = \beta_{32} = \beta_{33} = 0$, $\beta_{12} = -0.2$, $\beta_{13} = -0.3$, $\beta_{21} = 0.4$, $\beta_{31} = 0.32$. Были проведены расчеты для различных значений параметра k_3 . Далее представлены результаты вычислений, выполненных на сетке $N = 24$, шаг интегрирования по времени был равен $\tau = 0.002$.

При $k_3 = 0.24$ система (1)–(5) отвечает условиям леммы 1 и является косимметричной. В этом случае обнаружено семейство периодических режимов. При нарушении условий леммы 1 наблюдается вытеснение одной из популяций хищников. Так, при $k_3 > 0.24$ остается популяция v , а при $k_3 < 0.24$ – w . На рис. 1 показано изменение во времени плотностей популяций хищников при $k_3 = 0.12$. Здесь и далее $V = v_{N/2}$, $W = w_{N/2}$. Из рис. 1 видно, что в течение длительного промежутка времени наблюдается сосуществование конкурирующих популяций хищников.

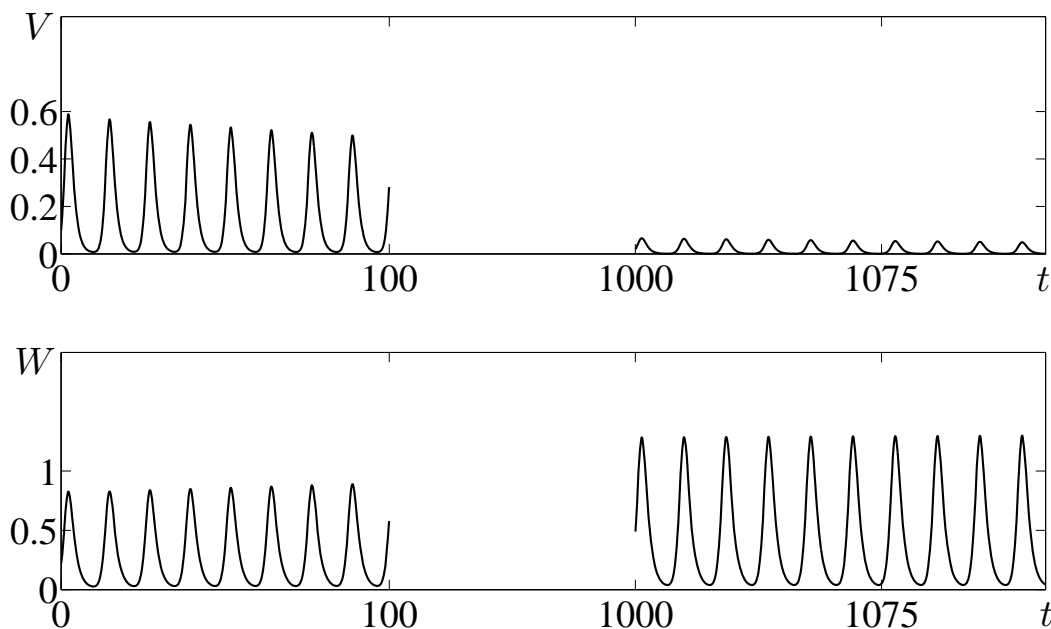


Рис. 1. Вытеснение популяции v и установление w ; $k_3 = 0.12$

На рис. 2 представлено семейство периодических режимов (сплошная линия), соответствующее случаю косимметрии ($k_3 = 0.24$). Точки С и D соответствуют режимам с одной популяцией хищника, а А и В – сосуществованию хищников. Линия, отвечающая семейству, построена для максимальных

значений плотностей, пунктиром представлено изменение плотностей в центральной точке ареала ($x = 0.5$) для режимов сосуществующих хищников.

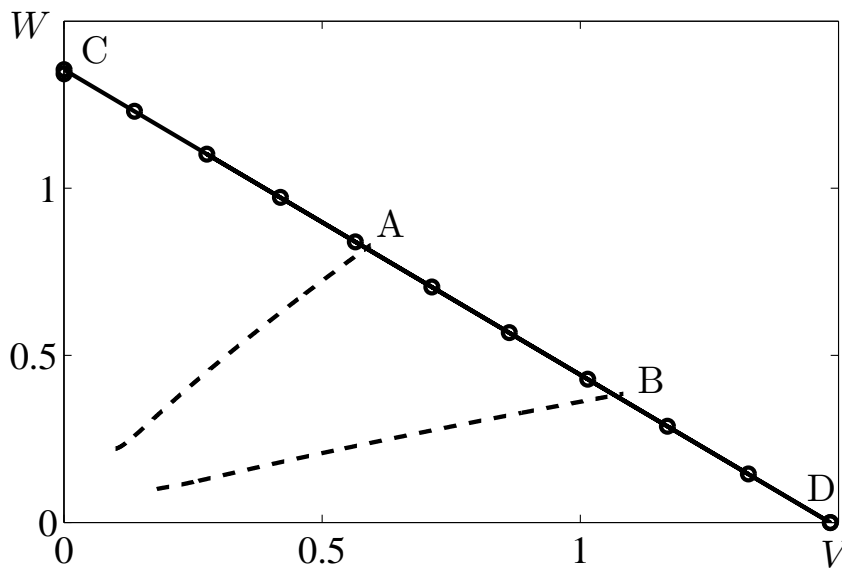


Рис. 2. Семейство периодических режимов (сплошная линия) и траектории двух решений (пунктир)

Таблица 1. Мультипликаторы для нескольких режимов

Режим	k_3	Макс. мультипликаторы
A	0.24	1.002, 0.998, 0.019
B	0.24	1.002, 0.999, 0.027
C	0.12	1.000, 0.967, 0.016
D	0.12	1.040, 1.000, 0.031

В таблице 1 представлены результаты вычисления мультипликаторов установившихся периодических колебаний. Равенство одного из мультипликаторов единице является индикатором предельного цикла. Для режима C остальные мультипликаторы лежат в круге единичного радиуса на комплексной плоскости, это означает устойчивость режима. В случае режима D имеется мультипликатор (1.040), который лежит вне круга единичного радиуса, это означает неустойчивость данного режима. Для режимов A и B получены два мультипликатора, значения которых близки к единице. Один из этих мультипликаторов отвечает направлению вдоль семейства, а другой является индикатором предельного цикла. Остальные мультипликаторы лежат внутри круга единичного радиуса. Это соответствует устойчивости циклов семейства в направлении, трансверсальном к семейству. Наблюдаемая при вычислении «единичных» мультипликаторов погрешность вызвана расчетом кратных величин. В прямом численном эксперименте с хорошей точностью получают сами периодические режимы, см. рис. 3.

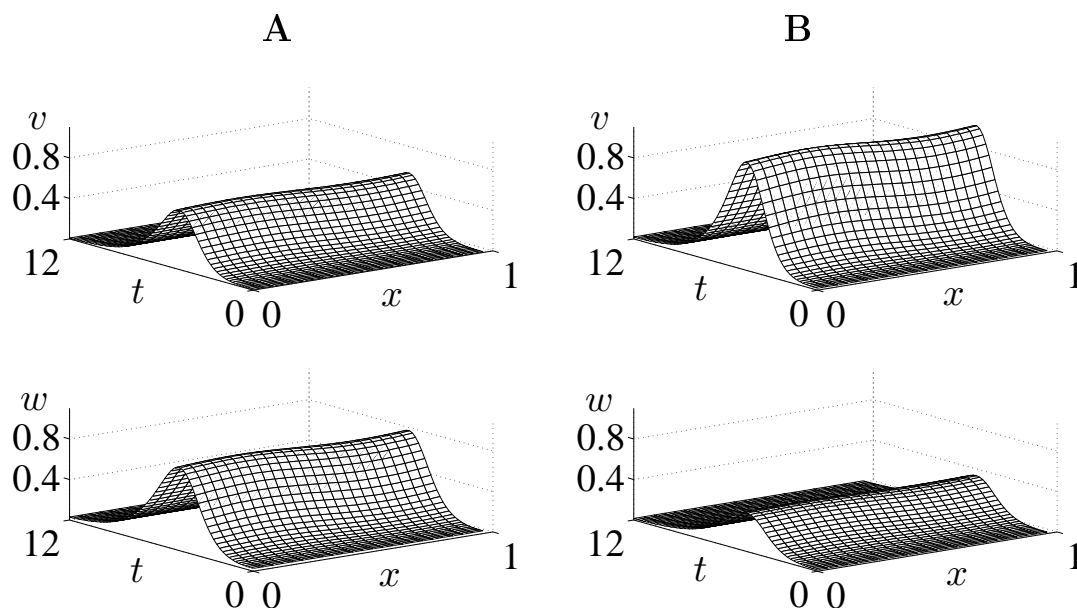


Рис. 3. Пространственно-временные распределения популяций хищников для режимов А и В

Таким образом, получено, что решения данной косимметричной системы образуют непрерывное семейство предельных циклов, отвечающих пространственно-временным колебаниям сосуществующих популяций хищников.

Литература

1. *Cosner C.* Reaction-diffusion-advection models for the effects and evolution of dispersal // *Discrete and continuous dynamical systems.* 2014. Vol. 4. N 5. P. 1701–1745.
2. *Ruan S., Ardito A., Ricciardi P., DeAngelis D.L.* Coexistence in competition models with density-dependent mortality // *Comptes Rendus – Biologies.* 2007. Vol. 330. P. 845–854.
3. *Юдович В.И.* Косимметрия, вырождение решений операторных уравнений, возникновение фильтрационной конвекции // *Мат. заметки.* 1991. Т. 49. № 5. С. 142–148.
4. *Будянский А.В., Цибулин В.Г.* Влияние направленной миграции на формирование пространственных популяционных структур // *Биофизика.* 2015. Т. 60. Вып. 4. С. 758–768.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕРХМОЩНОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА С ВЕЩЕСТВОМ С ПОМОЩЬЮ PIC-МЕТОДА и поддержке РФФИ

Зайцева А.А.* , Ечкина Е.Ю.*

** Московский государственный университет, факультет
вычислительной математики и кибернетики, Москва, Россия*

Создание лазеров вызвало появление не только целого ряда новых направлений в физике, химии, биологии и других науках, но и разработку большого количества новых технологий в микроэлектронике, в обработке, хранении и передаче информации, в приборостроении, медицине, военной технике и анализе свойств материалов.

Лазерное излучение обладает многими специфическими свойствами, которые открыли совершенно новые возможности и области приложений оптики. Последние достижения в развитии лазерной техники позволили получить сверхкороткие, длительностью в несколько фемтосекунд ($1\text{ф.с.} = 10^{-15}\text{с}$), импульсы электромагнитного излучения с интенсивностью 10^{21}Вт/см^2 . В связи с этим встала проблема изучения взаимодействия лазерных импульсов с веществом, которая имеет множество направлений. Веществом может быть что угодно: от микроскопических объектов (атомы, молекулы) до макроскопических конденсированных прозрачных и непрозрачных сред (газы, плазма, жидкость, твердые тела).

Именно по причине специфических свойств лазерного излучения и возникает проблема взаимодействия лазерного излучения с веществом. В частности, этот факт привел к активным теоретическим и экспериментальным исследованиям взаимодействия лазерного импульса с плазмой. Одним из методов исследования этой проблемы является численное моделирование.

В рамках эксперимента плазма может считаться холодной и бесстолкновительной. Механизм ионного ускорения во взаимодействии сверхкороткого и сверхмощного лазерного импульса с бесстолкновительной плазмой базируется на образовании электрических полей благодаря изменениям плотности электронов под действием электромагнитного излучения.

Детальное изучение этой проблемы требует полной компьютерной симуляции, базирующейся на использовании так называемого метода частиц-ячейке или PIC – метода.

Наша работа посвящена описанию вычислительного эксперимента, построенного на мультипроцессорной платформе. Эксперимент проводился в рамках 2D3V, когда желаемая функция распределения ионов зависит от двух пространственных значений и трех компонент импульса. Плазма рассматривается во власовском приближении, со средним содержанием ионов и электронов в самосогласованных полях. Поэтому она представлена конечным числом ионов и электронов (до 10^7), расположенных в дискретных

точках пространства. Частицы двигаются под действием внешних самосогласованных полей. Взаимодействие частиц делится на две стадии: расчет полей, образованных частицами, и определение движения частиц под действием сил, приложенных к ним. Поля рассчитываются из уравнений Максвелла, где токи и заряды ищутся из положений и скоростей всех частиц. Движение частиц определяется численным решением уравнения Ньютона-Лоренца с высокой точностью.

Вычислительный цикл состоит из попеременного решения этих двух задач. Задаются переменная и пространственная сетка, это удовлетворяет необходимым требованиям точности и стабильности. Частицы помечаются индексом i , например v_i и x_i . Значения полей рассчитываются только в узлах пространственной сетки, помечаются индексом j , например E_j .

В работе представлен метод расчета большого числа параметров системы на мультиплатформе, проще говоря, распараллеливание базируется на "поиске параметров". Это распараллеливание дает большой выигрыш во времени в построении вычислительного эксперимента.

Литература

1. *Bulanov S.V., Esirkepov T.Zh., Khoroshkov V.S., Kusnetsov A.V., Pegoraro F.* Oncological hadrontherapy with laser ion accelerators. // *Physics Letters A*, 2002.
2. *Mourou G., Tajima T., Bulanov S.V.* Optics in the relativistic regime. // *Reviews of modern physics*, volume 78, april-june, 2006.
3. *Echkina E.Yu., Inovenkov I.N., Esirkepov T.Zh. et al.* Laser Physics. // *Laser Physics*. 2009. V.19 P.228

ИНФОРМАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕЛЬЧЕНИЯ ЗЕРНОВЫХ КУЛЬТУР В ТЕРМИНАХ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАКЕТА МАТНЕМАТИСА

Золотов Н.Б., Лимаренко Н.В., Семёнов И.Е.

*ФГБОУ ВПО "Донской государственный технический
университет", г.Ростов-на-Дону*

Измельчение сыпучих сред представляет интерес для современных технологий производства новых материалов, теплоэнергетики, сельского хозяйства и пищевой промышленности. При проектировании дробильных устройств параметры конструкции определяются в результате компромисса нескольких противоречивых требований. К ним относятся: качество измельчения (дисперсность, однородность), эффективность помола, устойчивость технологического процесса и ресурс оборудования. Наиболее продуктивным методом решения задачи оптимизации конструкции измельчителя и режимов его работы является математическое моделирование. Однако, несмотря на бурное развитие методов вычислительной математики и соответствующего программного обеспечения, современные модели измельчения сыпучих материалов основаны на внешнем описании объекта [1], то есть являются эмпирическими. Следовательно, результативность математического моделирования при проектировании новых и совершенствовании действующих измельчительных устройств/технологий невелика.

Целью проводимого авторами цикла исследований ставится построение математической модели, верно отражающей физическую сущность процесса измельчения, особенности конструкции дробильного устройства и динамику диссипации сыпучего материала. Соответственно задачи исследования, сводятся к выбору базового математического формализма, средств исследования модели, а также оценки условий её адекватности.

Новизна предлагаемого подхода состоит в реализации идеи описать измельчение сыпучего материала в дробилке с позиций эволюции во времени функции распределения частиц по размерам. Подобный подход ранее применялся в теоретической физике для описания движения, взаимодействия, рождения и гибели нейтронов в ядерном реакторе [3], распределения электронов по энергии в газовом разряде [4], распространения энергетических возмущений в оптически активных средах [5]. Кроме того, математические модели сходной структуры возникают при анализе возрастной структуры населения [6], доходности различных социальных групп в обществе [7], а также во множестве биологических приложений [8].

Распределения перемалываемых частиц по размерам $F(x, t)$ описываются интегро-дифференциальным уравнением:

$$\frac{\partial F(x, t)}{\partial t} - v(x) \frac{\partial F(x, t)}{\partial x} = H(F(x, t)), \quad (1)$$

где t – момент времени; $v(x)$ – скорость измельчения; $H(F(x, t))$ – интегральный оператор, отвечающий поступлению цельного и отводу дробленого зерноматериала и, предположительно, допускающий аппроксимацию $H(F(x, \infty)) \approx h(x)$.

Если предположить, что

$$h(x) = A \text{Exp}[-(\frac{x-B}{Z})^2], \quad (2)$$

а $v(x) = (kx + \frac{q}{x})$ при различных механизмах дробления крупных и мелких частиц или $v(x) = kx^n$ при использовании крупноячеистого сита.

Решение (1) с такими источниками не выписывается в квадратурах. Чтобы получить элегантную форму решения (1), возможно, приближенного в данной работе вместо (2) предлагается использовать другой шаблон для трехпараметрического распределения частиц по размерам в источнике (источнике – стоке)

$$h(x) = \alpha x^\beta \text{Exp}[-\gamma x^{\beta+1}] \quad (3)$$

или

$$h(x) = \alpha x^\beta \text{Exp}[-\gamma x^{\beta+1}] - q \text{Exp}[-mx]. \quad (4)$$

Для адекватности замена должна, как минимум, удовлетворять трем (поскольку оба распределения трехпараметрические) независимым критериям. В качестве таковых выберем совпадение точек экстремума $(X_{max}; F(X_{max})) = (X_{max}; \varphi(X_{max}))$ и радиусов кривизны $F(x)$ и $\varphi(x)$ в соответствующей точке.

Решение соответствующей громоздкой системы трех нелинейных алгебраических уравнений с использованием как ручных преобразований, так и пакета Mathematica, дает аналитическую связь между параметрами распределений $\{A, B, Z\} \leftrightarrow \{a, b, \gamma\}$, удовлетворяющими выбранным критериям:

$$A = \alpha \left(\left[\frac{\beta}{\gamma[\beta+1]} \right]^{\frac{\beta}{\beta+1}} \right) \text{Exp}[-\frac{\beta}{\beta+1}], \quad B = \left(\frac{\beta}{\gamma(\beta+1)} \right)^{\frac{1}{\beta+1}}, \quad Z = \frac{\sqrt{2} \left(\frac{\beta}{\beta+1} \right)^{\frac{1}{\beta+1}}}{\sqrt{\beta(\beta+1)}}. \quad (5)$$

Дополнительно справедливость предлагаемой замены проверим путем сопоставления статистически значимых параметров модельных распределений $F[x, A, B, Z] = A \text{Exp}[-(\frac{x-B}{Z})^2]$ и $\phi(x, \alpha, \beta, \gamma) = \alpha x^\beta \text{Exp}[-\gamma x^{\beta+1}]$: математического ожидания, дисперсии, асимметрии и эксцесса. Такой анализ выявит параметрические границы адекватности предложенного нами способа приближенного решения (1).

Для $F[x, A, B, Z] = A \text{Exp}[-(\frac{x-B}{Z})^2]$:

математическое ожидание: $M[x] = B = (\frac{\beta}{\gamma(\beta+1)})^{\frac{1}{\beta+1}}$;

дисперсия: $D[x] = \frac{Z^2}{2} = \frac{(\frac{\beta}{1+\beta})^{-1+\frac{2}{1+\beta}}}{(1+\beta)^2}$;

асимметрия: $A[x] = 0$;

эксцесс: $E[x] = 3$.

Для $\phi(x, \alpha, \beta, \gamma) = \alpha x^\beta \text{Exp}[-\gamma x^{\beta+1}]$ были проведены расчёты характеризующих параметров с помощью пакета Wolfram Mathematica 10.0. Результаты данных вычислений, представлены на рис. 1-4.

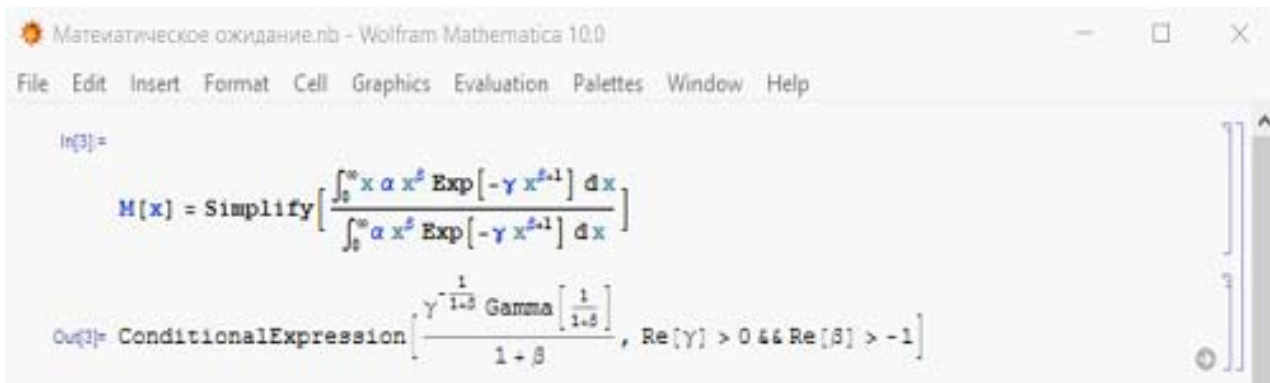


Рис. 1. Вычисление математического ожидания для распределения (3), с учетом нормировки

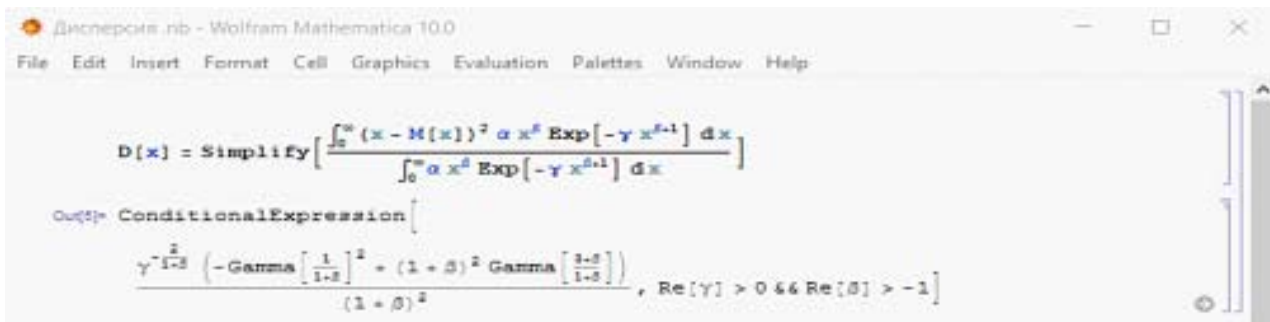


Рис. 2. Вычисление дисперсии для распределения (3), с учетом нормировки

При сопоставлении распределений (2) и (3) учитывалось то обстоятельство, что коэффициенты A и α фигурируют в них линейным образом, следовательно, могут и должны быть исключены из рассмотрения. При этом задача сводится к сопоставлению двухпараметрических распределений, и объём исследовательской работы существенно сокращается.

На рис. 5 (а, б) - 6 (а, б) приведены оценки погрешности статистических параметров распределения частиц (перемалываемого зерноматериала) по размерам при использовании предлагаемого модельного распределения.

Ассиметрия.nb - Wolfram Mathematica 10.0

File Edit Insert Format Cell Graphics Evaluation Palettes Window Help

$$A[x] = \text{Simplify} \left[\frac{\int_0^{\infty} (x - M[x])^3 \alpha x^{\beta} \text{Exp}[-\gamma x^{\beta+1}] dx}{D[x]^{3/2} \int_0^{\infty} \alpha x^{\beta} \text{Exp}[-\gamma x^{\beta+1}] dx} \right]$$

Out(7)= ConditionalExpression[

$$\frac{\gamma^{-\frac{3}{\beta+1}} \left(2 \text{Gamma} \left[\frac{1}{1+\beta} \right]^3 + (1+\beta)^3 \text{Gamma} \left[\frac{4-\beta}{1+\beta} \right] + 6 \beta \text{Gamma} \left[\frac{2}{1+\beta} \right] \text{Gamma} \left[-1 + \frac{1}{1+\beta} \right] \right)}{(1+\beta)^3 \left(\frac{\gamma^{-\frac{2}{\beta+1}} \left(-\text{Gamma} \left[\frac{1}{1+\beta} \right]^2 - (1+\beta)^2 \text{Gamma} \left[\frac{2+\beta}{1+\beta} \right] \right)}{(1+\beta)^2} \right)^{3/2}},$$

Re[γ] > 0 && Re[β] > -1]

Рис. 3. Вычисление асимметрии для распределения (3), с учетом нормировки

Эксцес.nb - Wolfram Mathematica 10.0

File Edit Insert Format Cell Graphics Evaluation Palettes Window Help

$$B[x] = \text{Simplify} \left[\frac{\int_0^{\infty} (x - M[x])^4 \alpha x^{\beta} \text{Exp}[-\gamma x^{\beta+1}] dx}{\text{Dis}[x]^2 \int_0^{\infty} \alpha x^{\beta} \text{Exp}[-\gamma x^{\beta+1}] dx} \right]$$

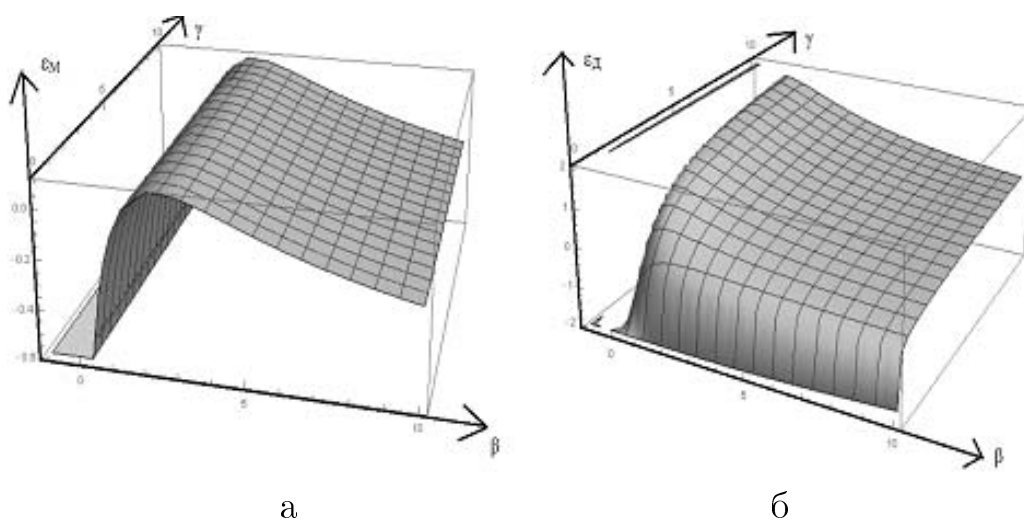
Out(8)= ConditionalExpression[

$$\left(-3 \text{Gamma} \left[\frac{1}{1+\beta} \right]^4 + 12 (1+\beta) \text{Gamma} \left[\frac{1}{1+\beta} \right]^2 \text{Gamma} \left[\frac{2}{1+\beta} \right] - \right.$$

$$\left. 12 (1+\beta)^2 \text{Gamma} \left[\frac{1}{1+\beta} \right] \text{Gamma} \left[\frac{3}{1+\beta} \right] + (1+\beta)^4 \text{Gamma} \left[\frac{5+\beta}{1+\beta} \right] \right) /$$

$$\left(\text{Gamma} \left[\frac{1}{1+\beta} \right]^2 - (1+\beta)^2 \text{Gamma} \left[\frac{3+\beta}{1+\beta} \right]^2 \right), \text{Re}[\gamma] > 0 \ \&\& \ \text{Re}[\beta] > -1]$$

Рис. 4. Вычисление эксцесса для распределения (3), с учетом нормировки

Рис. 5. Относительная погрешность математического ожидания ε_M (а) и дисперсии ε_D (б) при использовании распределения (3) вместо (2)

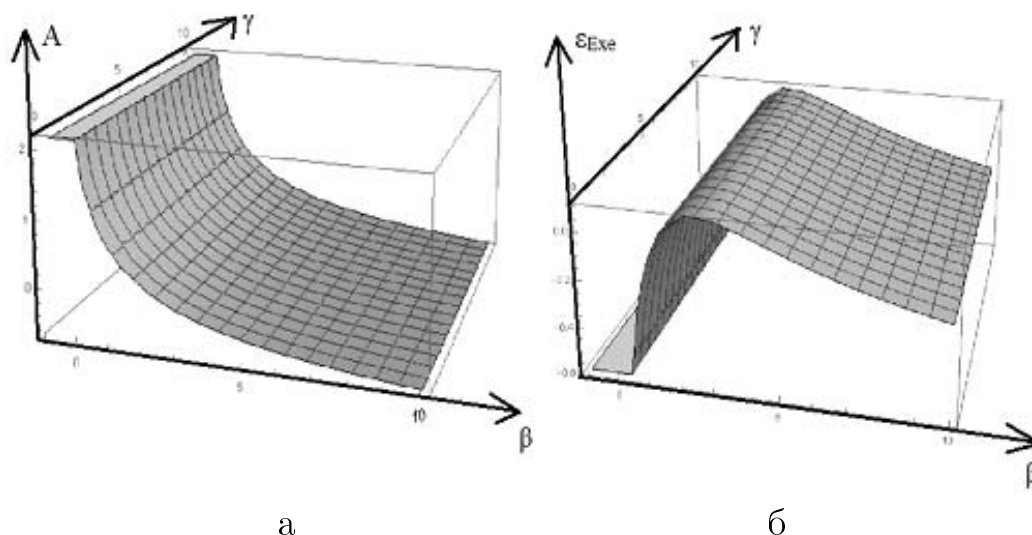


Рис. 6. Величина асимметрии модельного распределения (3) – (а) и относительная погрешность эксцесса ε_{Eex}

Результаты выполненного исследования сводятся к следующему:

1. Не удобное для аналитического интегрирования трехпараметрическое распределение (2) можно заменить приближенной функциональной зависимостью (3).
2. При выполнении условий

$$\begin{cases} \forall \alpha \\ 2.6 \lesssim \beta \lesssim 3.7 \\ \frac{\beta}{5} \lesssim \gamma \lesssim \frac{\beta}{2} \end{cases}$$

погрешность предложенной замены не превышает 20 % для таких характеристик распределения как математическое ожидание, дисперсия и эксцесс; асимметрия предложенного распределения также не превосходит по абсолютной величине 0.2.

3. Использование предложенной замены существенно упрощает получение технически значимых решений уравнения (1) в квадратурах.

Литература

1. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2001.
2. Владимиров В.И. Физика ядерных реакторов: Практические задачи по их эксплуатации. Изд. 5-е изд. перераб. и доп. – М.: Книжный дом "ЛИБРОКОМ" 2009.
3. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. М.: Наука, 1992.

4. *Ярив А.* Квантовая электроника: пер. с англ. / Под ред. Я.И. Ханина. М.:Сов.радио, 1980.
5. *Русяк И.Г., Кетова К.В.* Оценка и моделирование динамики человеческого капитала // Современные наукоемкие технологии. 2007. № 9. С. 56-58.
6. *Русяк И.Г., Кетова К.В.* Анализ экономических характеристик демографических потерь // Научный журнал "Вестник ТГУ". 2008. № 2.
7. *Солбриг О., Солбриг Д.* Популяционная биология и эволюция: Пер. с англ. М.: Мир, 1982.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АЭРОПЛАНА С КРЫЛОМ ОБРАТНОЙ СТРЕЛОВИДНОСТИ

Казаков Е.А.

*Физический факультет Южного федерального университета,
Ростов-на-Дону*

Крыло обратной стреловидности является смелым и неординарным техническим решением, любопытным с точки зрения аэродинамики. Несмотря на необычный внешний вид, оно обладает рядом технических преимуществ по сравнению с классическим крылом прямой стреловидности на определенных режимах полёта. Целью моей работы являлось исследование поведения крыла обратной стреловидности в компоновке со схемой "утка" на различных сверхзвуковых и дозвуковых скоростных режимах.

С момента изобретения реактивного двигателя конструкции самолётов пошли буквально по пути наименьшего сопротивления, всё сильнее и сильнее сдвигая концы крыльев назад, образуя так называемое крыло прямой стреловидности. Однако была и другая ветвь развития, и отнюдь не тупиковая – крыло обратной стреловидности, направленное в пикку набегающему потоку. Многие из самолётов получили его вследствие ошибки конструкторов и чертёжников – изначально спроектированный "нормальный" самолёт внезапно оказывался неправильно отцентрован и не мог стабильно держаться в воздухе. В таком случае пересмотреть форму крыла и изменить угол между направлением движения и передней кромкой (лишь для того, чтобы переместить концы крыльев вперед или назад) было намного проще, чем перебалансировать весь самолёт. Примером такой сдвижки стал легендарный Ил-2Д (хотя в его случае концы были сдвинуты как раз назад, согласно классической модели). Тем не менее, многие прототипы изначально создавались как носители крыла обратной стреловидности. ДБ-ЛК, ЛЛ-3, Уэстланд "Лисандер" – разрабатывались ещё в далёкие 30-е годы. Но настоящим прорывом можно считать Ju-287.

Его единственной и ключевой новинкой как реактивного самолёта были крылья обратной стреловидности. Стремясь увеличить критическое число Маха, конструкторы решили применить стреловидное крыло, используя давно известный в аэродинамике принцип скольжения. Исследования проводились с крыльями как прямой (КПС), так и обратной стреловидности (КОС). Недостатком КПС является преждевременный срыв потока на его концах, приводящий к потере эффективности элеронов и снижению запасов продольной устойчивости. КОС свободно от таких явлений, но как выяснилось позже, обладает другими недостатками. Сама компоновка КОС на самолете дает существенное преимущество на режимах взлета и посадки, с увеличением угла атаки консоли крыла не приближаются к взлетно-посадочной полосе

(эта опасность присуща лишь схеме низкоплана с отрицательным поперечным V), как у КПС, а, наоборот, удаляются на безопасную дистанцию, облегчая пилотирование. Но есть одно "но", полет с КОС на больших углах атаки способствует появлению дивергенции. Дивергенция элементов конструкции ЛА (от латинского слова *divergo* – отклоняюсь) характеризуется увеличением (вплоть до бесконечно большого знаменателя) производной коэффициента C_u по углу атаки. Вследствие этого, под действием аэродинамических сил происходит потеря статической устойчивости конструкции крыла с последующим его скручиванием и разрушением. С ростом скорости дополнительные аэродинамические силы, вызванные деформациями несущей плоскости, еще больше возрастают. Необходимо особо отметить момент преодоления сверхзвукового барьера: в момент перехода на сверхзвуковой режим КОС в силу конструктивных особенностей вызывает серьёзную турбулентность потока и, как следствие, тряску аэроплана с последующей возможной потерей стабильности и даже крушением. Борьба с флаттером актуальна и по сей день.

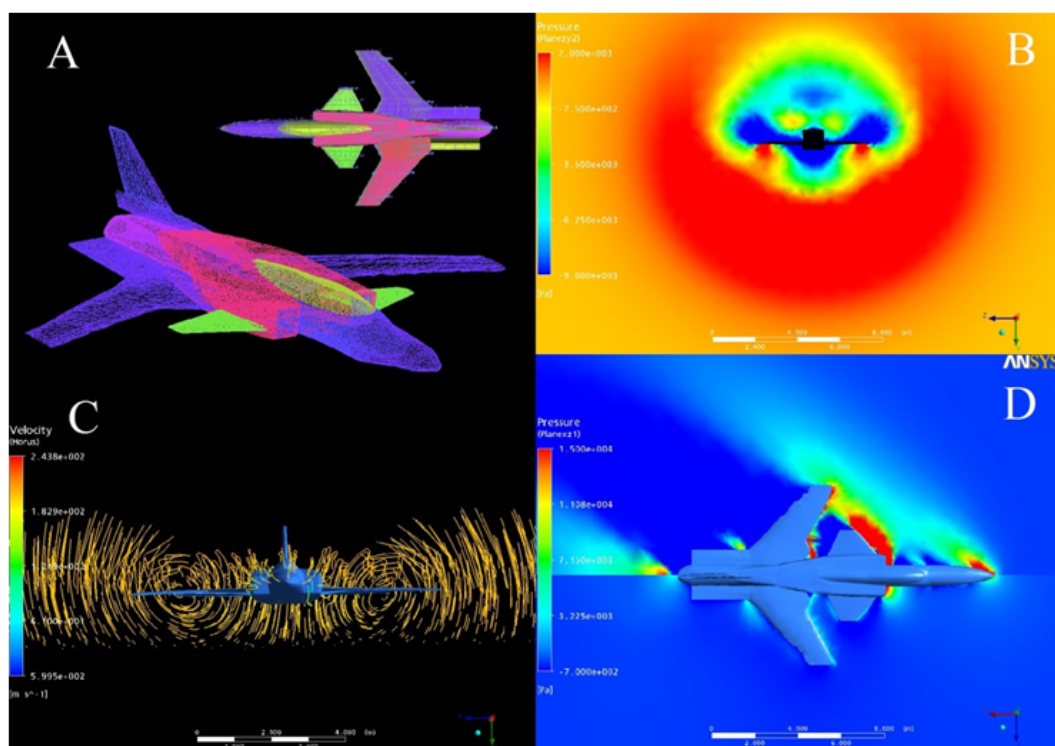


Рис. 1. Созданная мной модель аэроплана Northrop Grumman X-29A представлена на панели (А). Панель (В) показывает распределение давления в плоскости, перпендикулярной направлению течения потока. Панель (С) демонстрирует силовые линии скорости потока воздуха и наглядно проявляет преимущества КОС в отсутствии срыва потоков на законцовках. Панель (D) показывает различия в распределении давления при дозвуковом и сверхзвуковом режимах полёта и демонстрирует конус Маха.

Все преимущества и недостатки, вскрытые во время создания Ju-287,

остались неизменными и для всех последующих разрабатываемых прототипов. Конструкторы не собирались отказываться от столь лакомых преимуществ, как значительное улучшение лётных характеристик (в особенности на малых скоростях) и более комфортных, чем на любой другой модели, взлёта и посадки. Наиболее известные из них – это знаменитый Су-47 "Беркут", Grumman X-29 из ВВС США (о нём дальше пойдёт речь) и морской модификации J-20 Чэнду из КНР. Поскольку все эти машины являются ориентированными на воздушный бой истребителями, они по определению должны обладать высокой манёвренностью. Тут крыло обратной стреловидности снова подкидывает нам сюрприз: оно не только обеспечивает прирост манёвренных характеристик (особенно по крену), но при этом ещё и уменьшает ЭПР – эффективную площадь рассеяния и радиолокационную заметность самолёта. Таким образом, КОС выгодно отличает аэроплан по части тактических характеристик, хотя и ограничивает технические.

Исследование аэроплана как целого представляет собой серьёзную задачу. В рамках данной разработки было решено совместить крыло обратной стреловидности с компоновкой, в которой горизонтальное оперение размещено спереди крыла по направлению к носу – подобная конструкция обеспечивает добавочную подъёмную силу и стабильность. В ходе научных изысканий был найден угол атаки, обеспечивающий оптимальное соотношение устойчивости по тангажу, силы сопротивления потока и подъёмной силы, а также скоростные режимы на дозвуковых и сверхзвуковых условиях полёта, факт отсутствия срыва потоков на законцовках за счёт смещения воздуха к корневой части крыла и совпадающий с теорией раствор конуса Маха.

Рис. 2 наглядно иллюстрирует распределение и величину сил, возникающих в аэроплане на дозвуковом (режим "200") и сверхзвуковом ("500") режимах полёта. Косвенно подтверждается уникальная эффективность соотношения "подъёмная сила/сопротивление" у КОС. Испытания показали, что применение КОС может обеспечить улучшение на 20% характеристик самолёта на околозвуковых скоростях (при $M = 0,9$). Объединение различных технических усовершенствований на самолёте X-29A привело к уменьшению на 35% лобового сопротивления при числе $M = 0,9$, аэродинамическое качество оказалось на некоторых режимах на 30 - 40% выше, чем у обычных американских истребителей с крылом прямой стреловидности. На дозвуковых скоростях характеристики были лучше на 15%. Замечательный эффект наблюдается на сверхзвуковом режиме: значительную подъёмную силу ($2/3$ от таковой крыла) составляет ПГО, в отличие от классической компоновки, в которой оперение, в силу необходимости устойчивости, создаёт отрицательную подъёмную силу. Таким образом проявляется бесспорное преимущество схемы "утка" и компоновки X-29A с крылом обратной стреловидности над классической схемой.

Таким образом, крыло обратной стреловидности обладает внушительным числом преимуществ по сравнению с классической конструкцией и предъявляет более высокий уровень требований к разработке профиля. Ис-

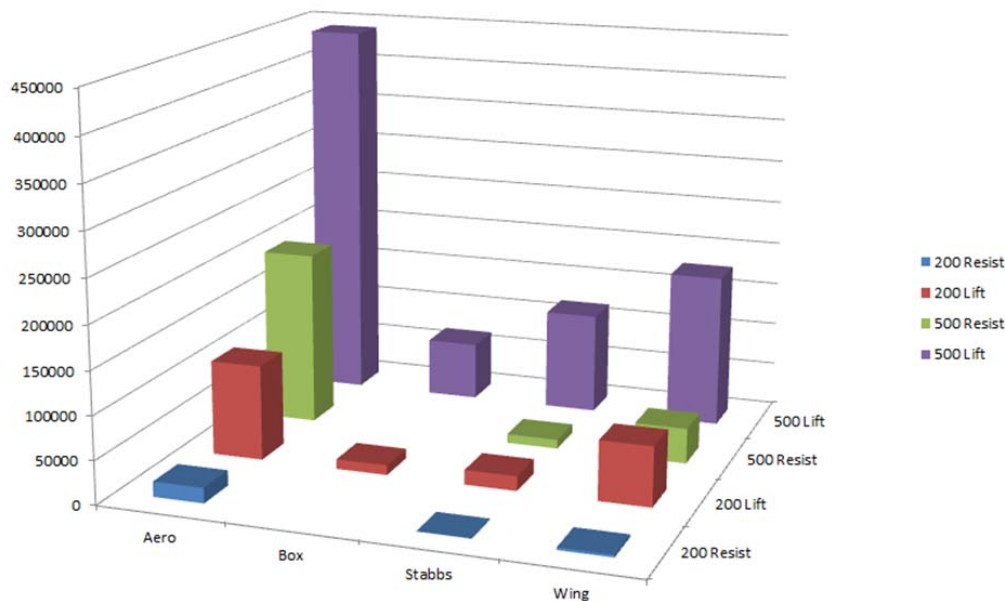


Рис. 2. Диаграмма сил. Слева направо: объект целиком, фюзеляж, ПГО, крыло; от переднего плана к заднему: сила сопротивления на дозвуковом режиме, подъемная сила на дозвуковом режиме, сила сопротивления на сверхзвуковом режиме, подъемная сила на сверхзвуковом режиме.

пользуя представленные в базе НАСА чертежи, в среде ANSYS мной была создана полноценная модель самолёта Grumman X-29A, первого в истории прототипа с крылом обратной стреловидности, официально преодолевшего звуковой барьер. Проведённое в данной работе моделирование обтекания воздушным потоком аэроплана как целого позволило оценить зависимость лётных характеристик от конфигурации элементов, устойчивость и балансировку конструкции. В ходе серии экспериментов установлено оптимальное значение угла атаки для горизонтального полёта – 4° , доказано отсутствие преждевременного срыва потоков на законцовках крыла, исследованы дозвуковые и сверхзвуковые режимы полёта. Целью моих текущих и дальнейших исследований является теоретическая разработка и экспериментальное нахождение конфигурации самолета с КОС, способной преодолеть флаттер и вывести доктрину применения КОС на новый идеологический уровень.

Литература

1. *Kazakov E.A.* Computer model of plane with forward-swept wing in unusual conditions, Proceedings of CRCNAA, стр.159, 2015.
2. *Hicks J. W., Huckabone T.* Preliminary Flight-Determined Subsonic Lift and Drag Characteristics of the X-29A Forward-Swept-Wing Airplane. - National Aeronautics and Space Administration, Ames Research Center, Dryden Flight Research Facility, 1989.

3. *Cotton S. J., Bjarke L. J.* Flow-Visualization Study of the X-29A Aircraft at High Angles of Attack Using a 1/48-Scale Model. - National Aeronautics and Space Administration, Dryden Flight Research Center, 1994.
4. *Saltzman E. J., Hicks J. W.* In-Flight Lift-Drag Characteristics for a Forward-Swept Wing Aircraft (and Comparisons With Contemporary Aircraft). - National Aeronautics and Space Administration, Office of Management, Scientific and Technical Information Program, 1994.
5. *Sefic W. J., Maxwell M.* X=29A Technology Demonstrator Flight Test Program Overview. - 1986.
6. *Абрамович Г. Н.* Прикладная газовая динамика.-4-е изд./гл. ред. физ.-мат. лит-ры изд-ва "Наука". - 2005.
7. *Жуковский Н. Е.* Теоретические основы воздухоплавания. - 2-е изд. "Гостехиздат 1925.

О НЕКОТОРЫХ ОСОБЕННОСТЯХ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ КОНВЕКЦИИ-ДИФФУЗИИ-РЕАКЦИИ¹

Крукиер Л.А., Крукиер Б.Л., Пичугина О.А.

