



Труды

**XV ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ-ШКОЛЫ
МОЛОДЫХ ИССЛЕДОВАТЕЛЕЙ**

**СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Ответственные редакторы: Четверушкин Б.Н.
Крукиер Л.А.

*Южный федеральный университет
(ЮФУ, г.Ростов-на-Дону)*

*Южно-Российский региональный центр информатизации ЮФУ
(ЮГИНФО ЮФУ, г.Ростов-на-Дону)*

*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН
(ИПМ РАН, г.Москва)*

*16-21 сентября 2013г.
Пос. Дюрсо*

УДК 519.6:532.5
ББК В 192.1
С56

Печатается по решению Редакционного совета ЮГИНФО ЮФУ

Редакционный Совет ЮГИНФО ЮФУ: к.т.н. Букатов А.А., к.ф.-м.н. Дациук В.Н., д.ф.-м.н. Крукиер Л.А.(председатель), д.ф.-м.н. Муратова Г.В., к.т.н. Лазарева С.А.(секретарь)

Серия "Математическое моделирование и современные информационные технологии", выпуск 12

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Сборник трудов XV Всероссийской конференции-школы молодых исследователей. Ростов-на-Дону, издательство Южного федерального университета, 2013, с. 296

В сборнике представлены доклады участников XV Всероссийской конференции-школы молодых исследователей "СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ", организованной Южно-Российским региональным центром информатизации Южного федерального университета и Институтом прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 13-01-06828-моб_г) и проходившей с 16 по 21 сентября 2013 года в поселке Абрау-Дюрсо, Россия. В работе Конференции-школы приняли участие представители научных центров Москвы, Новосибирска, Екатеринбурга, Красноярска, Казани, Уфы, Сарова, Ростова-на-Дону и других городов.

Оглавление

ТРЕХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ НАКАТА НЕЛИНЕЙНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ГРАВИТАЦИОННЫХ ВОЛН Аббасов И.Б.	9
КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ С УСЛОВИЯМИ ОТРАЖЕНИЯ – ПРЕЛОМЛЕНИЯ Амосов А.А.	17
ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ТЕЧЕНИЯ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ ПО СХЕМЕ КАБАРЕ В ПЛОСКОМ КАНАЛЕ ПРИ $Re_m = 5600$ Асфандияров Д.Г.	26
К ВОПРОСУ ОБ АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ БЕЗОПАСНОСТИ ТЕХНОСФЕРЫ Белозеров В.В., Олейников С.Н.	31
МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХСКОРОСТНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ДВУХ-ФАЗНОЙ ЖИДКОСТИ В ТРЕЩИНОВАТО-ПОРИСТЫХ ПЛАСТАХ Бервено Е.В., Калинин А.А., Лаевский Ю.М.	41
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МРІ/ОРЕНМР РЕАЛИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ АСИНХРОННОЙ РАБОТЫ С ПОТОКАМИ ДЛЯ ТРЕХМЕРНОЙ СХЕМЫ РАСЩЕПЛЕНИЯ В ЗАДАЧАХ ТЕПЛОПЕРЕНОСА Воронин К.В., Калинин А.А.	45
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯВЛЕНИЯ АССИМЕТРИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ В РАСТВОРЕ ЭЛЕКТРОЛИТА Горбачева Е.В., Франц Е.А., Ганченко Г.С.	51
ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ КДВБ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВОЛН В ПАРОЖИДКОСТНЫХ СРЕДАХ Горбенко Н.И.	56
КОМПАКТНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ДИФФУЗИИ И ШРЁДИНГЕРА Гордин В.А., Цымбалов Е.А.	63

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНОЙ СРЕДЫ В ОДНОСКОРОСТНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ПОСРЕДСТВОМ СХЕМЫ КАБАРЕ Данилин А.В., Головизнин В.М.	73
ЛОКАЛЬНЫЕ НЕОТРАЖАЮЩИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ В ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ И РАЗНОСТНЫХ ЗАДАЧАХ Дородницын Л.В.	78
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ЭФФЕКТОВ В ПЛАЗМЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА Ефимова А.А., Берендеев Е.А.	85
ДИФфуЗИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В МОДЕЛЯХ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫХ ТРОФИЧЕСКИХ ЦЕПЕЙ ТИПА <РЕСУРС-ПОТРЕБИТЕЛЬ> С КРОСС-ДИФфуЗИЕЙ Завалишин Н.Н.	90
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СМЕШЕНИЯ РАЗНОТЕМПЕРАТУРНЫХ СТРУЙ МЕТОДОМ КАБАРЕ Зайцев А.М.	96
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ ЗА ВЫСТУПОМ В КАНАЛЕ ПРИ ПЕРЕХОДЕ К ТУРБУЛЕНТНОСТИ Калинин Е.И., Мазо А.Б., Молочников В.М.	101
МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ В ОКРЕСТНОСТИ ТЕКТОНИЧЕСКИХ РАЗЛОМОВ И ТРЕЩИН ГИДРОРАЗРЫВА ПЛАСТА Калинин Е.И., Мазо А.Б., Поташев К.А.	106
ПЕРВЫЕ ИНТЕГРАЛЫ ОБЫКНОВЕННЫХ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ, НЕ ОБЛАДАЮЩИХ ВАРИАЦИОННОЙ ПОСТАНОВКОЙ Капцов Е.И.	111
ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ПАКЕТА "TIMES" Клочкова Л.В., Тишкин В.Ф.	116