ИММиКМ им.И.И. Воровича ЮФУ, Ростов-на-Дону

I Введение

Конвективно-диффузионный перенос и учет химических реакций играют определяющую роль при изучении процессов переноса субстанции в движущейся среде. В качестве базовой математической модели при его описании выступают краевые задачи "конвекции-диффузии-реакции" (КДР). Для их исследования привлекаются различные численные методы. После конечно-разностной, конечно-элементной или конечно-объемной аппроксимации по пространству мы приходим к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, если рассматривается нестационарная задача, и к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), если решается стационарная задача. Основные особенности этих задач, в обоих случаях, связаны с несимметричностью и знаконеопределенностью исходного оператора [1].

Наличие источников и стоков в химически реагирующих потоках отражается в коэффициенте реакции уравнения КДР и вносит дополнительные сложности при численном решении задачи. Переменный знак коэффициента реакции еще больше усложняет задачу. Все это приводит к серьезным проблемам при численном решении задачи КДР в широком диапазоне изменения коэффициентов уравнения.

II Постановка и аппроксимация задачи

Рассмотрим двумерную краевую задачу КДР в квадрате $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ с краевыми условиями 1-го рода. Уравнение КДР запишем в симметричной форме [2]

$$-\frac{1}{Pe} \Delta C + \frac{1}{2} \left(u \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial (uC)}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial (vC)}{\partial y} \right) + \alpha C = f(x, y), \quad (1)$$

$$C|_{\partial\Omega} = C_{gr}, \quad \vec{div} \tilde{U} = 0, \quad (2)$$

$$\vec{div} \tilde{U} = 0, \quad (3)$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №15-01-00441а, грант №14-01-31076 мол-а

где Pe – число Пекле, $\tilde{U} = \{u, v\}$ – поле скоростей в Ω , C – неизвестная функция, α – коэффициент реакции (при $\alpha = 0$ величина C консервативна), $\vec{div}\tilde{U} = 0$ (для несжимаемой среды), f – правая часть уравнения, $\delta\Omega$ – граница области Ω , C_{gr} – значение функции на границе $\delta\Omega$ (как правило, $C_{gr} = 0$ в силу подстановки $\tilde{C} = C - C_{gr}$ и линейности (1)).

Задача (1)-(3) появляется во многих областях исследований как самостоятельно, так и при решении более общей задачи, например, уравнений Навье-Стокса. Как правило, задача КДР рассматривается при условии, что $\alpha \geq 0$ [8]. Вместе с тем, ограничения на знак коэффициента реакции связаны не с сущностью задачи, а с возможностью ее решать численно, т.к. в случае переменного коэффициента реакции, принимающего как положительные, так и отрицательные значения спектр разностного аналога оператора Лапласа и члена реакции уравнения может не принадлежать правой полуплоскости. Часть данного спектра может сдвинуться в левую полуплоскость, в нем могут появиться нулевые собственные числа, и он потеряет важное для сходимости итерационных методов свойство знакоопределенности.

Известно [14], что знаконеопределенность, даже в случае самосопряженности СЛАУ, сильно затрудняет ее решение. Ранее, как правило, эти задачи решались прямыми методами или посредством перехода к соответствующей системе нормальных уравнений. В настоящее время решение знаконеопределенных СЛАУ актуально и для несамосопряженных задач [10].

Построим в области Ω равномерную по x и y сетку G с шагом $h = \frac{1}{N}$, где N – количество узлов. На этой сетке введем функции $C(x_i, y_k) = C_{ik}$, $x_i = i * \frac{1}{h}$, $y_k = k * \frac{1}{h}$, все неизвестные вычисляются в центре ячейки. Тогда уравнение (1) примет вид:

$$-\frac{1}{Pe}\Delta_h C + \frac{1}{2} \left(U_{ik} \frac{C_{i+1k} - C_{i-1k}}{2h} + \frac{U_{i+1k}C_{i+1k} - U_{i-1k}C_{i-1k}}{2h} + \right. \quad (4)$$

$$\left. V_{ik} \frac{C_{ik+1} - C_{ik-1}}{2h} + \frac{V_{ik+1}C_{ik+1} - V_{ik-1}C_{ik-1}}{2h} \right) + \alpha C_{ik} = f_{ik}.$$

Здесь $\Delta_h C$ – разностный аналог оператора Лапласа. Преобразуем (4), умножив обе его части на $Pe h^2$. Тогда

$$(4 + \alpha Pe h^2)C_{ik} + \left[\left(-1 + \frac{Pe h}{2} \tilde{U}_{ik} \right) C_{i+1k} + \left(-1 - \frac{Pe h}{2} \tilde{U}_{i-1k} \right) C_{i-1k} + \right. \quad (5)$$

$$\left. \left(-1 + \frac{Pe h}{2} \tilde{V}_{ik} \right) C_{ik+1} + \left(-1 - \frac{Pe h}{2} \tilde{V}_{ik-1} \right) C_{ik-1} \right] = \tilde{f}_{ik},$$

где

$$\tilde{U}_{ik} = \frac{U_{ik} + U_{i+1k}}{2}, \tilde{U}_{i-1k} = \frac{U_{ik} + U_{i-1k}}{2},$$

$$\tilde{V}_{ik} = \frac{V_{ik} + V_{ik+1}}{2}, \tilde{V}_{ik-1} = \frac{V_{ik} + V_{ik-1}}{2},$$

$$\tilde{f}_{ik} = Pe h^2 f_{ik}.$$

Установив на сетке G естественный порядок перебора узлов, получим систему

$$Ay = b, \quad (6)$$

где y , b – вектор неизвестных и правой части, соответственно, A – пятидиагональная матрица.

Исходная матрица (6) естественным образом раскладывается на сумму симметричной A_0 и кососимметричной A_1 матриц

$$A = A_0 + A_1$$

$$A_0 = A_0^T, A_1 = -A_1^T,$$

причем в симметричную матрицу A_0 попадают разностные аналоги членов диффузии и реакции уравнения (1), а в кососимметричную матрицу A_1 – разностный аналог конвективных членов уравнения (1), что связано со специальной "симметричной" записью исходной задачи, впервые предложенной в [4] и обобщенной в [2] и [8].

Известно [12], что, если $\alpha \geq 0$, то матрица A – положительно действительная, и ее спектр лежит в правой полуплоскости.

Рассмотрим случай, когда $\alpha < 0$. Отметим, что в случае регулярной области Ω , краевых условий 1 рода и равномерной сетки, собственные векторы и собственные числа разностного аналога оператора $L_h = -\frac{1}{Pe} \Delta_h + \alpha$ известны [6], [7] и имеют следующий вид:

$$\frac{2\pi^2}{Pe} + \alpha \leq \lambda_i \leq \frac{8}{Pe h^2} + \alpha,$$

$$i = 1, 2, \dots, N, \quad N = (n-1) * (n-1)$$

Следовательно, при $\alpha \leq -\frac{2\pi^2}{Pe}$, разностный оператор, соответствующий членам диффузии и реакции может терять свойство знакопостоянства в соответствии с теоремой Хирша [3], и его спектр частично смещается в левую полуплоскость. Таким образом, справедлива следующая теорема.

Теорема 1. Матрица СЛАУ (6), полученная из (5) при использовании естественного порядка перебора узлов сеточной области, является неотрицательно действительной, если

$$\alpha_{conv} \geq -\frac{2\pi^2}{Pe}.$$

Теоретические результаты необходимо проверить численно, что будет сделано в дальнейшем.

III Кососимметричные итерационные методы

Для решения СЛАУ (6) используется итерационный метод, записанный в следующей канонической форме [6]:

$$B(\omega) \frac{y_{k+1} - y_k}{\tau} + Ay_k = f, \quad (7)$$

где $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ – невырожденные матрицы, $y_k \in \mathbb{R}^n$ – k -ое итерационное приближение, y_0 – начальное приближение, $f \in \mathbb{R}^n$ – вектор правой части, k – номер итерации, $\tau, \omega \in \mathbb{R}$ – итерационные параметры.

Класс кососимметричных попеременно-треугольных итерационных методов (ПТКМ) предложенный в [5], [11] определяется (1) с матрицей

$$B = (B_c + \omega K_L) B_c^{-1} (B_c + \omega K_U). \quad (8)$$

В (10) B_c – симметричная матрица, ω – действительный параметр.

Ранее было показано [9], [13], что методы этого класса эффективно работают как сами, так и в качестве переобуславливателей для методов подпространства Крылова, если СЛАУ (6) строго несимметрична.

В дальнейшем для решения СЛАУ будет использоваться метод ПТКМ, сходимость которого доказана ранее в [5]

Литература

1. Вабищевич П. Н., Васильева М. В. Явно-неявные схемы для задач конвекции-диффузии-реакции // Сиб. журн. вычисл. матем. – 2012. – т. 15, №4. С. 359-369.
2. Крукиер Л.А., Мартынова Т.С. Влияние формы записи уравнения конвекции-диффузии на сходимость метода верхней релаксации// ЖВМ и МФ – 1999 – Т. 39, N. 11. – С.1821-1827
3. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления.– М.: Наука, 1984
4. Марчук Г. И. Численные методы и прогноз погоды. – Л.: Гидрометеоиздат, 1967.
5. Крукиер Л.А. Неявные разностные схемы и итерационный метод их решения для одного класса систем квазилинейных уравнений// Изв. ВУЗов, Математика -1979- Т.7. – С.41-52.
6. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений.– М.: Наука, 1978.
7. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики.– Новосибирск: Наука, 1973.

8. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. – М.: Эдиториал УРСС, 1999.
9. Krukier L.A. , Convergence acceleration of triangular iterative methods based on the skew-symmetric part of the matrix// Appl. Numer. Math. – 1999.– V.30. – P.281-290.
10. Krukier B.L., Krukier L.A. Using the Skew-Symmetric Iterative Methods for Solution of an Indefinite Nonsymmetric Linear Systems //J. Comp. Math. – 2014. – V. 32, N.3. – P. 266-271.
11. Botchev M.A., Krukier L.A. Iterative solution of strongly nonsymmetric systems of linear algebraic equations// J. Comp.Math. Math. Physics. – 1997. – V.37, N. 11. – P.1241-1251.
12. Krukier L.A., Pichugina O.A., Krukier B.L. Numerical solution of the steady convection-diffusion equation with dominant convection // Procedia Computer Science – 2013. – V. 18. – P.2095-2100.
13. Krukier L.A. , Chikina L.G., Belokon T.V. Triangular skew-symmetric iterative solvers for strongly nonsymmetric positive real linear system of equations// Appl. Numer. Math. – 2002. V. 41. – P.89-105.
14. Meurant G., Computer Solutions of Large Linear Systems. - Amsterdam: Elsevier Science, 1999.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВОЙ ТЕХНОЛОГИИ РАЗРАБОТКИ МЕСТОРОЖДЕНИЯ С ТРУДНЫМИ ЗАПАСАМИ НЕФТИ

Лазарева Г.Г.* , Федоров Е.А.*

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт вычислительной математики и математической
геофизики Сибирского отделения Российской академии наук,
Новосибирск*

Введение

В работе представлены математическая модель и результаты моделирования комплексного воздействия с применением технологии термогазохимического воздействия бинарным составом (ТГХВ БС) на скважинах. Целью работы является разработка быстродействующего калькулятора для оценки результатов натурных испытаний на основе реальных параметров пласта и закачиваемых реагентов. Для возможности обоснования параметров ведущихся промышленных испытаний разработаны математическая модель и расчетный модуль для выполнения расчетов технологическими службами сервисного предприятия. На основе анализа моделируемой технологии выделены наиболее существенные физические процессы: последовательная закачка реагентов, возникновение зоны реакции, разогрев и образование зоны высокого давления в ходе реакции, распространение температурного поля и поля давления по пласту. Построен алгоритм расчета ведущихся натурных испытаний, приведены реальные параметры пласта и закачиваемых реагентов к единой метрической системе. Учтены возможности ввода изменяющихся параметров пласта и закачиваемых веществ, создан удобный интуитивно-понятный интерфейс с возможностью вывода результатов расчета в графическом виде.

I Технология ГХВ БС

Суть моделируемой технологии заключается в закачке в скважину по затрубному пространству (без извлечения насосного оборудования) растворов энерговыделяющего состава и инициатора разложения. В результате термохимической реакции в скважине в удаленной от забоя зоне продуктивного пласта, при избыточном давлении, выделяется большое количество газов (азот, пары воды) и создается высокотемпературная область разложения бинарного состава (до 300-320°C).

Контроль за процессом протекания реакции на забое скважины, в режиме реального времени, производится с помощью высокотемпературной системы измерения, а скорость разложения и температура реакции могут регулироваться концентрацией солей. Результатом термогазохимического воздействия на призабойную зону пласта является восстановление проницаемости ПЗП, снижение вязкости нефти и образование дополнительных каналов фильтрации.

Технология разработана специалистами ООО <ЦНТ>, защищена российскими и зарубежными патентами, прошла экспертизу на промышленную безопасность в лицензированном предприятии ЗАО <Взрывиспытания>.

Алгоритм расчета параметров ведущихся натурных испытаний состоит из определения координат зоны реакции и расчета распространения температурного поля и поля давления в пласте. Рассматривается радиальное распространение реагентов в пласте для одномерного случая и расчет влияния активированных скважин на все месторождение в целом в планарной двумерной модели.

II Определение координат зоны реакции

Менее вязкая вытесняющая жидкость прорывается через вытесняемую, формируя каналы, называемые вязкими пальцами. Причиной такого прорыва является неустойчивость типа Саффмана - Тейлора плоского фронта вытеснения [1]. Вытеснение одной вязкой жидкости в пористой среде другой жидкостью часто моделируется течением в ячейке Хеле-Шоу, которая представляет собой две параллельные пластины, разделенные малым зазором [2]. Известны математические модели для исследования двумерной задачи устойчивости вытеснения двух несжимаемых жидкостей, например, на основе явных схем high-resolution для гиперболических уравнений и неявных консервативных схем, решаемых методом продольно-поперечной прогонки для эллиптических уравнений, описывающих эволюцию порового давления [3]. В случае многокомпонентной фильтрации в [4] были рассмотрены безитерационные схемы, в которых суммарная аппроксимация достигается за счет выполнения термодинамических соотношений.

В данном случае использован расчет закачки всех веществ поршневым способом. Основной причиной такого упрощения является невозможность определения точной геометрии неоднородностей в пласте. К тому же, расчеты пальцев вытеснения весьма трудоемки, так как требуется высокая точность вычислений при исследовании неустойчивостей. Необходимо, чтобы итерации для расчета порового давления сходились с высокой точностью, иначе значения инкрементов определяются с заметной погрешностью.

Размер расчетной области задается пользователем, шаг сетки определяется через желаемую точность определения границ зоны реакции. Шаг по времени определяется через задаваемые параметры. Вводятся и приводятся

к безразмерному виду параметры пласта и веществ: пористость, проницаемость, пластовое давление, мощность пласта, плотность, объем закачки, коэффициенты сжимаемости, вязкости и температуропроводности. На левой границе задается поэтапная закачка реагентов. Закачка продолжается до достижения нужного объема, потом закачивается следующее по порядку вещество. На правой границе заданы пластовое давление, наполненность водой в заданном соотношении с нефтью, вещество свободно выходит из области. Граница раздела сред определяется из упрощенного определения пористости.

III Расчет распространения температурного поля и поля давления по пласту

Решается уравнение теплопроводности с учетом переменных коэффициентов без учета конвекции в цилиндрической системе координат в одномерном случае

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(k_T r \frac{\partial T}{\partial r} \right),$$

$$T(r, t)_{t=0} = T_0(r)$$

и в декартовой системе координат в планарной модели

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_T \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_T \frac{\partial T}{\partial y} \right),$$

$$T(x, y, t)_{t=0} = T_0(x, y).$$

Здесь T – температура, $k_T = \frac{\lambda}{c\rho}$ – коэффициент температуропроводности, λ – теплопроводность, c – теплоемкость, ρ – плотность.

Можно построить полную гидродинамическую модель распространения реагентов в пласте с подробным расчетом давления, плотности, скорости, насыщенности, удельной массы и т.д. За простоту и надежность вычислений выбрано уравнение пьезопроводности в цилиндрической системе координат в одномерном случае

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(k_P r \frac{\partial P}{\partial r} \right),$$

$$P(r, t)_{t=0} = P_0(r)$$

и в декартовой системе координат в планарной модели

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_P \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_P \frac{\partial P}{\partial y} \right),$$

$$P(x, y, t)_{t=0} = P_0(x, y).$$

Здесь P – давление, $k_P = \frac{k_r}{\mu(m_r\beta_l + \beta_r)}$ – коэффициент пьезопроводности, k_r – проницаемость, μ – коэффициент вязкости, m_r – пористость, β_l, β_r – коэффициенты сжимаемости вещества и пласта. Использован метод стабилизирующей поправки, который реализован с помощью векторных прогонок. В качестве начальных данных выбраны давления, температуры в пласте (известные в результате натуральных измерений) и в области реакции (непосредственно вычисляемые из данных о закачиваемых реагентах).

IV Содание интерфейса

Расчётный модуль предоставляет возможность задать параметры расчёта и выдает графическое представление размещения закачанных веществ в скважине (вертикальный срез пласта через линию скважины), графики распределения поля давления и температуры, дебет скважины. В ходе его разработки были использованы следующие технологии: ОС – Windows, платформа – .NET 3.5, язык программирования – C#, технология GUI – WPF, библиотека OxyPlot для отрисовки графиков. Общие свойства графиков позволяют производить Zoom In/Out роликом, перемещение мышью и показ значения в точке (по клику). Дополнительные возможности модуля это копирование графика, сохранение графика в файл, сохранение проекта работ.

V Заключение

В работе представлен пример практического промышленного применения математического моделирования для разработки месторождений нефти. Существующие пакеты программ показали неспособность смоделировать принципиально новую технологию. Полученные результаты дают точные предсказания разогрева пласта в результате применения ТГХВ БС.

Авторы выражают благодарность В.Б. Заволжскому и И.В. Хлестову за постановку интересной практической задачи.

Литература

1. Барышников Н.А., Беляков Г.В., Турантаев С.Б., Филиппов А.Н. Лабораторное моделирование двухфазных струйных течений // Труды РГУ имени И.М.Губкина, 2013 г., No 3(272), с. 15-29.
2. Логвинов О.А. Об устойчивости боковой поверхности вязких пальцев, образующихся при вытеснении жидкости из ячейки Хеле-Шоу // Вестн. Моск. Ун-та. Сер. 1, Матем. Механ. 2011. № 2. с. 40-46.

3. *Заславский М.Ю., Пергамент А.Х.* Исследование неустойчивости типа *<fingers>* в фильтрационных течениях Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2002, 031.
4. *Митлин В.С.* Автоколебательные режимы течения двухфазных многокомпонентных смесей через пористые среды // Докл. АН СССР. - Т. 296, № 6. - с. 1323-1326.

ПОСТРОЕНИЕ ФУНКЦИИ ТОКА ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ И ВИХРЕВЫХ ТЕЧЕНИЙ

Лежнев В. Г., Марковский А. Н.

Кубанский государственный университет, г. Краснодар

Рассматриваются интегральные представления функции тока и их построение по граничным значениям для потенциальных и вихревых течений в ограниченной области $Q \subset \mathbb{R}^2$. Для вихревых течений это дает более широкий класс течений по сравнению с классическими постановками, где, как в задаче Стокса, требуется задавать скорость на границе.

1. Функция тока $\psi(x)$ потенциального течения $\mathbf{w}(x) = \nabla_c \psi(x)$ ($\text{rot } \mathbf{w}(x) = \mathbf{0}$, $\text{div } \mathbf{w}(x) = 0$), $x = (x_1, x_2) \in Q \subset \mathbb{R}^2$, где Q – ограниченная область с границей Ляпунова $\partial Q = S$ может быть определена по граничным значениям $\psi(x)|_S = f(x)$ в виде

$$\psi(x) = \int_S q(y) \ln |x - y| dS_y, \quad x \in Q.$$

Функция $q(y)$ такого представления существует и единственна, если $f(x)$ достаточно гладкая.

Алгоритм определения $q(y)$ состоит в следующем. Система функций

$$\sigma_m(x) = \int_S \ln |z^m - y| \ln |x - y| dS_y, \quad x \in S, \quad m = 1, 2, \dots$$

является полной и линейно независимой, если последовательность точек $z^m \in \mathbb{R}^2 \setminus \overline{Q}$ является базисной [1] и постоянная Робена [2] R_0 для области Q не равна нулю.

Пусть $f(x) = f^n(x) + \rho_n$, где f^n – проекция f на подпространство $\{\sigma_m\}_{m=1}^n$, тогда

$$f^n(x) = \sum_{m=1}^n c_m \sigma_m(x).$$

Минимизируя функцию $F(c_1, \dots, c_n) = \|f - f^n\|_S^2$ получим для c_k невырожденную систему уравнений

$$\sum_{m=1}^n c_m (\sigma_m, \sigma_k)_S = (f, \sigma_k)_S, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

где $\|\cdot\|_S^2$ и $(\cdot, \cdot)_S$ – норма и скалярное произведение в $L_2(S)$.

Приближенное решение имеет вид

$$\psi^n(x) = \sum_{m=1}^n c_m \int_S \ln |z^m - y| \ln |x - y| dS_y, \quad x \in Q.$$

2. Функция тока $\psi(x)$ вихревого соленоидального течения $\mathbf{w}(x)$ в Q может быть определена по ее граничным значениям $\psi(x)|_S = h(x)$ в виде

$$\psi(x) = \iint_Q g(y) \ln |x - y| dy, \quad x \in Q.$$

если плотность вихрей $g(y)$ – гармоническая функция, то такое определение единственно, что следует из леммы Новикова [3]. Если $h(x) \equiv \text{const}$, то течение $\mathbf{w}(x)$ будем называть *собственным вихрем* области Q ; оно представляет собой присоединенный вихрь Жуковского [4] для чисто циркуляционного течения (внешнего течения Робена). Функция тока является решением краевой задачи:

$$\Delta^2 \psi(x)|_Q = 0, \quad \psi(x)|_S = 0, \quad \left. \frac{\partial \psi(x)}{\partial \mathbf{n}} \right|_S = q^*(x),$$

где $q^*(x)$ – плотность потенциала Робена для ∂Q .

3. В случае достаточно гладкой $h(x)$ алгоритм определения $g(y)$ состоит в следующем. Система функций

$$\mu_m(x) = \iint_Q \ln |z^m - y| \ln |x - y| dy, \quad x \in S, \quad m = 1, 2, \dots$$

является полной и линейно независимой, если последовательность точек $z^m \in \mathbb{R}^2 \setminus \bar{Q}$ является базисной [1] и постоянная Робена R_0 для области Q не равна нулю.

Пусть $h(x) = h^n + \rho_n$, где h^n – проекция h на подпространство $\{\mu_m(x)\}_{m=1}^n$, $\rho_n \perp h^n$,

$$h^n = \sum_{m=1}^n c_m \mu_m(x), \quad x \in S.$$

Минимизируя функцию $G(c_1, c_2, \dots, c_n) = \|h - h^n\|_S^2$ получим для c_k невырожденную систему уравнений

$$\sum_{m=1}^n c_m (\mu_m, \mu_k)_S = (h, \mu_k)_S, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Приближенное решение функции тока для вихревого течения имеет вид

$$\psi^n(x) = \sum_{m=1}^n c_m \iint_Q \ln |z^m - y| \ln |x - y| dS_y, \quad x \in Q.$$

Литература

1. Лежнев А.В., Лежнев В.Г. Метод базисных потенциалов в задачах математической физики и гидродинамики. – Краснодар, 2009, 111 с.

2. Владимиров В. С. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1988. 512 с.
3. Новиков П.С. Об единственности решения обратной задачи потенциала // ДАН СССР, 1938,
4. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Дрофа, 2003. 478 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ ГЕОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ УСТАНОВОК С ОДНИМ И БОЛЕЕ ИСТОЧНИКОВ В ЗАДАЧАХ МОРСКОЙ ГЕОФИЗИКИ¹

Мариненко А.В., Эпов М.И.

*Институт нефтегазовой геологии и геофизики
им. А.А. Трофимука СО РАН, Новосибирск*

Аннотация

Использование приповерхностных установок возможно в случае их слабой чувствительности к слою морской воды и, одновременно, при достаточном количестве информации в измеренном сигнале для выделения нефтегазовых залежей и определения их геометрических характеристик и удельной электропроводности. Вспомним, каким образом избавляются от экранирующего эффекта в скважинной геофизике [1]. При геофизических исследованиях в скважинах установка (зонд) находится в среде, заполненной однородным проводящим буровым раствором. Еще в 70-е годы прошлого века для скважинных моделей были получены приближенные выражения, описывающие ЭДС от малого токового витка. Воспользовавшись аналогией с задачей каротажа и методом получения приближенных выражений, можно записать выражение для расчета ЭДС на поверхности слоя горизонтально-однородной морской воды, подстилаемого проводящим полупространством. В качестве установки в такой задаче будет выступать один или более изолированных кабелей с двумя приемниками, расположенными по одну сторону от источника. Количество необходимых точек измерений составляет около 100 положений установки (при шаге 10 м) над объектом, представляющим типичную антиклинальную ловушку. В качестве численного метода целесообразнее всего использовать векторный метод конечных элементов.

I Математическая модель

Система уравнений Максвелла, описывающих процессы электромагнетизма, в дифференциальной форме имеет вид [2]:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\ \operatorname{rot} \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J} + \vec{j}, \end{cases} \quad \operatorname{div} \vec{D} = \rho, \operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad (1)$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №13-05-12031-офи_м

где \vec{J} — плотность объемного тока (А/м²); \vec{j}^e — плотность стороннего тока (А/м²); ρ — плотность электрических зарядов (Кл/м³). Компонентами электромагнитного поля являются четыре вектора, характеризующие поле в среде: \vec{E} — напряженность электрического поля (В/м); \vec{D} — электрическое смещение (индукция) (Кл/м³); \vec{H} — напряженность магнитного поля (А/м); \vec{B} — магнитная индукция (Тл). Четыре уравнения Максвелла (1) дополняются тремя уравнениями, характеризующими свойства среды и устанавливающими связи между \vec{D} и \vec{E} , \vec{B} и \vec{H} , \vec{J} и \vec{E} : $\vec{J} = \sigma\vec{E}$, $\vec{D} = \epsilon\vec{E}$, $\vec{B} = \mu\vec{H}$, где σ — удельная электропроводность (См/м); $\epsilon = \epsilon_0\epsilon_r$, $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ (Ф/м), ϵ_r — относительная диэлектрическая проницаемость среды; $\mu = \mu_0\mu_r$, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ (Гн/м), μ_r — относительная магнитная проницаемость среды. При моделировании электрических полей в частотной области будем полагать, что компоненты \vec{j}^e и \vec{E} полученного уравнения будут зависеть от времени по гармоническому закону:

$$\vec{j}^e = \text{Re}(\vec{j}_{re}^e + \vec{j}_{im}^e)e^{i\omega t} = \vec{j}^e e^{i\omega t}, \vec{E} = \vec{E} e^{i\omega t} = (\vec{E}^{re} + i\vec{E}^{im})e^{i\omega t}, \quad (2)$$

где i — мнимая единица, $\omega = 2\pi f$ — циклическая частота, f — угловая частота. Поведение гармонического во времени электрического поля \vec{E} описывается векторным уравнением Гельмгольца:

$$\text{rot}(\mu^{-1}\text{rot}\vec{E}) - k^2\vec{E} = -i\omega\vec{j}^e, \quad (3)$$

где $k^2 = \omega^2\epsilon - i\omega\sigma$ — волновое число. В случае, когда σ — константа, закон сохранения электрического заряда описывается следующим уравнением:

$$\sigma\text{div}\vec{E} + i\omega\epsilon\text{div}\vec{E} = 0 \quad (4)$$

Так как в морской воде коэффициент электропроводности имеет разные значения на разных глубинах, рассмотрим задачу, в которой электропроводность есть функция от z : $\sigma = \sigma(z)$. Остальные характеристики среды, такие как диэлектрическая проницаемость ϵ и магнитная проницаемость μ по-прежнему будем считать константами. Тогда закон сохранения электрического заряда (4) примет вид:

$$\frac{\partial\sigma(z)}{\partial z}\vec{E}_z + \sigma(z)\left(\frac{\partial\vec{E}_x}{\partial x} + \frac{\partial\vec{E}_y}{\partial y} + \frac{\partial\vec{E}_z}{\partial z}\right) + i\omega\epsilon\left(\frac{\partial\vec{E}_x}{\partial x} + \frac{\partial\vec{E}_y}{\partial y} + \frac{\partial\vec{E}_z}{\partial z}\right) = 0 \quad (5)$$

Первое слагаемое в (5) описывает дополнительный заряд, который может появиться за счет вертикального изменения электропроводности среды (необходимое условие его появления состоит в наличии ненулевой z -компоненты электрического поля). Из соотношения (5) и из-за возможного наличия нескольких токовых кабелей в установке «источник — приемник»

можно сделать вывод о том, что задачи морской геоэлектрики необходимо решать в трехмерной области, где присутствуют все три компоненты электрического поля: E_x , E_y , E_z .

II Численные эксперименты

Пусть модель задачи представляет собой параллелепипед с тремя подобластями-средами — воздух, морская вода и подстилающая среда (рис. 1).

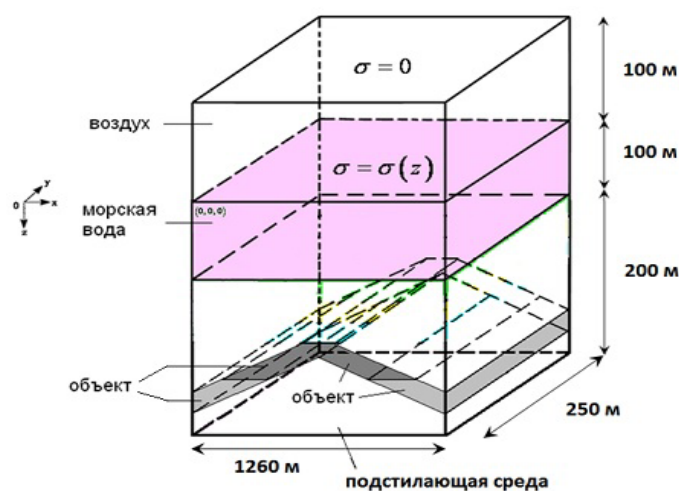


Рис. 1. Модель задачи и расчетная область.

Подстилающая среда имеет электропроводность 0.1 См/м. Объект представляет собой антиклинальную ловушку, заглубленную на 50 м от границы «вода — подстилающая среда», протяженностью 330 м и имеющую форму купола или арки (рис. 2).

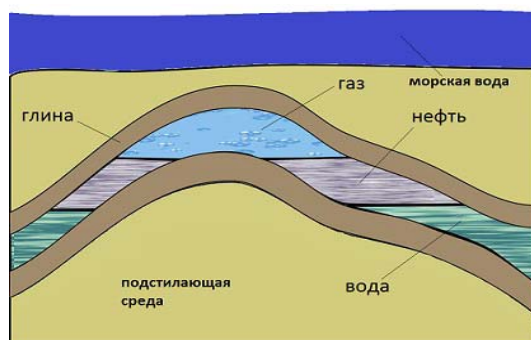


Рис. 2. Модель антиклинальной ловушки.

У водонасыщенного коллектора электрическое сопротивление может варьироваться [3] в промежутке от 2 до 6 Ом*м, у нефтенасыщенного — от 4 до 50 Ом*м, у газонасыщенного — от 30 до 200 Ом*м и, наконец, у глинистых флюидупоров — от 2 до 6 Ом*м. В нашем случае будем задавать следующие значения:

- водонасыщенный коллектор — $4 \text{ Ом}^*_{\text{м}}$, глубина — 50 м;
- нефтенасыщенный коллектор — $40 \text{ Ом}^*_{\text{м}}$, глубина — 40 м;
- газонасыщенный коллектор — $100 \text{ Ом}^*_{\text{м}}$, глубина — 30 м;
- глинистые пласты — в зависимости от того, с какой средой происходит контакт (при контакте с газом — $3 \text{ Ом}^*_{\text{м}}$; с нефтью — $3.5 \text{ Ом}^*_{\text{м}}$; с водой — $4 \text{ Ом}^*_{\text{м}}$).

Ширина коллекторов составляет от 30 до 100 м (у газонасыщенного коллектора), толщина глинистых пластов — 20 м. Электропроводность воды — линейная функция (5 См/м вблизи поверхности воды, 7 См/м у дна). В качестве приповерхностной геоэлектрической установки, как уже упоминалось выше, выступает один или более изолированных кабелей с двумя приемниками, расположенными по одну сторону от источника. Для начала будем рассматривать модель источника с одним кабелем и с двумя кабелями, расположенными перпендикулярно друг относительно друга. Длина одного кабеля с током составляет 500 м. Расстояние от центра источника до ближайшего приемника также равно 500 м. Расстояние между приемниками — 70 м. Подобные параметры установки позволяют применять описанный в аннотации подход для уменьшения влияния слоя морской воды. В качестве измеряемого параметра будет выступать разность фаз.

Первая серия экспериментов проводилась для установки с одним кабелем. Целью экспериментов было нахождение подбором эффективной для данной модели трехслойной среды и антиклинальной ловушки частоты, для чего проводилось тестирование на 3 Гц и выше с удвоением последующей частоты. После нахождения эффективной частоты, шаг уменьшался до 1 Гц, после чего находился приблизительный диапазон рабочих частот. Поскольку погрешность измерения разности фаз у приборов в полевых условиях колеблется в районе 1 градуса, эффективными можно считать те частоты, на которых реакция на объект составляет 3 и более градусов. Первоначальный поиск эффективной частоты показал, что работа установки на низких частотах — 3 Гц и 6 Гц оказалась менее эффективной, чем на высоких 10–15 Гц. Если на 10–15 Гц мы наблюдаем реакцию на объект от 2 до 5 градусов, то для частот 3 Гц и 6 Гц она составляет менее 1 градуса (0.7–0.75 градуса). Приблизительный диапазон рабочих частот составил от 11 до 13 Гц.

Пример полученных результатов для одной из эффективных частот (12 Гц) представлен на рис. 3.

Точки экстремумов возникают при прохождении краев кабеля и измерительных электродов над областями ВНК — водонефтяного контакта, ГНК — газонефтяного контакта, контактов нефти, газа и воды с глинистыми флюидоупорами и над верхушкой антиклинальной ловушки (самая близкая к поверхности часть ловушки). Так как этих точек достаточно много, количество скачков на графике также велико. Однако выраженность экстремумов

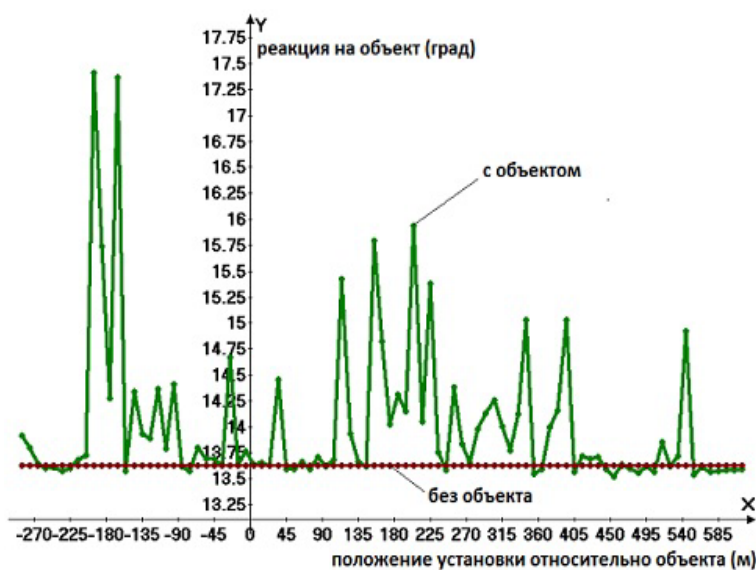


Рис. 3. Реакция на антиклинальную ловушку на частоте 12 Гц.

оказывается разной. Для некоторых частот максимальной оказывается реакция на области ВНК, в то время как для других частот наблюдается более выраженная реакция на области ГНК, области контактов нефти, газа и воды с глинистыми флюидоупорами или на вершущку антиклинальной ловушки. Очевидно, что это связано с разной глубиной метода на разных частотах.

Вторая серия экспериментов проводилась для установки с двумя кабелями, расположенными перпендикулярно друг относительно друга. Задавая разные знаки (+/-), частоты и значения тока в кабеле, можно найти ситуацию, при которой измеряемая разность фаз оказывается нулевой для модели трехслойной среды без объекта. Таким образом, первоначальная настройка установки проводится в отсутствии информации об объекте. После этого установка так же, как и в предыдущем случае, подвергается движению над областью, где может находиться объект. Такой подход позволяет избавить исследователей от необходимости многократного прогона установки на разных частотах при работе в полевых условиях. Для представленной на рис. 1 модели среды нулевой разности фаз удалось добиться при значениях тока в перпендикулярных друг относительно друга кабелях, соответственно, 100 и 115 А, либо -100 и -115 А.

Литература

1. Эпов М.И., Антонов Ю.Н. Технология исследования нефтегазовых скважин на основе ВИКИЗ. Методическое руководство // Новосибирск: НИЦ ОИГГМ СО РАН, Издательство СО РАН, 2000, 122 с.
2. Jackson, J. Classical electrodynamics. // New York, Wiley. — 1962. — 839 p.

3. *Еров М.И., Антонов Ю.Н., Яeltsov I.N.* VIKIZ Method for logging Oil and Gas Boreholes // Novosibirsk: Branch "Geo" of the Publishing House of the SB RAS, 2002, 112 p.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛО И МАССОПЕРЕНОСА ПРИ ДВИЖЕНИИ ТЕПЛОВОГО ФРОНТА В СРЕДЕ С СУБМИКРОННЫМИ ПОРАМИ ¹

Марков А.А.

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН,
Москва*

Введение

Недавние экспериментальные исследования конвективного и диффузионного переноса в нанотрубках углерода показали ускорение переноса на 2-3 порядка и более по сравнению с оценками на основе теории сплошной среды. Частично явления интенсификации переноса удастся объяснить прямым моделированием движения ансамбля молекул методом молекулярной динамики (МД). Следует заметить, что длина свободного пробега молекул газа в порах углерода превышает диаметр пор. Столкновения молекул с границей нанотрубки доминируют над соударением молекул между собой. Числа Кнудсена достигают величин 10-70, однако, измеренные потоки газа превышают оценки по теории слоя Кнудсена в 10-100 раз. [1,2] Отмеченные экспериментальные данные и ограничения теоретических моделей являются стимулом построить теорию процессов тепло- и массопереноса на основе эффектов проскальзывания и скачков концентраций и температуры в слое Кнудсена. В данной работе дается обобщение подхода Ченга [3,4] на случай процессов горения углерода на нано масштабах, в отличие от упомянутых выше работ для процессов на макро масштабах при больших числах Кнудсена. Наряду с условиями скачка температуры газовой фазы, вводятся также граничные условия скачков концентраций реагирующих компонент. Проведены расчеты горения углерода для переходных процессов от сплошной среды к режимам молекулярных потоков, для которых применяются методы молекулярной динамики. Мотивация данного исследования заключается в следующем: понять природу и особенности сложных газодинамических и тепловых процессов в волнах горения на субмикронных масштабах, имеющие применение в синтезе нано частиц. В работе развивается двухуровневая модель мелкодисперсной, химически активной смеси [5,6], основанная на расчете детальной кинетики и процессов тепло массообмена около изолированной частицы (мезо шкала), процедуре осреднения микро потоков вещества и тепла и расчете характеристик смеси на макро уровне. Определяющие уравнения на макро уровне используют формализм Эйлера: это

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ грантом № 14-08-00664

законы сохранения вещества, импульса и энергии несущей фазы, включающие осредненные микро потоки, а также уравнения для фракций частиц [7,8].

I Основные результаты

Проводится численное моделирование переноса тепла и массы в газовой смеси при движении теплового фронта в канале с субмикронными порами. Описание процессов при больших числах Кнудсена проводится с помощью уравнений сплошной среды с проскальзыванием газа на границах пор при скачках температуры и концентраций компонент газовой фазы. Получены величины макро потоков переноса вещества и тепла с учетом теплового излучения и эффектов переноса в слое Кнудсена около границ пор. Интенсивности потоков теплового излучения, проскальзывания, скачков температуры и концентраций получены в результате осреднения микро потоков в порах и представлены в безразмерной форме в виде зависимостей от степени черноты поверхности пор, пористости среды, коэффициентов отражения молекул от стенки пор, коэффициентов тепловой аккомодации и параметров подобия. Проведены расчеты в широком диапазоне параметров подобия при варьировании интенсивностей макро потоков. Получены следующие основные результаты численного моделирования процессов тепло и массопереноса:

1. Рост теплового излучения приводит к возрастанию температуры как на поверхности пор, так и внутри пор.

2. Давление газа в порах сильно растет вследствие эффекта термодиффузии, сопровождающего тепловое излучение и скачки температуры на границах пор.

3. Проскальзывание газа на границах пор усиливает эффект тепловой радиации.

4. Проскальзывание газа на границе канала сильно ускоряет процесс переноса тепла и массы в канале. Отмечены структуры фингерной неустойчивости в распределениях температуры в форме вытянутых языков высокой температуры, расположенных вблизи охлаждаемой стенки канала.

Результаты расчетов представлены в переменных Франк-Каменетского [12]. Характерные масштабы времени и размера

$$t_0 = \frac{\exp(\frac{E}{RT_0})}{k}, l_0 = \sqrt{\frac{\lambda_0 t_0}{c_V \rho_0}}$$

Безразмерная температура находится по формуле

$$T = \frac{(T' - T'_0)E}{RT_0^2}$$

Здесь штрих относится к размерным величинам, индекс ноль обозначает характерные значения переменных. Интенсивности проскальзывания A_u и скачка температуры A_T представлены в безразмерной форме и зависят от коэффициентов отражения молекул от поверхности θ_u и от коэффициента тепловой аккомодации α_T [3,4].

$$A_u = \frac{2\chi b_u l_0^2 \sqrt{\rho_0 P_0}}{r_1 Re_0 \mu_0}, b_u = \frac{(2 - \theta)}{\theta} \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

$$A_T = \frac{2\chi b_T l_0^2 \sqrt{\rho_0 P_0}}{r_1 \mu_0}, b_T = \frac{(2 - \alpha)}{\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{2\gamma}{\gamma + 1}$$

Интенсивность теплового излучения определяется коэффициентом A_R , который зависит от степени черноты поверхности пор ε , коэффициента пористости χ , постоянной Стефана Больцмана σ , размера пор r_1 , а также от характерной температуры и коэффициента теплопроводности

$$A_R = \frac{2\chi l_0^2 \varepsilon \sigma T_0^3}{r_1 \lambda_0}$$

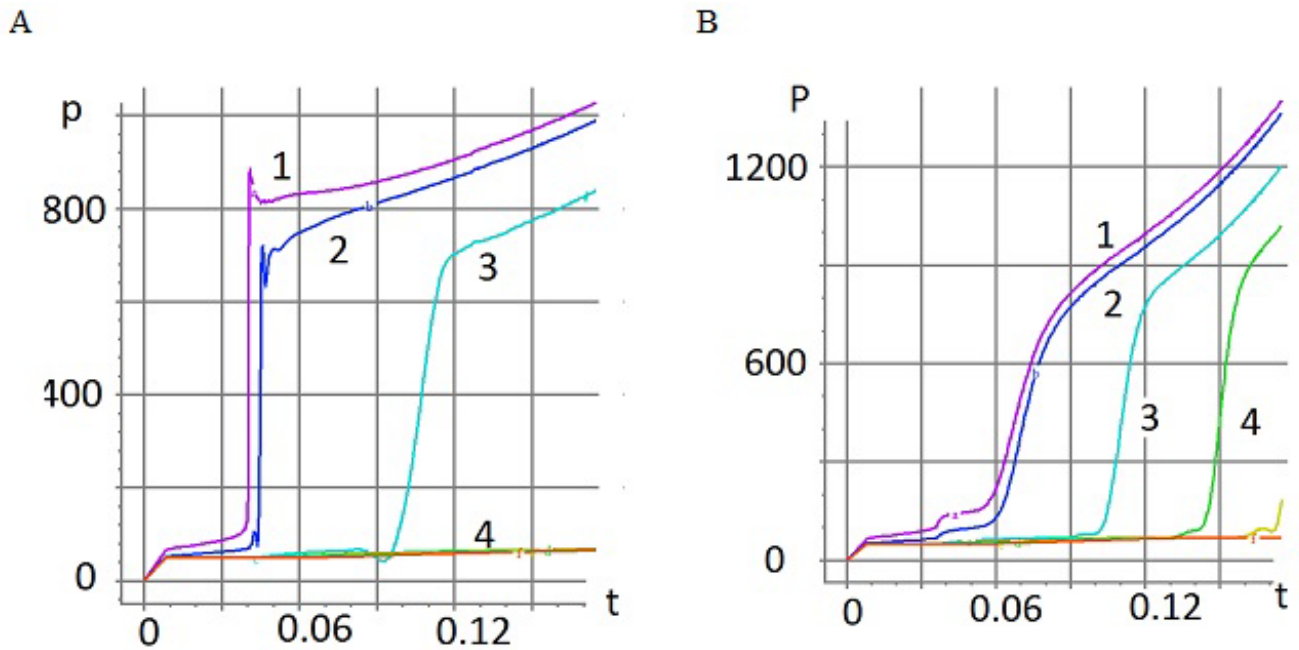


Рис. 1. Зависимость от времени давления газа в точках на оси симметрии канала при интенсивности теплового излучения $A_R = 1$ и интенсивностях проскальзывания $A_u = 10$ (слева) и $A_u = 100$ (справа). Линии 1–4 относятся к точкам на оси симметрии с координатами $(0, 0)$, $(0, 0.3)$, $(0, 1)$, $(0, 1.5)$. Проскальзывание газа имеет место как на стенке канала, так и на границах пор. Демонстрируется рост давления газа в порах с увеличением проскальзывания.

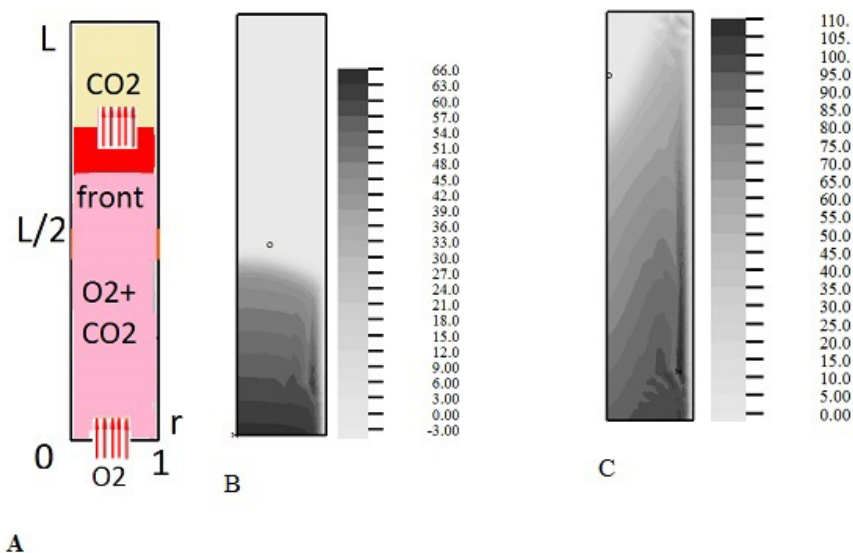


Рис. 2. Схема движения теплового фронта (А). Температура газа в моменты времени $t = 0.1$ (В), $t = 0.175$ (С) при тепловом излучении $A_R = 1$, проскальзывании $A_u = 100$, нулевых скачках температуры и концентраций Коэффициент теплообмена между твердой и газовой фазами $\kappa = 0.1$. Проскальзывание имеет место как на стенке, так и на границах пор. Демонстрируется развитие протяженных зон (фингеров) нагретого газа около стенки канала.

Литература

1. *Jan Eijkel* Liquid slip in micro- and nanofluidics recent research and its possible amplifications. *Lab Chip*, 2007, v.7, p299-301.
2. *J.K. Holt et all.* Fast mass transport through sub-nanometer carbon nanotubes. *Science* v.312, 19 May 2006.
3. *Cheng H.K.* The blunt body problem in hypersonic flow at low Reynolds number // *IAS Paper*. 1963. | 63-92. 100.
4. *Brikina I.G., Rogov B.V., Tirskii G.A.* On application continuum models for transitional hypersonic blunt body problems. *PMM* 2009 v 5, pp 700-716.
5. *Markov A.A.* Jump-Slip simulation technique for combustion in submicron tubes and submicron pores. // *Computers and Fluids* 99C (2014), pp. 83-92.
6. *Markov A.A.* Micro and macro scale technique for strongly coupled two-phase flows simulation.// *Computers & Fluids*. 2009. 38. 1435-1444.
7. *A.A. Markov, I.A. Filimonov, and K.S. Martirosyan* Simulation of front motion in a reacting condensed two phase mixture, *J. Comput. Phys.* Volume 231, Issue 20, 15 August 2012, Pages 6714-6724 (2012).
8. *Frank-Kamenetskii D.A.* Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics. (in Russian) P. 491 Nauka Publisher. 1987.

ПРЕДОБУСЛОВЛИВАНИЕ МЕТОДОВ ПОДПРОСТРАНСТВ КРЫЛОВА С ПОМОЩЬЮ КОСОЭРМИТОВЫХ ИТЕРАЦИЙ¹

Мартынова Т.С.

ИММиКН ЮФУ, Ростов-на-Дону

Введение

Исследован класс предобусловливателей для решения систем линейных алгебраических уравнений с неэрмитовой положительно определенной матрицей, построенный на основе эрмитового и косоэрмитового расщепления матрицы системы. Дано его обобщение для решения систем уравнений с седловой матрицей, которая имеет полуопределенный или вырожденный $(1, 1)$ блок. Для решения таких систем использован метод расширенного Лагранжиана. Показано, что использование рассмотренных предобусловливателей эффективно при итерационном решении систем линейных алгебраических уравнений методом GMRES.

I Постановка задачи

Теория итерационных методов для систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) обширна и достаточно развита. При решении СЛАУ одним из ключевых понятий является предобусловливание, т.е. выбор некоторых матриц, существенно влияющих на скорость сходимости итерационных методов.

Одним из актуальных направлений в теории итерационных методов является ее развитие для решения широкого класса седловых задач [6]. Применительно к СЛАУ это означает блочную структуру матрицы системы, которая может быть как эрмитовой, так и неэрмитовой. Теория релаксационных и обобщенных методов для решения седловых задач, а также проблемы предобусловливания и оптимизации итерационных методов подробно исследованы в [2]. Для решения СЛАУ большой размерности, как правило, используются методы подпространств Крылова, но они имеют слабую скорость сходимости, когда применяются к седловым задачам. Поэтому требуется создание хороших предобусловливателей для того, чтобы улучшить скорость сходимости данных методов.

Рассмотрим итерационное решение большой разреженной СЛАУ

$$Av = b, \quad b \in \mathbb{C}^n, \quad (1)$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (гос. задание ВУЗов, базовая часть), проект 1420, и РФФИ (гранты № 15-01-00441-а и №15-51-53066GFEN-а)

где $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ – неэрмитова положительно определенная матрица.

Матрицу A системы (1) представим в виде суммы эрмитовой и косоэрмитовой частей

$$A = A_0 + A_1, \quad (2)$$

где

$$A_0 = \frac{1}{2}(A + A^*), \quad A_1 = \frac{1}{2}(A - A^*). \quad (3)$$

Положительная определенность A означает, что для любого $x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$, $x^* A_0 x > 0$. Будем предполагать, что в некоторой матричной норме $||| \cdot |||$, $|||A_0||| \ll |||A_1|||$, т.е. матрица A является сильно неэрмитовой [3]. Эта ситуация возникает, например, при дискретизации уравнений Навье-Стокса, когда конвективные члены сильно доминируют [4]. Кроме того, в данной работе предполагается, что $\text{diag}(A_1) = 0$. Это условие удовлетворяется автоматически, если элементы матрицы A вещественные.

Представим косоэрмитову часть A_1 матрицы A в виде

$$A_1 = K_L + K_U, \quad (4)$$

где K_L и K_U строго нижне- и верхнетреугольная матрица соответственно. Очевидно, что $K_L = -K_U^*$.

Большинство из существующих предобусловливателей направлены на улучшение свойств эрмитовой части системы (1), тогда как часто источником численных трудностей является плохо обусловленная косоэрмитова часть матрицы СЛАУ. На основе расщеплений (2)-(4) в [5, 6, 7, 8] предложены и исследованы классы треугольных (ТКМ) и попеременно-треугольных (ПТКМ) косоэрмитовых (или кососимметрических в вещественном случае) итерационных методов для решения системы (1). В данной работе рассматриваются методы, относящиеся к ПТКМ.

В [9] исследован соответствующий двухпараметрический метод, доказана его сходимость, даны оценки оптимальных итерационных параметров. Для этого метода

$$B(\omega_1, \omega_2) = (B_c + \omega_1 K_L) B_c^{-1} (B_c + \omega_2 K_U), \quad (5)$$

где ω_1 и ω_2 – неотрицательные параметры, не равные нулю одновременно.

В [10, 11] предложен двухшаговый косоэрмитов итерационный метод (ДКМ), являющийся обобщением ПТКМ, даны достаточные условия сходимости метода и выбор оптимальных итерационных параметров. Матрица $B(\omega)$ для ДКМ имеет вид

$$B(\omega) = (B_c + \frac{\omega}{2} \widehat{K}_L) B_c^{-1} (B_c + \frac{\omega}{2} \widehat{K}_U), \quad (6)$$

где

$$\widehat{K}_L = K_L + H_0, \quad \widehat{K}_U = K_U - H_0,$$

$H_0 \in \mathbb{C}^{n \times n}$ – некоторая эрмитова матрица, $B_c \in \mathbb{C}^{n \times n}$ – эрмитова положительно определенная матрица. Очевидно, что

$$\widehat{K}_L = -\widehat{K}_U^*, \quad A_1 = (K_L + H_0) + (K_U - H_0) = \widehat{K}_L + \widehat{K}_U.$$

В случае, когда $H_0 = 0$, ДКМ сводится к ПТКМ; специальный выбор матрицы H_0 [10] позволяет улучшить сходимость метода.

В [9] авторами предложен обобщенный косоэрмитов треугольный метод GSTS (Generalized Skew-Hermitian Triangular Splitting), являющийся обобщением двухпараметрического метода с $B(\omega_1, \omega_2)$ из (5) для решения седловых СЛАУ, блочно-структурированная матрица которых имеет положительно определенный $(1, 1)$ блок. Доказана сходимость метода и даны оценки итерационных параметров.

В данной работе исследуются свойства матрицы $B(\omega)$ из (6), используемой в качестве предобусловливателя для решения СЛАУ (1). Доказана лемма о локализации спектра предобусловленной матрицы $B(\omega)^{-1}A$ и теорема об асимптотической скорости сходимости предобусловленного метода GMRES для частного случая, когда матрица $B(\omega)^{-1}A$ является диагонализуемой. Для общего случая подобных оценок получить не удается.

Для седловых задач рассмотрен более общий случай, когда $(1, 1)$ матричный блок блочно-структурированной СЛАУ является положительно полуопределенным или вырожденным. Для решения СЛАУ с такой матрицей используется метод расширенного Лагранжиана. Доказана теорема о распределении спектра матрицы $\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2)\mathcal{A}$, где предобусловливатель $\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2)$ есть обобщение $B(\omega_1, \omega_2)$ из (5) для седловых задач. Полученный результат позволяет наилучшим образом выбирать матрицы, необходимые для построения данного предобусловливателя.

II Решение СЛАУ с неэрмитовой положительно определенной матрицей методом ДКМ+GMRES

Представим матрицу $B(\omega)$, определяемую (6), так же, как и исходную матрицу A , в виде суммы ее эрмитовой и косоэрмитовой частей. Тогда

$$B(\omega) = B_0(\omega) + B_1(\omega), \tag{7}$$

где

$$\begin{cases} B_0(\omega) = \frac{1}{2}(B(\omega) + B(\omega)^T) = B_c + \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 \widehat{K}_L B_c^{-1} \widehat{K}_U, \\ B_1(\omega) = \frac{1}{2}(B(\omega) - B(\omega)^T) = \frac{\omega}{2}(\widehat{K}_L + \widehat{K}_U) = \frac{\omega}{2}A_1. \end{cases}$$

Предположим, что

$$0 < \alpha_h I \leq A_0 \leq \beta_h I, \quad 0 < \alpha_c I \leq B_c \leq \beta_c I, \\ \alpha_l I \leq \widehat{K}_L B_c^{-1} \widehat{K}_U \leq \beta_l I, \quad \alpha_s I \leq B_0(\omega) \leq \beta_s I,$$

где I - единичная матрица. Поскольку A_0 и B_c - эрмитовы положительно определенные матрицы, $B_0(\omega)$ и $\widehat{K}_L B_c^{-1} \widehat{K}_U$ - эрмитовы матрицы, то границы α_ξ и β_ξ , $\xi = h, c, l, s$ легко вычисляются.

Потребуем положительной определенности $B(\omega)$ из (7). Поскольку матрица $\widehat{K}_L B_c^{-1} \widehat{K}_U$ является отрицательно определенной, то $B_0(\omega) > 0$, если $\omega \in (0, \omega_{max})$, где

$$\omega_{max} = 2\sqrt{\left(-\frac{\alpha_c}{\alpha_l}\right)}.$$

Заметим, что α_l и β_l удовлетворяют следующим неравенствам:

$$\alpha_s \geq \alpha_c + \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 \alpha_l, \quad \beta_s \leq \beta_c + \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 \beta_l.$$

Следующая лемма определяет локализацию спектра предобусловленной матрицы СЛАУ (1) в случае применения ДКМ-предобусловливателя (6). Будем обозначать спектр матрицы A как $\sigma(A)$.

Лемма 1. Пусть матрицы A и $B(\omega)$ из (6) положительно определены. Тогда $\sigma(B(\omega)^{-1}A)$ содержится в одном из следующих трех кругов:

$$C_1: \left(x - \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_h} + \frac{1}{\omega}\right)\right)^2 + y^2 = \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_h} - \frac{1}{\omega}\right)^2, \text{ если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \geq \frac{2}{\omega},$$

$$C_2: \left(x - \left(\frac{\alpha_h}{2\beta_s} + \frac{1}{\omega}\right)\right)^2 + y^2 = \left(\frac{\alpha_h}{2\beta_s} - \frac{1}{\omega}\right)^2, \text{ если } \frac{\beta_h}{\alpha_s} \leq \frac{2}{\omega},$$

$$C_3: \left(x - \frac{1}{2} \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} + \frac{\alpha_h}{\beta_s}\right)\right)^2 + y^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} - \frac{\alpha_h}{\beta_s}\right)^2, \text{ если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \leq \frac{2}{\omega} \leq \frac{\beta_h}{\alpha_s}.$$

Доказательство. Пусть $\lambda \in \mathbb{C}$, $\lambda \in \sigma(B(\omega)^{-1}A)$ и $x \in \mathbb{C}^n$ - соответствующий собственный вектор. Тогда

$$B(\omega)^{-1}A = \left(B_0(\omega) + \frac{\omega}{2}A_1\right)^{-1}(A_0 + A_1)$$

и

$$\lambda B(\omega)x = Ax,$$

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{x^*Ax}{x^*B(\omega)x} \\ &= \frac{x^*A_0x + x^*A_1x}{x^*B_0(\omega)x + \frac{\omega}{2} \cdot x^*A_1x} \\ &= \frac{\frac{x^*A_0x}{x^*B_0(\omega)x} + \frac{x^*A_1x}{x^*B_0(\omega)x}}{1 + \frac{\omega}{2} \cdot \frac{x^*A_1x}{x^*B_0(\omega)x}} \\ &= \frac{2}{\omega} + \frac{\frac{x^*A_0x}{x^*B_0(\omega)x} - \frac{2}{\omega}}{1 + \frac{\omega}{2} \cdot \frac{x^*A_1x}{x^*B_0(\omega)x}}. \end{aligned}$$

Легко показать, что если $\lambda = a + \frac{b}{1+i \cdot c}$, то для $\forall a, b, c \in \mathbb{R}$ все λ лежат на окружности с центром $(a + \frac{1}{2}b, 0)$ и радиусом $\frac{1}{2}|b|$, где i – мнимая единица. Для удобства введем величины:

$$m = \frac{x^* A_0 x}{x^* B_0(\omega) x}, \quad \eta = \frac{1}{i} \cdot \frac{x^* A_1 x}{x^* B_0(\omega) x}.$$

Тогда

$$\lambda = \frac{2}{\omega} + \frac{m - \frac{2}{\omega}}{1 + i \cdot \frac{\omega}{2} \eta}.$$

Следовательно, собственные значения λ матрицы $B(\omega)^{-1}A$ лежат на окружности с центром

$$\left(\frac{m}{2} + \frac{1}{\omega}, \quad 0 \right)$$

и радиусом

$$\left| \frac{m}{2} - \frac{1}{\omega} \right|.$$

Поскольку $\frac{\alpha_h}{\beta_s} \leq m \leq \frac{\beta_h}{\alpha_s}$, то все эти окружности содержатся в кругах

$$\left(x - \left(\frac{\alpha_h}{2\beta_s} + \frac{1}{\omega} \right) \right)^2 + y^2 = \left(\frac{\alpha_h}{2\beta_s} - \frac{1}{\omega} \right)^2$$

и

$$\left(x - \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_s} + \frac{1}{\omega} \right) \right)^2 + y^2 = \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_s} - \frac{1}{\omega} \right)^2.$$

Очевидно, что эти круги касаются в точке $(\frac{2}{\omega}, 0)$, а двумя другими точками пересечения с осью абсцисс являются $(\frac{\alpha_h}{\beta_s}, 0)$ и $(\frac{\beta_h}{\alpha_s}, 0)$. Возможны три случая расположения данных точек на оси абсцисс:

$$\frac{\alpha_h}{\beta_s} \geq \frac{2}{\omega}, \quad \frac{\beta_h}{\alpha_s} \leq \frac{2}{\omega}, \quad \frac{\alpha_h}{\beta_s} \leq \frac{2}{\omega} \leq \frac{\beta_h}{\alpha_s},$$

в соответствии с которыми и получаем локализацию спектра матрицы $B(\omega)^{-1}A$ в одном из кругов C_1, C_2 или C_3 . Лемма доказана.

Теперь, используя Лемму 1, можно получить следующий результат для оценки асимптотической скорости сходимости метода ДКМ + GMRES.

Теорема 1. Пусть матрицы A и $B(\omega)$ из (6) положительно определены, и матрица $B(\omega)^{-1}A$ является диагонализуемой. Тогда асимптотическая скорость сходимости предобусловленного метода GMRES с

использованием ДКМ-предобусловливателя для решения СЛАУ (1) определяется величиной

$$\varrho\left(\Upsilon\left(B(\omega)^{-1}A\right)\right) = \begin{cases} \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_s} - \frac{1}{\omega}\right) / \left(\frac{\beta_h}{2\alpha_s} + \frac{1}{\omega}\right), & \text{если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \geq \frac{2}{\omega}, \\ \left(\frac{1}{\omega} - \frac{\alpha_h}{2\beta_s}\right) / \left(\frac{1}{\omega} + \frac{\alpha_h}{2\beta_s}\right), & \text{если } \frac{\beta_h}{\alpha_s} \leq \frac{2}{\omega}, \\ \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} - \frac{\alpha_h}{\beta_s}\right) / \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} + \frac{\alpha_h}{\beta_s}\right), & \text{если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \leq \frac{2}{\omega} \leq \frac{\beta_h}{\alpha_s}. \end{cases} \quad (8)$$

Доказательство. Будем использовать ДКМ для ускорения метода GMRES [14]. В этом случае p -я невязка предобусловленного GMRES может быть выражена следующим образом:

$$r^{(p)} = B(\omega)^{-1}(b - Av^{(p)}) = \mathcal{P}_p(B(\omega)^{-1}A)r^{(0)}, \quad \mathcal{P}_p \in \Pi_p, \quad \mathcal{P}_p(0) = 1,$$

где Π_p – множество полиномов степени не выше, чем p . На каждом итерационном шаге GMRES вычисления осуществляются таким образом, что

$$\|r^{(p)}\|_2 = \min_{\mathcal{P}_p \in \Pi_p, \mathcal{P}_p(0)=1} \left\{ \|\mathcal{P}_p(B(\omega)^{-1}A)r^{(0)}\|_2 \right\}.$$

Если матрица $B(\omega)^{-1}A$ является диагонализируемой и $B(\omega)^{-1}A = X\Lambda X^{-1}$, то

$$\frac{\|r^{(p)}\|_2}{\|r^{(0)}\|_2} \leq k_2(X) \cdot \min_{\mathcal{P}_p \in \Pi_p, \mathcal{P}_p(0)=1} \max_{\lambda \in \Upsilon(B(\omega)^{-1}A)} |\mathcal{P}_p(\lambda)|,$$

где $k_2(X) = \|X\|_2 \|X^{-1}\|_2$. Тогда сходимость метода GMRES определяется величиной [14]

$$\varrho_p(\Upsilon(B(\omega)^{-1}A)) = \min_{\mathcal{P}_p \in \Pi_p, \mathcal{P}_p(0)=1} \max_{\lambda \in \Upsilon(B(\omega)^{-1}A)} |\mathcal{P}_p(\lambda)|,$$

где $\Upsilon(B(\omega)^{-1}A)$ – множество, содержащее спектр матрицы $B(\omega)^{-1}A$. Соответствующая асимптотическая скорость сходимости предобусловленного метода GMRES определяется следующим образом

$$\varrho_p(\Upsilon(B(\omega)^{-1}A)) = \lim_{p \rightarrow \infty} \varrho_p(\Upsilon(B(\omega)^{-1}A))^{\frac{1}{p}}.$$

Пусть $\mathbb{E}(a, b, c, d)$ – эллипс с центром в точке d , фокусами $d \pm c$ и полуосями a и b , где $c^2 = a^2 - b^2$. Тогда, если известно, что $\Upsilon(B(\omega)^{-1}A)$ содержится в эллипсе $\mathbb{E}(a, b, c, d)$, который расположен в правой полуплоскости и не включает начало координат, то асимптотическая скорость сходимости предобусловленного метода GMRES может быть выражена величиной [14]:

$$\varrho(\Upsilon(B(\omega)^{-1}A)) = \frac{a + b}{d + \sqrt{d^2 - c^2}}. \quad (9)$$

Тогда эллипс $\mathbb{E}(a, b, c, d)$, имеющий наименьшую площадь из всех эллипсов, содержащих спектр матрицы $B(\omega)^{-1}A$, описывается следующими тремя группами параметров ($c = 0$):

$$\begin{cases} a = \frac{\beta_h}{2\alpha_s} - \frac{1}{\omega}, & b = \frac{\beta_h}{2\alpha_s} - \frac{1}{\omega}, & d = \frac{\beta_h}{2\alpha_s} + \frac{1}{\omega}, & \text{если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \geq \frac{2}{\omega}, \\ a = \frac{1}{\omega} - \frac{\alpha_h}{2\beta_s}, & b = \frac{1}{\omega} - \frac{\alpha_h}{2\beta_s}, & d = \frac{\alpha_h}{2\beta_s} + \frac{1}{\omega}, & \text{если } \frac{\beta_h}{\alpha_s} \leq \frac{2}{\omega}, \\ a = \frac{1}{2} \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} - \frac{\alpha_h}{\beta_s} \right), & b = \frac{1}{2} \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} - \frac{\alpha_h}{\beta_s} \right), & d = \frac{1}{2} \left(\frac{\beta_h}{\alpha_s} + \frac{\alpha_h}{\beta_s} \right), & \text{если } \frac{\alpha_h}{\beta_s} \leq \frac{2}{\omega} \leq \frac{\beta_h}{\alpha_s}. \end{cases}$$

Подставляя значения параметров a, b, d в (9), получаем (8). Теорема доказана.

III Предобусловливание СЛАУ с седловой матрицей

СЛАУ с седловой матрицей возникают во многих областях: математическое программирование, вычислительная гидродинамика, условная оптимизация и др. [6].

Характерной задачей, приводящей к решению такой СЛАУ, является следующая задача квадратичного программирования: необходимо найти минимум u целевого функционала $J(u) \equiv \frac{1}{2}u^*Mu - u^*f$ при наличии $q \leq p$ линейных ограничений $Eu = g$:

$$\begin{pmatrix} M & E^* \\ E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}, \tag{10}$$

где $M = M^* \in \mathbb{C}^{p \times p}$ – положительно полуопределенная матрица, $E \in \mathbb{C}^{q \times p}$ – прямоугольная матрица полного ранга, $q \leq p$, $u, f \in \mathbb{C}^p$, $\mu, g \in \mathbb{C}^q$.

Данной задаче соответствует функционал Лагранжа $\mathcal{L}(u, \mu) = J(u) + \mu^*(Eu - g)$, где μ – вектор Лагранжевых множителей. Матрица M есть гессиан минимизируемой квадратичной функции, E – якобиан линейных ограничений.

Теорема 2. [15] Матрица блочно-структурированной СЛАУ (8) невырождена тогда и только тогда, когда:

$$\begin{cases} \text{rank}(E^*) = q, \\ \ker(E) \cap \ker(M) = \{0\}. \end{cases}$$

Существуют различные подходы к решению СЛАУ со законнеопределенной матрицей. Иногда ее преобразуют к положительно определенной форме, но при этом может сильно ухудшаться обусловленность системы. Можно применять методы, подходящие для решения законнеопределенных

систем. В данной работе используется третий подход – преобразование (8) к эквивалентной неэрмитовой СЛАУ, матрица которой имеет спектр, лежащий в правой полуплоскости [6, 7]. Перепишем систему (8) в неэрмитовой форме:

$$\begin{pmatrix} M & E^* \\ -E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ -g \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Рассмотрим случай, когда (1, 1) матричный блок полуопределен или вырожден. Будем использовать метод расширенного Лагранжиана, который состоит в замене (11) на СЛАУ

$$\mathcal{A}w = \begin{pmatrix} \widetilde{M} & E^* \\ -E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f + \gamma E^* g \\ -g \end{pmatrix} = \mathbf{F}, \quad (12)$$

в которой M заменяется на матрицу $\widetilde{M} \equiv M + \gamma E^* E$, являющуюся положительно определенной для всех $\gamma > 0$, если E имеет полный ранг [6, 4]. Очевидно, что (10) имеет то же самое решение, что и (11). Наиболее эффективен выбор $\gamma = \|M\|_2 / \|E\|_2^2$ [4]. В этом случае число обусловленности как (1, 1) блока, так и всей матрицы коэффициентов является наименьшим. Кроме того, в [4] показано, что для положительно полуопределенной матрицы M существует интервал значений γ , для которых спектральные свойства и обусловленность матрицы СЛАУ (10) лучше, чем для (11).

Локализация спектра матрицы \mathcal{A} в правой полуплоскости является предпочтительной при использовании некоторых методов подпространств Крылова, таких как GMRES. Тем не менее, стоит отметить, что какой бы ни была формулировка седловой задачи (эрмитовой знаконеопределенной или неэрмитовой положительно определенной), сходимость этих методов будет слабой без использования хороших предобуславливателей.

Представим матрицу \mathcal{A} из (10), аналогично (2), в виде суммы ее эрмитовой и косоэрмитовой составляющих:

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}_1,$$

где

$$\mathcal{A}_0 = \frac{1}{2}(\mathcal{A} + \mathcal{A}^*), \quad \mathcal{A}_1 = \frac{1}{2}(\mathcal{A} - \mathcal{A}^*)$$

и

$$\mathcal{A}_0 = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{A}_1 = \begin{bmatrix} 0 & E^* \\ -E & 0 \end{bmatrix}.$$

Косоэрмитову матрицу \mathcal{A}_1 , в свою очередь, представим в виде:

$$\mathcal{A}_1 = \mathcal{K}_L + \mathcal{K}_U = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -E & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & E^* \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

где 0 – нулевая матрица подходящей размерности, \mathcal{K}_L и \mathcal{K}_U – строго нижне- и строго верхнетреугольные матрицы, $\mathcal{K}_L = -\mathcal{K}_U^*$.

Определим матрицу \mathcal{B}_C следующим образом:

$$\mathcal{B}_C = \begin{bmatrix} B_1 & 0 \\ 0 & B_2 \end{bmatrix},$$

где B_1 и B_2 – эрмитовы невырожденные матрицы.

GSTS - предобусловливатель определяется следующим образом [9]:

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = (\mathcal{B}_C + \omega_1 \mathcal{K}_L) \mathcal{B}_C^{-1} (\mathcal{B}_C + \omega_2 \mathcal{K}_U) \quad (13)$$

или, в блочной форме,

$$\begin{aligned} \mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) &= \begin{bmatrix} B_1 & 0 \\ -\omega_1 E & B_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1^{-1} & 0 \\ 0 & B_2^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_1 & \omega_2 E^* \\ 0 & B_2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} B_1 & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 E B_1^{-1} E^* \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

где ω_1 и ω_2 – неотрицательные параметры, не равные нулю одновременно.

Возьмем в качестве матрицы $B_1 = \widetilde{M}$. Способы выбора матрицы B_2 рассмотрим позднее. Тогда

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 E \widetilde{M}^{-1} E^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 \widetilde{S} \end{bmatrix},$$

где $\widetilde{S} = E \widetilde{M}^{-1} E^*$ – дополнение Шура для \widetilde{M} .

Предобусловленная (слева) блочно-структурированная СЛАУ имеет вид:

$$\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathcal{A} \mathbf{w} = \mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathbf{F}. \quad (14)$$

Исследуем спектр предобусловленной матрицы из (14).

Теорема 3. Пусть матрицы \mathcal{A} и $\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2)$ определяются (10) и (13), соответственно, и $B_1 = \widetilde{M}$. Пусть $\lambda \in \sigma(\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathcal{A})$. Тогда для собственных чисел предобусловленной матрицы имеет место выражение

$$\lambda = \frac{\nu - \tilde{\omega} \xi \pm \sqrt{(\nu - \tilde{\omega} \xi)^2 - 4 \xi \nu}}{2 \nu},$$

где $\xi = \frac{z^* \widetilde{S} z}{z^* z}$, $\nu = \frac{z^* B_2 z}{z^* z}$, а параметр $\tilde{\omega} = \omega_1 \omega_2 - \omega_1 - \omega_2$.

Доказательство. Пусть $\lambda \in \sigma(\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathcal{A})$ и $(y^*, z^*)^* \in \mathbb{C}^{p+q}$ – соответствующий собственный вектор, где $y \in \mathbb{C}^p$, $z \in \mathbb{C}^q$. Тогда имеем

$$\begin{bmatrix} \widetilde{M} & E^* \\ -E & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \widetilde{M} & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 \widetilde{S} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}$$

или, эквивалентно,

$$\begin{cases} (1 - \lambda)\widetilde{M}y = (\lambda\omega_2 - 1)E^*z, \\ (\lambda\omega_1 - 1)Ey = \lambda B_2z - \lambda\omega_1\omega_2\widetilde{S}z. \end{cases} \quad (15)$$

Пусть $\lambda \neq 1$. В противном случае, если $\lambda = 1$, уравнения (15) сводятся к

$$\begin{cases} (\omega_2 - 1)E^*z = 0, \\ (\omega_1 - 1)Ey = B_2z - \omega_1\omega_2\widetilde{S}z, \end{cases} \quad (16)$$

и существует ненулевой вектор $(y_1^*, 0)^* \in \mathbb{C}^{p+q} \setminus \{0\}$ такой, что уравнения (16) справедливы для $y_1 \in \mathbb{C}^p \setminus \{0\}$. Если $\lambda \neq 1$, то из первого уравнения (15) имеем:

$$y = \frac{\lambda\omega_2 - 1}{1 - \lambda}\widetilde{M}^{-1}E^*z.$$

Подставляя это соотношение во второе уравнение в (15), получаем

$$\left(\frac{(\lambda\omega_1 - 1)(\lambda\omega_2 - 1)}{1 - \lambda} + \lambda\omega_1\omega_2 \right) \widetilde{S}z = \lambda B_2z,$$

или

$$(\lambda\tilde{\omega} + 1)\widetilde{S}z = \lambda(1 - \lambda)B_2z, \quad (17)$$

где $\tilde{\omega} = \omega_1\omega_2 - \omega_1 - \omega_2$. Для удобства введем величины

$$\xi = \frac{z^*\widetilde{S}z}{z^*z}, \quad \nu = \frac{z^*B_2z}{z^*z},$$

тогда, после умножения (17) слева на z^* и деления на z^*z обеих частей этого выражения, получаем:

$$(\lambda\tilde{\omega} + 1)\xi = \lambda(1 - \lambda)\nu,$$

т.е. λ является корнем квадратного уравнения

$$\nu\lambda^2 - (\nu - \tilde{\omega}\xi)\lambda + \xi = 0. \quad (18)$$

Из (18) непосредственно следует утверждение Теоремы 3. Теорема доказана.

Заметим, что когда $\tilde{\omega} = -1$, корнями (18) являются $\lambda = 1$ и $\lambda = \xi/\nu$.

Практический вывод, который следует из доказанной теоремы, следующий. Если $\tilde{\omega} = -1$ и $\xi = \nu$, то все собственные числа предобусловленной матрицы $\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2)\mathcal{A}$ равны 1, а это означает, что для эффективности рассмотренного предобусловливателя матрица B_2 должна максимально удачно аппроксимировать дополнение Шура \widetilde{S} .

В частности, если $B_2 = \widetilde{S}$ и $\omega_1 = \omega_2 = 1$, то предобусловленная матрица имеет простую блочную форму:

$$\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2)\mathcal{A} = \begin{bmatrix} I & (\widetilde{M}^{-1} - I)E^* \\ 0 & I \end{bmatrix}.$$

Литература

1. *M. Benzi, G.H. Golub, J. Liesen* Numerical solution of saddle point problems. *Acta Numerica*. 2005. Vol. 14. P. 1–137.
2. *Быченков Ю.В., Чижонков Е.В.* Итерационные методы решения седловых задач. Москва: БИНОМ, 2010. 342 с.
3. *Крукиер Л.А.* Неявные разностные схемы и итерационный метод их решения для одного класса систем квазилинейных уравнений // *Изв. ВУЗов, Матем.* 1979. № 7. С. 41–52.
4. *Крукиер Л.А.* Кососимметричные итерационные методы решения стационарного уравнения конвекции - диффузии с малым параметром при старшей производной // *Изв. ВУЗов, Матем.* 1997. № 4. С. 74–85.
5. *Krukier L.A.* Convergence acceleration of triangular iterative methods based on the skew-symmetric part of the matrix // *Appl. Numer. Math.* 1999. Vol. 30. P. 281–290.
6. *Бочев М.А., Крукиер Л.А.* Об итерационном решении сильно несимметричных систем линейных алгебраических уравнений // *ЖВМ и МФ.* 1997. Т. 37. № 11. С. 1283–1293.
7. *Крукиер Л.А., Чикина Л.Г.* Кососимметрический итерационный метод решения стационарного уравнения конвекции - диффузии // *Изв. ВУЗов, Матем.* 2000. № 11, С. 62–75.
8. *Крукиер Л.А., Крукиер Б.Л.* О сходимости кососимметричных итерационных методов // *Изв. ВУЗов, Матем.* 2011. № 6. С. 75–79.
9. *L.G. Chikina, B.L. Krukier* Solution of linear equation systems with a dominant skew-symmetric part using the product triangular iterative method // *Computational methods in applied mathematics*. 2003. Vol. 3. N 4. P. 647–650.
10. *Бай З.З., Крукиер Л.А., Мартынова Т.С.* Двухшаговые итерационные методы решения стационарного уравнения конвекции-диффузии с малым параметром при старшей производной на равномерной сетке // *ЖВМ и МФ.* 2006. Т. 46. № 2. С. 295–306.
11. *Krukier L.A., Martinova T.S., Bai Z.-Z.* Product-Type Skew-Hermitian Triangular Splitting Iteration Methods for Strongly Non-Hermitian Positive Definite Linear Systems // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2009. Vol. 232. N 1. P. 3–16.
12. *Krukier L.A., Krukier B.L., Ren Z.-R.* Generalized skew-Hermitian triangular splitting iteration methods for saddle-point linear systems // *Numer. Linear Algebra Appl.* 2014. Vol. 21. P. 152–170.
13. *G.H. Golub, C. Greif* On solving block-structured indefinite linear systems // *SIAM Journal on Scientific Computing*. 2003. Vol. 24. P. 2076–2092.

14. *Saad Y.* Iterative methods for Sparse Linear Systems. PWS Publishing Company. 1995. 528 p.
15. *Z.-Z. Bai, G.H. Golub, J.-Y. Pan* Preconditioned Hermitian and skew-Hermitian splitting methods for non-Hermitian positive semidefinite linear systems // Numerische Mathematik. 2004. Vol. 98. P. 1–32.
16. *Benzi M., Golub G.H.* A preconditioner for generalized saddle point problems // SIAM J. Matrix Anal. Appl. 2004. Vol. 26. P. 20–41.

ИТЕРАЦИОННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ УСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ С СИСТЕМОЙ ЛИНЕЙНЫХ ОГРАНИЧЕНИЙ-РАВЕНСТВ¹

Мартынова Т.С., Крукиер Л.А.

ИММиКН ЮФУ, Ростов-на-Дону

Введение

Рассматривается решение задач условной оптимизации с системой линейных ограничений типа равенств, которые возникают при исследовании загрязняющих веществ методами рентгеноспектрального анализа. Хотя при решении данной задачи возможно использование универсальных методов минимизации, целесообразно учитывать специфику задачи и использовать для ее решения специальные методы. Кроме того, в решаемой задаче присутствует система линейных ограничений-равенств, что делает невозможным использование методов безусловной оптимизации.

Большинство задач с ограничениями-равенствами приводит к появлению систем уравнений с седловой точкой, которые имеют полуопределенный $(1, 1)$ блок. Для улучшения обусловленности $(1, 1)$ блока используется метод расширенного Лагранжиана. При решении систем с седловой точкой применяется предобусловливатель, построенный на основе симметричного/кососимметричного расщепления матрицы системы.

I Постановка задачи

Нелинейная задача о наименьших квадратах (НЗНК) имеет вид [1, 2]: найти x_* , такое что

$$F(x_*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} F(x) = \frac{1}{2} R(x)^T R(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m r_i(x)^2, \quad (1)$$

где $m > n$ (обычно $m \gg n$), функция невязки $R : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ нелинейна по x , и через $r_i(x)$ обозначена i -я компонента функции $R(x)$. НЗНК обычно возникает из приложений, связанных с наилучшим приближением данных, где стараются наилучшим образом приблизить данные $(t_i, y_i), i = 1, \dots, m$ с помощью модели $M(x, t)$, которая нелинейна по x . В этом случае $r_i(x) = M(x, t_i) - y_i$, и НЗНК заключается в таком выборе параметров x , что приближение является максимально близким к данным с точки зрения

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (гос. задание ВУЗов, базовая часть), проект 1420, и РФФИ (гранты № 15-01-00441-а и №15-51-53066GFEN-а)

минимизации суммы квадратов невязок $r_i(x)$ [1]. Причины, по которым для НЗНК обычно не используются программы минимизации общего назначения, связаны с желанием учесть специальную структуру целевой функции. В частности, имеется в виду особая структура градиента функции (1) и её матрицы Гессе.

Пусть $J(x) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ – матрица Якоби для $R(x)$, т.е. $J(x)_{ij} = \partial r_i(x) / \partial x_j$, $H(x)$ – матрица Гессе и $g(x)$ – градиент функции $F(x)$, соответственно. Обозначим через $H_i(x)$ матрицу Гессе для $r_i(x)$. Тогда имеют место выражения [1, 2]:

$$H(x) = J(x)^T J(x) + Q(x), \quad (2)$$

$$g(x) = J(x)^T R(x), \quad (3)$$

где $Q(x) = \sum_{i=1}^m r_i(x) H_i(x)$.

Предположение о том, что модельная кривая должна пройти через некоторые заданные точки, либо наличие в задаче иных ограничений в виде равенств приводит к НЗНК с ограничениями-равенствами (ЗОР), т.е. необходимо минимизировать $F(x)$ из (1) при условии $h(x) = 0$. Во многих случаях при решении таких задач возникают системы уравнений с седловой точкой. Заметим, что в рассматриваемой задаче $h(x)$ является линейной функцией, т.е. $h(x) = Ex - f$, матрица ограничений $E \in \mathbb{R}^{p \times n}$ имеет полный строчный ранг, $f \in \mathbb{R}^p$, $p \leq n$ – число ограничений задачи.

Большинство алгоритмов решения НЗНК опирается на предположение о том, что слагаемое $J(x)^T J(x)$ в (2) при движении к оптимуму становится доминирующим. Поскольку $R(x)$ – нелинейная функция x , решение (1) возможно лишь с помощью последовательных приближений. Обозначим через x_k текущую оценку решения задачи минимизации функции (1), и пусть нижний индекс k у любой величины означает ее принадлежность x_k . В качестве квадратичной модели целевой функции $F(x)$ в окрестности точки x_k возьмем:

$$F_k(x) \approx F(x_k) + g_k^T(x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^T H_k(x - x_k). \quad (4)$$

Для решения задачи будем использовать метод множителей Лагранжа (ММЛ). Для ЗОР условия оптимальности имеют вид [2]:

$$\begin{cases} \nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = \nabla F(x) + \nabla h(x) \lambda = 0, \\ \nabla_\lambda \mathcal{L}(x, \lambda) = h(x) = 0, \end{cases} \quad (5)$$

где $\mathcal{L}(x, \lambda)$ – функция Лагранжа, т.е. $\mathcal{L}(x, \lambda) = F(x) + \lambda^T (Ex - f)$, $\lambda \in \mathbb{R}^p$ – вектор неизвестных параметров, называемых множителями Лагранжа. Отличительной чертой ММЛ является то, что вектор λ рассматривается как вектор неизвестных, равноправный с вектором параметров задачи, и итерации ведутся по x и λ одновременно. Этим данный подход принципиально отличается от методов возможных направлений, где осуществляется

итеративный спуск только по x , а множители Лагранжа в вычислениях не участвуют. Точка $(x_*, \lambda_*) \in \mathbb{R}^{n+p}$ является седловой точкой функции Лагранжа [3], т.е.

$$\mathcal{L}(x_*, \lambda_*) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \mathcal{L}(x, \lambda_*) = \max_{\lambda \in \mathbb{R}^p} \mathcal{L}(x_*, \lambda).$$

Метод Ньютона для решения системы (5) имеет вид [3]:

$$x_{k+1} = x_k + \Delta x_k, \quad \lambda_{k+1} = \lambda_k + \Delta \lambda_k, \quad (6)$$

где пара $(\Delta x_k, \Delta \lambda_k) \in \mathbb{R}^{n+p}$ определяется с помощью решения системы уравнений:

$$\nabla^2 \mathcal{L}(x_k, \lambda_k) \begin{bmatrix} \Delta x_k \\ \Delta \lambda_k \end{bmatrix} = -\nabla \mathcal{L}(x_k, \lambda_k)$$

или

$$\begin{bmatrix} H_k & \nabla h(x_k) \\ \nabla h(x_k)^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_k \\ \Delta \lambda_k \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_k) \\ h(x_k) \end{bmatrix}. \quad (7)$$

Учитывая, что матрица $Q(x)$ из (2) приближается к нулевой при движении к оптимуму, можно аппроксимировать $H_k \approx J_k^T J_k$, т.е. использовать метод Гаусса-Ньютона (ГН). С учетом (3), задача, решаемая на k -м итерационном шаге метода ГН имеет вид:

$$\begin{bmatrix} M_k & E^T \\ E & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_k \\ \Delta \lambda_k \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} u_k \\ v_k \end{bmatrix}, \quad (8)$$

где $M_k = J_k^T J_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ – положительно полуопределенные матрицы, $(u_k^T, v_k^T)^T \in \mathbb{R}^{n+p}$, $u_k = J_k^T R_k + E^T \lambda_k$, $v_k = E x_k - f$, $u_k \in \mathbb{R}^n$, $v_k \in \mathbb{R}^p$, $k = 0, 1, \dots$

Известно, что для обеспечения сходимости методов Ньютона и ГН необходимо иметь хорошее начальное приближение для всех параметров задачи. Как правило, в рассматриваемой задаче хорошее приближение x_0 для x известно. Имея хорошее приближение x_0 , можно получить и хорошее приближение λ_0 по формуле [3]:

$$\lambda_0 = \hat{\lambda}(x_0), \quad \hat{\lambda}(x) = [\nabla h(x)^T \nabla h(x)]^{-1} [h(x) - \nabla h(x)^T \nabla F(x)]$$

или, для данной задачи $\lambda_0 = \hat{\lambda}(x_0) = [E E^T]^{-1} [v_0 - E J_0^T R_0]$.

В случае, когда для $k = 0, 1, \dots$ матрицы M_k невырождены, обозначим через $S_k = E M_k^{-1} E^T$ дополнение Шура подматрицы M_k . Поскольку ранг E равен p , то S_k невырождены. Для этого случая несложными преобразованиями [3] можно получить следующую форму записи итерационного процесса (6)-(8):

$$\begin{cases} \lambda_{k+1} = S_k^{-1} [v_k - E M_k^{-1} J_k^T R_k], \\ x_{k+1} = x_k - M_k^{-1} \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \lambda_{k+1}). \end{cases} \quad (9)$$

В качестве критерия окончания итераций метода ГН берутся следующие условия: $\|R\|_1 \leq \varepsilon_1$, и $\|x_{k+1} - x_k\|_1 \leq \varepsilon_2$, $\varepsilon_1 = 10^{-6}$, $\varepsilon_2 = 10^{-7}$.

Таким образом, каждый шаг метода ГН формально сводится к обращению невырожденных матриц S_k , т.к. в их определение уже входят матрицы M_k^{-1} . Для улучшения обусловленности матриц M_k будем использовать метод расширенного Лагранжиана, позволяющий получить задачу, эквивалентную (8), но с положительно определенным $(1, 1)$ блоком на каждом итерационном шаге. Если же $(1, 1)$ блок положительно определен, то СЛАУ (8) разрешима единственным образом и определяет единственный минимум модельной функции (4). Кроме того, если $R(x_*) = 0$ и $J(x_*)^T J(x_*)$ положительно определена, то x_* является изолированным локальным минимумом функции (1), и метод ГН имеет локальную квадратичную скорость сходимости [2].