ПРИКЛАДНЫЕ АСПЕКТЫ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБЪЕКТОВ ПО
АЭРОКОСМИЧЕСКИМ ИЗОБРАЖЕНИЯМ ЗЕМНОЙ ПОВЕРХНО-
СТИ

Козодеров В.В., Дмитриев Е.В. 120

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХМЕРНЫХ ТЕЧЕНИЙ СХЕ-
МОЙ КАБАРЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ СЛАБОЙ СЖИМАЕМОСТИ

Кондаков В.Г. 134

АНАЛИЗ СОСУЩЕСТВОВАНИЯ КОНКУРИРУЮЩИХ ПОПУЛЯ-
ЦИЙ НА ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНОМ КОЛЬЦЕВОМ
АРЕАЛЕ

Кругликов М. Г. 142

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ ЛОКАЛИЗАЦИИ СПЕКТРА ПРОИЗВЕДЕНИЯ
ДВУХ НЕСАМОСОПРЯЖЕННЫХ МАТРИЦ

Крукиер Л.А., Крукиер Б.Л. 147

ЛИМИТЕР ПОВЫШЕННОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ ДЛЯ РАЗРЫВ-
НОГО МЕТОДА ГАЛЕРКИНА НА ТРЕУГОЛЬНЫХ СЕТКАХ

Ладонкина М.Е., Неклюдова О.А., Тишкин В.Ф. 151

НОВАЯ СТРУКТУРА ДАННЫХ ДЛЯ РАСЧЕТА БЛИЖНЕГО ВЗАИ-
МОДЕЙСТВИЯ В МЕТОДАХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Мальшев В.,Л., Марьин Д.Ф., Моисеева Е.Ф. 155

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ УСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ЭФФЕКТИВНЫ-
МИ ИТЕРАЦИОННЫМИ МЕТОДАМИ

Мартынова Т.С. 160

МНОГОСЕТОЧНЫЙ МЕТОД В ЗАДАЧАХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МЕ-
ХАНИКИ ЖИДКОСТИ И ГАЗА

Муратова Г.В., Андреева Е.М. 170

О МОДЕЛИРОВАНИИ ПАССИВНОГО МАССОПЕРЕНОСА В РУСЛО-
ВЫХ ПОТОКАХ

Надолин К.А. 184

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НАЧАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ ЭЛЕ-
МЕНТОВ КОНСТРУКЦИИ СИСТЕМЫ АВАРИЙНОГО СПАСЕНИЯ
НА ТЕМПЕРАТУРНЫЙ РЕЖИМ НА УЧАСТКЕ ВОЗВРАЩЕНИЯ

Наливайко С. И. 189

STATISTICS TOOL KIT - ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ СРЕДСТВА ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ Новаев Д.А., Липов Д.И., Колпаков С.И.	193
ВАРИАЦИОННОЕ УСВОЕНИЕ ДАННЫХ ДЛЯ МОДЕЛЕЙ КОНВЕКЦИИ-ДИФФУЗИИ-РЕАКЦИИ Пененко А.В.	196
ВАРИАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ ПОСТРОЕНИЯ ДИСКРЕТНО-АНАЛИТИЧЕСКИХ СХЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНИКИ ИНТЕГРИРУЮЩИХ МНОЖИТЕЛЕЙ Пененко В.В.	198
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНО-ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ Пичугина О.А.	203
ЛОКАЛИЗАЦИЯ СИНГУЛЯРНОСТЕЙ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ И АДАПТАЦИЯ РАСЧЕТНОЙ СЕТКИ К ПОЛОЖЕНИЮ РАЗРЫВОВ Плёткин А.В.	209
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТМОСФЕРНОГО ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ В БАЙКАЛЬСКОМ РЕГИОНЕ Пьянова Э.А.	215
ОБ ОДНОЗНАЧНОЙ РАЗРЕШИМОСТИ R_ν -ОБОБЩЁННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ С ВЫРОЖДЕНИЕМ НА ГРАНИЦЕ Рукавишникова Е.И.	220
РАЗРАБОТКА И РЕАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ СРЕДЫ Свободина К.С.	224
ОБОСНОВАНИЕ СХОДИМОСТИ ДИСКРЕТНЫХ АНАЛОГОВ СОПРЯЖЕННО-ОПЕРАТОРНЫХ МОДЕЛЕЙ Сорокин С.Б.	228