II Метод расширенного Лагранжиана

Метод расширенного Лагранжиана [4] может применяться в случае, когда матрицы M_k в (8) являются плохо обусловленными или вырожденными [5]. На каждом k -м итерационном шаге заменим квадратичный целевой функционал (4) на регуляризованный $F_\gamma(x) \equiv F(x) + \gamma \|Ex - f\|^2$, где $\|\cdot\|$ есть l_2 -норма, $\gamma > 0$ – параметр. Тогда соответствующий регуляризованный Лагранжиан имеет вид:

$$\mathcal{L}_\gamma(x, \lambda) = \mathcal{L}(x, \lambda) + \frac{\gamma}{2} \|Ex - f\|^2,$$

и вместо СЛАУ (8) на каждом итерационном шаге метода ГН необходимо решать следующую "расширенную" систему:

$$\begin{bmatrix} \widetilde{M}_k & E^T \\ E & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_k \\ \Delta \lambda_k \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} u_k + \gamma_k E^T v_k \\ v_k \end{bmatrix}, \quad (10)$$

где $\widetilde{M}_k \equiv M_k + \gamma_k E^T E$. Матрица \widetilde{M}_k в (10) будет положительно определена, если $\gamma_k > 0$, и матрица E имеет полный ранг [4]. Очевидно, что (10) имеет то же самое решение, что и (8).

Пусть $\widetilde{S}_k = E \widetilde{M}_k^{-1} E^T$. Матрицы \widetilde{S}_k являются положительно определенными, если положительно определены \widetilde{M}_k , поскольку E имеет полный ранг. Итерационные формулы, аналогичные (9), имеют вид:

$$\begin{cases} \widehat{\lambda}_{k+1} = \widetilde{S}_k^{-1} [v_k - E \widetilde{M}_k^{-1} J_k^T R_k], \\ \lambda_{k+1} = \widehat{\lambda}_{k+1} - \gamma_k v_k, \\ x_{k+1} = x_k - \widetilde{M}_k^{-1} \nabla_x \mathcal{L}(x_k, \widehat{\lambda}_{k+1}). \end{cases} \quad (11)$$

Очевидно, что при $\gamma_k = 0$ соотношения (11) переходят в (9). Сходимость итерационных процессов (9) и (11) исследована в [3].

Рассмотрим вопрос о наилучшем выборе параметров γ_k , $k = 0, 1, \dots$ для (10)-(11). Наиболее эффективен выбор $\gamma_k = \|M_k\|_2 / \|E\|_2^2$ на каждом шаге метода ГН [4]. В этом случае число обусловленности как (1, 1) блока, так и всей матрицы коэффициентов является наименьшим. Кроме того, в [4] показано, что для положительно полуопределенных матриц M_k существует целый интервал значений γ_k , для которых спектральные свойства и обусловленность матрицы СЛАУ (10) лучше, чем для исходной матрицы (8).

III Предобусловливание блочно-структурированных СЛАУ

Природа многих прикладных задач большой размерности позволяет строить для них специальные эффективные схемы минимизации, поскольку типичной чертой матриц Гессе встречающихся на практике функций большого числа переменных является разреженность и структурированность. В таких случаях, как правило, используют методы подпространств Крылова, но они имеют слабую скорость сходимости, когда применяются к задачам с седловой точкой. Поэтому требуются хорошие предобусловливатели, чтобы улучшить скорость сходимости данных методов. Перепишем знаконеопределенную СЛАУ (10), решаемую на k -м шаге метода ГН, в эквивалентном несимметричном виде [6, 7]:

$$\mathcal{A}w = \mathbf{b},$$

где

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & E^T \\ -E & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w} = \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta \lambda \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} -\widetilde{u} \\ v \end{bmatrix},$$

где $\widetilde{u} = u + \gamma E^T v$ (для удобства здесь и далее нижний индекс номера итерации метода ГН опускается).

При такой форме записи матрица $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{(n+p) \times (n+p)}$ является положительно-устойчивой, т.е. собственные числа \mathcal{A} имеют положительные вещественные части [6, 7], что является предпочтительным при использовании некоторых методов подпространств Крылова, таких как GMRES.

Рассмотрим предобусловливатель, построенный с использованием симметричного/кососимметричного расщепления исходной матрицы. Известно, что любую матрицу можно представить в виде суммы симметричной и кососимметричной составляющих [8]. Тогда для \mathcal{A} имеем:

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}_1, \tag{12}$$

где

$$\mathcal{A}_0 = \frac{1}{2}(\mathcal{A} + \mathcal{A}^T), \quad \mathcal{A}_1 = \frac{1}{2}(\mathcal{A} - \mathcal{A}^T)$$

есть симметричная и кососимметричная части матрицы \mathcal{A} :

$$\mathcal{A}_0 = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{A}_1 = \begin{bmatrix} 0 & E^T \\ -E & 0 \end{bmatrix}.$$

Кососимметричную матрицу \mathcal{A}_1 , в свою очередь, можно представить в виде:

$$\mathcal{A}_1 = \mathcal{K}_L + \mathcal{K}_U = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -E & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & E^T \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

где 0 - нулевая матрица подходящей размерности, \mathcal{K}_L и \mathcal{K}_U - строго нижне- и строго верхнетреугольные матрицы, причем $\mathcal{K}_L = -\mathcal{K}_U^T$. Для решаемой задачи такие расщепления являются естественными, поскольку $(1, 1)$ блок СЛАУ (8) является аппроксимацией матрицы Гессе (и пересчитывается на каждом шаге), а матрица E известна из постановки задачи.

На основе этих расщеплений в [9] авторами был предложен обобщенный кососимметрический треугольный метод GSTS (Generalized Skew-Hermitian Triangular Splitting) для решения блочно-структурированных СЛАУ. В [10] дано решение модельных задач условной оптимизации этим методом и проведено его сравнение с классическим методом GSOR. Заметим, что GSTS может применяться в случае, когда $(2, 2)$ матричный блок в (8) и (10) не равен нулю.

Определим матрицу \mathcal{B}_C следующим образом:

$$\mathcal{B}_C = \begin{bmatrix} B_1 & 0 \\ 0 & B_2 \end{bmatrix},$$

где B_1 и B_2 симметричные невырожденные матрицы. Тогда GSTS-предобусловливатель определяется следующим образом [9, 10]:

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = (\mathcal{B}_C + \omega_1 \mathcal{K}_L) \mathcal{B}_C^{-1} (\mathcal{B}_C + \omega_2 \mathcal{K}_U), \quad (13)$$

или в блочной форме

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = \begin{bmatrix} B_1 & \omega_2 E^T \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 E B_1^{-1} E^T \end{bmatrix},$$

где ω_1 и ω_2 неотрицательные параметры, не равные нулю одновременно.

Возьмем в качестве матрицы $B_1 = \widetilde{M}$. Способы выбора матрицы B_2 рассмотрим позднее. Тогда

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & \omega_2 E^T \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 E \widetilde{M}^{-1} E^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & \omega_2 E^T \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 \widetilde{S} \end{bmatrix},$$

и предобусловленная (слева) блочно-структурированная СЛАУ имеет вид:

$$\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathcal{A} \mathbf{w} = \mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathbf{b}. \quad (14)$$

Итерационные методы и предобусловливатели, построенные на основе симметричного – кососимметричного расщепления исходной матрицы имеют широкий спектр приложений. В данной работе решается лишь одна из задач, для которой применение этих методов целесообразно. Другой прикладной областью, где используются данные методы, является гидродинамика (решение задачи Стокса, уравнений Навье-Стокса, диффузии-конвекции и др.).

IV Численные эксперименты

Построим модель рассеяния группы химических элементов, которые могут содержаться в воде. При описании профиля экспериментальной картины рассеяния производится выбор профильной функции для описания формы пиков полученной дифрактограммы: Гаусс (G), Лоренц (L), псевдо-Войт (PV).

Пиковая форма: Гауссиан

$$G(t, x_0, \Delta x) = \frac{2}{\Delta x} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp \left[-4 \ln 2 \left(\frac{t - x_0}{\Delta x} \right)^2 \right],$$

пиковая форма: Лоренциан

$$L(t, x_0, \Delta x) = \frac{2}{\pi \Delta x \left[1 + 4 \left(\frac{t - x_0}{\Delta x} \right)^2 \right]},$$

пиковая форма: Псевдо-Войт (PV)

$$PV(t, x_0, \Delta x, \eta) = \eta \cdot G(t, x_0, \Delta x) + (1 - \eta) \cdot L(t, x_0, \Delta x), 0 \leq \eta \leq 1,$$

где параметр x_0 характеризует положение пика, Δx является шириной на полувысоте пика, функция PV – линейная комбинация Гауссиана G и Лоренциана L с той же самой шириной Δx , η – параметр PV .

Уточнение профиля линии основано на введении функции F , которая должна быть минимизирована относительно всех параметров:

$$F = \frac{\sum_{i=1}^m |y_i^{obs} - y_i^{calc}|^2}{\sum_{i=1}^m |y_i^{obs}|^2},$$

где y_i^{obs} – данные, полученные в процессе эксперимента, y_i^{calc} – вычисляемые данные,

$$y_i^{calc} = \sum_{j=1}^k I_j PV(t_i, x_0^{(j)}, \Delta x^{(j)}, \eta^{(j)}) + \varphi(t_i, x_1, \dots, x_s),$$

где k – количество пиков на дифрактограмме, I_j – интегральная интенсивность, $\varphi(t_i, x_1, \dots, x_s)$ – некоторая неизвестная функция фона (Background).

Множество параметров, уточняемых методом наименьших квадратов, составляют параметры, характеризующие форму пиков данной дифрактограммы: $\{I_j, x_0^{(j)}, \Delta x^{(j)}\}$, весовые коэффициенты $\{\eta^{(j)}\}$, $j = 1, \dots, k$ и параметры, входящие в функцию φ : $\{x_l\}$, $l = 1, \dots, s$. Для решения данной задачи требуется ввести приблизительные значения всех параметров и найти удачную аппроксимацию для функции φ (что является отдельной проблемой). В данной работе функция φ аппроксимируется с помощью кубического сплайна с естественными краевыми условиями.

Линейными ограничениями в данной задаче являются:

$$I_1/I_j = \mathfrak{I}_1/\mathfrak{I}_j, \quad j = 2, \dots, k, \quad \eta^{(j)} = \eta^{(i)}, \quad \Delta x^{(j)} = \Delta x^{(i)}, \quad i, j = 1, \dots, k,$$

значения величин $\{\mathfrak{I}_j\}$, $j = 1, \dots, k$ даны в таблицах ?? и 2. Спектральные линии, для которых $\mathfrak{I}_j < 1e^{-2}$, либо их энергии (положения пиков) не входят в рассматриваемый диапазон ($14KeV - 121KeV$), отмечены в таблицах символом „-“. Поскольку для всех химических элементов таблицы ?? спектральные линии $L_{\alpha 1}, L_{\alpha 2}, L_{\beta 1}, L_{\beta 3}, L_{\beta 4}, L_{\beta 5}, L_{\beta 6}, L_{\gamma 1}$ не входят в указанный диапазон энергий, соответствующие строки в этой таблице полностью отсутствуют. Данные для таблиц ?? и 2 взяты из [11].

Для аппроксимации якобиана используются разности вперед, т.е. j -й столбец $J(x)$ аппроксимируется по формуле:

$$\tilde{J}(:, j) = \frac{R(x + h_j e_j) - R(x)}{h_j},$$

где e_j обозначает j -й единичный вектор, h_j – шаг аппроксимации, уменьшаемый по мере приближения к оптимуму.

Вычисления проводились в MATLAB с машинной точностью 10^{-16} . Когда на каждом шаге метода ГН решалась СЛАУ большого размера предобусловленным методом GMRES, то критерием окончания внутренних итераций являлось условие:

$$\|\mathcal{B}^{-1}\mathbf{b} - \mathcal{B}^{-1}\mathcal{A}\mathbf{w}^k\|_2 \leq 10^{-6} \|\mathcal{B}^{-1}\mathbf{b} - \mathcal{B}^{-1}\mathcal{A}\mathbf{w}^0\|_2.$$

Рассматривались три версии GSTS-предобусловливателя: GSTS(1), GSTS(2) и GSTS(3), отличающиеся выбором матрицы B_2 (таблица 3). Во всех расчетах $B_1 = \tilde{M}$. Значения параметров определялись экспериментально, причем $\omega_1 = \omega_2 = \omega_{exp}$. Значение параметра для расширенной лагранжевой системы на каждом шаге метода ГН определялось как $\gamma_k = \|M_k\|_2 / \|E\|_2^2$.

В таблице 4 даны результаты расчетов задачи с небольшим числом параметров по формулам (11) метода ГН. Здесь указано число итераций („IT“), время в секундах („CPU“), норма невязки $\|R\|_1$ („RES“), сумма квадратов

невязок по завершении всех итераций („Ssq”), число обусловленности $(1, 1)$ блока исходной (полуопределенной) матрицы $(\text{cond}(M_0))$, количество параметров, определяемых по методу наименьших квадратов (n) , число ограничений задачи (p) и названия химических элементов, для спектральных линий которых подобраны необходимые параметры. На Рис. 1 показаны экспериментальная и модельная кривые рассеяния для задачи со 112 параметрами.

В таблице 5 представлены результаты работы предобусловленного метода PGMRES с использованием предобусловливателей GSTS(i), $i = 1, 2, 3$ на одной итерации метода ГН. Численные эксперименты показали, что при решении задач большой размерности методом ГН в качестве предобусловливателя для метода GMRES на каждом шаге наилучшие свойства проявил GSTS(2) как по числу итераций, так и по времени CPU. Это связано, главным образом, с наиболее удачной аппроксимацией матрицы B_2 . Предобусловливатель GSTS(1) несколько уступает GSTS(3) по времени и по числу итераций. Это позволяет рекомендовать использование GSTS(2) в качестве предобусловливателя для методов подпространств Крылова при решении НЗНК с системой ограничений-равенств. Как и следовало ожидать, без использования предобусловливателей метод GMRES работает крайне медленно.

В таблице 6 представлены результаты расчетов внешних итераций метода ГН для задач большой размерности с использованием на каждом шаге наилучшего предобусловливателя GMRES+GSTS(2).

Таблица 1. Стандартные относительные интенсивности излучения химических элементов

Химический элемент (порядковый номер)					
\mathcal{I}_j	Линия	Sr (38)	Cd (48)	W (74)	Hg (80)
\mathcal{I}_1	$K_{\alpha 1}$	5.58213e-01	5.41041e-01	5.00601e-01	4.91246e-01
\mathcal{I}_2	$K_{\alpha 2}$	2.90157e-01	2.87764e-01	2.87705e-01	2.88916e-01
\mathcal{I}_3	$K_{\beta 1}$	8.79408e-02	9.24314e-02	1.08831e-01	1.10730e-01
\mathcal{I}_4	$K_{\beta 2}$	1.67464e-02	2.86752e-02	4.30517e-02	4.71596e-02
\mathcal{I}_5	$K_{\beta 3}$	4.55533e-02	4.80446e-02	5.64303e-02	5.76225e-02
\mathcal{I}_6	$L_{\gamma 2}$	-	-	-	1.09451e-01
\mathcal{I}_7	$L_{\gamma 3}$	-	-	-	1.44907e-01
\mathcal{I}_8	$L_{\gamma 6}$	-	-	-	2.46215e-02

Таблица 2. Стандартные относительные интенсивности излучения химических элементов

Химический элемент (порядковый номер)					
\mathcal{I}_j	Линия	Pb (82)	Th (90)	U (92)	Pu (94)
\mathcal{I}_1	$K_{\alpha 1}$	4.87769e-01	4.75825e-01	4.73147e-01	4.70615e-01
\mathcal{I}_2	$K_{\alpha 2}$	2.89233e-01	2.92344e-01	2.93492e-01	2.94809e-01
\mathcal{I}_3	$K_{\beta 1}$	1.10815e-01	1.10429e-01	1.10315e-01	1.10278e-01
\mathcal{I}_4	$K_{\beta 2}$	4.97524e-02	5.70990e-02	5.81971e-02	5.88268e-02
\mathcal{I}_5	$K_{\beta 3}$	5.77565e-02	5.80115e-02	5.80906e-02	5.82200e-02
\mathcal{I}_6	$L_{\alpha 1}$	-	-	-	6.54313e-01
\mathcal{I}_7	$L_{\alpha 2}$	-	-	-	7.31858e-02
\mathcal{I}_8	$L_{\beta 1}$	-	7.63960e-01	7.59182e-01	7.54892e-01
\mathcal{I}_9	$L_{\beta 3}$	-	3.49140e-01	3.35732e-01	3.22372e-01
\mathcal{I}_{10}	$L_{\beta 4}$	-	3.63908e-01	3.69674e-01	3.75103e-01
\mathcal{I}_{11}	$L_{\beta 5}$	-	3.41068e-02	3.66090e-02	3.89039e-02
\mathcal{I}_{12}	$L_{\beta 6}$	-	1.20405e-02	1.23776e-02	1.27173e-02
\mathcal{I}_{13}	$L_{\gamma 1}$	1.65149e-01	1.78203e-01	1.81835e-01	1.85507e-01
\mathcal{I}_{14}	$L_{\gamma 2}$	1.14773e-01	1.43332e-01	1.52055e-01	1.61292e-01
\mathcal{I}_{15}	$L_{\gamma 3}$	1.45259e-01	1.43619e-01	1.42538e-01	1.41233e-01
\mathcal{I}_{16}	$L_{\gamma 6}$	2.89336e-02	3.83568e-02	3.90470e-02	3.91762e-02

Таблица 3. Выбор матрицы B_2

Предобусловливатель	Матрица B_2	Описание
GSTS(1)	$E\widehat{M}^{-1}E^T$	$\widehat{M} = tridiag(\widehat{M})$
GSTS(2)	$E\widehat{M}^{-1}E^T$	$\widehat{M} = tridiag(M) + \gamma diag(E^T E)$
GSTS(3)	$tridiag(E\widehat{M}^{-1}E^T)$	

Таблица 4. Решение НЗНК с небольшим числом параметров методом ГН

n	p	$\text{cond}(M_0)$	Ssq	IT	CPU	RES	Хим. элементы
26	12	1.55e+09	2.9e-10	8	0.26	4.22e-6	W
46	26	1.44e+10	1.32e-09	11	0.42	8.45e-7	W, Cd
70	40	2.21e+12	6.54e-10	18	0.65	1.98e-6	W, Cd, Sr
112	82	1.31e+12	5.12e-09	32	0.98	3.12e-6	W, Cd, Sr, Hg
160	122	2.76e+14	3.21e-09	49	1.57	1.65e-7	W, Cd, Sr, Hg, Pb
235	148	2.87e+16	6.12e-09	58	1.95	5.32e-6	W, Cd, Sr, Hg, Pb, Th
310	175	4.76e+16	1.22e-08	69	2.58	1.11e-6	W, Cd, Sr, Hg, Pb, Th, U
400	220	2.76e+18	3.12e-08	82	3.61	3.10e-6	W, Cd, Sr, Hg, Pb, Th, U, Pu

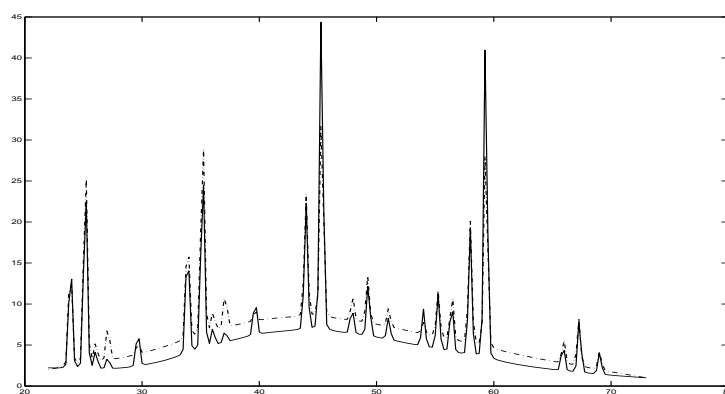


Рис. 1. Экспериментальная (штрихпунктирная линия) и модельная (сплошная линия) кривые рассеяния для задачи со 112 параметрами

Таблица 5. Сравнение IT, CPU и RES метода GMRES и GMRES с предобусловливанием GSTS(i), $i = 1, 2, 3$ на одной итерации метода ГН

n		800	1060	1200	1355	1420	1500	
p		256	288	324	386	392	406	
GMRES		IT	88	106	146	182	249	304
		CPU	37.97	43.44	49.52	58.12	85.15	112.34
		RES	2.21e-7	1.12e-6	6.02e-7	1.24e-6	3.73e-7	3.141e-6
PGMRES	GSTS(1)	IT	14	15	17	19	22	27
		CPU	0.033	0.051	0.082	0.096	0.216	0.357
		RES	6.61e-7	3.12e-6	1.22e-7	1.44e-6	4.93e-7	8.31e-7
	GSTS(2)	IT	10	11	12	13	16	18
		CPU	0.028	0.041	0.069	0.088	0.174	0.321
		RES	6.73e-6	5.66e-7	8.78e-7	7.71e-7	9.52e-6	2.19e-7
	GSTS(3)	IT	13	14	15	17	20	24
		CPU	0.031	0.048	0.078	0.092	0.191	0.342
		RES	8.07e-7	9.73e-7	8.42e-7	8.01e-7	6.96e-7	7.68e-6

Таблица 6. Решение НЗНК с использованием метода GMRES+GSTS(2) на каждой итерации ГН

n	p	$Cond(M_0)$	Ssq	IT(ГН)	CPU	RES
800	256	1.381e+11	2.906e-010	121	3.418	4.223e-6
1060	288	0.726e+10	1.853e-010	153	6.291	4.007e-6
1200	324	1.318e+11	2.432e-09	195	13.676	9.753e-6
1355	386	1.738e+12	1.980e-09	280	24.831	4.238e-6
1420	392	1.556e+14	2.881e-08	379	67.239	7.554e-5
1500	406	0.918e+16	1.765e-08	488	156.842	6.123e-5

Литература

1. Дэннис Дж., Шнабель Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. Москва: Мир, 1988. 440 с.
2. *J. Nocedal and S.J. Wright* Numerical optimization. Springer Series in Operations Research: Springer-Verlag, New York, 1999.
3. Бертсекас Д. Условная оптимизация и методы множителей Лагранжа. Москва: Радио и связь, 1987.
4. *G.H. Golub, C. Greif* On solving block-structured indefinite linear systems // SIAM Journal on Scientific Computing. 2003. Vol. 24. P. 2076–2092.
5. *T.S. Martynova* On Augmented Lagrangian Methods for Saddle-Point Linear Systems with Singular or Semidefinite (1, 1) Blocks // Journal of Computational Mathematics. 2014. Vol. 32. N. 3. P. 297–305.
6. *M. Benzi, G.H. Golub, J. Liesen* Numerical solution of saddle point problems. Acta Numerica. 2005. Vol. 14. P. 1–137.
7. *Benzi M., Golub G.H.* A preconditioner for generalized saddle point problems // SIAM J. Matrix Anal. Appl. 2004. Vol. 26. P. 20–41.
8. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. Москва: Наука, 1984.
9. *Krukier L.A., Krukier B.L., Ren Z.-R.* Generalized skew-Hermitian triangular splitting iteration methods for saddle-point linear systems // Numer. Linear Algebra Appl. 2014. Vol. 21. P. 152–170.
10. Крукиер Л.А., Мартынова Т.С. Эффективный итерационный метод решения задач с седловой точкой // Математическое моделирование. 2014. Т. 26, № 12, С. 116–126.
11. *Plechaty E.F., Cullen D.E., Howerton R.J* Tables and Graphs of Photon Interaction Cross Sections from 0.1 keV to 100 MeV Derived from the LLL Evaluated Nuclear Data Library // Report UCRL-50400, NTIS DE82-004819, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, 1981. Vol. 6.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ТЕПЛОГО ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА МАЛОЙ ПЛОТНОСТИ В ПЛАЗМЕ МЕТОДОМ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ¹

Месяц Е.А.¹, Снытников А.В.* , Лотов К.В.**

* *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск*

** *Институт ядерной физики СО РАН, Новосибирск*

Введение

Пучковая неустойчивость является одной из наиболее распространенных неустойчивостей в плазме и представляет большой интерес для широкого круга приложений, таких как ускорение заряженных частиц внешними электромагнитными полями и нагрев лабораторной плазмы.

В рамках работы, проводимой с ИЯФ СО РАН по совместным проектам, была создана трехмерная численная модель взаимодействия пучка электронов с плазмой, основанная на методе частиц и ориентированная на исследование устойчивости и нагрева плазмы электронным пучком. Для исследования влияния пучковых нелинейностей на поведение неустойчивости в условиях развитой турбулентности необходимо численное моделирование, которое, с одной стороны, способно на больших временах отслеживать эволюцию возбуждаемой пучком турбулентности, а с другой – позволяет обеспечить достаточно подробное описание кинетических эффектов, связанных с захватом пучка.

Основная цель данной работы – исследование точности метода частиц в ячейках в зависимости от количества частиц. Известно, что шумовая погрешность убывает медленно, как $N^{-1/2}$, что ведет к резкому увеличению времени расчетов, а также объемов хранимых и передаваемых данных. Поэтому важно ответить на вопрос, сколько частиц достаточно для качественно и количественно удовлетворительного решения конкретной задачи. Ответ на него также позволит понять, насколько в том или ином случае необходимо использовать модификации алгоритма метода частиц в ячейках.

I Постановка задачи

Модель высокотемпературной бесстолкновительной плазмы представляется кинетическим уравнением Власова и системой уравнений Максвелла [1],

¹Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 14-12-00043. Разработка кода велась при поддержке гранта РФФИ № 14-07-00241.

которые в безразмерной форме имеют следующий вид:

$$\frac{\partial f_{i,e}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_{i,e}}{\partial \mathbf{r}} + q_{i,e}(\mathbf{E} + [\mathbf{v}, \mathbf{B}]) \frac{\partial f_{i,e}}{\partial \mathbf{v}} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \text{rot } \mathbf{B} - \mathbf{j}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\text{rot } \mathbf{E}, \quad (3)$$

$$\text{div } \mathbf{E} = \rho, \quad \text{div } \mathbf{B} = 0. \quad (4)$$

Здесь индексами i и e помечены величины, относящиеся к ионам и электронам, соответственно; $q_e = -1$, $q_i = m_e/m_i$; $f_{i,e}(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ – функция распределения частиц; $m_{i,e}$, $\mathbf{p}_{i,e}$, $\mathbf{r}_{i,e}$ – масса, импульс, положение иона или электрона; \mathbf{E} , \mathbf{B} – напряженности электрического и магнитного полей. Для перехода к безразмерному виду в качестве единиц используются следующие базовые величины: скорость света $c = 3 \cdot 10^{10}$ см/с, масса электрона $m_e = 9,1 \cdot 10^{-28}$ г, плотность плазмы $n_0 = 10^{14}$ см $^{-3}$, время $t = \omega_{pe}^{-1}$, где плазменная электронная частота $\omega_{pe} = 5,6 \cdot 10^{11}$ с $^{-1}$.

Решение уравнения Власова проводится методом частиц в ячейках [2]. Плазма представляется набором модельных частиц, траекториями движения которых являются характеристики уравнения Власова

$$\frac{d\mathbf{p}_{i,e}}{dt} = q_{i,e}(\mathbf{E} + [\mathbf{v}, \mathbf{B}]), \quad \frac{d\mathbf{r}_{i,e}}{dt} = \mathbf{v}_{i,e}, \quad \mathbf{p}_{i,e} = \frac{\mathbf{v}_{i,e}}{\sqrt{1 - v_{i,e}^2}}. \quad (5)$$

Для решения системы уравнений (5) используется схема с перешагиванием, а для решения системы уравнений Максвелла используется метод Лэнгдона-Лазинского, описанный в работе [3]. Форма ядра частицы выбрана классическая – РС.

В начальный момент времени в трехмерной области решения, имеющей форму прямоугольного параллелепипеда $x \in [0, L]$, $y, z \in [0, L_{\perp}]$, находится плазма, состоящая из электронов и ионов водорода, и пучок электронов. Задаются плотности пучка n_b и электронов плазмы $n_e = 1 - n_b$, температура электронов плазмы T_e и пучка T_b ; температура ионов считается нулевой $T_i = 0$. Начальное распределение частиц по скоростям максвелловское с плотностью распределения

$$f(v) = \frac{1}{\Delta v \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(v - v_0)^2}{2\Delta v^2}\right),$$

где Δv – разброс частиц по скоростям ($T_b = \Delta v^2$), v_0 – средняя скорость пучка. Средняя скорость ионов и электронов фона нулевая. Все частицы (электроны и ионы плазмы, электроны пучка) распределены по области равномерно, начальная средняя скорость пучка направлена по x и равна

$v_0 = 0.2$. Граничные условия для всех функций по всем направлениям периодические.

В расчетах нас интересует развитие отдельно взятой неустойчивой моды, поэтому длина области в направлении x выбрана равной одной длине исследуемой плазменной волны, $L_y = L_z = L_\perp = 4h_x$. Так как граничные условия для всех функций по всем направлениям периодические, то из непрерывного спектра волновых чисел k вырезаются дискретные значения $k_s = 2\pi s/L_s$ ($s = x, y, z$), из которых только основная мода с $k_x = 2\pi/L$, $k_y = k_z = 0$ попадает в область большого инкремента. Эту волну и характеризующий ее инкремент мы и будем рассматривать в расчетах. В зависимости от разброса электронов пучка по скоростям различают несколько режимов неустойчивости: гидродинамический ($k\Delta v \ll \gamma$), переходный ($k\Delta v \sim \gamma$) и кинетический ($k\Delta v \gg \gamma$). Здесь γ – инкремент развивающейся неустойчивости, Δv – разброс электронов пучка по скоростям.

Большой объем данных, связанных с трехмерностью задачи, требует использования распределенных вычислительных систем. Распараллеливание выполнено методом декомпозиции расчетной области по направлению y , перпендикулярному направлению движения электронного пучка x . Используется смешанная эйлерово-лагранжева декомпозиция. Подробности параллельной реализации описаны в статье [4].

II Вычисление инкремента неустойчивости

Для оценки точности получаемого решения проводится сравнение инкремента развивающейся неустойчивости с его аналитическими оценками для той же задачи в одномерной постановке [5]. Известно, что на начальной стадии развития неустойчивости энергия электрического поля (W) нарастает по экспоненте, $W \propto e^{2\gamma t}$. Поэтому инкремент неустойчивости можно вычислять как производную от логарифма энергии электрического поля во всей счетной области. Расчеты, однако, показали, что данный способ вычисления инкремента неустойчивости не подходит для вычислений в кинетическом режиме, когда взаимодействие с возбуждаемой волной вступает все меньшая часть электронов пучка, и время насыщения неустойчивости увеличивается. При этом энергия электрического поля волны уменьшается и при недостаточном количестве частиц становится по величине сравнима с численными шумами. Такие расчеты требуют большого количества частиц, что не всегда возможно обеспечить. Поэтому в качестве диагностики был выбран расчет инкремента неустойчивости по амплитуде отдельной неустойчивой моды E_0 ,

$$\gamma = \frac{\partial}{\partial t} \ln(E_0), \quad (6)$$

который хорошо работает во всех режимах.

III Результаты расчетов

Счетные параметры: сетка по пространству $100 \times 4 \times 4$, шаг по времени $\tau = 0.001$. Обозначим lp число частиц в одной ячейке сетки и рассмотрим вопрос точности получаемого решения в разных режимах в зависимости от lp .

Обозначения: отношение плотности пучка к плотности плазмы – n_b , разброс электронов пучка по скоростям – Δv , длина области – L .

Расчеты проводились при параметрах, соответствующих трем разным режимам развития пучковой неустойчивости:

1. **Гидродинамический режим** ($k\Delta v \ll \gamma$): $n_b/n_0 = 2 \cdot 10^{-3}$, $\Delta v/v_0 = 0.035$, $L = 1.2566$. При заданных параметрах величина инкремента неустойчивости должна быть $\gamma = 0.0722$ [5].
2. **Переходный режим** ($k\Delta v \sim \gamma$): $n_b/n_0 = 2 \cdot 10^{-3}$, $\Delta v/v_0 = 0.14$, $L = 1.1424$. При этих параметрах величина инкремента неустойчивости должна быть $\gamma = 0.0232$.
3. **Кинетический режим** ($k\Delta v \gg \gamma$): $n_b/n_0 = 2 \cdot 10^{-4}$, $\Delta v/v_0 = 0.14$, $L = 1.1424$. Аналитическое значение инкремента неустойчивости в этом случае $\gamma = 0.0027$.

Таблица 1. Инкремент и его относительная погрешность (в %) в зависимости от количества частиц пучка в ячейке (lp). γ_1 – расчетное значение инкремента в гидродинамическом режиме, γ_2 – в переходном режиме, γ_3 – в кинетическом режиме. Аналитическое значение для тех же инкрементов $\gamma_1^0 = 0.0722$, $\gamma_2^0 = 0.0232$, $\gamma_3^0 = 0.0027$.

lp	γ_1	ϵ (%)	γ_2	ϵ (%)	γ_3	ϵ (%)
50	0.068	6	0.017	27	–	–
500	0.07	3	0.02	14	–	–
2500	0.071	2	0.021	9	0.002	20
5000	0.071	2	0.022	5	0.002	20
10000	0.071	2	0.022	5	0.002	20

Основные результаты моделирования отражены в табл. 1. Здесь ϵ – относительная погрешность вычисленного инкремента неустойчивой волны, γ_k^0 – аналитическое значение инкремента неустойчивой волны, γ_k – численное значение инкремента. Как показали расчеты, данный комплекс программ позволяет проводить моделирование эволюции электронного пучка в широком диапазоне параметров. В гидродинамическом режиме резонансной волной захватываются все электроны пучка, в кинетическом – малая часть электронов пучка, скорости которых лежат в узком диапазоне. На рис. 1

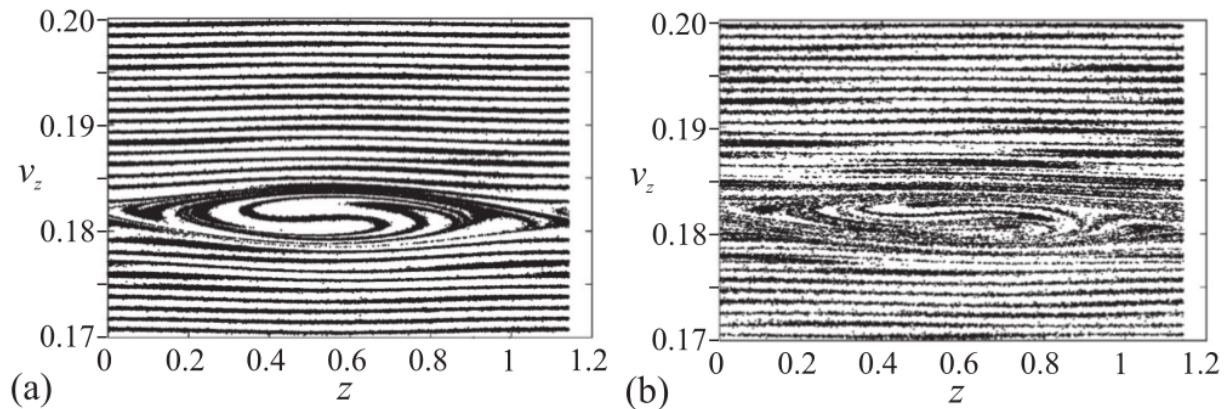


Рис. 1. Электроны пучка на фазовой плоскости (x, v_x) для кинетического режима с достаточным ($lp = 2500$) и недостаточным ($lp = 500$) числом частиц. Момент времени $t = 2100$.

изображено поведение частиц пучка на фазовой плоскости с достаточным и недостаточным числом модельных частиц для кинетического режима. Расчеты показали, что для воспроизведения не только качественной картины, но и количественных характеристик пучковой неустойчивости (величины инкремента неустойчивой моды с точностью не менее 20%) при наших параметрах необходимо иметь не менее $2 \cdot 10^5$ модельных частиц пучка в интервале скоростей, в котором происходит взаимодействие с неустойчивой волной.

Переформулируем данное заключение в более общем виде в терминах числа частиц в ячейке. Рассмотренное разрешение (100 узлов сетки на волновой период) является типичным для моделирования методом частиц в ячейках. Полагая ширину пакета равной $\sim k_s^{-1}$ по y и z (или 16 узлов), получаем, что $2 \times 10^5 / 100 / 16^2 \sim 10$ частиц в ячейке достаточно для корректного моделирования, если весь пучок вступает во взаимодействие с волной. Если же неустойчивость развивается в кинетическом режиме, и только малая часть ϵ электронов захватывается волной, то необходимое число частиц $\sim 10/\epsilon$.

Литература

1. Кролл Н., Трайвеллис А. Основы физики плазмы. Москва: Мир, 1975.
2. Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А., Федорук М.П. Численное моделирование методами частиц-в-ячейках. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004.
3. Langdon A.B., Lasinski B.F. Electromagnetic and relativistic plasma simulation models // Methods in Computational Physics. 1976. Vol. 16. P. 327–366.

4. *Snytnikov A.V.* Supercomputer simulation of plasma electron heat conductivity decrease due to relativistic electron beam relaxation // *Procedia Computer Science*. 2010. Vol. 1, Issue 1. P. 607–615.
5. *Лотов К.В., Тимофеев И.В.* Переходный режим одномерной двухпотоковой неустойчивости // *Вестник НГУ. Серия: Физика*. 2008. Т. 3, вып. 1. С. 62–65.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЙРОННОЙ АКТИВНОСТИ

Муратова Г.В., Бавин В.В., Андреева Е.М.,
Белоус М.А.

*Институт математики, механики и компьютерных наук
ФГОУ ВПО "Южный федеральный университет"
г. Ростов-на-Дону*

Введение

Актуальным направлением современной науки является математическое моделирование биологически правдоподобных нейронных сетей, в которых происходят процессы генерации и распространения нервных импульсов, изменения величины мембранного потенциала нейронов во времени [1, 2].

На основе динамических механизмов работы нейрона составлены различные математические модели. Среди них есть относительно простые, например "Integrate and Fire", в которой нейрон представляется в виде параллельно подключенных конденсатора, отвечающего за емкостной ток мембраны, и резистора, имитирующего утечку ионов через ионные каналы [3]. Созданы и более сложные, биологически правдоподобные модели, например, модель Ходжкина-Хаксли [4], которая гораздо сложнее в вычислительном плане и в плане анализа её динамики, но она гораздо точнее описывает динамику мембранного потенциала нейрона.

Механизм образования мембранного потенциала имеет ионную природу. Сквозь мембрану, отделяющую внутриклеточную среду от внеклеточной, идут потоки ионов. Разность концентраций ионов с обеих сторон создает разность потенциалов на мембране между внешней и внутренней средой. В процессе распространения нервных импульсов, под воздействием электрического сигнала в мембране открываются Na^+ -каналы, ионы по градиенту концентрации проходят в клетку, деполяризуя её. Если величина деполяризации мембраны достигает порога, клетка возбуждается, и по ее телу распространяется потенциал действия. В деполяризованной мембране начинают открываться K^+ -каналы, происходит реполяризация – ионы по градиенту концентрации выходят из клетки, возвращая в состояние покоя.

I Модель Ижикевича

В данном исследовании нейронной активности мы используем модель Ижикевича [5], которая описывается динамикой мембранного потенциала

V (Рис.1) в виде быстро-медленной системы двух дифференциальных уравнений (1).

$$\begin{cases} c_m \frac{dV}{dt} = g(v - v_{rest})(v - v_{thresh}) - u + I \\ \frac{dU}{dt} = a(b(v - v_{rest}) - u) \\ \text{если } V \geq V_{peak}, \text{ то } \begin{cases} V = c \\ U = U + d \end{cases} \end{cases} \quad (1)$$

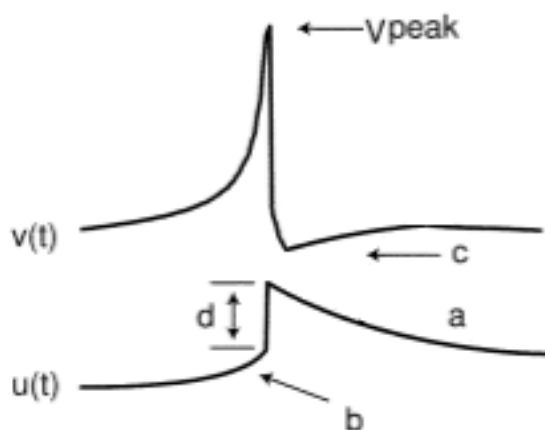


Рис. 1. График формы нервного импульса модели Ижикевича.

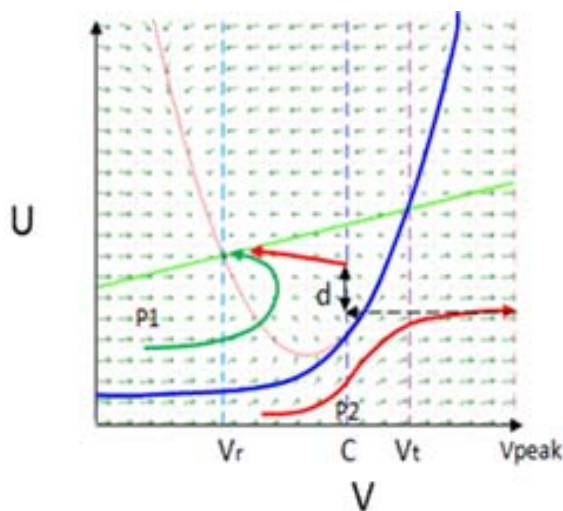


Рис. 2. Фазовая плоскость модели.

В зависимости от начальных условий и величины приложенного тока модель может быть в двух динамических режимах – это движение к потенциалу покоя $P1$, или генерация электрического импульса $P2$ [6]. Фазовая траектория может сходиться в устойчивую точку, в которой величина потенциала равна величине потенциала покоя, например точка $P1$ на Рис.2, либо расходиться, идя к пиковому значению, например точка $P2$ на рис.2.

Структура модели нейронной сети состоит их элементов двух типов: нейронов и синаптических связей, соединяющих нейроны. Одна синаптическая связь соединяет два нейрона, причем нейрон, выход (аксон) которого соединен с входом (дендритом) другого, является пресинаптическим, а второй нейрон, соответственно, постсинаптическим. Сила связи между нейронами характеризуется величиной веса связи – W , эквивалентной количеству нейромедиаторов, выделяемых в синаптической щели при прохождении потенциала действия. В зависимости от величины веса связь через связь проходит ионный ток, передающий потенциал действия, которому соответствует переменная синаптического тока – Y . Нейроны характеризуются величиной электрического потенциала – V , которая зависит от величины суммарного входящего синаптического тока – I . В сети один нейрон может иметь много входов и только один выход, соединенный со многими нейронами [1].

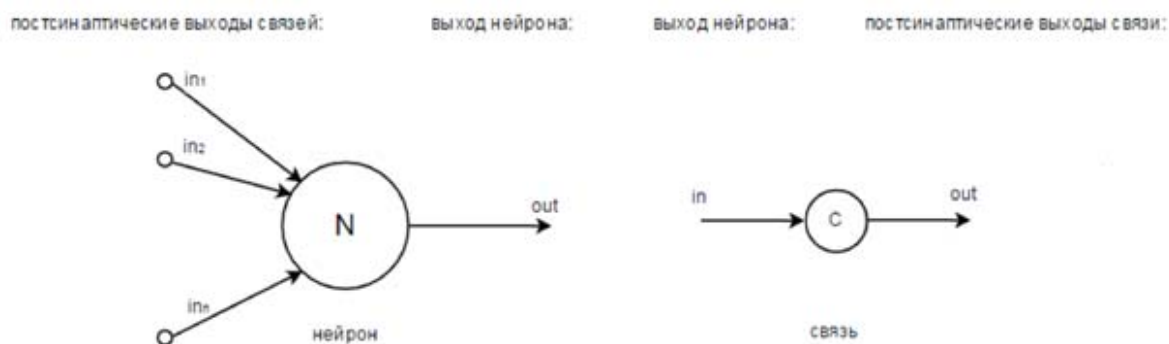


Рис. 3. Структура сети.

II Алгоритм модели GPGPU

Моделирование нейронных сетей является требовательным к вычислительным ресурсам процессом из-за наличия большого количества однотипных элементов. Такие модели могут содержать сотни тысяч параллельно функционирующих нейронов. Для повышения эффективности математической модели путём увеличения производительности моделирования применяются параллельные вычисления. Реализация параллельных вычислений основана на технологии *General-purpose computing for graphics processing units (GPGPU)*, позволившей провести расчеты на графическом процессоре видеокарты на языке *GLSL*.

Вычисления *GPU* разделены на различные вычислительные потоки, с различными правилами доступа. Вычисления выполняются на квадратной сетке, где каждому элементу – пикселю соответствует отдельный вычислительный поток с одним набором команд. Данные модели хранятся в двухмерных структурах данных – текстурах, элементы которых содержит четыре переменные с плавающей запятой. При параллельных вычислениях за

итерацию одна текстура подвержена либо операции чтения, либо операции записи, что делает невозможным операцию перезаписи этой текстуры. Поэтому для устранения этого недостатка каждая текстура имеет две версии – четную и нечетную. В случае четной итерации происходит чтение четной версии, а запись осуществляется в нечетную версию текстуры, соответственно, на нечетной итерации – чтение из нечетной версии, а запись – в четную версию текстуры.

На каждой итерации модели последовательно просчитываются три подпрограммы: для расчета потенциала нейронов, синаптического тока связей и синаптического тока нейронов.

Сначала выполняется подпрограмма, рассчитывающая величину потенциала V для каждого нейрона. Динамика потенциала нейрона описывается моделью Ижикевича. Если величина потенциала нейрона превышает порог V_{peak} , – значит, нейрон возбужден и генерирует потенциал действия. Операция чтения текущих параметров нейронов происходит из текстуры “нейроны 1”, каждому элементу которой соответствует параметры $[V \ U \ I \ 0]$, а операция записи новых параметров проводится на текстуре “нейроны 2”. Тогда для k -го нейрона на $(i + 1)$ -ой итерации итерационные формулы имеют вид (2):

$$\left\{ \begin{array}{l} V_k^{i+1} = V_k^i + \Delta t \cdot \left[\frac{I_k^i + g \cdot (V_k^i - V_{thresh}) \cdot (V_k^i - V_{rest}) - U_k^i}{C_m} \right] \\ U_k^{i+1} = U_k^i + \Delta t \cdot [a \cdot (b \cdot (V_k^i - V_{rest}) - U_k^i)] \\ \text{если } V_k^i \geq V_{peak} \text{ то } \begin{cases} V_k^{i+1} = c \\ U_k^{i+1} = U_k^i + d \end{cases} \end{array} \right. \quad (2)$$

Следующая подпрограмма рассчитывает величину синаптического тока каждой связи сети. Параметры связей хранятся в текстуре “связи”, каждый элемент которой содержит индекс пресинаптического нейрона, индекс постсинаптического нейрона, величины синаптического тока и веса $[index_{pre} \ index_{post} \ Y \ W]$. Чтение текущих параметров происходит из текстуры четной (нечетной) “связи”, а запись осуществляется в текстуру нечетной (четной) “связи”. По индексу пресинаптической связи в текстуре четной (нечетной) “связи” определяется значение V во вспомогательной текстуре “нейроны 1”. Если эта величина больше порога V_{peak} , это означает, что сгенерирован потенциал действия, величина синаптического тока принимает значение равное единице, что соответствует генерированному потенциалу действия на пресинаптическом входе связи, после чего ток связи экспоненциально затухает с коэффициентом K_l .

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_k^{i+1} = Y_k^i \cdot e^{K_l} \\ \text{если } V_{pre}^i \geq V_{peak} \text{ то } Y_k^{i+1} = 1 \end{array} \right. \quad (3)$$

Последняя, третья подпрограмма рассчитывает суммарный входной си-наптический ток для каждого нейрона, который равен сумме входящих си-наптических токов связей, у которых нейрон находится на постсинаптическом входе. Чтение происходит из текстуры "нейроны 2", текстуры "связи" четная(нечетная) и текстуры "номера связей", которая содержит значения об индексах первой – first и последней – last связи в текстуре "связи", у которых текущий нейрон на постсинапсе, и которая упорядочена по постсинаптическим нейронам. Результат расчетов записывается в текстуру "нейроны 1".

$$I_k^{i+1} = \sum_{j=first}^{last} W_j \cdot Y_j^i \quad (4)$$

В общем виде вычислительный поток имеет следующий вид (Рис.4):

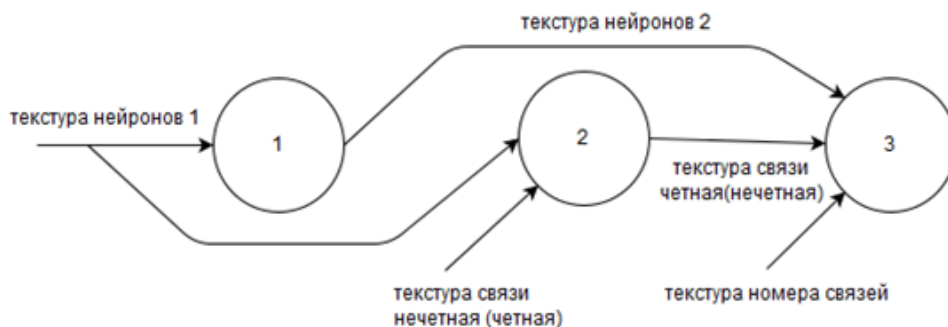


Рис. 4. Общая схема выполнения этапов итерации.

III Заключение

В данном исследовании разработаны модель электрической активности нейронной сети на основе модели Ижикевича и ее алгоритм с использованием технологии *GPGPU*. Проведен ряд вычислительных экспериментов, анализ результатов которых показал необходимость модификации используемой модели и усложнения вычислительного алгоритма. Это определило направления дальнейших исследований – разработку алгоритма биологически правдоподобного образования связей между нейронами внутри сети.

Литература

1. Научная сессия НИЯУ МИФИ–2010. XII Всероссийская научно-техническая конференция "Нейроинформатика–2010": Лекции по нейроинформатике. М.: МИФИ, 2010. 328с.

2. Чижов А.В, Турбин А.А. От моделей единичных нейронов к моделям популяций нейронов. Нейроинформатика. 2006. №1. С.76-88.
3. Jolivet R., Lewis T.J., Gerstner W. Generalized integrate-and-fire models of neuronal activity approximate spike trains of a detailed model to a high degree of accuracy. Journal of Neurophysiology. 2004. V.92. №.2. P.959-976.
4. Hodgkin A.L., Huxley A.F. A quantitative description of ion currents and its applications to conduction and excitation in nerve membranes. Journal of Neurophysiology. 1952. V.117. №4. P.500-544.
5. Izhikevich E.M. Dynamical systems in neuroscience: the geometry of excitability and
6. Hale J., Kozak H. Dynamics and Bifurcations. New York: Springer, 1991. 567p.

РАЗВИТИЕ ИДЕЙ Г.И.МАРЧУКА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОХРАНЫ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ¹

Пененко В.В.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

В многосторонней научной и практической деятельности академика Г.И.Марчука особое место занимали вопросы создания теории и методов математического моделирования для решения задач охраны окружающей среды и здоровья человека. В его научной школе многие идеи нашли воплощение при решении конкретных научных и практических задач, а также получили дальнейшее развитие.

В лекции будет сделан обзор основных результатов Г.И.Марчука, касающихся теории переноса излучения, расчета ядерных реакторов, физики атмосферы и охраны окружающей среды. Далее будут представлены новые аспекты вычислительных технологий математического моделирования для решения класса взаимосвязанных задач экологии и климата, которые разрабатываются в ИВМиМГ СО РАН в развитие идей и творческого наследия Г.И.Марчука. В его исследованиях фундаментальное значение имеют методы теории сопряженных уравнений, которые он начал разрабатывать еще в конце 50-тых годов прошлого века для расчета ядерных реакторов [1]. Основная идея этих методов состоит в том, что наряду с исходной системой уравнений математической модели исследуемых процессов строятся сопряженные, в смысле определения тождества Лагранжа, операторы и уравнения. В результате поставленная проблема исследуется на базе совместного использования решений основных и сопряженных задач. Здесь также значительное место занимают методы теории возмущений для линейных функционалов. Г.И.Марчук первым предложил использовать сопряженные уравнения для задач динамики атмосферы, океана [2], а затем развил теорию применительно к задачам охраны окружающей среды и других сложных систем [3,4].

Для конкретизации будем рассматривать объединенные модели гидротермодинамики и химии атмосферы в четырехмерных пространственно-временных областях в атмосфере Земли. Основную часть этого комплекса составляют уравнения с операторами типа конвекции-диффузии -реакции, описывающие процессы переноса и трансформации многокомпонентных функций состояния. С этими уравнениями связаны, в режиме двухсторонних взаимодействий, уравнения, представляющие процессы переноса и трансформации излучений в системе атмосфера- подстилающая поверхность. К

¹Работа выполняется при частичной поддержке Программы 43 Президиума РАН по стратегическим направлениям развития науки, а также проекта РФФИ №14-01-00125-а

основным объектам системы моделирования относятся также данные мониторинга природно-техногенных процессов средствами контактных и дистанционных измерений наземного и аэрокосмического базирования. Для организации связей между моделями процессов и результатами мониторинга, мы определяем совокупность математических моделей наблюдений, описывающих образы измеряемых величин в терминах функций состояния моделей процессов.

Специфическая черта изучаемых процессов состоит в их разномасштабности. Кроме того, модели природных процессов и модели наблюдений за их поведением содержат различного рода неопределенности, как в физическом описании самих моделей, так и во входных данных и в действующих факторах, которые необходимо оценивать с использованием всей доступной фактической информации. Всё это выдвигает на первый план поиски стратегий, позволяющих оперативно усваивать в современных вычислительных технологиях как можно более полную информацию о природных процессах, содержащуюся в данных наблюдений, и уточнять модели для их исследования. Для этих целей задаются функционалы, выражающие степень близости между измеряемыми величинами и их образами, рассчитанными с помощью моделей процессов и моделей наблюдений.

При построении системы моделирования следует также иметь в виду, что все перечисленные ранее объекты имеют неопределенности. Поэтому для их количественных оценок с использованием данных наблюдений мы вводим в уравнения моделей процессов, наряду с функциями источников, новые искомые слагаемые. Чтобы достичь главных целей исследования - то есть получить решение оптимизационных задач управления качеством природной среды и оценок экологических перспектив и рисков, в систему моделирования вводится также совокупность целевых функционалов. Их содержание определяется целями исследований, а также критериями устойчивого развития современного общества.

Теоретическую базу нашей концепции составляют вариационные принципы. Они представляют универсальный инструмент для объединения всех разномасштабных и мультивариантных элементов системы моделирования. Для их согласования основной функционал интегрального тождества для описания моделей процессов выбираем, исходя из определения уравнения баланса полной энергии объединенной системы комплекса моделей процессов. При наличии неопределенностей вариационный принцип формулируется со слабыми ограничениями. Описание всех элементов системы моделирования с помощью одного объединенного функционала имеет инвариантный характер. Благодаря этому, он позволяет рассматривать с единых позиций прямые, сопряженные и обратные задачи природоохранного прогнозирования, а также строить все численные схемы для их реализации. При этом все алгоритмические конструкции получаются согласованными. Кроме решения перечисленных задач получается набор алгоритмов для реализации методов теории чувствительности всех целевых функционалов к вариациям источни-

ков внешних воздействий, а также входных данных и параметров моделей. При этом рассчитываются, кроме функций состояния, значения сопряженных функций и функций неопределенностей, которые дают количественную оценку качества численных моделей процессов.

Поскольку наши приоритеты лежат в сфере применения вариационных принципов, кратко остановимся на этапах их разработки для решения задач физики атмосферы, прогноза погоды и охраны окружающей среды и попытаемся представить наш взгляд на современное состояние и перспективы их научных и практических применений.

Развивая методологию Г.И.Марчука, в 1975 г. были разработаны вариационные методы теории чувствительности нелинейных функционалов и моделей к вариациям входных данных, параметров и источников [5]. Тогда же был сформулирован универсальный алгоритм прямого и обратного моделирования с использованием основных и сопряженных уравнений для нелинейных задач динамики атмосферы и прогноза погоды [5-7]. В этих методах теории чувствительности существенным образом используется математический аппарат дифференцирования, в смысле определения Гато, нелинейных функционалов и операторов в пространствах функций состояния, параметров моделей и источников внешних воздействий.

Одним из практических применений предложенной вычислительной технологии является вариационный метод усвоения данных [6]. Его возможности были продемонстрированы результатами расчетов по четырехмерной нестационарной модели гидротермодинамики атмосферы в сферических координатах. Теоретические основы предложенного метода базируются на идеях классического вариационного принципа Эйлера-Лагранжа, в котором модели процессов выступают в качестве ограничений на множества функций состояния и параметров. Эти ограничения вводятся в вариационный принцип с помощью сопряженных функций, которые играют роль распределенных множителей Лагранжа. В дальнейшем были разработаны эффективные алгоритмы вариационного усвоения данных наблюдений (включая спектральные) для оценок функций состояния и параметров моделей, методов оптимального управления и методов исследования чувствительности для нелинейных динамических систем атмосфера-континент-океан и организации на их основе уравнений обратных связей [7-10].

После наших первых публикаций по вариационному усвоению, появились аналогичные исследования зарубежных коллег [11-13]. С тех пор было предложено множество различных модификаций этой методологии и схем её алгоритмической реализации, счет публикаций измеряется тысячами. Тут следует оговориться, что мы не ставим целью дать сколь-нибудь полный анализ методов усвоения данных в мировой литературе, отсылая заинтересованного читателя к недавним обширным обзорам [14,15].

Первое поколение вариационных методов усвоения данных развивалось в предположении, что модели процессов являются точными. Результаты измерений используются в них, в основном, для корректировки начальных

условий. Эти методы и сейчас продолжают активно использоваться, но, по нашему мнению, их применение, из-за необходимости построения сложных итерационных процессов, для современных систем наблюдений и моделей с высоким пространственно-временным разрешением недостаточно эффективно.

Среди современных технологий усвоения данных в настоящее время выделяется 4 лидирующих направления: 1) методы вариационного усвоения данных; 2) методы взвешенных наименьших квадратов; 3) методы типа фильтрации Калмана в оригинальной формулировке и в сочетании с методами ансамблей для параметрических оценок ковариационных матриц; 4) релаксационные методы (nudging-based), в которых невязки между измеренными и вычисленными значениями функций состояния непосредственно включаются в модели процессов.

В настоящее время мы развиваем методы решения прямых и обратных задач с усвоением данных на базе вариационного принципа со слабыми ограничениями [16-20]. При таком подходе в модели процессов явно включаются дополнительные слагаемые, учитывающие вклад неопределенностей. С позиций теории оптимального управления их можно рассматривать как параметры, или функции управления, которые определяются из условий минимизации целевого функционала с учетом всех доступных данных измерений. Соответственно, расширенный функционал вариационного принципа вводится с учетом суммарной меры всех неопределенностей, включаемых в систему моделирования. Методы усвоения на базе вариационного принципа со слабыми ограничениями можно отнести к методам второго поколения.

Отметим некоторые достоинства таких методов. Длина окон усвоения данных в них задается параметрически и может быть произвольной, начиная от одного шага по времени [17,19]. Перечислим формулировки нескольких вариантов таких алгоритмов:

- прямые алгоритмы для оперативного усвоения всех доступных данных с совместным решением прямых и сопряженных задач и с расчетом функций чувствительности и неопределенности;
- новые вариационные схемы, эквивалентные методам фильтрации Калмана: в нашем варианте включение данных измерений осуществляется через функции неопределенностей, рассчитываемые с помощью решения прямых и сопряженных задач; это исключает необходимость использования наиболее трудоемких элементов решения матричного уравнения типа Риккати высокой размерности для расчета ковариационных матриц, а также широко используемых в последние годы ансамблевых методов для параметрического оценивания этих матриц;
- вариационные версии релаксационных nudging-based методов, в которых включение невязок между вычисленными и измеренными значениями функций состояния также осуществляется с помощью функций

неопределенностей.

Как уже отмечалось ранее, ключевым элементом всех технологий прогнозирования являются данные измерений реального поведения исследуемых процессов. Мы строим систему моделирования так, чтобы в перспективе можно было использовать всю доступную информацию от различных наблюдательных систем: контактных (*in situ*) и дистанционных. Описания моделей наблюдений для спутниковых, лидарных и микроволновых систем мониторинга формально имеют похожую структуру. Представляется интересным использовать также доступные наблюдения с беспилотных летательных аппаратов и данных зондирования наземного базирования, типа солнечных фотометров системы АЭРОНЕТ. Полезное свойство всех дистанционных способов наблюдений, дающих интегрированные по толще атмосферы характеристики в виде изображений, состоит в том, что использование их вместе с моделями процессов в режиме обратного моделирования дает существенно большие масштабы областей чувствительности и наблюдаемости для решения обратных задач, чем точечные наблюдения. Но контактные наблюдения (*in situ*) дают информацию, четко привязанную к конкретным элементам пространства и интервалам времени. И поэтому их учет совместно с данными дистанционных наблюдений повышает точность представления всей совокупности информации для целей её усвоения.

Практическая реализация вариационных принципов осуществляется с применением различных методов декомпозиции и расщепления. В развитие существующих подходов к построению численных схем, обладающих свойствами суммарной аппроксимации, для разномасштабных операторов моделей мы разработали новый вариационный метод, в котором применяется концепция сопряженных интегрирующих множителей. Это еще один фундаментальный аспект применения сопряженных задач в рамках вариационных технологий моделирования. Его идея основана на использовании их решений в роли интегрирующих множителей для построения высокоточных численных схем, согласованных в прямых и сопряженных вариантах [21-23]. В результате получают гибридные дискретно-аналитические схемы, обладающие свойствами аппроксимации, устойчивости и безусловной монотонности, как для операторов конвекции-диффузии, так и для операторов трансформации различных субстанций из пространств функций состояния моделей процессов. С позиций организации вычислительных технологий такие схемы удобны для исследования разномасштабных процессов с высокой пространственно-временной изменчивостью.

В методологии усвоения данных мониторинга, фундаментальное свойство разрабатываемых нами вариационных принципов со слабыми ограничениями состоит в том, что на их основе получают прямые безытерационные алгоритмы вариационного усвоения в реальном времени всех доступных данных наблюдений, включая данные в виде изображений. Такие методы пока не имеют аналогов в мире.

В заключение заметим, что разрабатываемые вариационные принципы представляют универсальный инструмент для создания технологии математического моделирования для решения научных и практических задач на основе совместного использования моделей исследуемых процессов и результатов их мониторинга в реальных условиях. При наличии неопределенностей в моделях и входных данных удобно работать с вариационными принципами в формулировке со слабыми ограничениями. Такой подход позволяет построить эффективные и согласованные методы решения прямых, сопряженных и обратных задач по заданным целевым критериям и с количественными оценками влияния неопределенностей. Области их применения: задачи геофизической гидротермодинамики, физика атмосферы и водных объектов, охрана окружающей среды, процессы в живых и технических системах и т.д.

Литература

1. *Марчук Г. И.* Численные методы расчёта ядерных реакторов. М.: Атомная энергия, 1958. 162 с.
2. *Марчук Г.И.* Численное решение задач динамики атмосферы и океана. Л.: 1974; 303 с.
3. *Марчук Г.И.* Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М., Наука, 1982, 319 с.
4. *Марчук Г. И.* Сопряжённые уравнения и анализ сложных систем. М., Наука, 1992, 334 с.
5. *Пененко В.В.* Вычислительные аспекты моделирования динамики атмосферных процессов и оценки влияния различных факторов на динамику атмосферы // В сб. Некоторые проблемы вычислительной и прикладной математики. Новосибирск, Наука. 1975, 61-76.
6. *Пененко В.В., Образцов Н.Н.* Вариационный метод согласования полей метеорологических элементов // Метеорология и гидрология, №11, 1976, с. 3-16.
7. *Пененко В.В.* Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л. , Гидрометеиздат, 1981, 352 с.
8. *Marchuk G.I., Penenko V.V.* Application of perturbation theory to problems of simulation of atmospheric processes// In: Monsoon dynamics (Joint IUTAM/IUGG International Symposium on Monsoon Dynamics, Delhi, 1977.) Eds. J.Lighthill and R.P.Pearce. Cambridge University press, 1981, p. 639-655.
9. *Marchuk G.I., Penenko V.V.* Application of optimization methods to the problem of mathematical simulation of atmospheric processes and environment// in G.I.Marchuk (ed.), Modelling and Optimization of

- Complex Systems: Proc. of the IFIP-TC7 Working conf., Springer, New York, 1978, pp.240-252.
10. *Марчук Г.И., Пененко В.В.* Исследование чувствительности дискретных моделей динамики атмосферы и океана. // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана, 1979, т.15, № 11, с.1123- 1131.
 11. *Le Dimet F., Talagrand O.* Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects // Tellus, 1986, vol. 38A, p. 97-110.
 12. *Lewis J.M., Derber J.C.* The use of adjoint equations to solve a variational adjustment problem with advective constraints// Tellus 37A, 1985, p. 309-322.
 13. *Talagrand, O. and Courtier P.* Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. I: Theory// Quart. J. Roy. Meteor. Soc., 1987, vol. 113, p. 1311-1328.
 14. *Navon I.M.* Data assimilation for numerical weather prediction: A review// Data Assimilation for Atmospheric, Oceanic and Hydrologic Appl, 2009, vol.1, p. 21-65.
 15. *M. Bocquet, H. Elbern, H. Eskes et al.* Data assimilation in atmospheric chemistry models: current status and future prospects for coupled chemistry meteorology models// Atmos. Chem. Phys., 15, 5325-5358, 2015 www.atmos-chem-phys.net/15/5325/2015/ doi:10.5194/acp-15-5325-2015.
 16. *Пененко В.В.* Системная организация математических моделей для задач физики атмосферы, океана и охраны окружающей среды. Новосибирск, Препринт ВЦ СО АН СССР №619, 1985, 43 с.
 17. *Пененко В.В.* Вариационные методы усвоения данных и обратные задачи для изучения атмосферы, океана и окружающей среды// Сиб. журнал вычислит. математики, 2009, Т.12, С. 421-434.
 18. *Пененко В.В.* О концепции природоохранного прогнозирования// Оптика атмосферы и океана, 2010, т. 23, №6, с. 432-438.
 19. *Пененко А.В., Пененко В.В.* Прямой метод вариационного усвоения данных для моделей конвекции-диффузии на основе метода расщепления// Вычислительные технологии, 2014, Т.19, №4, с. 69-83.
 20. *Penenko, V., Baklanov, A., Tsvetova, E., and Mahura, A.* Direct and Inverse Problems in a Variational Concept of Environmental Modeling//Pure Appl. Geophys., 2012, v.169, 447-465.
 21. *V. Penenko, E. Tsvetova.* Discrete-analytical methods for the implementation of variational principles in environmental applications// Journal of Computational and Applied Mathematics 226 (2009) 319-330.

22. *Penenko, V.V., Tsvetova E.A.* Variational methods of constructing monotone approximations for atmospheric chemistry models// Numerical analysis and applications, 2013, vol. 6, p. 210-220.
23. *Penenko, V.V., Tsvetova, E.A., Penenko A.V.*, Variational approach and Euler's integrating factors for environmental studies// Computers and Mathematics with Applications, 2014, vol. 67, p. 2240-2256.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ПОПОЛНЕНИЯ ПОПУЛЯЦИИ С ПЕРЕМЕННОЙ СКОРОСТЬЮ РОСТА В РАННЕМ ОНТОГЕНЕЗЕ¹

Переварюха А.Ю.* , Дубровская В.А.**

* Санкт-Петербургский институт информатики и автоматизации РАН, Санкт-Петербург

** Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург

I Введение

Статья посвящена разработке вычислительной модели популяционного процесса с учетом некоторых специфических условий протекания репродуктивного цикла и формирования поколений в раннем онтогенезе анадромных рыб. Вычислительное исследование предлагаемых систем уравнений предполагается проводить в рамках решаемых прикладных задач с использованием формализма гибридных автоматов.

II Теорема Сингера и методы прогнозирования уловов

Для динамики численности биологических сообществ характерно саморегулирование. Внутрипопуляционным механизмом регуляции, влияющим на динамику популяций осетровых рыб и лососёвых, является сложная зависимость между нерестующим на ограниченных русловых участках с пригодным грунтом запасом и формирующимся от него новым поколением. В ихтиологии предлагались математические модели для формализации зависимости пополнения R от запаса S (stock-recruitment), в частности, известна модель У. Рикера:

$$R = aSe^{-bR},$$

где a — безразмерный параметр, характеризующий репродуктивный потенциал популяции; b — отражает влияние лимитирующих зависящих от плотности факторов. Проблема несоответствия прогнозов и данных наблюдений связана с тем, что не анализировались свойства динамической системы $M \langle \Omega, t, \psi \rangle$, где оператор эволюции $\psi(R; \mathbf{a})$ есть формализация некоторой параметрической зависимости между основными величинами, характеризующими развитие популяционного процесса, и в случае итераций модели

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ грант №15-07-01230.

Рикера: $R_{n+1} = aR_n \exp(-bR_n)$ для M наблюдается возникновение топологически неэквивалентных фазовых портретов.

Условие первого метаморфоза поведения M определяется тем, когда производная в неподвижной точке x^* перестанет удовлетворять критерию устойчивости $|\psi'(x^*)| < 1$, следующему из теоремы Гробмана-Хартмана. Для однопараметрического семейства отображений $\psi : I \rightarrow I$ класса гладкости C^2 с условиями: $\psi'_x(x^*) = v(a)$, $\psi'(x) \neq 0$ если $x \neq c$, $\psi''(c) \neq 0$ при $a = \bar{a}$ таком что $\psi'(x^*) = -1$ наблюдается следующая ситуация для $\psi^2(x)$ в теряющей устойчивость x^* :

$$\frac{d\psi^2(x^*)}{dx} = 1, \tag{1}$$

$$\frac{d^2\psi^2(x)}{dx^2} = \psi''(\psi(x))(\psi'(x))^2 + \psi'(\psi(x))\psi''(x),$$

$$\frac{d^2\psi^2(x^*)}{dx^2} = 0. \tag{2}$$

Следовательно, $d\psi^2(x)/dx$ при $a = \bar{a}$ имеет в x^* локальный экстремум, который при выполнении $d^3\psi^2(x)/dx^3 < 0$ будет максимумом и тогда с появлением двух неподвижных точек x_1^*, x_2^* для $\psi^2(x)$ возникает бифуркация удвоения периода.

Дифференциальный инвариант Шварца:

$$H_\psi = \frac{\psi'''(x)}{\psi'(x)} - \frac{3}{2} \left(\frac{\psi''(x)}{\psi'(x)} \right)^2.$$

обладает свойством сохранять знак при итерациях, если $H_f < 0$ то $H_{f^n} < 0$, а с учетом (1) и (2) получаем:

$$H_{\psi^2(x^*)} = \frac{d^3\psi^2(x)}{dx^3}.$$

Легко показать, что для модели Рикера $H < 0$ при $x \in \mathbb{R}$.

При плавном увеличении бифуркационного параметра в области значений $a > e^2$ происходит переход к хаосу через каскад бифуркаций удвоения периода. Изменение поведения системы через бесконечный каскад бифуркаций известно как сценарий М. Фейгенбаума. Подобный переход к хаосу реализуется в дифференцируемых одномерных отображениях при выполнении критериев теоремы Д. Сингера [1] доказавшего, что отображение унимодальной функции с сохраняющим знак $H_\psi < 0$ (критерии Сингера) может иметь не более одной устойчивой периодической траектории и эта траектория является ω -предельным множеством для точки $c : \psi'(c) = 0$.

III Зависимость выживаемости и прироста

Самая простая модель численности поколения $N(t)$ исходит из дифференциального уравнения пропорциональной смертности, и задает экспоненциальную кривую убыли с одним параметром:

$$\frac{dN}{dt} = -zN, N(t) = N_0 e^{-zt}.$$

С экспоненциальной убылью исходной генерации приблизительно согласуются данные о массовых видах мелких короткоцикловых рыб озер и водохранилищ. Для разных видов рыб темп убыли должен варьироваться по мере развития особей, наиболее резко выражаться у молоди короткоцикловых пелагических рыб, подверженных биотическому прессу на всем жизненном цикле. Для крупных осетровых и лососевых модели формирования поколений являются важным средством оценки перспектив восстановления численности из-за нерационального промысла.

Основываясь на данных наблюдений за «покатной» миграцией молоди волжских осетровых рыб в годы с различным объемом стока воды в половодье и отметив сдвиги пика прохождения мигрирующей к морю молоди мы предложили модель с двумя мгновенными коэффициентами смертности в уравнении убыли:

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = -(\alpha w(t)N(t) + \theta(S)\beta) N(t) \\ \frac{dw}{dt} = \frac{g}{N + \zeta}, \theta(S) = \frac{1}{1 - \exp(-cS)} \\ \frac{dg}{dt} = rg - \frac{rg^2}{G} - \nu N(t), \end{cases} \quad (3)$$

где: S – величина нерестового запаса; $w(t)$ – отражает уровень размерного развития поколения, влияющий на увеличение пищевых потребностей; В третьем уравнении g – описывает динамику количества доступных кормовых объектов согласно известному уравнению Ферхюльста-Пирла с учетом выедания корма молодью $\nu N(t)$; убывающая функция $\theta(S) \rightarrow 1$ при $S \rightarrow \infty$, слабо влияет на вычисление итогового пополнения $N(T)$, если численность запаса достаточно велика. Функционал предназначен для моделирования резкого снижения эффективности воспроизводства при деградации популяции, важного для благополучия осетровых; ζ – параметр, учитывающий ограничение темпов развития, не зависящие от численности; c – параметр, характеризующий степень выраженности эффекта Олли; α – мгновенный коэффициент компенсационной смертности; β – мгновенный коэффициент декомпенсационной смертности; $t \in [0, T]$ – специфичный для биологического вида интервал уязвимости.

График зависимости, полученный при численном решении задачи Коши для всех $S \in \mathbb{Z}^+$ с начальными условиями $w(0) = w_0, g(0) = 0.5G, N(0) =$

λS , где λ – средняя плодовитость особей, представляет унимодальную кривую с уменьшающимся наклоном ниспадающей правой ветви (при параметрах $\alpha = 0.8 \times 10^{-14}$, по средней плодовитости волжской севрюги за время наблюдений $\lambda = 227 \times 10^3$, $c = 2.5 \times 10^{-3}$, $G = 125000$, $T = 55$ сут.). Кривая имеет ненулевую горизонтальную асимптоту, две точки перегиба и две нетривиальные точки пересечения с биссектрисой координатного угла.

IV Схема представления модельного времени

Изучение биологических особенностей осетровых привело к выводам о существенном влиянии быстрых изменений в их онтогенезе, имеющем экспериментальное подтверждение в работах по исследованию смены этапов развития организмов. В современных условиях развития вычислительной математики для решения задачи создания модели, учитывающей метаморфозы в жизненном цикле, целесообразно воспользоваться представлением модельного времени:

$$\tau = \bigcup_n \{Gap_pre_n, [T_{n-1}, T_n], Gap_post_n\},$$

где *Gap_pre* – «временная щель» для вычисления согласованных начальных условий и проверки предиката на левом конце промежутка очередного длительного поведения; *Gap_post* – аналогичная «щель», где определяются новые начальные условия на правом конце текущего промежутка τ_i для решения следующей по порядку или выбранной по условиям предиката задачи Коши. T_i – время срабатывания перехода: в которой становится истинным предикат события, приводящего к смене поведения. При достижении особых состояний в пространстве переменных состояния (событий) могут изменяться значения параметров в правых частях, форма правой части или число уравнений. События описываются предикатами, определенными на решениях дифференциальных уравнений и позволяющими вычислительное среде выделять из всего множества состояний системы то, которое приводит к изменению поведения. Конечное множество интервалов между событиями и будут соответствовать моделируемым стадиями развития. Для их исследования гибридных систем разработаны специальные алгоритмы [2]. Удобной формой представления непрерывно-дискретных систем является гибридный автомат, расширение идеи дискретных карт состояний с условными переходами, где узлам графической формы сопоставлены процессы, описываемые дифференциальными уравнениями.

V Предикативно изменяемая скорость роста

В случае важной роли метаморфозов у молоди анадромных рыб на первый взгляд логично организовать прямое переопределение коэффициентов

мгновенной смертности в первом уравнении (3) по мере наступления фиксированных отрезков времени T_k . Мы опробовали данный метод в [3], столкнувшись с трудоемкой работой по параметрической идентификации, и предлагаем другой подход. Идея заключается в описании резких изменений скорости роста при смене этапов, что опосредованно влияет на выживаемость. Именно скорость роста особей определяет момент выхода поколения из-под действия превалирующих на данном этапе онтогенеза факторов смертности. Второе уравнение для скорости размерного развития $w(t)$ из системы (3) заменим гибридной структурой с дважды предикативно переопределяемой правой частью:

$$\frac{dw}{dt} = \begin{cases} q, 0 < t < \tau \\ \frac{g}{\sqrt{N + \zeta}}, t > \tau, w(t) < w_{k1} \\ \eta w(t) - V \sqrt{w(t)}, w_{k1} < w(t) < w_k \end{cases} \quad (4)$$

где $[0, \tau)$ – длительность периода развития до резобриции желточного мешка, определяемая биологическими особенностями вида (для осетровых в среднем 8 суток) с линейным коэффициентом q ; w_k – интерпретируется как уровень развития, при достижении которого изменяется характер метаболизма из-за смены характера питания, что влияет на выход из под пресса доминирующего хищника и продолжительность интервала уязвимости.

VI Заключение

При переходе к третьей модельной стадии развития полагается, что скорость роста свободно мигрирующей молодежи не определяется более плотностью и может описываться известным уравнением Л. фон Бергаланфи, где коэффициенты анаболизма η и катаболизма V определились для многих видов животных. На первых стадиях жизненного цикла происходит помимо роста формирование систем жизнедеятельности организма, тогда как на последующих рост и половое созревание. Вполне оправдано разделять понятия и соответствующего уравнения для условного размерного развития молодежи на ранних стадиях онтогенеза и роста уже сформировавшихся особей.

Работа проводится в рамках проектов РФФИ.

Литература

1. *Singer D.* Stable orbits and bifurcations of the maps on the interval // SIAM journal of applied math. 1978. Vol. 35. P. 260–268.
2. *Сениченков Ю.Б.* Численное моделирование гибридных систем.— СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2004. 206 с.

3. *Переварюха А. Ю.* Разработка вычислительных моделей воспроизводства рыб для сценарного исследования // Таврический Вестник Информатики и Математики. 2014. № 1. С. 93-103.

КОРРЕКЦИЯ И ВЕРИФИКАЦИЯ НЕЯВНОЙ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Рязанов А.М., Кондаков В.Г.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики, Москва

Введение

В работе рассматривается один из неявных алгоритмов решения уравнения теплопроводности, обладающий минимальным вычислительным шаблоном и свойством безусловной устойчивости. Предлагается его модификация в виде добавления в алгоритм дополнительной процедуры коррекции вычисляемых переменных, обеспечивающей выполнение законов сохранения для получаемых значений, а также позволяющая в ряде случаев существенно сократить вычислительные затраты без потерь в качестве параллельного кода. Приводятся примеры тестовых расчетов. Проводится верификация и анализ эффективности предложенной модификации. Обсуждается параллельная реализация.

I Математическая модель

Рассмотрим эволюционную задачу расчета распределения температуры T в трехмерной области Ω с границей Γ , на которой заданы общие условия третьего рода:

$$\begin{aligned} c_V(\mathbf{r}) \frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{q} &= F(\mathbf{r}) \text{ при } \mathbf{r} \in \Omega, \\ \mathbf{q} &= \sigma(\mathbf{r}) \operatorname{grad} T \text{ при } \mathbf{r} \in \Omega, \\ \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} + \kappa [T - T_w(\mathbf{r})] &= Q_w(\mathbf{r}) \text{ при } \mathbf{r} \in \Gamma, \\ T &= T_0 \text{ при } t = 0, \mathbf{r} \in \Omega. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь t – время, \mathbf{r} – пространственные координаты, \mathbf{n} – внутренняя нормаль к границе Γ , \mathbf{q} – вектор теплового потока, c_V – теплоемкость, σ – коэффициент теплопроводности, F – функция объемных тепловых источников, T_w – температура поверхности Γ , Q_w – тепловой поток через поверхность Γ , κ – коэффициент теплообмена с поверхностью. Если на части границы $\Gamma_1 \in \Gamma$ задано условие первого рода, то $Q_w = 0, \kappa =$ при $\mathbf{r} \in \Gamma_1$. Если на $\Gamma_2 \in \Gamma$ задано условие второго рода, то $\kappa = 0$ при $\mathbf{r} \in \Gamma_2$.

II Аппроксимация

Для нестационарной задачи (1) строится неявный метод для трёхмерных гексаэдральных неструктурированных расчетных сеток, обобщение которого на случай сеток из произвольных выпуклых многогранников, как представляется, не должен вызывать затруднений.

Сам метод подробно описан в работе [1] и позднее получил название метода слабой аппроксимации. Здесь же изложим его суть и отразим ключевые моменты, чтобы иметь возможность продолжить рассуждения о процедуре коррекции.

С каждой ячейкой ассоциированы значения температуры T , теплоемкости c_V , коэффициента теплопроводности σ и функции тепловых источников F . С узлами ассоциирован вектор потока \mathbf{q} . Для граней вводится понятие плотности теплового потока Q , играющее ключевую роль в алгоритме. Поточковые функции используются как самостоятельные зависимые переменные.

Благодаря приведенному выбору переменных, используемый вычислительный шаблон получается максимально компактным (что облегчает распараллеливание алгоритма). Однако, позволяющим, с одной стороны, корректно аппроксимировать потоки на криволинейных не ортогональных сетках, и, с другой стороны, получить внутренне согласованные аппроксимации дифференциальных операторов, таких как дивергенция и градиент. И как следствие, получить разностный аналог оператора Лапласа, обладающий свойством самосопряженности.

В предположении о том, что грани (нумеруются далее индексом f) ячеек (нумеруются далее индексом c) являются "почти плоскими", для них определяются единичные нормали \mathbf{s} и величины плотностей теплового потока $Q(f) = \mathbf{q} \cdot \mathbf{s}$. Ячейки, содержащие грань, помечаются как "хозяин" и "сосед" для учета знака при вычислениях.

Далее строится естественная и корректная аппроксимация дивергенции вектора \mathbf{q} .

$$\operatorname{div} \mathbf{q} \approx -\frac{1}{V(c)} \sum_{f \in I_f(c)} Q(f) S(f) Z(f, c). \quad (2)$$

А так же дивергентная аппроксимация объема расчетной ячейки $V(c)$

$$V(c) \approx -\frac{1}{3} \sum_{f \in I_f(c)} \left\{ \frac{1}{4} \left[\sum_{n \in I_n(f)} \mathbf{r}_n(f) \cdot \mathbf{s}(f) \right] S(f) Z(f, c) \right\}. \quad (3)$$

В уравнениях (2), (3) $V(c)$ – объем рассматриваемой ячейки c , $S(f)$ – площадь ячейки f , $I_n(f)$ – множество узлов n , принадлежащих грани f , $I_f(c)$ – множество граней, образующих ячейку c , $\mathbf{r}_n(f)$ – радиус-векторы узлов, образующих грань f , $\mathbf{s}(f)$ – нормаль к грани f , направленная в сторону ячейки "хозяина", $Z(f, c)$ – знаковая функция, принимающая значение 1,

если c является ячейкой-хозяином грани f , -1 , если c является ячейкой-соседом, 0 в остальных случаях.

Для аппроксимации закона Фурье (1.2) используется то, что минимальное значение функционала

$$\Phi = \int_{\Omega} (|\mathbf{q}|^2/\sigma - 2T \operatorname{div} \mathbf{q}) d\Omega + \int_{\Gamma} (q_n^2/\kappa - 2T_w q_n) d\Gamma, \quad (4)$$

$$q_n = \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$$

достигается при выполнении следующих соотношений:

$$\mathbf{q}/\sigma = -\operatorname{grad} T \text{ в области } \Omega, q_n/\kappa = T - T_w \text{ на границе } \Gamma. \quad (5)$$

Здесь T гладкая функция, заданная в области с гладкой границей.

Корректная аппроксимация функционала (4) является источником расчетных формул, связывающих значения плотности теплового потока Q через грани со значениями температуры T в ячейках.

Приведенный интеграл (4) представляет собой сумму двух объемных и одного поверхностного. В то время как аппроксимация второго и третьего слагаемых проводится без труда с использованием формулы (2), аппроксимация квадрата модуля вектора \mathbf{q} представляет определенную сложность. Выполняется она введением в узлах ячейки локальных базисов, составленных из нормалей к граням, образующим трёхгранный угол, содержащий рассматриваемый узел. Определение дуального к нему базиса, и получение выражения, связывающее компоненты вектора теплового потока в узле с плотностями теплового потока через грани, которым принадлежит данный узел.

После чего интеграл по объему ячейки сетки от квадратичного члена \mathbf{q}^2/σ в (4) аппроксимируется взвешенной суммой значений этой величины в узлах, образующих ячейку:

$$\int_{V(c)} |\mathbf{q}|^2/\sigma d\Omega \approx \frac{V(c)}{8\sigma(c)} \sum_{n \in I_n(c)} |\mathbf{q}(n, c)|^2 \quad (6)$$

Проделанные операции позволяют получить выражение для аппроксимации закона Фурье и соотношения, связывающие температуру T в ячейках и плотности тепловых потоков Q через грани, следующего вида.

$$a(f)Q(f) + b(f) = g_T(f), b(f) = \sum_{f_k \in I_f(f)} b(f_k)Q(f_k), \quad (7)$$

$$I_f(f) = I'_f(c_{1f}) \cup I'_f(c_{2f})$$

Замечательным свойством данных соотношений является то, что ассоциированные с гранями величины $a(f)$ и $b(f_k)$ – постоянные, зависящие лишь

от геометрических характеристик ячейки-хозяина и ячейки-соседа. Суммирование в выражении для параметров $b(f)$ проводится по множеству $I_f(f)$, состоящему из множества $I'_f(c_{1f})$ всех граней f_k , прилегающих к грани f стороны ячейки-хозяина, и множества граней $I'_f(c_{2f})$, прилегающих к f со стороны ячейки-соседа. Если грань f принадлежит границе области, то в суммировании участвует лишь множество граней $I'_f(c_{1f})$.

III Неявная схема

Аппроксимируем теперь задачу (1) в каждой ячейке c и на каждой грани f сетки разностной схемой

$$c_V \frac{\bar{T}(c) - T(c)}{\tau} - \frac{1}{V(c)} \sum_{f \in I_f(c)} \bar{Q}(f) S(f) Z(f, c) = F(c),$$

$$a(f) \frac{\bar{Q}(f) - Q(f)}{\omega} + a(f) Q(f) + \sum_{f_k \in I_f(f)} b(f_k) Q(f_k) = g_{\bar{T}}(f). \quad (8)$$

Здесь и далее τ – шаг по времени, черта сверху помечает значения функций на верхнем временном слое, а ω – релаксационный параметр.

Решение системы уравнений (8) проводится следующим образом. Пусть на некотором временном слое значения \bar{T} в ячейках и Q на гранях известны. С помощью исключения из (8) величин \bar{Q} можно получить систему линейных алгебраических уравнений для величин \bar{T} с хорошо обусловленной симметричной матрицей, в каждой строке которой лишь диагональный элемент H_0 и шесть внедиагональных элементов $H_k (k = 1, \dots, 6)$ отличны от нуля.

После решения линейной задачи новые значения \bar{Q} легко находятся с помощью соотношения (8):

$$\bar{Q}(f) = (1 - \omega) Q(f) + \omega [g_{\bar{T}} - b(f)] / a(f). \quad (9)$$

Среди преимуществ данного подхода особо выделяются следующие:

- дивергентная аппроксимация объемов криволинейных ячеек;
- согласованная с объемами консервативная аппроксимация оператора дивергенции;
- использование естественных потоковых переменных;
- безусловная устойчивость алгоритма;
- самосопряженность, положительная определенность и максимальная компактность эллиптического оператора, обращаемого на каждом временном шаге.

IV Верификация

Метод был реализован авторами. При создании кода использовались язык C++, технология MPI, библиотека сеточных данных MOAB для управления данными на распределённых по процессорам неструктурированных расчетных сетках, векторно-матричные операции и решатель СЛАУ из библиотеки для параллельных научных вычислений PETSc, прямой решатель из библиотеки MUMPS. Код показал хорошую масштабируемость. Для верификации были выбраны два тестовых расчета, обладающих известным аналитическим решением.

IV.1 Процесс эволюции сингулярной функции во времени.

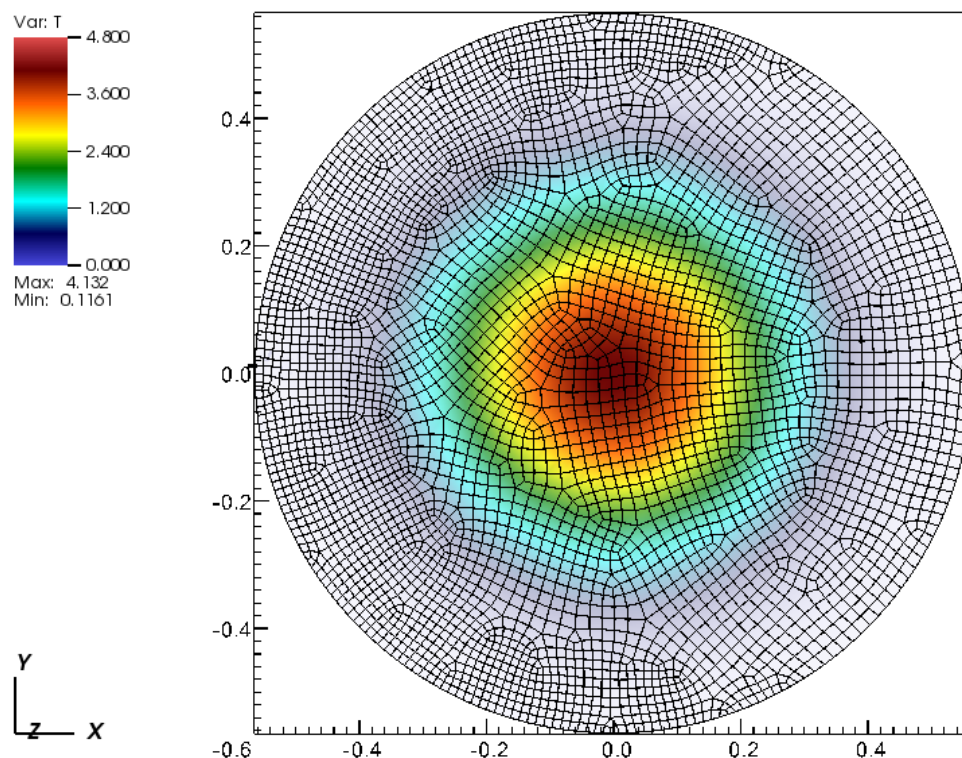


Рис. 1. Распределение температуры с наложением расчетной сетки

Для проведения теста в качестве расчетной области была выбран цилиндр с искривленной и намеренно "испорченной" сеткой на нем. В ячейке, расположенной в середине области, задаётся температура таким образом, чтобы интеграл от температуры по всей области был равен единице при условии, что в остальных ячейках области температура задаётся нулевой. Расчет продолжается 100 шагов по времени, выбранных таким образом, чтобы влиянием граничных условий на распределение температуры можно было пренебречь. После проведения расчета, полученные данные должны

соответствовать аналитическому решению в соответствии с формулой:

$$\Phi(x, t) = (4t\pi)^{\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{|x|^2}{4t}\right). \quad (10)$$

n – размерность области расчета. На рисунке 1 изображена расчетная область с сеткой и распределением температуры после 100 шагов по времени.