РANS МОДЕЛЬ АТМОСФЕРНОЙ ДИСПЕРСИИ ДЛЯ ОЦЕНКИ РА- ДИАЦИОННОЙ ОБСТАНОВКИ В УСЛОВИЯХ СЛОЖНОЙ ТРЕХ- МЕРНОЙ ГЕОМЕТРИИ ОБЪЕКТА. НЕКОТОРЫЕ ДРУГИЕ МОДЕЛИ И ПРОГРАММНЫЕ КОМПЛЕКСЫ В ЗАДАЧАХ РАДИОЭКОЛОГИИ Сорокикова О.С., Семенов В.Н., Дзама Д.В.	233
МОДЕЛИ ТЕРМОДИФфуЗИОННОЙ КОНВЕКЦИИ: СИММЕТРИИ И ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ Степанова И.В.	241
ПРИМЕНЕНИЕ ОБЛАЧНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПРИ МОДЕЛИРОВА- НИИ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕХНОГЕННЫХ И КЛИМАТИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ГРУНТ, РАСПОЛОЖЕННЫЙ В ЗОНЕ ВЕЧНОЙ МЕРЗЛОТЫ Филимонов М.Ю., Ваганова Н.А., Игумнов А.С., Берсе- нев А.Ю., Васев П.А., Гусарова В.В., Халтурина Т.Ю.	246
ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА В СХЕМЕ КАБАРЕ В ОБЛАСТИ С ОБРАТНОЙ СТУПЕНЬКОЙ Финогенов С.А., Рязанов А.М.	256
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ КОЛЬЦЕВЫХ СТРУКТУР В ОЗЕРЕ БАЙКАЛ Цветова Е.А.	264
МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭКСТРЕМАЛЬНОГО НАВОДНЕ- НИЯ В ДЕЛЬТЕ ДОНА 23.03.13 – 24.03.13 Чикин А.Л., Чикина Л.Г.	269
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСТЕКАНИЯ И ДРЕЙФА НЕФ- ТЯНЫХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ ВОДОЕМОВ Шабас И.Н.	274
О ВЫЧИСЛЕНИИ СОЦИАЛЬНЫХ КОНСТАНТ НА ТРАЕКТОРИЯХ ЭВОЛЮЦИИ СОЦИУМА Шведовский В.А.	279
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОВОГО ПОТОКА К ПОВЕРХНОСТИ РАЗ- ГОННОГО БЛОКА С ПОМОЩЬЮ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ Шестакова Е. С.	283

СПЕКТРАЛЬНАЯ ПРОЗРАЧНОСТЬ АТМОСФЕРЫ КАК ИНСТРУ- МЕНТ АТМОСФЕРНОЙ КОРРЕКЦИИ ПРИ ИНТЕРПРЕТАЦИИ КОС- МИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ Шляхова Л.А., Боева И.Н.	286
--	-----

ТРЕХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ НАКАТА НЕЛИНЕЙНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ГРАВИТАЦИОННЫХ ВОЛН

Аббасов И.Б.

Таганрогский технологический институт Южного федерального университета, Таганрог

В работе представлена трёхмерная численная модель наката нелинейных поверхностных гравитационных волн на основе уравнений Навье-Стокса. Сформулирована постановка трёхмерной задачи, описаны граничные и начальные условия. С помощью метода расщепления по физическим процессам построена дискретная модель с учетом коэффициента заполнения ячеек. Приведены трехмерные модели поэтапного наката поверхностной гравитационной волны на береговые склоны.

Исследование процессов изменения береговых линий являются актуальными для прогнозирования и развития экосистемы мелководья. При описании волновых явлений часто используются различные модификации уравнений мелкой воды. Однако наиболее адекватно волновые процессы описывают уравнения Навье-Стокса. Эти уравнения учитывают как нелинейные эффекты, так и турбулентные процессы в вязкой несжимаемой жидкости.

Статьи [1], [2] посвящены трехмерному моделированию обрушения поверхностной волны. В работе [2] представлены результаты трехмерного моделирования наката, и обрушения волны при распространении по наклонному берегу. Для моделирования используется уравнение Навье-Стокса с учетом двухфазной среды воздух-вода.

В работе [3] исследован численный метод моделирования наката длинных волн на берег. Предложенный метод позволяет решать двумерные задачи со сложной геометрией. В рамках теории мелкой воды в работе [4] предложен метод для моделирования набегания прерывных волн на наклонный берег и их распространения по сухому руслу. Статья [5] посвящена моделированию распространения штормовых волн и цунами в рамках численного решения нелинейного уравнения мелкой воды.

В статье [6] проведены экспериментальные исследования деформации профиля обрушивающихся поверхностных волн в зоне прибоя. В работе [7] анализированы результаты экспериментальных исследований процесса наката и обрушения поверхностной волны на наклонном берегу.

Данная работа посвящена трехмерному моделированию наката поверхностных гравитационных волн в условиях мелководных заливов. Математическая модель строится на основе уравнений Навье-Стокса. В качестве модели мелководной акватории используются гидрофизические условия Азовского моря. Вопросы численного моделирования волновых явлений для данного бассейна на основе уравнений мелкой воды были рассмотрены в работе [8]. Двумерное моделирование наката на основе уравнений Навье-Стокса было

проведено в работе [9]. Трехмерные модели волновых процессов при этом являются не только наиболее информативными, также позволяют учитывать реальный трехмерный рельеф дна и берега мелководных заливов.

Согласно геометрии задачи ось x декартовой системы координат совмещена с поверхностью невозмущенной жидкости и направлена в сторону берега, ось y направлена вдоль берега, ось z – направлена вертикально вверх (Рис. 1). В начальный момент времени жидкость находится в состоянии покоя. На некотором расстоянии от берега в точке $x=0$ задается возмущение давления в виде импульса, меняющееся по мере удаления от начала координат по гармоническому закону. Проследим последующее движение водной массы в сторону берега.

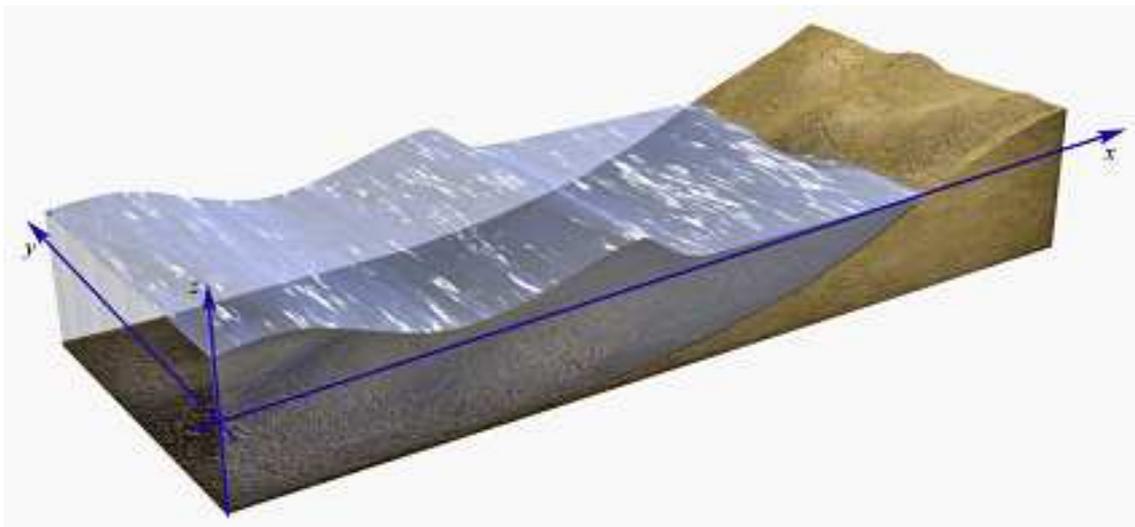


Рис. 1. Геометрия трехмерной задачи наката поверхностной гравитационной волны

Для описания трехмерных гравитационных волн на поверхности с учетом её вязкости воспользуемся трехмерными уравнениями Навье-Стокса, уравнением неразрывности для несжимаемой жидкости и уравнением гидродинамического давления [10]:

– уравнения Навье-Стокса:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \eta \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \eta \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \quad (2)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \eta \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + g, \quad (3)$$

– уравнение неразрывности для несжимаемой жидкости:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (4)$$

– уравнение полного гидродинамического давления с учетом глубины:

$$P(x, y, z, t) = p(x, y, z, t) + \rho g z, \quad (5)$$

где u, v – горизонтальные и w – вертикальная составляющие вектора скорости \mathbf{V} движения частиц водной среды, ρ – плотность жидкости, g – гравитационная постоянная, μ, η – горизонтальная и вертикальная составляющие коэффициента турбулентного обмена.