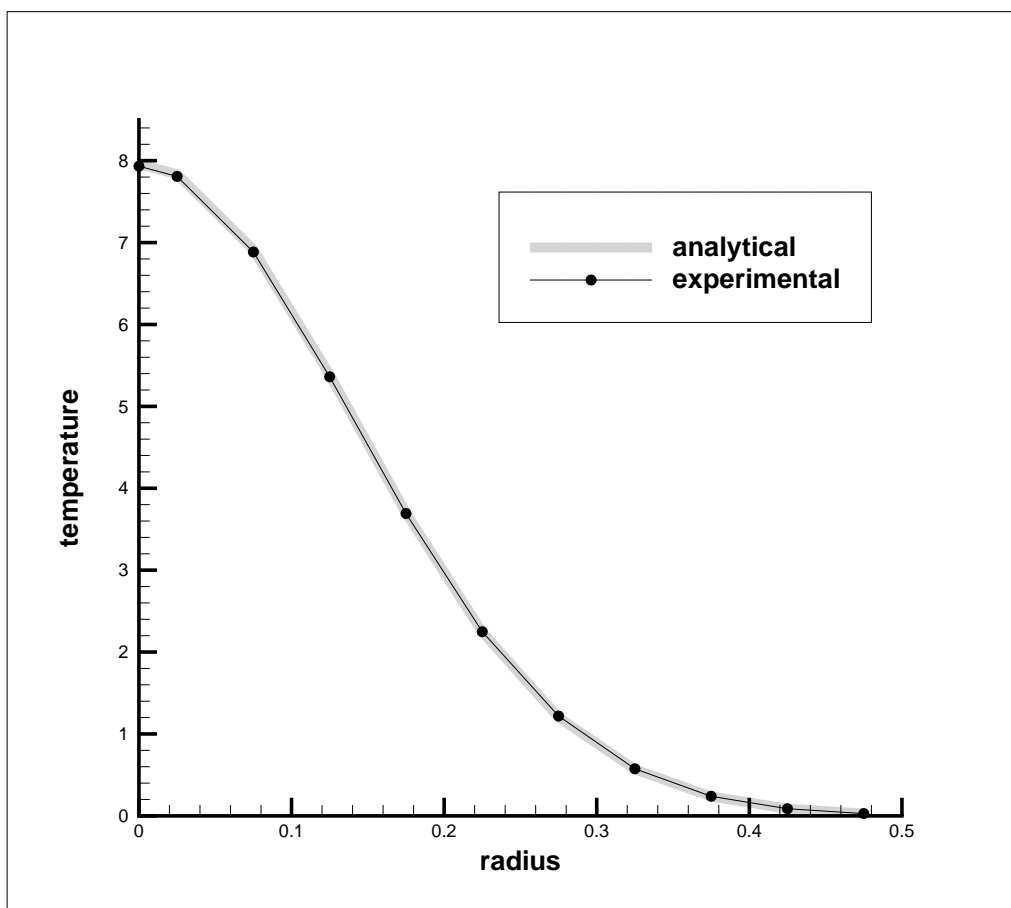


Рис. 2. Радиальное распределение температуры в сравнении с аналитическим решением

Рисунок 2 содержит график распределения температур после проведения расчета и аналитическое решение. Как видно, результат расчёта хорошо совпадает с аналитическим решением. При расчетах в трехмерной области (сфера) получены аналогичные результаты.

IV.2 Теплопроводность в квази-бесконечной пластине.

Тест взят из верификационной библиотеки тестов программного пакета ANSYS FLUENT (ANSYS Fluid Dynamics Verification Manual), где в свою очередь, приводится ссылка на работу [3]. Моделируется процесс нагревания тонкой медной балки. В начальный момент времени пластина нагрета равномерно, и к одному из её краёв подводится источник, порождающий

тепловой поток. После двух минут протекания процесса в качестве проверочного значения рассматривается распределение температуры.

Параметры расчета. Плотность меди 8995.67 кг/м^3 . Удельная теплоёмкость 381 Дж/кгК . Теплопроводность (проводимость) 401 Вт/мК . Размеры пластины $750 \text{ мм}/300 \text{ мм}$ (выбранные размеры достаточно велики, чтобы предположить пластину полу-бесконечной в направлении распространения тепла). Граничные условия:

- тепловой поток 300000 Вт/м^2 на левой стенке;
- противоположная (правая) стенка задана адиабатической;
- боковые поверхности пластины моделируются симметричными или периодическими граничными условиями.

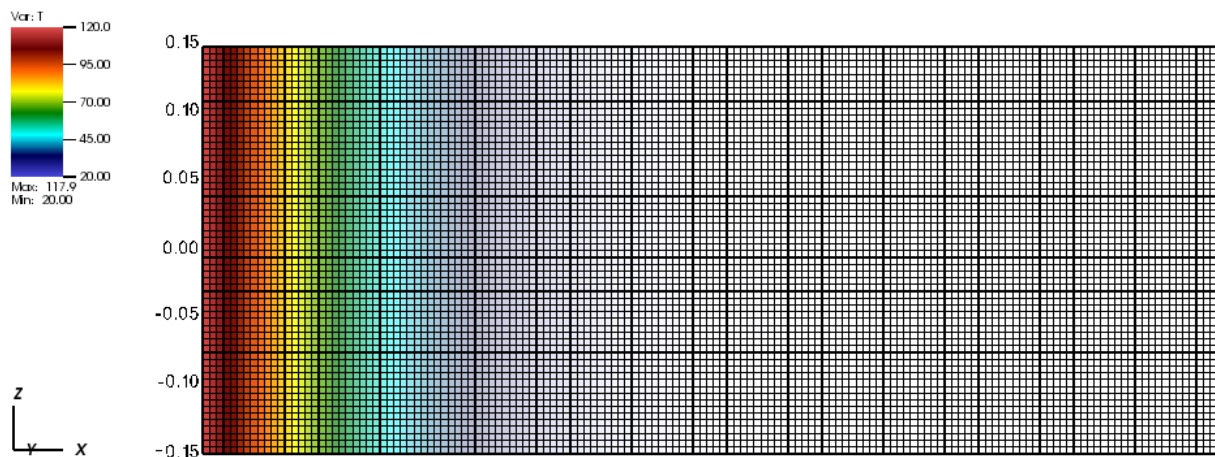


Рис. 3. Распределение температуры с наложением расчетной сетки

Для проведения расчета была выбрана ортогональная равномерная сетка. На рис.3 изображена пластина с сеткой и распределением температуры после двух минут протекания процесса. В таблице1 приводятся результаты сравнения полученных результатов с эталонными.

Таблица 1. Результаты тестирования

	Точное решение K	Результаты расчета K	Отношение
Температура нагреваемой стенки	393	393.6	99.84
Температура на удалении 0.15м от нагреваемой стенки	318.4	319	99.81

Результаты тестирования представляются нам весьма удовлетворительными.

V Коррекция

Построенный метод хорошо себя зарекомендовал на практике, оказавшись вполне пригодным для решения задач индустриальной математики. Однако, неизменно актуальным для любого вычислительного кода является вопрос его эффективности. Ведь использование неявного метода большими шагами по времени является оправданным только в том случае, если сложность вычислений для реализации этого одного большого шага не превосходит суммарной сложности вычислений всех малых шагов явной схемы, дающих в сумме этот большой шаг.

При исследовании этого аспекта в первую очередь встаёт вопрос о трудозатратах на обращение оператора, входящего в уравнение для температуры. В настоящее время существует множество пакетов-солверов (PETSc, MUMPS, SUPERLU и др.), предоставляющих возможность обращаться матрицы прямыми (LU, ILU и др.) и итерационными (cg, gmres, bicgstab, algmultigrid и др.) методами на вычислительных машинах с массивно-параллельной архитектурой сравнительно эффективно. Однако, очевидно, что сложность обращения данного оператора растёт нелинейно с ростом размерности задачи и зачастую является вычислительным ядром всего алгоритма. Поэтому задача снижения нагрузки на решатель при реализации неявного метода является чрезвычайно актуальной.

Оказалось, что у этой проблемы есть во многих случаях эффективное решение, которое заключается во введении дополнительной процедуры коррекции после каждого шага по времени.

Из уравнения 8.1 выразим значения температуры с нового слоя.

$$\bar{T}(c) = T(c) + \frac{\tau}{c_V} \left[\frac{1}{V(c)} \sum_{f \in I_f(c)} \bar{Q}(f) S(f) Z(f, c) + F(c) \right]. \quad (11)$$

Получив значения q_n после окончания вычислений по исходному методу, подставим их в (11), что даст нам новые скорректированные значения температур $\tilde{T}(c)$. После этого по формуле (9) находятся соответствующие скорректированные значения потоков $\tilde{Q}(f)$.

Смысл описанной процедуры заключается в том, что подставляя полученные значения потоков $\tilde{Q}(f)$ в закон сохранения, мы получаем дивергенизированные значения температур $\tilde{T}(c)$, отвечающих закону сохранения. Дополнительный выигрыш заключается в том, что отпадает необходимость решать полученное СЛАУ для температур точными прямыми методами. Становится достаточно лишь уменьшить невязку на несколько порядков, чтобы получить приемлемое качество решения.

Преимущество подобного подхода заключается в том, что введя дополнительную процедуру коррекции, а следовательно и дополнительную вычислительную сложность алгоритма, мы разгружаем солвер, позволяя ему не

обращать матрицу точно, а лишь выполнить несколько итераций. Прямое решение СЛАУ большой задачи растёт нелинейно и занимает существенно больше времени, чем пара дополнительных вычислений дивергенции и потоков в процедуре коррекции. И даже прибавив к сложности коррекции сложность проделанных итераций солвера, мы получим существенный прирост в скорости вычислений.

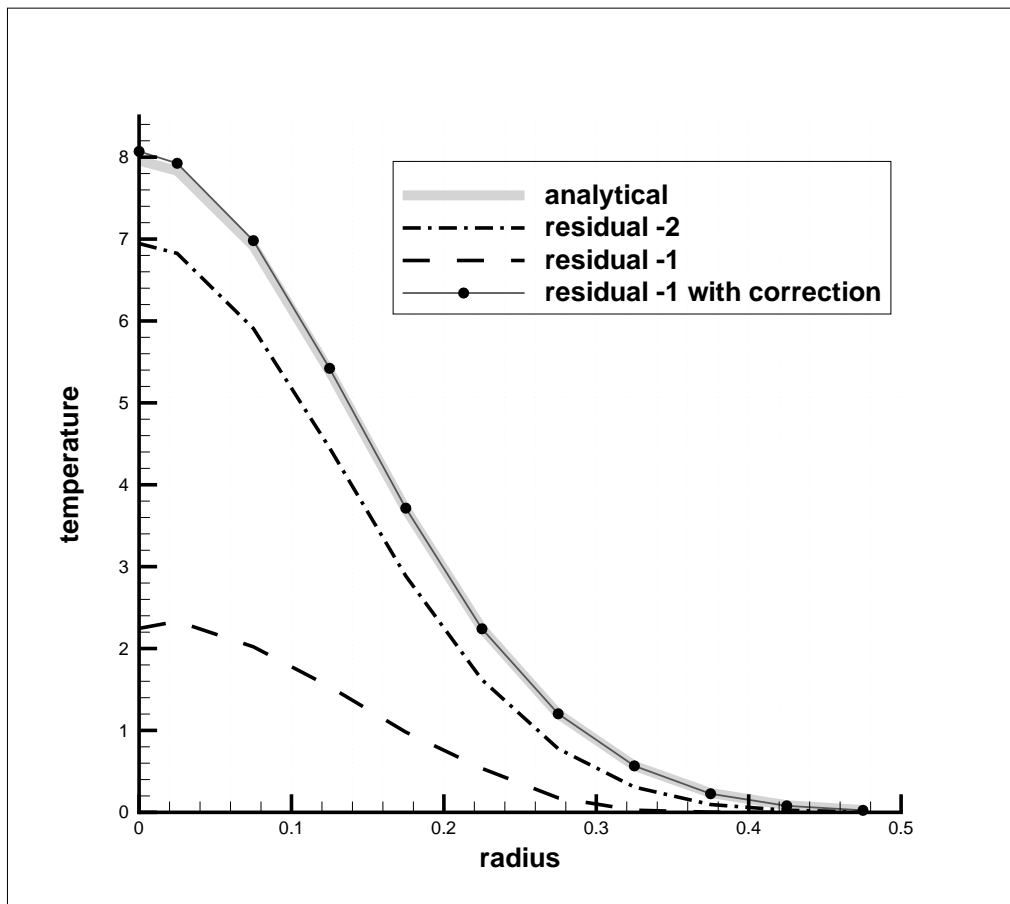


Рис. 4. Сравнение температуры в радиальном направлении

Рассмотрим действие коррекции на примере эволюции сингулярной функции. При использовании точного прямого решателя СЛАУ после n шагов по времени τ , мы получаем отклонение результата численного эксперимента от аналитического значения не более одного процента во всех точках сетки. Если заменить точный решатель итерационным, понижающим значение невязки всего на порядок или два, то решение после n шагов существенно портится. Если же применить процедуру коррекции, результат опять приобретает прежнее качество. На рисунке 4 отображены графики распределения температуры по окончании расчетов при использовании итерационного солвера, понижающего значение невязки на один порядок (черная пунктирная линия), на два порядка (черная линия точка-тире), на один порядок с применением процедуры коррекции (черная сплошная линия), аналитическое решение (серая сплошная линия). Хорошо видно, что после

включения коррекции результаты эксперимента хорошо ложатся на аналитическую кривую. Практика показала, что процедура коррекции также позволяет использовать при расчетах бóльшие шаги по времени при сохранении точности расчетов.

VI Заключение

В настоящей работе был рассмотрен метод, предложенный в [1]. Алгоритм был реализован для многопроцессорных вычислительных комплексов с использованием актуального на данный момент инструментария библиотек и пакетов прикладных программ (C++, MPI, MOAB, PETSc, MUMPS). Реализованный код показал удовлетворительные результаты масштабируемости. Были проведены тестовые расчеты на неструктурированных криволинейных расчетных сетках в трехмерных областях, показавшие хорошее совпадение полученных экспериментальных данных с аналитическим решением. Предложена процедура коррекции алгоритма, обеспечивающая удовлетворение выполнения закона сохранения для вычисляемых величин, а также позволяющая существенно сократить вычислительные затраты на каждом шаге по времени.

Литература

1. *Головизнин В.М., Котеров В.Н., Кривцов В.М.*, Расчет уравнения теплопроводности на неструктурированных криволинейных сетках, // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 51:11 (2011), 2075–2083
2. *Коршия Т.К., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П., Шашков М.Ю.*, Вариационный подход к построению разностных схем для уравнения теплопроводности на криволинейных сетках, // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 20:2 (1980), 401–421
3. *Incropera F.P., Dewitt D.P., Bergman T.L., and Lavine A.S.*, // *Introduction to Heat Transfer*, 5th Edition, Wiley & Sons, 2007; P. 283.

МЕТОД РЕШЕНИЯ ВНЕШНЕЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ЛАПЛАСА¹

Савченко А.О.* , Ильин В.П.*,** , Бутюгин Д.С.*

* *Институт вычислительной математики и
математической геофизики СО РАН, Новосибирск,*

** *Новосибирский государственный университет, Новосибирск*

I Постановка задачи и метод решения

Рассмотрим открытую область D в пространстве \mathbb{R}^3 , ограниченную липшицевой поверхностью ∂D , $\partial D = \partial D_1 \cup \partial D_2$, ∂D_2 – гладкая поверхность. Внешняя краевая задача для уравнения Лапласа состоит в нахождении функции $u \in C^1(\mathbb{R}^3 \setminus D) \cap C^2(\mathbb{R}^3 \setminus \bar{D})$, равномерно стремящейся к нулю на бесконечности, удовлетворяющей решению уравнения

$$\Delta u(\mathbf{r}) = 0, \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \bar{D}, \quad (1)$$

и краевым условиям

$$u(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \partial D_1, \quad \frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \partial D_2. \quad (2)$$

Задача (1) – (2) предполагается решённой, если удастся найти значения искомой функции u_S на поверхности сферы ∂S , являющейся границей шара $\bar{S} = S \cup \partial S$, $\bar{D} \subset S$. Действительно, в этом случае можно найти значения функции в произвольной точке пространства $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \setminus \bar{D}$ в сферических координатах в виде интеграла Пуассона [1]

$$u(r, \theta, \varphi) = \frac{R}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta_0 \int_0^{2\pi} u_S(\theta_0, \varphi_0) \frac{|r^2 - R^2|}{(r^2 - 2Rr \cos \gamma + R^2)^{3/2}} d\varphi_0 d\theta_0, \quad (3)$$

где R – радиус сферы ∂S , $\mathbf{r}_0 \in \partial S$, $r_1 = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| = \sqrt{r^2 - 2Rr \cos \gamma + R^2}$, γ – угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{r}_0 , $\cos \gamma = \cos \theta \cos \theta_0 + \sin \theta \sin \theta_0 \cos(\varphi - \varphi_0)$. Формула (3) является основой для предлагаемого итерационного метода решения задачи (1) – (2), который заключается в последовательном решении вспомогательных краевых задач в ограниченных областях.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 14-11-00485). Экспериментальные исследования поддержаны грантом 14-07-00128 Российского фонда фундаментальных исследований.

Введём дополнительную ограниченную область Ω_0 с границей $\partial\Omega_0$ такую, что $\bar{S} \subset \Omega_0$. Будем решать с помощью МКЭ внутреннюю краевую задачу в области $\hat{\Omega}_0 \equiv \Omega_0 \setminus \bar{D}$, при заданных граничных условиях на ∂D и пересчитываемых на каждой итерации краевых условиях на $\partial\Omega_0$. На первой итерации метода задаём нулевые граничные условия на поверхности $\partial\Omega_0$ и решаем внутреннюю краевую задачу для области $\hat{\Omega}_0$. При этом нас будет интересовать решение этой задачи только на поверхности ∂S . По этим значениям определим новые граничные условия на внешней расчётной области $\partial\Omega_0$ по формуле (3), и проведём аналогично вторую и последующие итерации. Отметим, что на разных шагах этого процесса расчётные области для внутренних краевых задач можно выбирать динамическим образом, т.е. на k -ой итерации вместо Ω_0 определить область Ω_{k+1} с границей $\partial\Omega_{k+1}$, $k = 0, 1, \dots, K$. Количество итераций K определяется по условию сходимости метода с заданной точностью $\varepsilon \ll 1$. Выбор области Ω_k , заключающей в себя шар \bar{S} , на второй и всех последующих итерациях производится из соображений экономии вычислительных ресурсов и возможности получения наиболее точного решения на поверхности шара. При этом условие включения $S \subset \Omega_k$ остаётся в силе. На всех последующих итерациях решается внутренняя краевая задача в области $\hat{\Omega}_k \equiv \Omega_k \setminus \bar{D}$ и по формуле (3) новые граничные условия Дирихле на поверхности $\partial\Omega_k$.

II Сходимость итерационного метода

Докажем сходимость предложенного метода. Запишем формулу (3) в виде

$$u(\mathbf{r}) = \int_{\partial S} u_S(\mathbf{r}_0) K_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) d s.$$

Тогда итерационный процесс определяется следующим образом:

$$\begin{cases} \Delta u^{k+1}(\mathbf{r}) = 0, & \mathbf{r} \in \hat{\Omega}_k, \\ u^{k+1}(\mathbf{r}) = \Phi^k(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in \partial\Omega_k, \\ u^{k+1}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in \partial D_1, \\ \frac{\partial u^{k+1}}{\partial n}(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in \partial D_2, \quad k = 0, 1, \dots, \end{cases} \quad (4)$$

где $\Phi^0(\mathbf{r}) = 0$,

$$\Phi^k(\mathbf{r}) = \int_{\partial S} u_S^k(\mathbf{r}_0) K_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) d s, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_k, \quad \mathbf{r}_0 \in \partial S, \quad k = 1, 2, \dots \quad (5)$$

Определим при $\mathbf{r} \in \bar{\Omega}_k \setminus D$ погрешность метода как

$$\omega^{k+1}(\mathbf{r}) = u^{k+1}(\mathbf{r}) - u(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \omega^{k+1}(\mathbf{r}) &= \int_{\partial S} (u_S^k(\mathbf{r}_0) - u_S(\mathbf{r}_0)) K_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) d s = \\ & \int_{\partial S} \omega^k(\mathbf{r}_0) K_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) d s \equiv \varphi^k(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (7)$$

и погрешность будет удовлетворять уравнениям

$$\begin{cases} \Delta \omega^{k+1}(\mathbf{r}) = 0, & \mathbf{r} \in \hat{\Omega}_k, \\ \omega^{k+1}(\mathbf{r}) = \varphi^k(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in \partial \Omega_k, \\ \omega^{k+1}(\mathbf{r}) = 0, & \mathbf{r} \in \partial D_1, \\ \frac{\partial \omega^{k+1}}{\partial n}(\mathbf{r}) = 0, & \mathbf{r} \in \partial D_2. \end{cases} \quad (8)$$

Из принципа максимума и принципа Заремба-Жиро [2] для гармонических функций следует, что максимум погрешности достигается на внешней границе $\partial \Omega_k$ области $\bar{\Omega}_k \setminus D$, и справедлива оценка

$$\max_{\mathbf{r} \in \bar{\Omega}_k \setminus D} |\omega^{k+1}(\mathbf{r})| \leq \max_{\mathbf{r} \in \partial \Omega_k} |\omega^{k+1}(\mathbf{r})| = \max_{\mathbf{r} \in \partial \Omega_k} |\varphi^k(\mathbf{r})|. \quad (9)$$

Поскольку интеграл Пуассона с единичным весом для сферы радиуса R равен R/r при $r > R$, то из (7) следует оценка

$$\max_{\mathbf{r} \in \partial \Omega_k} |\omega^{k+1}(\mathbf{r})| \leq \max_{\mathbf{r}_0 \in \partial S} |\omega^k(\mathbf{r}_0)| \int_{\partial S} K_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) d s \leq \frac{R}{R_0} \max_{\mathbf{r}_0 \in \partial S} |\omega^k(\mathbf{r}_0)|, \quad (10)$$

где R_0 – максимальный радиус шара, вписанного в $\bar{\Omega}_k$, $R_0 > R$. Отсюда следует, что итерационный метод сходится со скоростью геометрической прогрессии с показателем R/R_0 .

III Численные эксперименты и обсуждение результатов

Будем искать численное решение внешней краевой задачи для функции $u(r, \theta, \varphi)$, выбранной в сферических координатах (r, θ, φ) в виде

$$u(r, \theta, \varphi) = \sin \theta \cos \varphi / r^2. \quad (11)$$

Зададим на гранях куба с рёбрами, равными 0.03, граничные условия в соответствии с точным решением (11). Будем полагать, что куб, а также и все последующие в рассмотрении области, ограниченные выбранными поверхностями, имеют центр симметрии в начале координат. На первой итерации выберем границу внешней расчётной области $\partial \Omega_0$ в виде поверхности куба с рёбрами, равными 2, на поверхности которого зададим нулевые граничные условия. В области $\hat{\Omega}_0$, ограниченной поверхностями этих кубов, решается внутренняя задача Дирихле и находятся значения функции на сфере

радиуса 0.25. По этим значениям определяются новые граничные условия на поверхности куба с меньшими рёбрами, равными 0.54, по формуле (3). Далее снова решается задача Дирихле в новой расчётной области $\hat{\Omega}_1$, ограниченной поверхностями кубов с рёбрами 0.03 и 0.54, и определяются новые приближённые значения функции на сфере. На всех итерациях, начиная со второй, расчётные области, расположенные между поверхностями кубов, остаются неизменными, т.е. $\hat{\Omega}_k = \hat{\Omega}_1$, $k = 2, 3, \dots$. Поверхность сферы, на которой ищется приближённое решение, является неизменной на всех итерациях.

Построение конечно-элементных аппроксимаций внутренней задачи Дирихле и решение получаемых СЛАУ проводилось при помощи пакетов FEniCS [3] и PETSc [4]. Для решения использовались H^1 -конформные конечные элементы Лагранжа 2-го порядка на редкой сетке, состоящей из $15.7 \cdot 10^3$ тетраэдров ($N = 31409$), и на густой сетке из $8.3 \cdot 10^5$ тетраэдров ($N = 1151800$), где N – количество базисных функций. Для генерации сетки использовался пакет NETGEN [5].

3.1 Численное решение задачи Дирихле.

Обозначим за ε_a^m среднеквадратичную погрешность отклонения от точного решения на внешней поверхности $\partial\Omega_k$ и на сфере ∂S , вычисленную по формуле

$$\varepsilon_a^m = \sqrt{\frac{\sum_{i,j} (u_a(\theta_j, \varphi_i) - \tilde{u}_a^m(\theta_j, \varphi_i))^2}{\sum_{i,j} u_a^2(\theta_j, \varphi_i)}}, \quad (12)$$

где $u_a(\theta_j, \varphi_i)$ и $\tilde{u}_a^m(\theta_j, \varphi_i)$ – точные и приближённые значения искомой функции в узлах θ_j, φ_i сетки на поверхности сферы и внешней области. Значения индексов у погрешностей и функций принимают значения $a = 1, 2$, соответственно $a = 1$ для погрешности функции на поверхности сферы, $a = 2$ для погрешности функции на внешней поверхности; $m = 0, 1$, соответственно $m = 0$ для редкой сетки, $m = 1$ для густой сетки.

Результаты расчётов представлены в таблице 1.

Приведённые данные иллюстрируют, наряду со сходимостью метода, явное преимущество использования более подробной сетки для получения уточнённых значений искомым функций.

3.2 Численное решение внешней задачи Неймана.

Пусть на поверхности меньшего куба ∂D известно значение нормальной производной, вычисленное из формулы (11). Для численного решения задачи Неймана была использована новая подробная сетка с $1.015 \cdot 10^6$ тетраэдрами. Погрешности решения, вычисленные по формуле (12), приведены в таблице 2.

Анализ данных, приведённых в таблицах 1–2, позволяет сделать вывод, что полученные погрешности уменьшаются при переходе от редкой к густой сетке от 3-х до 4-х раз, что соответствует уменьшению линейных размеров

№ итер.	ε_1^0	ε_1^1	ε_2^0	ε_2^1
1	0.01032	0.01032	0.01034	0.01034
2	0.00622	0.00568	0.00644	0.00588
3	0.00429	0.00342	0.00448	0.00359
4	0.00324	0.00218	0.00338	0.00230
5	0.00264	0.00147	0.00275	0.00155
6	0.00229	0.00105	0.00238	0.00111
7	0.00209	0.00081	0.00216	0.00085
8	0.00197	0.00066	0.00203	0.00069

Таблица 1. Зависимость среднеквадратичных погрешностей решения задачи Дирихле от числа итераций.

№ итер.	ε_1^0	ε_1^1	ε_2^0	ε_2^1
1	0.01059	0.01059	0.01060	0.01060
2	0.00644	0.00582	0.00666	0.00603
3	0.00448	0.00350	0.00467	0.00367
4	0.00342	0.00222	0.00357	0.00234
5	0.00282	0.00149	0.00294	0.00157
6	0.00248	0.00107	0.00257	0.00112
7	0.00228	0.00082	0.00236	0.00086
8	0.00216	0.00067	0.00224	0.00070

Таблица 2. Зависимость среднеквадратичных погрешностей решения задачи Неймана от числа итераций.

тетраэдров при таком переходе: $\sqrt[3]{830/15.7} \approx 3.8$. Для выявления вклада возможных погрешностей в результирующую ошибку численного алгоритма, были посчитаны значения функции на сфере, когда на внешней поверхности $\partial\Omega_1$ были заданы точные граничные условия, вычисленные по формуле (11). Погрешность полученных значений оказалась такого же порядка, как и результирующая погрешность метода после 8 итераций метода. Отсюда можно сделать вывод, что результирующая погрешность метода обусловлена, прежде всего, точностью решения внутренней краевой задачи в $\hat{\Omega}_1$ и будет уменьшаться при сгущении сетки.

В заключение авторы выражают признательность Петухову А.В. за помощь при проведении численных экспериментов.

Литература

1. *Н.С. Кошляков, Э.Б. Глинер, М.М. Смирнов.* Основные дифференциальные уравнения математической физики. // М., Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1962, 767стр.
2. *А.В. Бицадзе.* Краевые задачи для эллиптических уравнений второго порядка // М., Наука, 1966, 203стр.
3. *A. Logg, K.-A. Mardal, G. N. Wells et al.* Automated solution of differential equations by the finite element method // Springer, 2012.
4. *PETSc Web page:* <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
5. *J. Schöberl.* NETGEN An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules // Computing and Visualization in Science, V.1, N.1, pp.41-52, 1997.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНТЕНСИВНЫХ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ МЕТОДОМ ИТЕРАЦИЙ ПО ПОДОБЛАСТЯМ¹

Свешников В.М.

Институт вычислительной математики и математической геофизики, Новосибирский государственный университет, Новосибирск

Введение

Интенсивными называются пучки заряженных частиц, при моделировании которых необходимо учитывать влияние кулоновского расталкивания, что приводит к нелинейной самосогласованной задаче. Важным для практики является случай, когда эмиттер заряженных частиц работает в режиме ограничения тока объемным зарядом [1]. Это означает, что плотность эмиссионного тока заранее не известна, а определяется в процессе решения задачи. При этом возникает прикатодная особенность, состоящая в том, что плотность объемного заряда, вносимого частицами, обращается в бесконечность. Для выделения особенности расчетная область разбивается на две подобласти: прикатодную и основную. В прикатодной подобласти строится аналитическое решение, а в основной подобласти решение находится численно. Центральным является вопрос сшивки подобластей. Для этого применяется подход, согласно которому на границе сопряжения подобластей по аналогии с линейными задачами [2] записывается уравнение Пуанкаре – Стеклова, которое аппроксимируется системой нелинейных операторных уравнений. Её решение в настоящей работе проводится методом Бройдена [3], который требует решения всего лишь одной вспомогательной задачи до проведения итераций по подобластям.

I Постановка задачи

Пусть в замкнутой области $\bar{G} = G \cup \Gamma$, где Γ – граница G , требуется найти решение уравнений движения частиц с зарядом e_i и массой m_i в электрическом поле с напряженностью \vec{E} :

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i, \quad \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \frac{e_i}{m_i} \vec{E}, \quad \vec{E} = -\text{grad } \varphi \quad (1)$$

с начальными условиями

$$\vec{r}_i|_{t=0} = \vec{r}_i^0, \quad \vec{v}_i|_{t=0} = \vec{v}_i^0. \quad (2)$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №14-11-00485)

Здесь \vec{r}_i – координаты, \vec{v}_i – скорости частиц, $i = 1, 2, \dots$ – номер частицы, t – время, r_i^0, v_i^0 – заданные величины. Потенциал электрического поля φ находится из решения нелинейного уравнения Пуассона

$$\Delta\varphi = -\frac{\rho(\varphi)}{\varepsilon_0} \quad (3)$$

с краевыми условиями

$$\varphi|_{\Gamma_1} = g, \quad \frac{\partial\varphi}{\partial n}|_{\Gamma_2} = 0, \quad (4)$$

где ρ – плотность объемного заряда, вносимого частицами, ε_0 – электрическая проницаемость вакуума, g – известная функция координат, Γ_1, Γ_2 – куски границы Γ такие, что $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma$, \vec{n} – внутренняя нормаль к Γ_2 . Плотность тока \vec{j} потока заряженных частиц удовлетворяет уравнениям

$$\operatorname{div} \vec{j} = 0, \quad \vec{j} = \rho\vec{v}, \quad \vec{v} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\sum e_i \vec{v}_i}{\sum e_i}, \quad (5)$$

где \vec{v} – средняя скорость, а суммирование ведется по всем частицам, находящимся в объеме ΔV . Мы будем рассматривать такой режим работы катода, при котором ток ограничен объемным зарядом. В этом случае плотность тока j на поверхности $C \subset \Gamma$ входа частиц в расчетную область (катоде) не известна, а находится в процессе решения самосогласованной задачи. Тогда задача (1) – (5) решается со следующими граничными и начальными условиями

$$\varphi|_C = 0, \quad E|_C = \frac{\partial\varphi}{\partial \vec{n}}|_C = 0, \quad \vec{v}_i|_{t=0} = 0. \quad (6)$$

Рассматриваются двумерные (плоские или осесимметричные) задачи в декартовой x, y или цилиндрической r, z системах координат. Моделирование пучка заряженных частиц осуществляется методом трубок тока, который представляет собой экономичный вариант широко известного метода больших частиц. Интегрирование уравнений движения и решение уравнения Пуассона проводится численно по схемам второго порядка точности.

II Итерационный процесс по подобластям

Разобьем расчетную область G линией Γ_{cb} на две подобласти G_c и G_b такие, что $G = G_c \cup G_b \cup \Gamma_{cb}$. Граница Γ точками пересечения с Γ_{cb} разбивается на два куска Γ_c, Γ_b такие, что, $\bar{G}_c = G_c \cup \Gamma_c \cup \Gamma_{cb}$, $\bar{G}_b = G_b \cup \Gamma_b \cup \Gamma_{cb}$, где \bar{G}_c, \bar{G}_b – соответствующие замыкания. В дальнейшем \bar{G}_c будем называть прикатодной подобластью, а \bar{G}_b – основной подобластью. Решение исходной самосогласованной задачи в $\bar{G} = G \cup \Gamma$ с неизвестной плотностью тока j будем искать путем построения последовательных приближений в данных

подобластях. На каждом приближении проводится решение следующих самосогласованных задач в \bar{G}_c и \bar{G}_b , предполагая, что на Γ_{cb} задано значение потенциала w . По известным аналитическим формулам рассчитывается плотность тока j и пучок заряженных частиц в прикатодной подобласти \bar{G}_c , в результате чего определяются координаты и скорости заряженных частиц на Γ_{cb} . Используя эти величины, численно решается самосогласованная задача в основной подобласти \bar{G}_b с заданной плотностью тока на поверхности старта заряженных частиц, которой в данном случае является Γ_{cb} . Решив данную задачу, пересчитывается потенциал на границе сопряжения по правилам, приведенным ниже, и описанный процесс повторяется на следующем приближении.

Основная проблема при решении самосогласованной задачи (1) – (6) заключается в том, чтобы в результате проведения последовательных приближений найти на границе Γ_{cb} такое распределение потенциала w , которое удовлетворяло бы исходной задаче во всей области \bar{G} . Для её решения запишем на границе сопряжения уравнение

$$\left(\frac{\partial\varphi(w)}{\partial\vec{n}}\right)_c - \left(\frac{\partial\varphi(w)}{\partial\vec{n}}\right)_b = 0 \quad (7)$$

относительно функции w , которое по аналогии с линейными задачами будем называть уравнением Пуанкаре – Стеклова. Здесь \vec{n} – нормаль к Γ_{cb} , а индексы c, b означают, что величины в скобках относятся соответственно к подобластям \bar{G}_c и \bar{G}_b .

Уравнение (7) будем решать приближенно. Для этого построим на Γ_{cb} сетку ω , состоящую из N узлов. Заменим задачу отыскания функции w непрерывного аргумента приближенной задачей нахождения в узлах сетки функции дискретного аргумента $U = \{u_i\}$. Для этого в узлах сетки ω определим соотношения

$$f_i(U) \equiv \left(\frac{\partial\varphi(U)}{\partial\vec{n}}\right)_{c,i} - \left(\frac{\partial\varphi(U)}{\partial\vec{n}}\right)_{b,i}, \quad i = \overline{1, N}, \quad (8)$$

Тогда уравнение (7) заменится системой нелинейных операторных уравнений

$$F(U) \equiv \{f_i(U)\} = 0. \quad (9)$$

Решение системы (8), (9) будем проводить методом Бroyдена, суть которого в данном случае заключается в следующем. На границе сопряжения подобластей задаётся начальное приближение w^0 для потенциала и решаются аналитически в G_c и численно в G_b самосогласованные подзадачи. По известным формулам метода Бroyдена [3] рассчитывается новое приближение w^1 и вновь решаются самосогласованные подзадачи в подобластях. Данный процесс повторяется до сходимости. Для реализации первого шага необходимо решение одной вспомогательной самосогласованной задачи с возмущенной плотностью тока.

Проведенные численные эксперименты на модельной задаче оплоском диоде с известным аналитическим решением показали, что рассматриваемый метод итераций по подобластям сходится с точностью до десятых долей процента за 5 итераций.

Литература

1. *Сыровой В.А.* Введение в теорию интенсивных пучков заряженных частиц. Москва: Энергоатомиздат, 2014. 488 с.
2. *Quarteroni A., Vali A.* Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. Oxford: Clarendon Press, 1999. 360 p.
3. *Дэнис Дж., Шнабель Р.* Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. Москва: Мир, 1988. 421 с.

РЕАЛИЗАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА НА КОМПЬЮТЕРАХ С ГРАФИЧЕСКИМИ УСКОРИТЕЛЯМИ¹

Смолехо И.В., Садовская О.В.

*Институт вычислительного моделирования СО РАН,
Красноярск*

Введение

Жидкие кристаллы являются уникальными веществами благодаря необычному сочетанию анизотропных свойств, присущих кристаллам, и текучести, свойственной жидкостям. Подвижность молекул жидких кристаллов позволяет воздействием внешних сил изменять их ориентацию и таким образом управлять свойствами жидких кристаллов. Впервые модель жидкого кристалла была предложена Эриксоном [1]. Построению модели посвящены работы Лесли [2], Аэро [3] и других авторов.

I Математическая модель

В [4, 5] построена упрощенная математическая модель нематического жидкого кристалла как акустической микронеоднородной среды с вращающимися частицами. Основная система уравнений этой модели в двумерном случае выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho u_t &= -p_x - q_y, & \rho v_t &= q_x - p_y, & j \omega_t &= 2q, & \varphi_t &= \omega, \\ p_t &= -k(u_x + v_y) + \beta T_t, & q_t &= \alpha(v_x - u_y - 2w), \\ c T_t &= (\kappa_{11} T_x + \kappa_{12} T_y)_x + (\kappa_{12} T_x + \kappa_{22} T_y)_y - \beta T(u_x + v_y). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь u и v – компоненты вектора скорости, ω – угловая скорость, φ – угол поворота молекул кристалла, p – гидростатическое давление, q – касательное напряжение, T – абсолютная температура, ρ – плотность, j – момент инерции, k – модуль объемного сжатия, α – модуль упругого сопротивления вращению, β – коэффициент теплового расширения, c – удельная теплоемкость, κ_{11} , κ_{12} и κ_{22} – компоненты тензора теплопроводности: $\kappa_{11} = \kappa_1 \cos^2 \varphi + \kappa_2 \sin^2 \varphi$, $\kappa_{12} = (\kappa_1 - \kappa_2) \sin \varphi \cos \varphi$, $\kappa_{22} = \kappa_1 \sin^2 \varphi + \kappa_2 \cos^2 \varphi$, κ_1 и κ_2 – коэффициенты теплопроводности в направлении ориентации молекул жидкого кристалла и в поперечном направлении, нижние индексы t и x , y означают производные по времени и пространственным переменным,

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 14-01-00130)

соответственно. В систему (1) входят уравнения поступательного и вращательного движения, уравнение для угла поворота, уравнения состояния для давления и касательного напряжения, уравнение анизотропной теплопроводности с переменными коэффициентами.

II Численный алгоритм

Численное решение краевых задач для системы (1) осуществляется с помощью метода двуциклического расщепления по пространственным переменным. В двумерном случае на каждом временном интервале $(t_0, t_0 + \Delta t)$ расщепление включает в себя 5 этапов: решение одномерных подсистем уравнений акустики жидкого кристалла и связанных уравнений теплопроводности в направлениях x и y на полуинтервале по времени $(t_0, t_0 + \Delta t/2)$, пересчет величин ω , φ и q по схеме Кранка–Николсон, повторный пересчет в направлениях y и x на втором полуинтервале $(t_0 + \Delta t/2, t_0 + \Delta t)$. На 1-м и 5-м этапах метода расщепления считается, что искомое решение зависит только от x , и система уравнений (1) преобразуется к следующему виду:

$$\rho u_t = -p_x, \quad \rho v_t = q_x, \quad p_t = -k u_x + \beta T_t, \quad q_t = \alpha v_x, \quad (2)$$

$$c T_t = f_{1x} - \beta T u_x, \quad f_1 = \kappa_{11} T_x + \kappa_{12} T_y. \quad (3)$$

Аналогично, на 2-м и 4-м этапах, когда решение зависит только от y :

$$\rho u_t = -q_y, \quad \rho v_t = -p_y, \quad p_t = -k v_y + \beta T_t, \quad q_t = -\alpha u_y, \quad (4)$$

$$c T_t = f_{2y} - \beta T v_y, \quad f_2 = \kappa_{12} T_x + \kappa_{22} T_y. \quad (5)$$

На 3-м этапе метода расщепления решается система уравнений:

$$j \omega_t = 2 q, \quad \varphi_t = \omega, \quad q_t = -2 \alpha \omega. \quad (6)$$

Первый и пятый (второй и четвертый) этапы метода разделены, несмотря на то, что дважды решается практически одна и та же задача. Такая конструкция метода расщепления обеспечивает устойчивость численного решения в двумерном случае при выполнении одномерного условия Куранта.

На этапах расщепления одномерные задачи решаются с использованием конечно-разностной схемы типа “предиктор–корректор” в следующей последовательности: сначала реализуется шаг “предиктор” для подсистемы уравнений акустики (2), (4), (6), затем решается связанное уравнение теплопроводности (3), (5), и в заключение выполняется шаг “корректор” матричной системы, правая часть которой зависит от температуры. Конечно-разностная схема, построенная по принципу схемы С.К. Годунова, применяется при решении акустических уравнений, схема Г.В. Иванова с контролируемой диссипацией энергии – при решении уравнения теплопроводности. Температура в каждом направлении вычисляется с помощью трехточечной прогонки. Схема является неявной на шаге “предиктор” и явной на шаге “корректор”.

III Среда разработки параллельной программы

Разработана программа для численного решения системы уравнений (1) математической модели жидкого кристалла. Параллельная программа реализована на языке Си с применением технологии CUDA [6], позволяющей использовать графические ускорители видеокарт.

Распараллеливание вычислений производится на этапах метода расщепления. На GPU (Graphical Processing Unit) расчетная область разбивается на квадратные блоки, содержащие одинаковое число нитей. Благодаря идентификаторам, имеющимся в CUDA, каждой нити ставится в соответствие ячейка разностной сетки. В параллельном режиме нити графического устройства выполняют однотипные операции в ячейках по расчету решения на шаге “предиктор” и, после этого, на шаге “корректор” схемы. В начале программы на CPU (Central Processing Unit) задаются размерности конечно-разностной сетки и все необходимые константы, а также описываются одномерные массивы и задаются начальные данные для основных величин – компонент вектора скорости, угловой скорости, угла поворота, давления, касательного напряжения и температуры. Одновременно на GPU выделяется память под массивы для этих величин и всех необходимых вспомогательных величин. Затем необходимые константы и массивы копируются с CPU на GPU. На каждом шаге по времени последовательно реализуются этапы метода расщепления. На этапах расщепления графическим устройством выполняются все необходимые ядра (процедуры) в параллельном режиме. Для анализа результатов счета в контрольных точках по времени решение передается с GPU на CPU, и по полученным файлам данных рисуются линии уровня искомых величин графическими средствами персонального компьютера.

IV Результаты расчетов

Численно исследована эффективность работы программы: в методических расчетах зафиксировано ускорение работы параллельной программы примерно в 25 раз по сравнению с последовательной версией. Проведена серия расчетов на высокопроизводительном вычислительном сервере Flagman ИВМ СО РАН, демонстрирующих работу программы.