Рассмотрим граничные условия для нашей задачи. На свободной поверхности жидкости предполагаются следующие условия:

$$P(x, y, z, t) = P_{атм.}; w(x, y, z, t) = \frac{1}{g\rho} \frac{\partial P}{\partial t}, \quad (6)$$

при этом вертикальная скорость выражается через производную давления дифференцированием выражения (5) для гидродинамического давления.

На дне области предполагаются условия непротекания и скольжения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial n} V(x, y, z, t) &= 0, \rho\eta \frac{\partial}{\partial z} u(x, y, z, t) = -\tau_x(t) \\ \rho\eta \frac{\partial}{\partial z} v(x, y, z, t) &= -\tau_y(t), \rho\mu \frac{\partial}{\partial x} w(x, y, z, t) = -\tau_z(t); \end{aligned} \quad (7)$$

где \mathbf{n} – вектор нормали к донной поверхности, $\tau_x(t), \tau_y(t), \tau_z(t)$ – компоненты тангенциального напряжения на дне.

На левой и правой боковых границах, условия аналогичны условиям на дне, на тыльной границе, где располагается источник импульса:

$$\frac{\partial}{\partial n} P(x, y, z, t) = \alpha, u(x, y, z, t) = u^{(0)}, \quad v(x, y, z, t) = v^{(0)}, \quad w(x, y, z, t) = w^{(0)}. \quad (8)$$

В начальный момент времени $t=0$ жидкость находится в покое, и выполняются следующие условия: $P(x, y, z, 0) = \rho g z, u(x, y, z, 0) = 0, v(x, y, z, 0) = 0, w(x, y, z, 0) = 0.$

С помощью метода расщепления по физическим процессам проводится аппроксимация исходных уравнений по временной переменной [11, 12]. Согласно данному методу расчет осуществляется в три этапа:

- на первом этапе считается поле скоростей;
- на втором этапе рассчитывается давление;
- на третьем этапе уточняется поле скоростей по давлению;

Разработана дискретная конечно-объемная модель задачи с учетом коэффициента заполненности ячеек [13, 14]. Расчетная область по пространственным направлениям представляет собой куб. Для численной реализации дискретной математической модели вводится равномерная сетка [15, 16]:

$$\begin{aligned} \varpi_h &= \{x_i = ih_x, y_j = jh_y, z_k = kh_z; \\ i &= \overline{0..N_x}, j = \overline{0..N_y}; k = \overline{0..N_z}; N_x h_x = l_x, \\ &N_y h_y = l_y, N_z h_z = l_z\}, \end{aligned} \quad (9)$$

где i, j, k – индексы по направлениям x, y, z ; h_x, h_y, h_z – шаги по пространству; N_x, N_y, N_z – количество узлов по пространству; l_x, l_y, l_z – пространственные размеры области. Для аппроксимации исходных дифференциальных уравнений по пространственным координатам используется интегроинтерполяционный метод.

Получены дискретные аналоги уравнений для расчета составляющих вектора скорости, поля давления, также дискретные аналоги граничных условий. Проведено исследование консервативности дискретной модели. Было установлено, что для сеточного аналога разностного уравнения соблюдается интегральный закон сохранения импульса. Погрешность аппроксимации конечно-разностной схемы по временной координате имеет первую, по пространственным координатам вторую степень. Проведено исследование устойчивости задачи на основе принципа максимума, получены ограничения на шаги по времени и по пространственным координатам.

Дискретные уравнения для расчета составляющих вектора скорости и поля давления рассчитываются по неявной схеме, для уточнения компонент поля скорости рассчитываются по явной схеме. Построенные дискретные уравнения решаются методом верхней релаксации. Разработана программа "3DBayWaves" для расчета трехмерного поля скоростей и поля давления водной среды при численном моделировании наката и обрушения нелинейной поверхностной гравитационной волны [17].

Рассмотрим процесс трехмерного численного моделирования набегания нелинейных поверхностных гравитационных волн на береговые склоны мелководных акваторий. Согласно постановке задачи слой вязкой несжимаемой жидкости заполняет определенный уровень трехмерного прибрежного бассейна, при этом линия дна переходит к береговой линии (Рис. 1). Дно бассейна медленно поднимается и переходит в береговой склон. Батиметрические условия трехмерного бассейна привязаны к условиям Таганрогского залива Азовского моря [18, 19]. Конструкция трехмерного бассейна разработана с учетом особенностей берегов Азовского моря согласно СНиП 33-01-2003 "Гидротехнические сооружения". Она относится к берегозащитным сооружениям откосного типа с вертикальной стенкой [20].