На рис. 1 представлены результаты расчетов для задачи о действии трех Λ -образных импульсов давления в нормальном направлении на части левой границы расчетной области в виде квадрата. Остальные части границы считаются свободными от напряжений. Нагрузка действует некоторое время, а потом граница полностью освобождается от напряжений. На рис. 2 показаны результаты для задачи о действии четырех источников тепла на нижней границе и четырех источников на левой границе расчетной области. Видно, что линии уровня температуры ориентируются под заданным углом поворота φ . Область действия каждого источника тепла – 10 см (при длине

стороны квадрата, равной 1 м). Разностная сетка состоит из 1024×1024 ячеек.

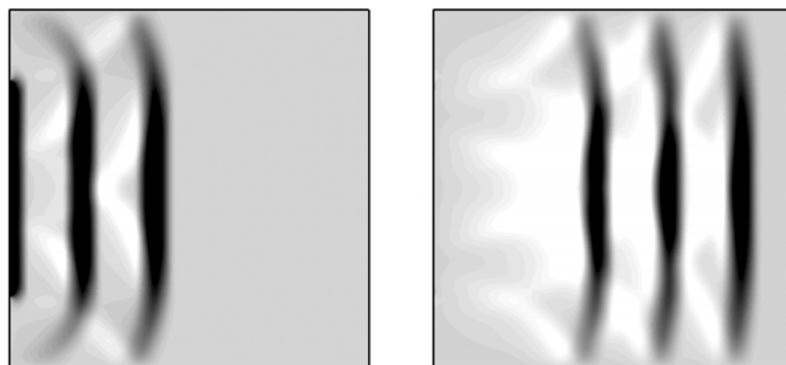


Рис. 1. Λ -образные импульсы давления на части левой границы: линии уровня давления p (250-й и 500-й шаги по времени – слева направо)

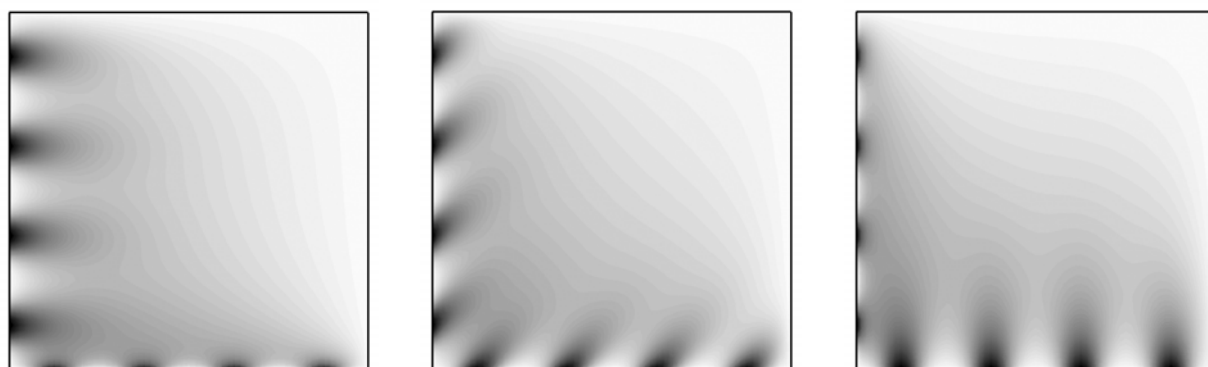


Рис. 2. Источники тепла на нижней и левой границах: линии уровня температуры T при коэффициентах теплопроводности $\kappa_1 = 5 \kappa_2$ и углах поворота $\varphi = 0, \pi/4, \pi/2$ (слева направо), 1000-й шаг по времени

Литература

1. *Ericksen J.L.* Conservation laws for liquid crystals // *Trans. Soc. Rheol.* 1961. Vol. 5. P. 23–34.
2. *Leslie F.M.* Some constitutive equations for liquid crystals // *Arch. Ration. Mech. Anal.* 1968. Vol. 28. P. 265–283.
3. *Аэро Э.Л., Булыгин А.Н.* Уравнения движения нематических жидких кристаллов // *Прикл. матем. и механ.* 1971. Т. 35. Вып. 5. С. 879–891.
4. *Садовский В.М., Садовская О.В.* Об акустическом приближении термомеханической модели жидкого кристалла // *Физическая мезомеханика.* 2013. Т. 16. № 3. С. 56–62.

5. *Sadovskii V.M.* Equations of the dynamics of a liquid crystal under the influence of weak mechanical and thermal perturbations // AIP Conf. Proc. 2014. V. 1629. P. 311–318.
6. *Боресков А.В., Харламов А.А.* Основы работы с технологией CUDA // Москва: АДМК Пресс, 2010. 232 с.

МИКРОМАСШТАБНЫЕ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ АТМОСФЕРНОЙ ЦИРКУЛЯЦИИ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ РАДИОАКТИВНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ В УСЛОВИЯХ ГОРОДСКОЙ ИЛИ ПРОМЫШЛЕННОЙ ЗАСТРОЙКИ. ИНТЕГРИРОВАННЫЕ КОДЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ.

Сороковикова О.С.

*Институт проблем безопасного развития атомной
энергетики, Москва*

В настоящее время в России разрабатываются коды нового поколения для оценки радиационной обстановки на промышленном объекте в случае аварийной ситуации или в режиме нормальной эксплуатации [1, 2, 3]. Строится трёхмерная модель конкретного объекта с фактором радиационного риска. В зависимости от стратификации (класса устойчивости атмосферы), скорости и направления ветра на некоторой высоте, восстанавливаются параметры пограничного слоя атмосферы. Особенности аэротермодинамического режима на территории объекта с крупными зданиями, которые оказывают принципиальное влияние на распространение загрязнения внутри промышленной застройки, моделируются трехмерными RANS моделями. На основе трехмерных полей ветра, характеристик неизотропной турбулентности рассчитывается распространение радиоактивного выброса в атмосфере, загрязнение территории и зданий. На рис. 1 представлен результат моделирования распространения загрязнения на территории Белоярской АЭС при аварии "Потеря системного и надёжного электроснабжения (отказ активных систем останова реактора, отказ САОТ)" в разрабатываемом в настоящее время реакторе типа БН-1200. Результаты моделирования:

- Доза облучения на границе промплощадки за 10 суток не превысит 0.2 мЗв
- Необходимости принятия срочных мер по защите населения нет

В отличие от мезомасштабных моделей, в данном случае поле скорости ветра не может быть задано извне (например, с использованием данных стандартного метеопрогноза), а должно вычисляться с учетом детальной геометрии взаимного расположения препятствий, их формы и размеров.

Корректный метод решения этой задачи – прямое решение полной системы уравнений гидродинамики Навье-Стокса для несжимаемой жидкости с соответствующими граничными условиями на твердых поверхностях и с использованием моделей турбулентности в 3-мерной постановке. Модель

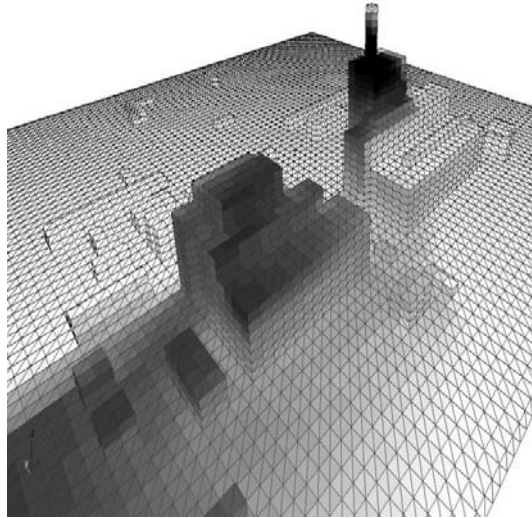


Рис. 1. Картина осаджений на поверхности земли и зданий на дискретной модели промплощадки Белоярской АЭС

турбулентности – $k - \varepsilon$, модифицированная в пиповерхностных ячейках на основе теории подобия Моница Обухова.

Фактически это двухслойная модель. Под первым слоем здесь понимается совокупность всех ячеек, пересекающихся с границей. Вторым слоем – совокупность всех остальных расчётных ячеек, не имеющих пересечения с границами области.

В качестве входных данных необходимо иметь трехмерную модель промышленного объекта. В код встроен специализированный модуль, позволяющий облегчить построение объекта при помощи специальных заготовок. Пример такой заготовки представлен на рис 2.

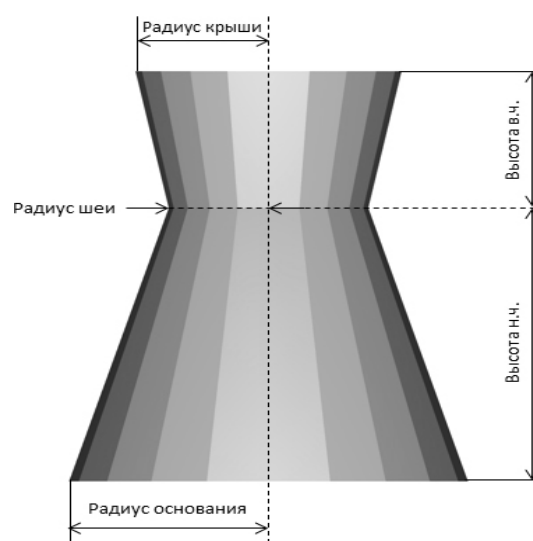


Рис. 2. Схема объекта типа "Градирня". Вид сбоку. В.ч. – верхняя часть, н.ч. – нижняя часть

Интегрированный код позволяет рассчитать аэротермодинамику, коэф-

фициенты турбулентного обмена, распространение радионуклидов (126 радионуклидов) в атмосфере, загрязнение поверхности. Конечный результат – дозы внутреннего и внешнего облучения (от облака, загрязненной поверх-

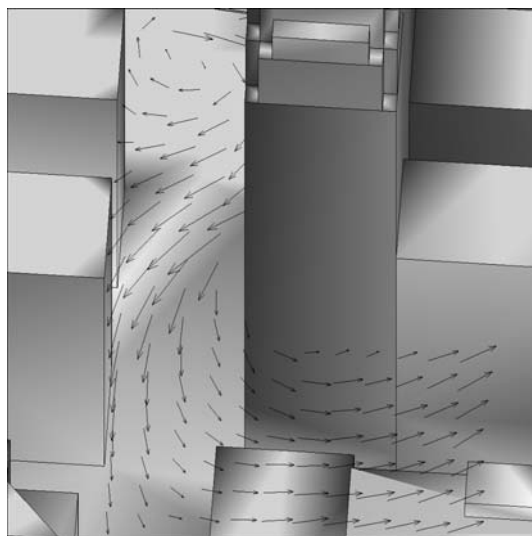


Рис. 3. Визуализация фрагмента БД по ветру.

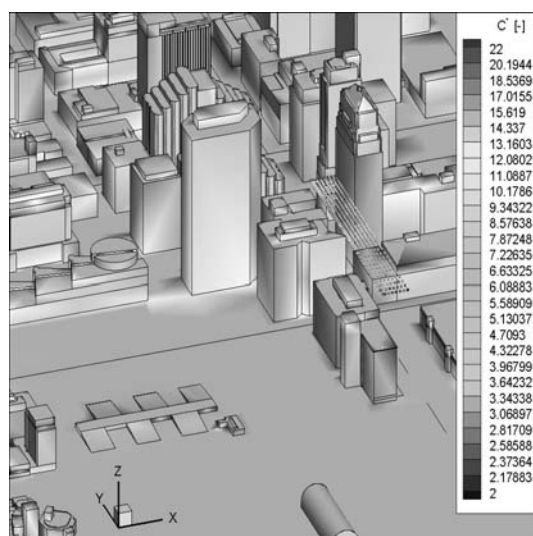


Рис. 4. Фрагмент визуализации БД по концентрации примеси. Измерительная сеть и измеренные концентрации (черно-белая палитра).

ности, ингаляции) в зависимости от местонахождения человека на объекте, скорости и траектории его движения по объекту.

На ранних стадиях аварии – в соответствии с результатами моделирования возможно спланировать необходимые контрмеры.

Для верификации всех моделей, включенных в интегрированный код, используются как некоторые аналитические решения (известные и специально построенные) так и международная база данных, специально предназначенная для верификации микрометеорологических моделей в условиях

промышленной или городской застройки [4, 5]. Для оценки качества моделирования используются современные специальные "validation metrics". Существующая международная база данных [4, 5] для верификации требует предварительной обработки. Примеры визуализации фрагментов этой БД представлены на рис.3 и рис.4.

Литература

1. *Сороковикова О.С., Семёнов В.Н., Дзема Д.В.* RANS модель атмосферной дисперсии для оценки радиационной обстановки в условиях сложной трёхмерной геометрии объекта. Некоторые другие модели и программные комплексы в задачах радиоэкологии. Современные проблемы математического моделирования. ЮГИНФО ЮФУ, г. Ростов-на-Дону, ИПМ РАН, г. Москва. 16-21 сентября 2013 г. Пос. Дюрсо.
2. *Blagodatskykh D.V., Dzama D.V., Sorokovikova O.S.* Simulations of radioactive contamination within an industrial site. Southern Federal University. Proceeding of fourth China-Russia Conference Numerical algebra with applications. Editors : Zhong-Zhi-Bai, Lev A. Krukier, Galina V. Muratova. 26-29 June 2015 Rostov on Don, RUSSIA pp. 84-87.
3. *Dzama D.V., Sorokovikova O.S., Blagodatskykh D.V.* A verification of the blocks for 3D aerothermodynamics modeling and doses calculation from a cloud of arbitrary geometry as parts of a software package for estimation of the radiation situation within an industrial site at radiation risk. Southern Federal University. Proceeding of fourth China-Russia Conference Numerical algebra with applications. Editors: Zhong-Zhi-Bai, Lev A. Krukier, Galina V. Muratova. 26-29 June 2015 Rostov on Don, RUSSIA pp. 92-96.
4. *Denise Hertwig, George C. Efthimiou, John G. Bartzis and Bernd Leitl* CFD-RANS model validation of turbulent flow in a semi-idealized urban canopy // Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 2012. Vol. 111. P. 61-72.
5. VDI (2005). Environmental meteorology - Prognostic microscale windfield models - Evaluation for flow around buildings and obstacles.2005. Beuth Verlag, Berlin

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРЯМЫХ ТРЁХМЕРНЫХ ЗАДАЧ ЭЛЕКТРОТОМОГРАФИИ И ВЭЗ НА GPU¹

Суродинa И.В.* , Неведрова Н.Н., Санчаа А.М.**

* *Институт Вычислительной математики и
математической геофизики, Новосибирск*

** *Институт нефтегазовой геологии и геофизики,
Новосибирск*

Введение

В настоящее время развитие всех методов геоэлектрики определяется новыми аппаратными разработками и программно-алгоритмическими средствами для прямого моделирования и интерпретации полевых данных. Для методов постоянного тока (методов сопротивлений) современная аппаратура, в частности, широко востребованные во всем мировом геофизическом сообществе, многоэлектродные установки электротомографии, обеспечивают быструю профильную либо площадную съемку. Это резко повышает объем полученной информации, увеличивает детальность исследования, но также требует повышенного контроля за качеством полевых данных и соответствующих методик обработки. Для методов сопротивлений легче поддерживать необходимое соответствие, так как именно для них имеется наиболее развитая теоретическая и программная база, которая требует своевременного усовершенствования.

На сегодня нет универсальных программ трехмерного моделирования. Обычно программы создаются под какую-либо конкретную задачу, поэтому их использование для сложных природных объектов не всегда возможно. Кроме того, довольно часто эти программы были протестированы лишь на теоретических данных для простых моделей и их использование применительно к полевым измерениям весьма проблематично.

Поэтому была создана программа EMF_DC3Dmod [1, 2] применительно к данным метода сопротивлений для решения прямой задачи, которую можно использовать для расчетов наиболее сложных трехмерных моделей. Программа EMF_DC3Dmod (Суродинa И.В., Неведрова Н.Н., Санчаа А.М.) была разработана совместно Институтом нефтегазовой геологии и геофизики и Институтом вычислительной математики и математической геофизики СО РАН.

Разработанный алгоритм, тщательное тестирование показало, что использование этой программы позволяет сузить области эквивалентности

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ – грант мол_а_вед № 15-35-20614

геоэлектрических параметров, уменьшить неоднозначность решения обратной задачи путем выбора оптимальной начальной модели, а также дает возможность провести моделирование с учетом основных особенностей строения. С помощью программы EMF_DC3Dmod с использованием полевых данных ВЭЗ были построены трехмерные модели для межгорных впадин Сибири, позволившие уточнить строение ряда сложных внутривпадинных структур [1, 2, 3].

Развитие современной вычислительной техники, в частности появление гибридных вычислительных систем, в которых наряду с процессорами традиционной архитектуры используются массивно-параллельные сопроцессоры, например, графические процессоры (GPU), позволяет существенно ускорить расчёты. Использование GPU наиболее эффективно при решении задач, обладающих параллелизмом по данным, число арифметических операций в которых велико по сравнению с операциями над памятью. Если задача таким свойством не обладает, существенного ускорения также можно добиться, но путём больших усилий. Для получения максимального выигрыша необходимо организовать вычисления с учётом GPU архитектуры, добиваясь полного параллелизма расчётов. Для программы EMF_DC3Dmod удалось построить полностью параллельные алгоритмы.

I Постановка задачи

Трёхмерное моделирование для задач вертикального электрического зондирования и электротомографии сводится к моделированию распределения электрического потенциала точечного источника в сложно построенной среде.

Представим потенциал электрического поля U в виде суммы аномального потенциала U^a и первичного потенциала U^0 , связанного с источником поля, расположенным в однородной среде с проводимостью σ_0 :

$$U = U^0 + U^a. \quad (1)$$

Для аномального потенциала U справедливо уравнение Пуассона

$$\operatorname{div}(\sigma \nabla U^a) = -\operatorname{div}((\sigma - \sigma_0) \nabla U^0). \quad (2)$$

$\sigma(x, y, z)$ – проводимость в среде. При удалении от источника потенциал затухает как $1/R$, поэтому функция $U^a = 0$ вдали от источников. Дискретизация уравнения (2) конечно-разностным методом [4] и последующая его симметризация приводит к системе линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b, \quad (3)$$

где A действительная, симметричная, сильно разреженная, положительно определенная матрица. После решения системы (3) получим аномальный потенциал. Затем с помощью уравнения (1) находим полный потенциал. Для

нахождения кажущегося сопротивления необходимо решить несколько таких задач для различного положения источниковых электродов.

II Метод решения

Для решения систем линейных уравнений (3) был выбран итерационный метод сопряжённых градиентов (CG), поскольку в данном случае мы имеем разреженные, симметричные матрицы больших размеров (от 1500000 до 2500000 сеточных узлов). Все операции в формулах для метода CG являются матрично-векторными и хорошо распараллеливаются на GPU. Но скорость сходимости в нашем случае будет невысокой. Максимальное ускорение, которого можно добиться на GPU составит лишь 5-6 раз. Поэтому данный метод нужно использовать с предобуславливателем. Идея предобуславливания состоит в том, что система, например, (3), заменяется на систему $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ или $AM^{-1}y = b$, $x = M^{-1}y$, где матрица $M^{-1}A$ или AM^{-1} имеет значительно меньшее число обусловленности, чем сама матрица A и система для вектора z с невязкой в правой части r

$$Mz = r, \quad (4)$$

должна быть легко разрешима. В случае реализации на GPU налагается ещё и требование высокой параллелизации не только решения системы (4), но и построения предобуславливающей матрицы. Мы использовали оригинальный подход построения предобуславливающей матрицы на основе аппроксимации обратной матрицы, предложенный в [5]. Данный подход отличается полной параллелизацией алгоритмов PCG (Preconditioned Conjugate Gradient) (предобусловленный метод сопряжённых градиентов).

Пусть матрица D_0 – начальное приближение к обратной матрице. Если $\|E - AD_0\| \leq q < 1$, то можно построить итерационный процесс приближения к обратной матрице:

$$D_1 = D_0 + D_0(E - AD_0) \quad (5)$$

$$D_2 = D_1 + D_1(E - AD_1) = 2D_1 - D_1AD_1$$

и т.д. В качестве стартового приближения к обратной матрице мы брали предобуславливатель Якоби $D_0 = \text{diag}(a_{11}^{-1}, a_{11}^{-1}, \dots, a_{nn}^{-1})$. В нашем случае это возможно, так как в результате аппроксимации уравнения (3) получаем матрицу со слабым диагональным преобладанием. В трёхмерных задачах наиболее эффективным (по времени при заданной точности расчётов) оказалось применение D_1 .

Для задач ВЭЗ (вертикального электрического зондирования) и электро-томографии большего эффекта можно добиться, если предварительно масштабировать систему (3) так, чтобы диагональные элементы матрицы стали равными 1.

$$a_{ij} = 1/a_{ii} * a_{ij} * 1/a_{ii}, i, j = 1, \dots, n.$$

Тогда, как легко увидеть из (5), диагональные элементы предобуславливающей матрицы будут также единичными, а внедиагональные элементы равны соответствующим противоположным элементам самой матрицы A .

Предобусловленный метод сопряжённых градиентов с предобуславливающей матрицей D_1 :

$$\begin{aligned}
 &\text{Инициализация: } x_0, r_0 = b - Ax_0, z_0 = D_1 r_0, p_0 = z_0; \\
 1. & \quad q_i = Ap_i, \alpha_i = \frac{z_i^T r_i}{p_i^T q_i}; \\
 2. & \quad x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i, r_{i+1} = r_i - \alpha_i q_i; \\
 3. & \quad z_{i+1} = D_1 r_{i+1}; \\
 4. & \quad \beta_i = \frac{z_{i+1}^T r_{i+1}}{z_i^T r_i}, p_{i+1} = r_{i+1} + \beta_i p_i.
 \end{aligned} \tag{6}$$

Все шаги 1-4 в (6) легко могут быть распараллелены на GPU, так как содержат только матрично-векторные операции. При реализации данных алгоритмов мы использовали библиотеку функций CUBLAS CUDA NVIDIA. В результате мы получили полностью параллельный алгоритм метода PCG, не требующий никаких затрат на построение предобуславливателя.

Ускорение в задачах ВЭЗ и электротомографии составило до 70 раз по сравнению с последовательным вариантом. Новый, GPU-вариант EMF_DC3Dmod реализован на языке `pgfortran` с использованием интерфейса передачи данных MPI для кластера. Одновременно рассчитывается до 6 разносов для установки Шлюмберже на 12 GPU. Тестирование программы проводилось на кластере НКС-30T+GPU Сибирского Суперкомпьютерного центра.

Программа для электротомографии реализована на языке `pgfortran` для одной видеокарты для многоэлектродной установки СКАЛА [6]. Программа успешно работает на ноутбуке, что позволяет оперативно выполнить расчёты и в полевых условиях.

Литература

1. *Неведрова Н.Н., Суродина И.В., Санчаа А.М.* Трёхмерное моделирование сложных геоэлектрических структур // Геофизика. 2007. №1. с.36-41. ISSN 1681-4568.
2. *Неведрова Н.Н., Санчаа А.М., Суродина И.В.* Характеристики разломных структур по данным электромагнитных зондирований. Моделирование разломов // Геофизические исследования. 2014. Том 15. с. 83-94. ISSN 1818-3735

3. *Неведрова Н.Н., Санчаа А.М., Суродина И.В.* Трехмерное моделирование зон тектонических деформаций для задач геоэлектрики постоянным током // Международная конференция "Геофизические исследования Урала и сопряженных регионов": матер.конф. 3-6 февр. 2008. Екатеринбург. 2008. с. 8-12.
4. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. Москва: Наука, 1979. 655 с.
5. *Labutun I.B., Surodina I.V.* Algorithm for Sparse Approximate Inverse Preconditioners in Conjugate Gradient Method // Reliable Computing (Interval Computations) Journal http://interval.louisiana.edu/reliable-computing-journal/tables-of-contents.html#Volume_18
6. *<http://nemfis.ru>*

ОДИН ИЗ ПОДХОДОВ К РАСЧЕТУ ПЕРЕМЕЩЕНИЯ И ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛЬДИН¹

Тарелкин А.А., Чикина Л.Г., Шабас И.Н.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

Ледовый покров – важная составляющая часть гидрологического режима морей. Дрейфующий и припайный лед существенно осложняет судоходство в этих районах, освоение прибрежной зоны, создает большие нагрузки на несущие опоры мостов. Моделирование ледовых покровов является важным направлением исследования при разработке и проектировании стационарных и подвижных объектов размещающихся в зонах льдообразования.

Чаще всего модель перемещения ледяного покрова рассматривает лед как пористую структуру, в случае рассмотрения льдин как отдельных объектов их описывают как материальные точки [1, 3]. В данной работе каждая льдина рассматривается как плоское тело, и при перемещении учитываются её конфигурация, а так же действие на неё течения воды и ветровой нагрузки.

В качестве объекта исследования рассматривается процесс перемещения льдин произвольной формы в водоеме, заполненном однородной идеальной несжимаемой жидкостью. При этом граница водоема считается вертикальной, а его глубина превышает толщину льдины. Рассматриваемые объекты представляют собой упругие пластины произвольной формы. В качестве начальных условий заданы плотность и форма льдины. По этим параметрам рассчитываются площадь, масса и центр масс данного объекта. В начальный момент времени предполагается, что льдина находится в состоянии покоя, т.е. $u^{t=0} = v^{t=0} = 0$.

При контакте с границей водоема, движение льдины будет рассматриваться как столкновение с твердой упругой поверхностью. За основу модели перемещения льдины была взята двумерная модель дрейфа айсберга [4]. Если в данной модели посчитать что отсутствует взаимодействие с грунтом, ветровое волнение и водоем не имеет наклона, то движение льдины можно описать следующим уравнением:

$$M \frac{du}{dt} = F_{nx}^W + F_{nx}^A, \quad M \frac{dv}{dt} = F_{ny}^W + F_{ny}^A, \quad (1)$$

где $F_{nx}^W, F_{nx}^A, F_{ny}^W, F_{ny}^A$ – проекции радиальных составляющих сил на оси x и y .

На водоеме строится равномерная прямоугольная сетка, в которой задается поле скоростей течения.

Заменив производные по времени их конечно-разностными аналогами, получим:

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект №1420, государственное задание ВУЗов, базовая часть)

$$\frac{\Delta u}{\Delta t} = \frac{F_{nx}^W + F_{nx}^A}{M}, \quad \frac{\Delta v}{\Delta t} = \frac{F_{ny}^W + F_{ny}^A}{M},$$

где Δ – шаг по времени, Δu и Δv – градиенты компонент скорости по времени ($\Delta u = u_{t+1} - u_t$, $\Delta v = v_{t+1} - v_t$)

Для угловой скорости уравнения примут следующий вид:

$$\omega^{t+1} = \omega^t + \frac{F_{\tau}^W + F_{\tau}^A}{I} \Delta t$$

где I – момент инерции льдины, а F_{τ}^W, F_{τ}^A – тангенциальные составляющие сил, действующих на льдину.

Определив скорость дрейфа льдины, находим координаты её положения (x, y) на следующем временном шаге:

$$x^{t+1} = x^t + u^{t+1} \Delta t, \quad y^{t+1} = y^t + v^{t+1} \Delta t, \quad \varphi^{t+1} = \varphi^t + \omega^{t+1} \Delta t$$

Проведем разбиение всей площади льдины для получения неструктурированной расчетной сетки. Предполагаем, что вся масса каждого элемента сконцентрирована в центре масс этого элемента, а скорость на всей площади элемента равна скорости его центра масс. Таким образом, результирующая сила, действующая на льдину, есть сумма сил, действующих на каждый элемент разбиения:

$$F_{res} = \sum_{i=0}^n (F_i^W + F_i^A)$$

$$F_i^W = c_w \rho_w S_i (V^W - V_i^{ice})$$

$$F_i^A = c_a \rho_a S_i (V^A - V_i^{ice})$$

где V^W – скорость течения, V^A – скорость ветра, V_i^{ice} – скорость i элемента льдины, ρ_w, ρ_a – плотность воды, воздуха, c_w, c_a – коэффициент трения воды, воздуха, S_i – площадь i элемента льдины, контактирующая с водой.

Взаимодействие между объектами сводится в задаче обнаружения и обработки столкновений [2, 6]. Этап обнаружения столкновений делится на два шага.

Шаг 1. Определение кандидатов на столкновение. Для каждой льдины определяется минимальный радиус окружности с центром в центре масс и полностью содержащей эту льдину (рис.1). Сравнивая расстояние между центрами масс двух льдины и сумму радиусов полученных окружностей делаем вывод о возможности столкновения. Если расстояние больше суммы радиусов, тогда льдины точно не столкнулись, иначе считаем эту пару льдин кандидатами на столкновение и переходим к шагу 2.

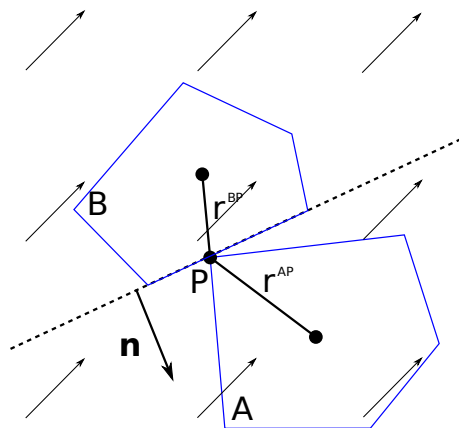


Рис. 1. Момент столкновения двух объектов

Шаг 2. Поиск точки соприкосновения льдин. Для обнаружения столкновений производится поиск общих точек, проверкой на принадлежность вершин первой льдины контуру второй. При обнаружении у пары объектов общих точек находятся величина импульса с которым эти объекты взаимодействуют между собой.

$$j = \frac{-(1 + \varepsilon) v_1^{AB} \cdot n}{n \cdot n \left(\frac{1}{M^A} + \frac{1}{M^B} \right) + \frac{(r_{\perp}^{AP} \cdot n)^2}{I^A} + \frac{(r_{\perp}^{BP} \cdot n)^2}{I^B}}$$

где j – импульс, ε – коэффициент упругости, v_1^{AB} – разность скоростей тел до столкновения, \bar{n} – вектор нормали из точки столкновения, M^A, M^B – масса столкнувшихся объектов, I^A, I^B – инерция столкнувшихся объектов.

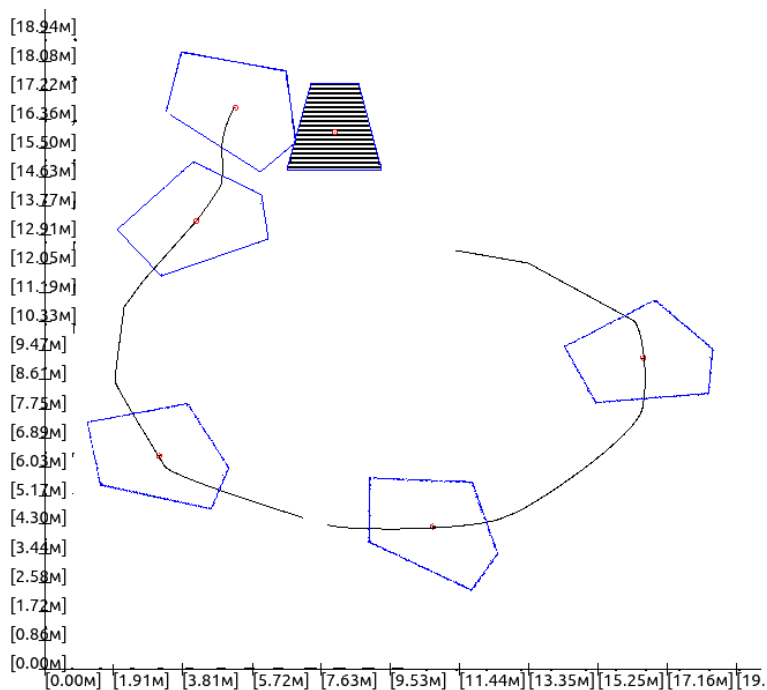


Рис. 2. Рассчитанная траектория перемещения льдины

В настоящей работе были получены результаты двумерного моделирования перемещения льдины в замкнутом прямоугольном водоеме. Течение воды в водоеме задавалось циркуляционным по часовой стрелке, а действие ветра было боковым с востока на запад. На рис.2 показана траектория движения льдины, с выделением ее ориентации в различные моменты времени.

Проведенная визуализация данного численного эксперимента показала, что модель достаточно адекватно воспроизводит перемещения отдельных льдин, их взаимодействие между собой и статическим телом.

Литература

1. *D. Holland M. M.* Modelling the impact of icebergs on the Southern Ocean freshwater budget and circulation // National Science Foundation. – 2004.
2. *Ericson C.* Real-Time Collision Detection / под ред. Т. Кох. – Elsevier, 2005. International Meshing Roundtable. – 1998. – С. 239–269.
3. *Schäfer-Neth C., Stattege K.* Computerized modeling of sedimentary systems // / под ред. Н. J. – Springer, 1999. – Ch. Icebergs in the North-Atlantic: Modelling circulation changes and glacio-marine deposition. С. 63–78.
4. *Клячкин С.* Прогностическая модель дрейфа айсберга // Проблемы арктики и антарктики. – 2012. – С. 78–88.
5. *Скворцов А.* Обзор алгоритмов построения триангуляции Делоне // Вычислительные методы и программирование. – 2002. – No 3. – С. 14–39.
6. *Coumans E.* Continuous Collision Detection and Physics // Sony Computer Entertainment. – 2005.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА И ТРАНСФОРМАЦИИ МЕТАНА В БАЙКАЛЕ¹

Цветова Е.А.

Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения РАН, г. Новосибирск

О метане в Байкале известно уже давно. Мелкие выбросы метана постоянно происходят на мелководьях, где он выходит пузырями на поверхность. Однако в конце прошлого века на дне Байкала были открыты большие залежи метангидратов, которые представляют собой рыхлый лед, состоящий из смеси воды и метана. Газовые гидраты образуются при особых условиях: большом давлении и низких температурах. Поскольку их в мировой литературе рассматривают как топливо будущего, возникла необходимость исследовать возможное влияние процессов, связанных с трансформацией метангидрата на гидродинамику водоема и, следовательно, на изменение качества вод. В частности, нас интересует возможность обновления глубинных вод Байкала с участием метана.

Суть проблемы состоит в следующем. В отличие от мелких водоемов, озеро Байкал не перемешивается от поверхности до дна в периоды естественной конвекции осенью и весной. Препятствием обмену служат физические условия в водоеме. Температура максимальной плотности, отвечающая за организацию конвекции, убывает, начиная с 4°C на поверхности, на 0.21° каждые 100 м. Поэтому естественная конвекция прекращается, когда температура воды на некой глубине совпадает с температурой максимальной плотности на этой глубине. Таким образом, интенсивный вертикальный водообмен ограничивается верхним слоем 200-250 м, в то время как основное ядро до больших глубин остается в большой степени изолированным от внешних воздействий. Этим в настоящее время объясняют круглогодичное практическое постоянство всех термодинамических и химических показателей воды ядра.

В то же время, наблюдения на экстремальных глубинах в придонном слое иногда выявляют водные массы, которые по показателям (температуре и содержанию кислорода) существенно отличаются от тех, которые лежат выше в ядре. Они близки к тем, которые находятся вблизи поверхности. Как могла такая вода оказаться в самых глубоких слоях? Эта загадка в последнее время нашла объяснение, подтвержденное наблюдениями [1, 2]. Дело в том, что вода с поверхности при определенных условиях может опускаться по крутому подводному береговому склону, достигая экстремальных глубин. Этот процесс связан с Экмановским переносом при некоторых сильных ветрах и существенно зависит от времени года и температурной стратификации поверхностных слоев. Эти события случаются после остывания поверхностных

¹Работа поддержана Программами фундаментальных исследований 43 и 23 Президиума РАН, а также проектом РФФИ №14-01-00125-а.

вод до температур ниже температуры придонных слоев и продолжаются до периодов ледостава и в начальном периоде полного ледового покрова (обычно озеро замерзает в январе).

Однако в наблюдениях имеются данные о весенних интрузиях холодных вод, которые нельзя связать с Экмановским переносом. В связи с этим мы предлагаем рассмотреть в качестве триггера механизма глубокой конвекции процессы, связанные с диссоциацией метангидратов, которые могут попасть в воду в результате оползней и подвижек грунта, извержений подводных вулканов и т.д. В пользу этой версии свидетельствуют кольцевые образования на льду озера, которые мы также связываем с разложением гидратов [3].

Для решения этой проблемы формулируется задача моделирования гидротермодинамики гетерогенной системы, в состав которой входит вода и метан в трех состояниях: растворенный, газообразный и твердый, в виде кристаллов газогидрата. С течением времени система трансформируется с учетом фазовых переходов. Все фазы моделируются как сплошные среды. Основная фаза – жидкость, которая рассматривается как несущая среда. В каждом конкретном объеме области моделирования мы рассчитываем доли каждой фазы, которые со временем изменяются под действием гидротермодинамических процессов, а также в результате межфазного взаимодействия.

Для моделирования гидротермодинамики воды в озере, как несущей среды, используется математическая модель в негидростатическом приближении, разработанная автором. Она представлена системой уравнений в частных производных для трех компонентов вектора скорости, уравнения для температуры, уравнений состояния и неразрывности. В модели учтены силы Кориолиса, перенос и турбулентная диффузия тепла и моментов количества движения.

Поведение фаз метана описывается системой уравнений типа конвекции-диффузии-реакции. Предполагается, что растворенный метан движется со скоростью несущей среды, а газовая и твердая фазы получают дополнительные скорости подъема за счет сил плавучести. Термические эффекты, учитывающие скрытую теплоту перехода фаз, включены в уравнение для температуры. Система уравнений дополняется соответствующим набором краевых и начальных условий. Поскольку модели содержат большое количество параметров и неопределенностей, связанных с конкретными условиями постановок задач и сценариев расчета, численные эксперименты проводятся с использованием различных параметризаций тепло-массообмена.

На рисунках 1,2 приведены результаты сценарных экспериментов, показывающих, что процессы, связанные с трансформацией метангидратов могут быть механизмом, запускающим глубокую конвекцию.

Здесь речь идет о другом механизме, не связанным с опусканием по подводному склону. В процессе подъема струя, образовавшаяся при всплытии метангидрата, разрушает слой мезотермического максимума снизу. Слой мезотермического максимума – это слой, вода в котором теплее, чем в выше и ниже лежащих слоях. Он ежегодно образуется в озере по окончании процес-

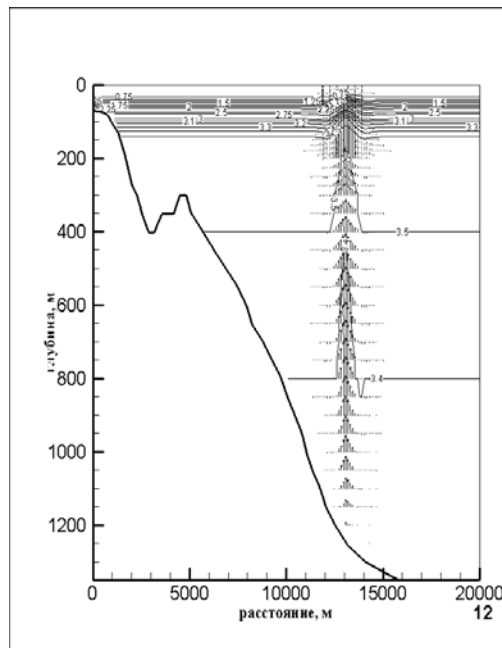


Рис. 1. Температура и течения на вертикальном разрезе области через центр струи через 72 минуты после начала сценария.

сов естественной конвекции, когда из-за уменьшения температуры максимальной плотности процесс перемешивания прекращается, и поверхностные слои начинают остывать. Он является препятствием водообмену между эпилимнионом и гиполимнионом. Заметим, что разложение гидрата происходит на глубинах приблизительно 380 м, как раз вблизи этого слоя. Интенсивное разложение гидрата приводит к понижению температуры окружающей жидкости и образованию газа. Благодаря силе плавучести, новая смесь продолжает подниматься до определённой высоты, где её плотность сравнивается с плотностью воды, находящейся на данной глубине. Часть водных масс начинает включаться в возвратные циркуляции вокруг струи, а часть по инерции проскакивает выше и достигает нижней границы льда, создавая сложную трехмерную структуру в поверхностном слое.

Вода, вовлеченная в возвратные течения, формирующиеся вокруг ядра, на определенных глубинах имеет температуру, близкую к температуре максимальной плотности на данной глубине. Это формирует условия для возникновения термобарической неустойчивости и инициирует процесс опускания вод либо до дна, либо до тех глубин, которые по физическим условиям соответствуют их плотности (рис.2).

Таким образом, на основании сценарных расчетов можно сделать предварительный вывод о том, что диссоциация газогидратов может привести к запуску глубокой конвекции и обновлению глубинных вод озера.

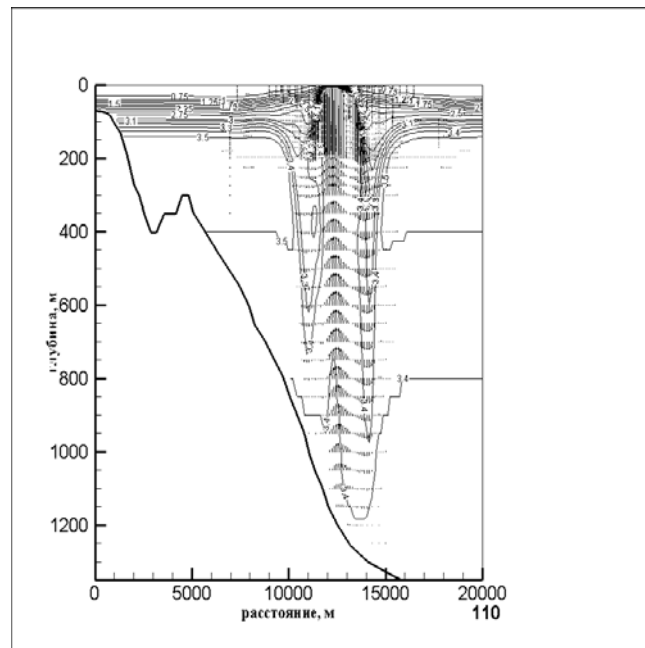


Рис. 2. То же, что и на рис.1, но через 11 час после начала сценария

Литература

1. Schmid, M., N. M. Budnev, N. G. Granin, et al. Lake Baikal deepwater renewal mystery solved//Geophys. Res. Lett., 2008, Vol. 35, L09605.
2. Tsimitri, C., B. Rockel, A. Wuest, et al. Drivers of deep-water renewal events observed over 13 years in the South Basin of Lake Baikal// J. Geophys. Res. Oceans, 2015, vol. 120, P. 1508-1526.
3. Н. Г. Гранин, В. В. Козлов, Е. А. Цветова, Р. Ю. Гнатовский Полевые исследования и некоторые результаты численного моделирования кольцевой структуры на льду озера Байкал// ДАН, 2015, том 461, № 3, с. 343-347

РАСЧЕТ ИЗМЕНЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ СОЛИ В ТАГАНРОГСКОМ ЗАЛИВЕ ПРИ СГОНАХ-НАГОНАХ

Чикин А.Л.* , Клещенок А.В.* , Чикина Л.Г.**

* *Институт аридных зон Южного научного центра РАН, Ростов-на-Дону*

** *Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону*

С начала XXI века участились катастрофические наводнения в Таганрогском заливе и дельте Дона. О последствиях, связанных с затоплением больших площадей дельты Дона уже не раз говорилось. Это и многомиллионные экономические потери, и даже гибель людей. В данной работе представлена еще одна сторона данного природного явления.

Для Азовского моря характерна значительная пространственная неоднородность солености. Если в Таганрогском заливе концентрация солености составляет 0,5-0,7‰, то в районе Керченского пролива она возрастает до 13-14‰. Однако во время экстремальных нагонов воды в Таганрогский залив (низовок) наблюдается существенное увеличение концентрации соли в Таганрогском заливе в целом и устье Дона, в частности. Это приводит к тому, что в водозаборы, предназначенные для питьевой воды, попадает осолоненная вода, наносится большой вред участкам обрабатываемой земли (слой соленого ила доходит до 1,5 - 2 см, и на нем ничего не растет).

В настоящее время, используя осредненные данные наблюдений, построены карты солености Азовского моря, как по временам года, так и для каждого месяца [1]. В то же время для экстремальных нагонов имеются, в лучшем случае, точечные наблюдения на одной-двух станциях. Целью данной работы являлось рассчитать поле солености именно во время штормовых нагонов.

Численное исследование процесса распределения поля солености в восточной части Таганрогского залива при штормовых нагонах проводилось с помощью трехмерной математической модели переноса вещества, описываемой уравнением конвекции-диффузии [2].

$$\frac{\partial s}{\partial t} + u \frac{\partial s}{\partial x} + v \frac{\partial s}{\partial y} + w \frac{\partial s}{\partial z} = \mu_{xy} \left(\frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial s}{\partial z} \right)$$

где s – концентрация; $\mathbf{V} = \{u, v, w\}$ – вектор скорости; μ_{xy}, μ_z – коэффициенты горизонтальной и вертикальной диффузии соответственно.

Предполагается, что поток через боковую границу отсутствует $\frac{\partial s}{\partial n} = 0$. Чтобы не связываться с условиями на свободной границе Таганрогского залива и Азовского моря, расчет проводился по всему Азовскому морю, но динамика концентрации рассматривалась только в Таганрогском заливе. В

качестве начального распределения концентрации выбиралось поле солёности, соответствующее картам солёности на данное время года.

Проверка модели проводилась по наблюдаемым данным нагонов. К сожалению, таких данных немного, т.к. подобные наблюдения ранее не проводились. Рассматривались данные по нагону 27-28 июня 2014 года. Кроме того, уточнение гидродинамической составляющей модели осуществлялось по значениям уровня воды. Наблюдение проводили во внутренней точке залива, где установленная станция расположена в 5 км от устья Дона. Непрерывная запись измерителем течения производилась в течение трех суток (26-28 июня 2014 г).

На рисунке 1 представлены расчетные и наблюдаемые данные по уровню воды 27-28 июня 2014 года. Погрешность расчета не превышала 25%.

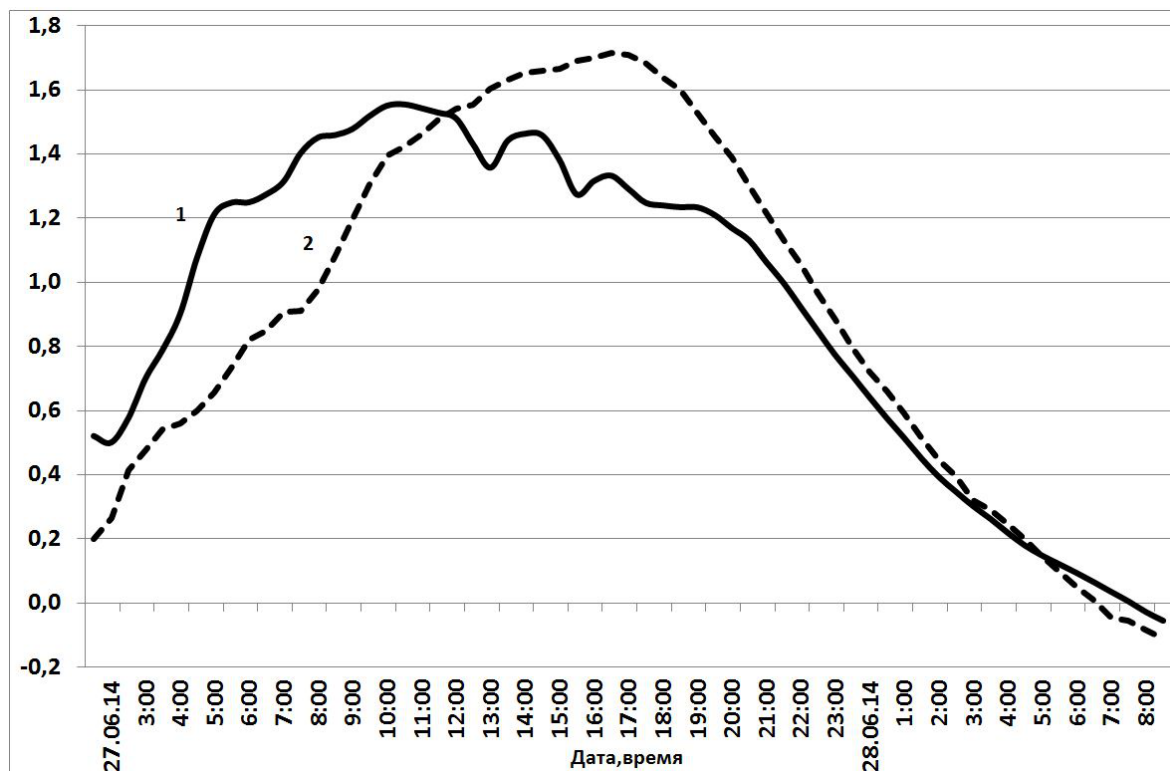


Рис. 1. Поведение уровня воды (м) 27-28 июня 2014 года. (1 - данные расчета; 2 - наблюдаемые данные)

На рисунке 2 представлены расчетные и наблюдаемые данные по солёности. Погрешность расчета не превышает 20%. В то же время оценить качество расчетов в приграничных точках нельзя, так как отсутствуют данные наблюдений на прибрежных станциях.

Целью исследования было восстановление поведения концентрации соли в дельте Дона во время экстремального нагона воды 24-25 сентября 2014 года, когда датчики учета солёности не были установлены. В период с 24 по 26 сентября 2014 года, когда были известны только изменение ветровой ситуации и уровня воды, с помощью представленной модели был проведен



Рис. 2. Изменение концентрации соли ((1 - данные расчета; 2 - наблюдаемые данные))

расчет изменения концентрации соли в восточной части Таганрогского залива. Изменение концентрации соли в точке, удаленной от устья Дона на 5 км, представлено на рисунке 3.

Видно, что при действии восточного ветра при сгоне воды из залива концентрация соли быстро убывала до значения пресной воды, а затем, при развороте ветра на западное направление, стала быстро увеличиваться и достигла значения 5,55‰. После этого, с ослаблением ветра, соленость снова стала уменьшаться.

Проведенные расчеты позволили получить предполагаемое поле распределения солености в момент наибольшей ее концентрации. Данная картина представлена на рисунке 4.

Проведенные расчеты показали, что данная модель позволяет достаточно адекватно описывать процесс перемещения соленых масс воды под действием ветра в Таганрогском заливе. Однако, в устьях рукавов Дона, где также наблюдалось увеличение концентрации соли, удовлетворительные расчетные результаты получить не удалось, так как в данный момент времени модель не учитывает процесс затопления дельты Дона.

Литература

1. Матишов Г.Г., Архипова О.Е., Чикин А.Л. Модельный подход к восстановлению пропущенных данных по солености на примере Азовского

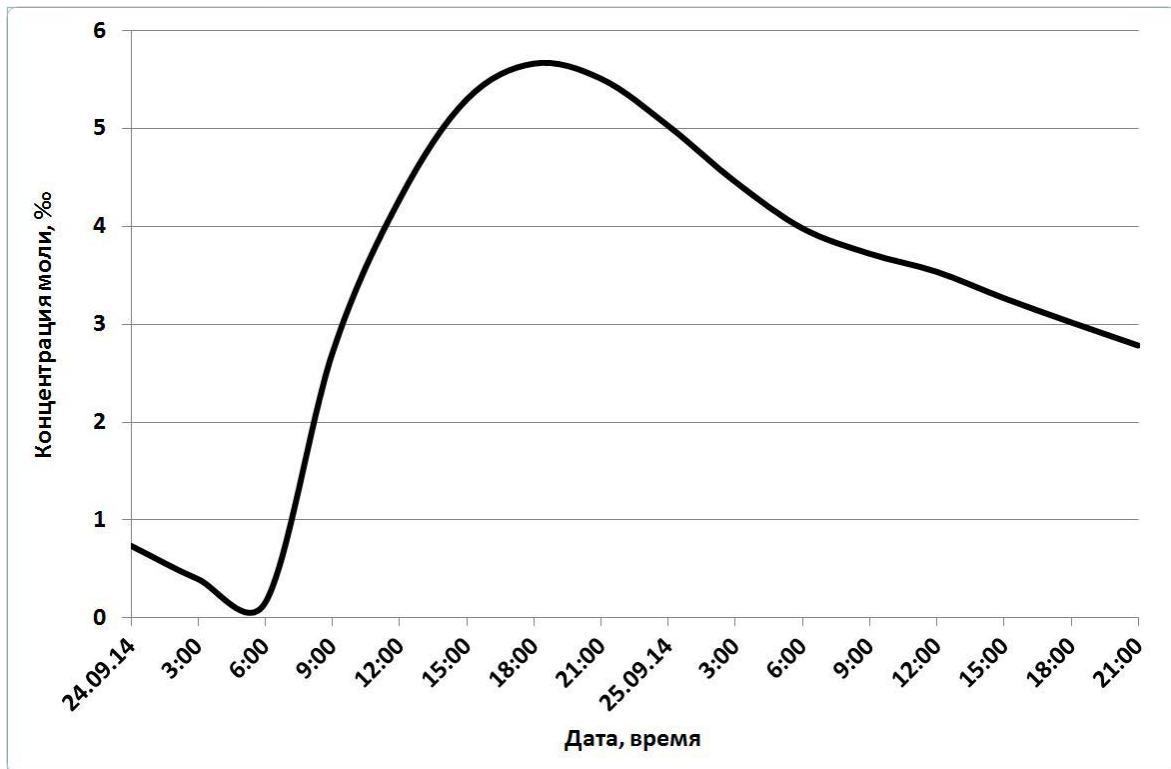


Рис. 3. Расчетная кривая изменения концентрации соли в период 24 по 25 сентября 2014 года



Рис. 4. Распределение солености в Таганрогском заливе в момент наибольшей наблюдаемой концентрации 24.09.14

2. Climatic Atlas of the Sea of Azov 2006. World Data Center for Oceanography, Silver Spring, International Ocean Atlas and Information Series, Volume 10, 106 p.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ НЕФТЯНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ В ВОДОЕМЕ С УЧЕТОМ ИЗМЕНЕНИЙ ТЕМПЕРАТУРЫ¹

Шабас И.Н., Чикина Л.Г.

ИММиКМ им.И.И. Воровича ЮФУ, Ростов-на-Дону

Введение

Авария, произошедшая в ноябре 2007 года в акватории Керченского пролива, привела к загрязнению обширных территорий Азовского моря тяжелыми нефтяными фракциями. Загрязненными оказались не только воды водоема, его береговая линия, но и дно моря, на которое опустился вылившийся мазут. В этой связи, математическое моделирование процессов оседания и подъема ранее осевших на дно нефтяных загрязнений под воздействием сезонных изменений температуры, представляет интерес для прогнозирования негативных последствий вторичных загрязнений.

I Постановка задачи

При моделировании поведения нефтяного загрязнения учитывается процесс распространения нефтяного пятна по поверхности водоема под действием сил поверхностного натяжения (растекание) и под действием течения и ветра над водоемом (дрейф) [1, 2, 6]. Также важно рассматривать процессы образования и транспорта эмульсии "нефть-вода" [4]. Немаловажными являются процессы испарения и биodeградации нефти, однако в данной работе эти процессы остались за рамками исследования.

Начальные радиусы (l_{min}, l_{max}), площадь пятна (A_s) и начальную толщину образовавшейся пленки нефти (h_{oil}) будем вычислять по формулам [3]:

$$l_{min} = 53.76 \left(\frac{\rho_w - \rho_{oil}}{\rho_{oil}} \right)^{1/3} V_{oil}^{1/3} t^{1/4},$$

$$l_{max} = l_{min} + 0.95 U_{wind}^{4/3} t^{3/4},$$

$$A_s = \frac{\pi}{4} l_{min} l_{max},$$

$$h_{oil} = \frac{V_{oil}}{A_s}.$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект №1420, государственное задание ВУЗов, базовая часть)

здесь V_{oil} – начальный объем вылившейся нефти, ρ_w, ρ_{oil} – плотность воды и нефти соответственно, t – время, U_{wind} – скорость ветра.

Процессы переноса в толще водоема описываются системой трехмерных уравнений [5, 7]:

$$\frac{\partial \bar{S}}{\partial t} = \sum_{\beta=1}^3 \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{M}_i \frac{\partial \bar{S}}{\partial x_i} \right) \right) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i \bar{S}) \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \bar{v}_i = 0,$$

где $\bar{S} = \{S_{oil}, T\}$, S_{oil} – концентрации эмульсии "нефть-вода", T – температура; $\bar{M}_i = \{D_{oil}, K_T\}_i$, D_{oil}, K_T – коэффициент турбулентной диффузии эмульсии и коэффициент турбулентного обмена температуры (соответственно), v_i – компоненты вектора скорости.

Дрейф пятна нефти по поверхности водоема описывается двумерным уравнением конвекции-диффузии [3, 9]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} + \bar{\nabla}(h\bar{v}) - \bar{\nabla}(D\bar{\nabla}h) &= R_h, \\ \bar{v} &= \left(u_x + \frac{\tau_x^w}{C_f}, u_y + \frac{\tau_y^w}{C_f} \right), \\ D &= \frac{g \cdot h^2(\rho_w - \rho_{oil})}{\rho_w C_f}, \end{aligned} \quad (2)$$

где h – толщина нефти, ∂v – скорость дрейфа пленки, $\frac{\tau_x^w}{C_f}$ – напряжение сдвига из-за ветра, D – функция диффузии распространения пятна нефти, C_f – коэффициент трения между нефтяной пленкой и поверхностью воды ($0.02 \text{ кг/м}^2 \text{ с}$), R_h – источниковая (стоковая) функция, g – ускорение свободного падения, $\bar{\nabla} = (\partial/\partial x, \partial/\partial y)$.

Системы (1) и (2) замыкаются начальными

$$\bar{S}|_{t=0} = \bar{S}_0(x, y, z), \quad h|_{t=0} = h_0(x, y, z)$$

и смешанными краевыми условиями на границе области $\partial\Omega$ [8]:

$$g_s \frac{\partial \bar{S}}{\partial n} + r_s \bar{S} \Big|_{\Omega} = p_s, \quad g_h \frac{\partial h}{\partial n} + r_h h \Big|_{\Omega} = p_h,$$

здесь $\frac{\partial}{\partial n}$ – это производная по нормали n к границе $\partial\Omega$.

Полученные системы уравнений решаются конечно-разностными методами с использованием неявных схем. В расчетной области строится прямоугольная равномерная по всем направлениям сетка. Для аппроксимации уравнения используется противопотоковая схема записи конвективных членов. Предполагается, что поле скоростей известно на каждом временном шаге.

При попадании на поверхность водоема часть нефти перемешивается с водами водоема и образует эмульсию. Интенсивность перемешивания зависит от свойств нефти, от степени волнения вод водоема. Для описания процессов взаимного перехода частиц нефти между нефтяной пленкой и взвешенной фракцией нефти в воде C_{em} использованы уравнения [4]:

$$\begin{aligned}\frac{dh}{dt} &= -\frac{K}{\rho_{oil}}(\Lambda\rho_{oil}h - z_m C_{em}), \\ \frac{dC_{em}}{dt} &= \frac{K}{z_m}(\Lambda\rho_{oil}h - z_m C_{em}).\end{aligned}$$

Здесь

$$\begin{aligned}K &= \frac{(\lambda_{ow} + \lambda_{wo})\lambda_{wo}B_1}{\lambda_{ow} + \lambda_{wo}B_1}, \\ \Lambda &= \frac{\lambda_{ow}}{\lambda_{wo}B_1}, \\ z_m &= \alpha H.\end{aligned}$$

H – задает высоту волны, α – безразмерный коэффициент масштабирования, зависящий от волнения моря ($\alpha = 1.2 - 1.6$). Коэффициенты λ_{ow} , λ_{wo} – скорость перехода нефти в состояние эмульсии и наоборот и коэффициент, характеризующий долю нефти в каплях эмульсии B_1 – вычисляются по формулам, предложенным в работе [4]. В среднем их значения могут быть заданы следующим образом: $\lambda_{ow} = \lambda_{wo} = 1 \times 10^{-4} \text{с}^{-1}$, $B_1 = 0.5$.

Растекание нефти приводит к увеличению исходного объема нефти и к уменьшению ее исходных вязкости и плотности. К изменению плотности и вязкости нефти и вод водоема также приводят колебания температуры (Рис. 1).

Плотности воды (ρ_w) и нефти (ρ_{oil}) в зависимости от температуры могут быть вычислены по формулам:

$$\begin{aligned}\rho_w(T) &= 1000.30 - 0.06 \cdot T(1.0 + T \cdot 0.06), \\ \rho_{oil}(T) &= \rho_{oil}^0(1 + \xi(20 - T)),\end{aligned}$$

здесь ρ_{oil}^0 – начальная плотность рассматриваемого нефтепродукта, а ξ – коэффициент его объемного расширения.

Вязкость воды (ν_w) и нефти (ν_{oil}) в зависимости от температуры рассчитываются по формулам:

$$\begin{aligned}\nu_w(T) &= \frac{A}{1.0 + B \cdot T + C \cdot T^2}, \\ \nu_{oil}(T) &= \nu^* e^{(-u(T-T^*))},\end{aligned}$$

где A, B, C – эмпирические коэффициенты ($A = 0.00000178, B = 0.0337, C = 0.000221$), ν^* – известная вязкость рассматриваемого нефтепродукта при некоторой температуре T^* .

II Вычислительный эксперимент

Предложенная модель была численно реализована на языке Fortran. Расчеты проводились на вычислительном кластере Института математики, механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича ЮФУ. Результаты вычислительных экспериментов приведены на рис. 1 и рис. 2.

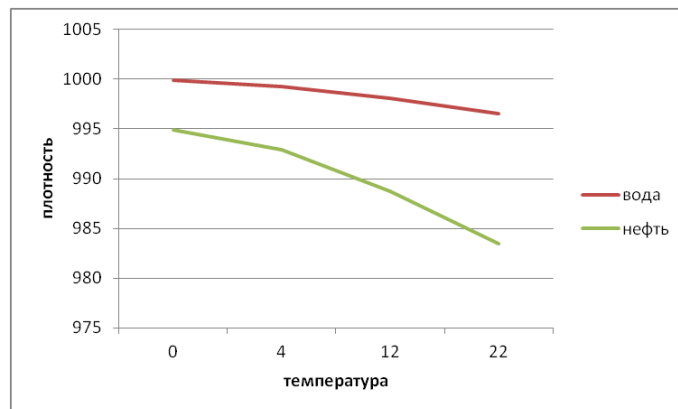


Рис. 1. Изменение плотности воды и нефти при изменении температуры.

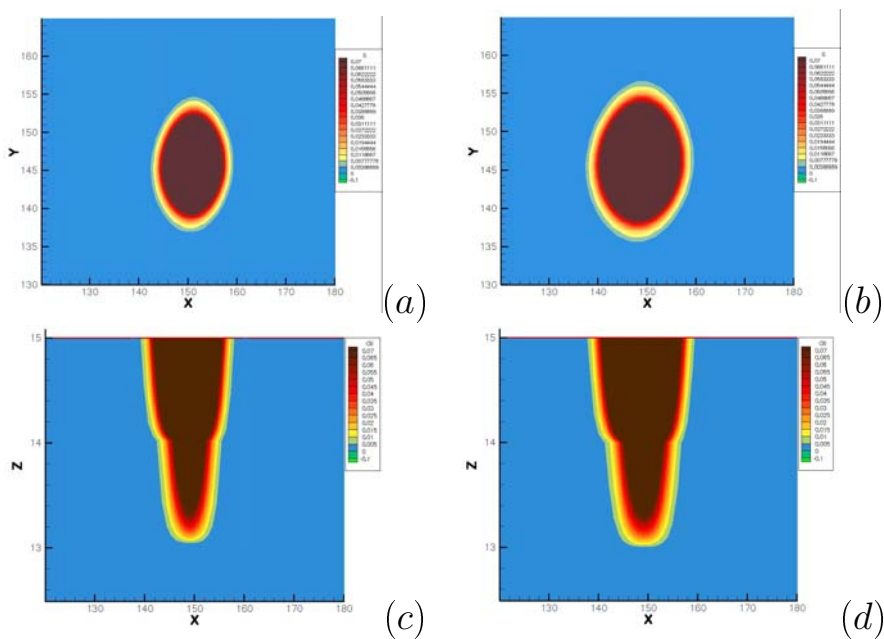


Рис. 2. Результаты моделирования растекания нефтяного пятна по поверхности (сверху) и распределения эмульсии в толще водоема (снизу) при $T = 0^\circ C$ (справа) и при $T = 22^\circ C$ (слева)

Литература

1. *J.A.Fay* "The spread of oil slicks on a calm sea" In: Oil on the sea, Plenum Press. - New-York, 1969, p.53-63.
2. *J.A.Fay* "Physical processes in the spread of oil on a water surface" In: Proc. of the Joint Conf. on prevention and control of oil spills. Washington, 1971 (cit. N8).
3. *Ehsan Sarhadi Zadeh1 and Kouroshe Hejazi* "Eulerian Oil Spills Model Using Finite-Volume Method with Moving Boundary and Wet-Dry Fronts" // Modelling and Simulation in Engineering Volume 2012 (2012), Article ID 398387, 7 pages, <http://dx.doi.org/10.1155/2012/398387>
4. *Pavel Tkach* A CFD solution of oil spill problems // Environmental Modelling & Software. Т. 21. 2006. pp.271-282.
5. *Белолыпецкий В.М., Генова С.Н., Луковенко П.Н.* Численное моделирование гидротермического режима непроточного водоема. // Proceedings of International conference RDAАММ-2001, Vol 6, Pt 2, 2001, pp.121-126
6. *Карабалин У.С.* Методы ликвидации и предупреждения аварийных ситуаций при освоении месторождений углеводородного сырья. Монография. Алматы, 2008, 185с.
7. *Крукиер Л.А.* Неявные разностные схемы и итерационный метод их решения для одного класса систем квазелинейных уравнений // Изв. Вузов. Матем, 1979, №7, с.41-52.
8. *Шабас И.Н.* Численное решение трехмерной задачи оседания вещества в Азовском море. // Сборник трудов IX Всероссийской школы-семинара "Современные проблемы математического моделирования Ростов-на-Дону, Издательство РГУ, 2001г., с.414-417.
9. *И.Н. Шабас, А.Л. Чикин, Л.Г. Чикина* Математическое моделирование задач переноса многокомпонентных примесей в Азовском море на многопроцессорных вычислительных системах // Известия ЮФУ, Технические науки. 2014. №12, сс 200-210

УСЛОВИЯ БАЛАНСА ЭФФЕКТИВНОСТИ ЭКОНОМИКИ И СОЦИАЛЬНОЙ СПРАВЕДЛИВОСТИ

Шведовский В.А.

МГУ им.М.В.Ломоносова, Москва

Конституция РФ (1993 г.) в статье 7 декларирует: Российская Федерация является социальным государством. Одно из его основных назначений: обеспечивать баланс между рыночной эффективностью и социальной справедливостью.

Опыт развития РФ за последние годы показал, как нелегко государственным структурам удерживать под контролем воздействия на параметры СОВ комплекса экзогенных и эндогенных социально-экономических факторов. Неудачи в этой работе ведут к росту протестов.

Цель статьи: *найти условия оптимизации названного выше баланса.*

Чтобы исследовать на уровне модельного описания действие основных факторов, формирующих протестный потенциал, возьмём за основу описания СОВ производственную функцию $F(K, L, I)$ и составим в общем случае нелинейное уравнение в частных производных первого порядка (ч.п.п.), заданное в неявной форме относительно F – производственной функции, её трёх (а не двух!) кумулятивных аргументов – переменных (занятости – L , капитала – K и объёма знаний – I). По стандартной (на основе геометрии контактной структуры) методике для уравнения ч.п.п. выведены уравнения характеристик. Они, как система ОДУ первого порядка, содержат и производные $\partial F/\partial K$, $\partial F/\partial L$, $\partial F/\partial I$, входящие в баланс факторов, отражающих идею, что любые социальные изменения требуют для своей реализации разных, как и денежных, ресурсов:

$$\Phi(M, L, I, F(K, L, I), p, l, h) = 0 \quad (1)$$

где $\partial F/\partial K = P_K = p$, $\partial F/\partial L = P_L = l$, $\partial F/\partial I = P_i = h$. По классификации Г.Б. Клейнера, p – ставка по кредитам, l – заработная плата, h – стоимость произведенной информации (автоматизированное рабочее место – АРМ). Ранее было показано, что система ОДУ для эффективно функционирующей экономики выводится из (1):

$$\left\{ \begin{array}{l} dK/dt = \partial\Phi/\partial P_K \\ dL/dt = \partial\Phi/\partial P_L \\ dI/dt = \partial\Phi/\partial P_I \\ d(\partial F/\partial K)/dt = -(\partial\Phi/\partial K + \partial\Phi/\partial F * \partial F/\partial K) \\ d(\partial F/\partial L)/dt = -(\partial\Phi/\partial L + \partial\Phi/\partial F * \partial F/\partial L) \\ d(\partial F/\partial I)/dt = -(\partial\Phi/\partial I + \partial\Phi/\partial F * \partial F/\partial I) \\ dF/dt = \partial F/\partial K * dK/dt + \partial F/\partial L * dL/dt + \partial F/\partial I * dI/dt \\ P_K * (\partial P_L/\partial I - \partial P_I/\partial L) + P_I * (\partial P_K/\partial L - \partial P_L/\partial K) + P_L * (\partial P_L/\partial K - \\ - \partial P_K/\partial I) = 0 \end{array} \right. \quad (2)$$

Теорема Фробениуса – условие вывода системы ОДУ – уравнений характеристик для (1) при обобщении: $F(K,L) > F(K,L,I)$. При этом, как обычно, в математической экономике все $K, L, I, P_K, P_L, P_I, F > 0$.

Система (2) – модель ядра СОВ для функционирующей экономики. *Обязательным условием вывода этой системы является $\partial\Phi/\partial F \neq 0$, что интерпретируется как признание отсутствия социального равенства.* Но с другой стороны, это является и признанием необходимости учёта в СОВ социальных переменных, как минимум, *показателя социального неравенства.* В противном случае $\partial\Phi/\partial F = 0$ означает социально-однородное, т.е. "уравнительное" общество, но и ведущее к не работающей эффективно экономике.

И тогда будет последовательной и актуальной такая постановка задачи: *до какой меры должно быть социальное неравенство?*

Или по-другому: как обеспечить разумный выбор между социально несправедливой экономической эффективностью – $\partial\Phi/\partial E \neq 0$ и экономически неэффективной социальной справедливостью $\partial\Phi/\partial E = 0$.

Для нахождения условий декларированного выбора выдвигается социологическая гипотеза о том, что выражение для неравенства $\partial\Phi/\partial \neq 0$ представимо как некоторая функция $f(G)$, где G – индекс Джини, в частности, это линейная функция: $f(G) = \alpha * (G - G_0)$, измеряющая уровень избыточности социального неравенства, а G_0 – порог Шевякова А.Ю.[1]

Тогда по совокупности условий система (2) переписывается в виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} dK/dt = \partial\Phi/\partial P_K \\ dL/dt = \partial\Phi/\partial P_L \\ dI/dt = \partial\Phi/\partial P_I \\ d(P_K)/dt = -(\partial\Phi/\partial K + \alpha * (G - G_0) * \partial F/\partial K) \\ d(P_L)/dt = -(\partial\Phi/\partial L + \alpha * (G - G_0) * \partial F/\partial L) \\ d(P_I)/dt = -(\partial\Phi/\partial I + \alpha * (G - G_0) * \partial F/\partial I) \\ dF/dt = P_K * dK/dt + P_L * dL/dt + P_I * dI/dt \\ P_K * (\partial P_L/\partial I - \partial P_I/\partial L) + P_I * (\partial P_K/\partial L - \partial P_L/\partial K) + P_L * (\partial P_L/\partial K - \\ - \partial P_K/\partial I) = 0 \end{array} \right. \quad (3)$$

Записав для системы ОДУ (3) условие нахождения модели СОВ в состоянии равновесия, получаем формулу "баланса" факторов воспроизводства, которую необходимо принять социальному государству как одну из основных догм макроуправления:

$$\begin{aligned} G_0 - G &= 1/a * (\partial\Phi/\partial K)/(\partial F/\partial K) \\ G_0 - G &= 1/a * \partial\phi/\partial L)/(\partial F/\partial L) \\ \partial\Phi/\partial I &= (\partial\Phi/\partial K)/(\partial F/\partial K) = (\partial\Phi/\partial L)/(\partial F/\partial L) \end{aligned} \quad (4)$$

В модели были учтены механизмы 1) "бегства капитала" и 2) "протеста". И тогда искомым баланс может быть представлен функцией Лагранжа, в которой функция благосостояния Z записана вместе с уравнениями названных механизмов с учётом неопределённых множителей Лагранжа.

Степень доверия масс социума к властным структурам связана с величиной G – индекса социального неравенства (Джини), а точнее $\alpha * (G - G_0)$ по следующей логике: чем больше избыточное неравенство, тем ниже степень доверия и наоборот. Мотивом количественной разработки этой идеи явилось установление [2] статистического факта: степень доверия X связана с производительностью труда Y ($Y=F/L$), а т.е. и с функцией благосостояния Z [3], уравнением регрессии (5):

$$Y = F/L = b_0 + b_1 * X, b_0 = -76.631, b_1 = 0.876, corr = 0.957 \quad (5)$$

Попытка прямолинейного использования (5) для построения уравнений – ограничений (6), (7), (8), (9) и применения метода неопределённых множителей Лагранжа оказалась неудачной:

$$(L * dF/dt - F * dL/dt) * L^{-2} = b_1 * dX/dt \quad (6)$$

$$dF/dt/F \geq dL/dt/L \quad (7)$$

Смысл соотношения (7): темп роста ВВП должен быть не менее темпа роста занятости – одно из условий не уменьшения уровня доверия к институтам власти. Другое условие – из совместного рассмотрения (3,6):

$$P_K * dK/dt + P_L * dL/dt + P_I * dI/dt \geq dL/dt * F/L \quad (8)$$

Или:

$$P_K * dK/dt + P_I * dI/dt + (P_L - F/L) * \partial\Phi/\partial P_L \geq 0 \quad (9)$$

Формальными кандидатами на функции благосостояния могут быть:

$$Z = f(F, L), Z = f(G, L), Z = f(I, L), Z = f(F, I), Z = f(F, G), Z = f(I, G).$$

Из теоретических соображений наиболее адекватными функциями для текущей ситуации являются функции, содержащие в качестве аргумента L – *варьирование занятостью*, т.е. первые 3 данного ряда. Тогда естественным дополнением в *управлении* двухчастной моделью (трудящиеся – элита) оказывается аргумент G – *варьирование степенью социального неравенства*.

Построив функцию Лагранжа для $Z = f(G, L)$ и определив из необходимых условий координаты условного экстремума и значения неопределённых множителей, получили возможность определить достаточные условия максимума функции благосостояния при отсутствии роста социальной напряжённости.

Заключение

1. Получены условия сохранения и укрепления доверия большинства населения к институтам власти.
2. Из шести функций благосостояния общества для применения метода неопределённых множителей Лагранжа были выбраны две $Z = f(F, L), Z = f(G, L)$. Для первой из них попытка получить достаточные условия максимума оказалась неудачной.
3. Получены достаточные условия максимума для $Z = f(G, L)$, т.е. укрепления доверия большинства населения к институтам власти посредством вариаций G и L , заключающиеся в реализации 2-х стратегий управления: 1) снижения социального неравенства на 5ую долю % и увеличения занятости на 9%, 2) снижения социального неравенства на 1% и снижения занятости на 2% .

4. Имеется точка роста данного подхода, заключающаяся в анализе остальных 4-х функций $Z = f(I, L)$, $Z = f(F, I)$, $Z = f(F, G)$, $Z = f(I, G)$ и построении функции Лагранжа для трёх управляющих параметров, например, для $Z = f(G, L, k_I)$.
5. Такие решения позволяют найти оптимум искомого баланса *для конкретного этапа* развития российской системы общественного воспроизводства, т.е. в условиях мирового кризиса, западных санкций и перехода на новую не сырьевую модель развития.

Литература

1. *Шевяков А.Ю., Кирута А.Я.* Неравенство, экономический рост и демография: неисследованные взаимосвязи. – *Научная монография*, Москва, М-Студио, 2009.
2. *Шведовский В.А., Шведовская Т.Л.* Моделирование динамики роста среднего класса (проблемы и перспективы формирования доверия к вертикали власти в России) // Математическое моделирование социальных процессов. Выпуск 16, М. -2014, С.197-221.
3. *Ефимов Б.А.* Социальная справедливость, общественное благосостояние и взаимность // Математическое моделирование социальных процессов / Под ред. А.П.Михайлова. Выпуск 9, М. 2007, С.15-38.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЯРКОСТИ ЭВТРОФНЫХ ВОДОЁМОВ

Шляхова Л.А., Повх В.И.

*Южный Российский Информационный Аналитический Центр,
г. Ростов-на-Дону*

Дистанционные методы контроля состояния поверхностных вод суши основаны на интерпретации спектральных свойств отраженного от воды излучения. Для установления однозначности спектрального признака необходимо наличие опорной информации в виде каталога отражательных характеристик отдельных компонент, вносящих максимальный вклад в спектральную яркость природной воды. Создать обсуждаемый каталог представляется возможным на основе лабораторного эксперимента. Анализ результатов по предлагаемой в работе однокомпонентной модели позволит решить обратную задачу для частного случая – определить содержание выделенной компоненты по дистанционно измеренному параметру.

Цель настоящей работы – выявление дешифровочного признака степени зарастания водоемов в лабораторных условиях на модели однокомпонентной смеси: дистиллированная вода плюс водоросль хлорелла в различных концентрациях, т.е. модели с различными концентрациями хлорофилла-а, обуславливающего поглощение в природной воде.

Исходные данные – это результаты измерений спектральной яркости однокомпонентной модели – суспензии водоросли хлорелла в области 400 – 800 нм (спектральное разрешение 2 нм) с последующим определением коэффициента спектральной яркости при различных концентрациях хлорофилла-а.

Результаты решения обратной задачи на основе теоретических расчетов – это спектральная яркость в заданных экспериментом спектральном интервале и концентрациях хлорофилла-а, полученная в приближении однократного рассеяния на биологических частицах (хлорелла) с учетом Релеевского рассеяния. Построение био-оптической модели как рассеивающей и поглощающей природной среды в однокомпонентном приближении сводится к моделированию оптических свойств ее диспергированного элемента. В модель расчета спектральной яркости включены два вида ослабления света: молекулярное рассеяние или рассеяние Релея и поглощение крупными биогенными частицами. При построении замкнутой модели оптических характеристик использовались допущения, соответствующие современным представлениям о его структуре: гидрозоль имеет полидисперсную систему и представляется эквивалентной системой однородных частиц сферической формы.

Результаты эксперимента. Спектры яркости однокомпонентной модели представлены на рис. 1, где яркость характеризуется относительной величиной как отношение яркости эталона V_0 (баритованная бумага) к абсолютному значению яркости V , измеренной спектрометром. При увеличении концентрации хлорофилла-а излучательная способность модели возрастает по сравнению с чистой водой и наблюдается корреляция со спектрами поглощения. Как результат исследования однокомпонентной модели следует рассматривать выявление наряду с известной полосой поглощения хлорофилла-а при длине волны 680 нм пика отражения на длине волны 715 нм (рис. 1), по-видимому, также обусловленного определенными пределами изменения концентрациями хлорофилла-а.

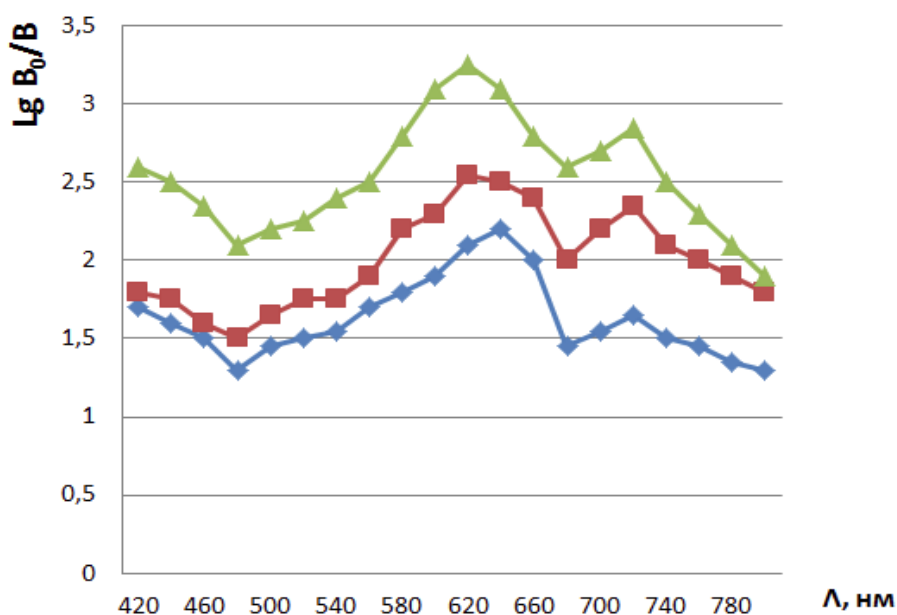


Рис. 1. Спектральная яркость суспензии одноклеточной водоросли хлореллы: \diamond – $C_{\text{хл-а}}$ – 7 мг/м³; \square – $C_{\text{хл-а}}$ – 33 мг/м³; \triangle – $C_{\text{хл-а}}$ – 60 мг/м³.

Исходя из предпосылок, что выявленные особенности в спектрах следует рассматривать как дешифровочный признак биологически активных веществ и используя возможность изменения в лабораторных условиях одного параметра модели — концентрации хлорофилла-а, получена линейная зависимость $\lg V_0/V$ от концентрации хлорофилла-а для полосы поглощения при 680 нм и выявленной полосы отражения при 715 нм (рис.2).

Уравнения регрессии с коэффициентами корреляции 0,93 и 0,88 имеют вид:

$$\begin{aligned} \lg V_0/V &= 0,56 + 1,63 \lg C_{\text{хл-а}} && (680 \text{ нм}); \\ \lg V_0/V &= 0,33 + 1,21 \lg C_{\text{хл-а}} && (715 \text{ нм}). \end{aligned}$$

Установленная связь между концентрацией хлорофилла-а и дистанционно измеренным параметром — спектральной яркостью — создает предпосылки для решения обратной задачи — дистанционному контролю содержания хлорофилла-а в эвтрофных природных водоемах.

Результаты теоретических расчетов. Предложенное однокомпонентное приближение позволило выполнить теоретические расчеты спектральной коэффициента яркости в заданных экспериментом спектральном интервале и концентрациях хлорофилла-а, используя "квазиоднократное" приближение решения уравнения переноса излучения [1] с учетом Релевского рассеяния чистой водой:

$$\rho'(\lambda) = \frac{\Lambda \chi(\beta')}{4(1 + |\cos \beta'|) [1 - \Lambda \Phi(\beta')]},$$

где $\Lambda = \sigma/\varepsilon$ — вероятность выживания кванта света, $\chi(\beta') = 4\pi\sigma(\beta)$ — индикатриса рассеяния, β' — угол между направлением распространения в воде падающего пучка света и нормалью слоя, $\Phi(\beta')$ — интегральная функция от $\chi(\beta')$, равная при $\beta' = 180^\circ$ доле света, рассеянного вперёд.

Поскольку было принято присутствие только крупнодисперсной биогенной фракции, то учитывалось, как и ранее [2], что в средней области B' вариации дисперсности несущественно влияют на угловое распределение интенсивности рассеяния и рассматривалась система частиц с показателем преломления $m = 1,05 - i10^{-3}$ с логарифмически-нормальным спектром размеров при фиксированном значении среднего объемно-поверхностного радиуса $r = 10$ мкм. Результаты сравнения значений спектральной яркости по теоретическим и экспериментальным моделям показаны на рис.3.

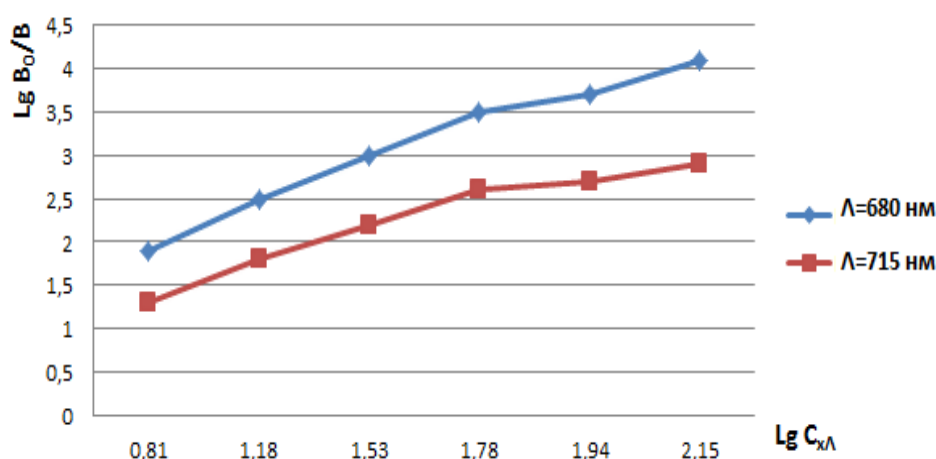


Рис. 2. Зависимость величины $\lg B_0/B$ от концентрации хлорофилла-а: \diamond — для полосы поглощения при 680 нм; \square — для пика отражения при 715 нм.

Полученные в работе результаты могут рассматриваться как основа для перехода к многокомпонентным моделям природных водоемов.

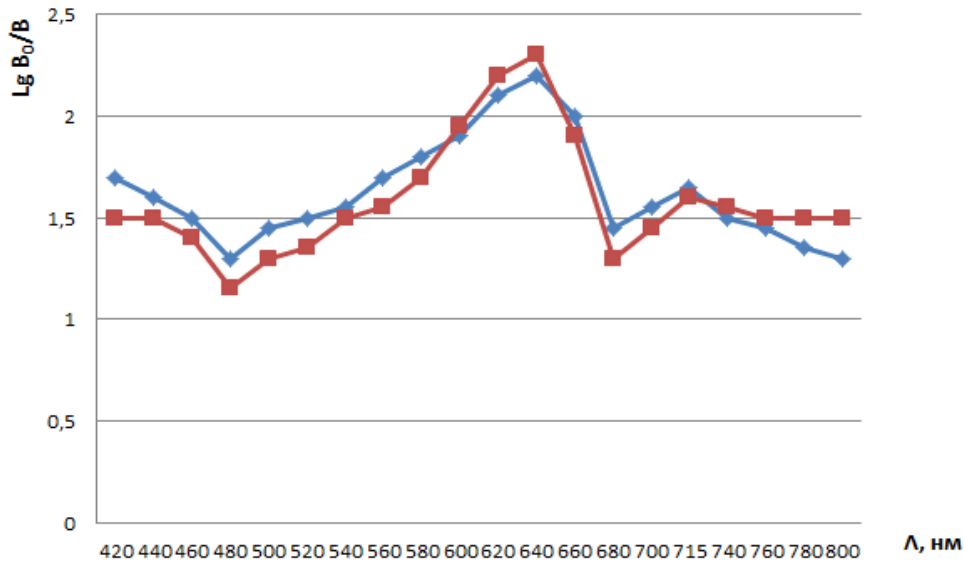


Рис. 3. Сравнение спектрального хода яркости суспензии одноклеточной водоросли хлореллы с $C_{\text{хл-а}} = 7 \text{ мг/м}^3$: \diamond – экспериментальные данные; \square – расчетные данные.

Литература

1. *Зеге Э.П.* Распространение света в дисперсной среде. Минск: Наука и техника, 1982. С. 84–105.
2. *Шляхова Л.А.* Расчет коэффициента яркости отраженного излучения для эвтрофных вод по индикатрисе рассеяния. // Сб. трудов XV Всероссийской конференции молодых исследователей "Современные проблемы математического моделирования". Ростов-на-Дону, издательство Южного федерального университета. 2013. С. 286–288.

РЕШЕНИЕ

XVI ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ-ШКОЛЫ МОЛОДЫХ
ИССЛЕДОВАТЕЛЕЙ
"СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ"

С 14 по 19 сентября 2015 состоялась XVI Всероссийская конференция-школа молодых исследователей "СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ".

В работе Конференции-школы приняли участие 85 ученых из 10 городов России, представлявшие 23 научных центра. Из них 18 докторов наук, 22 кандидата наук, 6 аспирантов, 2 магистранта и 4 студента. Было прочитано 11 лекций ведущими российскими учеными в области математического моделирования, сделаны 40 докладов исследователями различных научных центров, из которых 24 доклада были сделаны молодыми учеными.

Подводя итоги проведенной Конференции-школы, участники отмечают

- высокий научный уровень представленных докладов, разнообразие тематик и новые оригинальные подходы к решению задач математического моделирования;
- возросший интерес к участию в работе Конференции-школы молодых ученых;
- высокую активность молодых ученых, студентов, аспирантов и высокое качество сделанных ими докладов

и постановляют

- выразить благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований за финансовую поддержку в проведении Конференции-школы;
- выразить благодарность профессорам Пененко В.В. и Сороковиковой О.С. за привлечение к работе школы большого количества молодых ученых из возглавляемых ими научных коллективов;
- выразить благодарность Оргкомитету за проведенную им работу по организации Конференции-школы;
- выразить благодарность администрации и сотрудникам пансионата "Моряк" за помощь в проведении Конференции-школы;
- опубликовать Труды Конференции-школы до 31 октября 2015 года;
- выставить презентации лекций на сайте Конференции-школы;

- наметить проведение XVII Всероссийской конференции-школы "СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ" на 2017 год.

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Сборник трудов XVI Всероссийской конференции-школы молодых исследователей.

Ответственные редакторы: Крукиер Л. А., Муратова Г.В.

Технический редактор: Шабас И. Н.

Подписано в печать 17.12.2015.
Формат 60×84 ¹/₁₆. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 14,88. Уч.-изд. л. 10,45
Тираж 22 экз. Заказ № 4925.

Отпечатано в отделе полиграфической, корпоративной и сувенирной продукции
Издательско-полиграфического комплекса КИБИ МЕДИА ЦЕНТРА ЮФУ
344090, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 200/1, тел. (863) 247-80-51.