Для корректности физического процесса, необходимо соблюдать постепенное накопление нелинейных эффектов при распространении поверхностной волны. Размеры сетки составляют $100 \times 40 \times 60$ ячеек, уровень поверхности воды по вертикали находится в интервале $5 \div 25$ ячеек. Исходя из глубины залива $H=5$ м, участок акватории будет иметь следующие геометрические размеры: длина 40м, ширина 15м, протяженность по вертикали 25м (от дна), длина шага составляет $h_x = h_y = 0,42$ м, $h_z = 0,42$ м.

На рис.2 представлен последовательный процесс набегания нелинейной поверхностной гравитационной волны на пологий береговой склон. На тыльной стенке бассейна с глубиной $H=5$ м задано гармоническое возмущение среды с частотой $f = 0,13$ Гц. Расчеты проведены при следующих начальных параметрах волны: скорость $c=6,6$ м/с; длина волны $\lambda=50$ м; амплитуда верти-

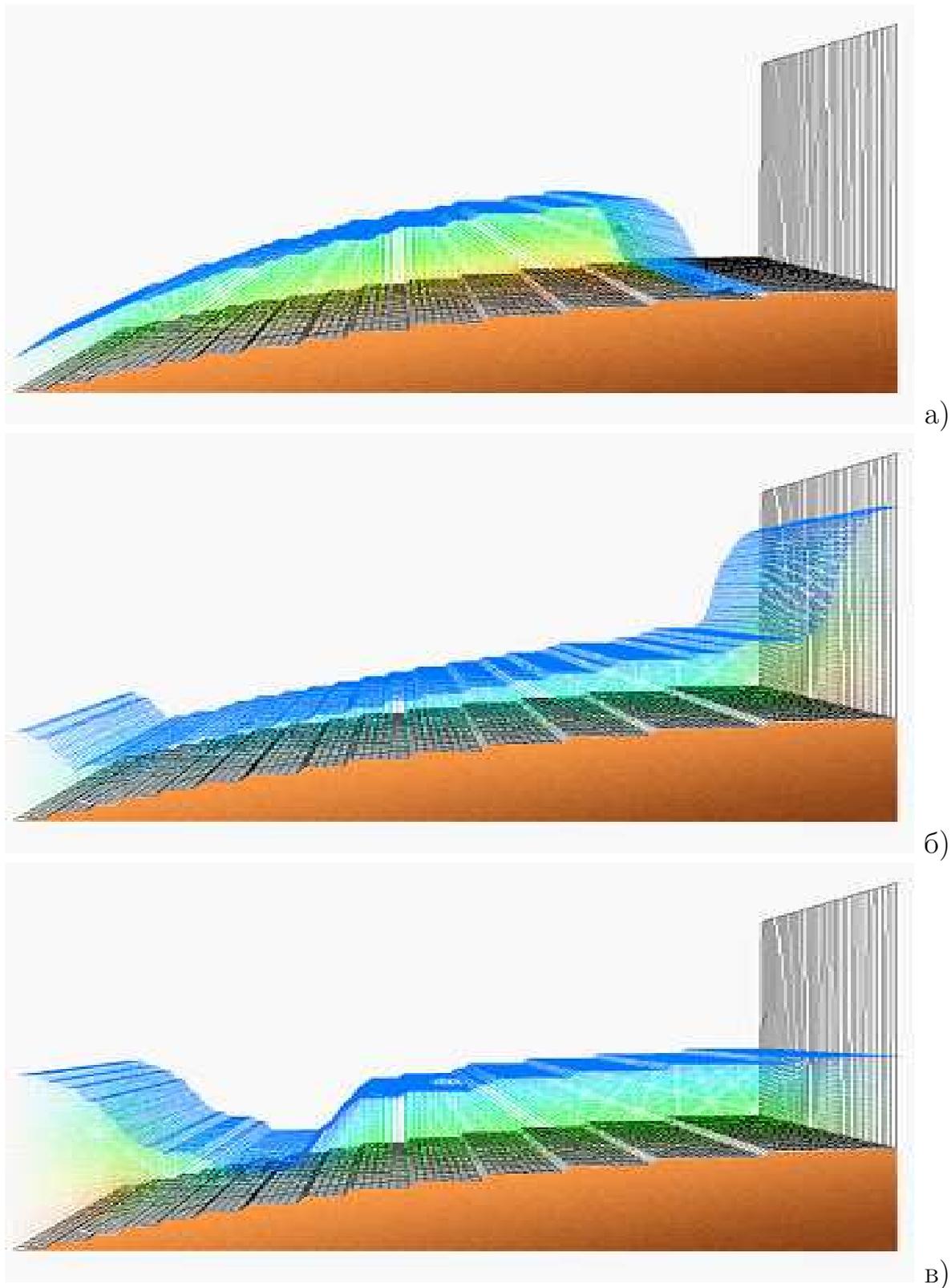


Рис. 2. Последовательные этапы набегания поверхностной гравитационной волны в различные моменты времени t : а) $t = 3,7$ с; б) $t = 6,3$ с, в) $t = 9,9$ с.

кального смещения свободной поверхности воды $a = 4,2$ м; параметр мелководности $kH = 0,6$; параметр нелинейности $\varepsilon = 0,8$. Поверхностная гравитационная

волна удовлетворяет начальным требованиям мелководности $H/\lambda < 1/5$ [21].

С уменьшением глубины трехмерного бассейна волна выходит на сухой берег, из-за возрастания нелинейных эффектов происходит укрупнение переднего фронта гребня волны (Рис. 2, а). Далее передний фронт волны становится отвесным, и происходит его обрушение. Волна, обрушиваясь, рассыпается и ударяется о переднюю вертикальную стенку бассейна. Этот процесс можно наблюдать на рисунке 2, б.

Потом водная масса начинает стекать обратно по береговому склону, происходит откат волны (Рис. 2, в). Откатывающаяся волна сбивает гребень следующей волны, ещё больше укрупняя его и ускоряя его обрушение. При этом к приходу следующего гребня уровень покоящейся жидкости в бассейне поднимается. Описанные этапы набегания поверхностной гравитационной волны соблюдаются также для поверхностных волн с другими начальными параметрами мелководности.

Для проверки адекватности разработанной модели, полученные результаты сравнивались с существующими численными [2] и экспериментальными [7] данными. На основе сравнения установлено хорошее согласие полученных результатов с существующими данными по основным этапам распространения и обрушения поверхностной волны.

Литература

1. *Watanabe Y., Saeki H.* Three dimensional large eddy simulation of breaking waves // *Coast. Eng. J.* – 1999. – V.41, № 3&4. – P.281-301. doi:10.1142/S0578563499000176
2. *Lubin, P., S. Vincent, S. Abadie J.-P. Caltagirone.* Three-dimensional large eddy simulation of air entrainment under plunging breaking waves // *Coastal Engineering.* – 2006. V.53, – P.631-655. doi:10.1016/j.coastaleng.2006.01.001
3. *Федотова З.И.* Обоснование численного метода для моделирования наката длинных волн на берег // *Вычислительные технологии.* – 2002. – Т.7, № 5. – С.58-76
4. *Борисова Н.М.* О моделировании процесса набегания прерывной волны на наклонный берег // *Сиб. журн. вычисл. математики.* – 2007. Т.10, № 1. – С. 1–18.
5. *Delis A. I., Kazolea M., Kampanis N. A.* A robust high resolution finite volume scheme for the simulation of long waves over complex domains // *Int. J. Num. Meth. In Fluids.* – 2008. – V.56. – P.419-452, doi:10.1002/fld.1537
6. *Ting F.C.K., Kirby J.T.* Dynamics of surf-zone turbulence in a spilling breaker // *Coastal Engineering.* – 1996. V.27, № – P.131– 160. doi:10.1016/0378-3839(??)00037-2,

7. *Kimmoun O. Branger H.* A PIV investigation on laboratory surf-zone breaking waves over a sloping beach // *J. Fluid Mech.* – 2007. – V. 588. – P.353-397. doi:10.1017/S0022112007007641
8. *Abbasov I.B.* Numerical simulation of nonlinear surface gravity waves transformation under shallow-water conditions // *Applied Mathematics.* 2012. V.3. №2. P. 135-141. doi:10.4236/am.2012.32021
9. *Аббасов И.Б.* Моделирование наката нелинейных поверхностных гравитационных волн на основе уравнений Навье–Стокса // *Вычислительная механика сплошных сред.* – 2012. Т.5, №3. – С.322-326. doi:10.7242/1999-6691/2012.5.3.38
10. *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкостей: в 2 т. – М.: Мир. 1991. – Т. 2. – 552с.
11. *Harlow F.H. Welch J.E.* Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface // *Phys. Fluids.* – 1965. – V. 8, № 12. – P. 2182-2189. doi:10.1063/1.1761178
12. *Яненко Н.Н.* Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. – Новосибирск.: Наука, 1967. – 196 с.
13. *Сухинов А.И., Тимофеева Е.Ф., Чистяков А.Е.* Построение и исследование дискретной математической модели расчета прибрежных волновых процессов // *Известия ЮФУ. Технические науки.* – 2011. – Т.121, № 8. – С.22-32.
14. *Аббасов И.Б., Сухинов А.И., Чистяков А.Е.* Численное моделирование наката нелинейных поверхностных гравитационных волн на основе уравнения Навье-Стокса // XIV Всероссийская конференция-школа "Современные проблемы математического моделирования" с международным участием: Сб. трудов, Абрау-Дюрсо, 12 – 17 сентября 2011 г. – Ростов на-Дону, Изд-во ЮФУ. – 2011. – С.10-15.
15. *Самарский А.А.* Введение в численные методы. Учеб. пособие для вузов. – М.: Наука, 1987. – 288 с.
16. *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 636 с.
17. Программа трехмерного моделирования наката поверхностных волн на мелководье "3DBayWaves": а.с. № 2012617087 о гос. рег. прогр. для ЭВМ. Аббасов И.Б, Семёнов И.С., Царевский В.В.; заявл. 22.05.2012 г.; опубл. 08.08.2012 г.
18. *Мамыкина В.А., Хрусталева Ю.П.* Береговая зона Азовского моря. – Ростов-на-Дону: Изд.-во РГУ, 1980. – 176 с.
19. Гидрометеорология и гидрохимия морей СССР. Проект "Моря СССР". Т.V. Азовское море / Под ред. Н.П. Гоптарева и др. – СПб.: Гидрометеоиздат, 1991. – С.75-88.

20. СНиП 33-01-2003 "Гидротехнические сооружения" Госстрой России, - М., 2004.
21. *Дебольский В.К., Зайдлер Р., Массель С.* Динамика русловых потоков и литодинамика прибрежной зоны моря. – М.: Наука, 1994. – 303 с.

КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ С УСЛОВИЯМИ ОТРАЖЕНИЯ – ПРЕЛОМЛЕНИЯ¹

Амосов А.А.

Национальный исследовательский университет "Московский энергетический институт", Москва

Введение

Рассмотрим задачу переноса монохроматического излучения в системе $G = \bigcup_{j=1}^m G_j$ полупрозрачных тел G_j , разделенных вакуумом. Каждое из тел G_j является ограниченной областью в \mathbb{R}^3 с границей ∂G_j класса C^1 . Предполагается, что области G_i и G_j попарно не пересекаются, но их границы могут пересекаться для некоторых $i \neq j$. Каждое из тел G_j заполнено полупрозрачной средой с постоянными значениями коэффициентов поглощения $\kappa_j > 0$, рассеяния $s_j \geq 0$ и показателем преломления $k_j > 1$. Положим $\kappa(x) = \kappa_j$, $s(x) = s_j$ и $k(x) = k_j$ для $x \in G_j$, $1 \leq j \leq m$.

Пусть $\Omega = \{\omega \in \mathbb{R}^3 \mid |\omega| = 1\}$ – единичная сфера (сфера направлений).

Искомая функция $I(\omega, x)$ определена на множестве $D = \Omega \times G$ и имеет физический смысл интенсивности излучения в точке $x \in G$, распространяющегося в направлении $\omega \in \Omega$.

Для описания распространения излучения в G будем использовать уравнение переноса излучения

$$\omega \cdot \nabla I + (\kappa + s)I = s\mathcal{S}(I) + \kappa k^2 F, \quad (\omega, x) \in D.$$

Здесь $\omega \cdot \nabla I = \sum_{i=1}^3 \omega_i \frac{\partial}{\partial x_i} I$ – производная функции I по направлению ω .

Через \mathcal{S} обозначен оператор рассеяния

$$\mathcal{S}(I)(\omega, x) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \theta_j(\omega' \cdot \omega, x) I(\omega', x) d\omega', \quad (\omega, x) \in D_j = \Omega \times G_j, \quad 1 \leq j \leq m$$

с индикатриссой рассеяния, обладающей следующими свойствами:

$$\theta_j \in L_1(-1, 1), \quad \theta_j \geq 0, \quad \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \theta_j(\mu) d\mu = 1, \quad 1 \leq j \leq m.$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №13-01-00201), Министерства образования и науки РФ (соглашение № 14.В37.21.0864) и Совета по грантам при Президенте РФ (проект НШ-2033.2012.1)

Исследованию его математических свойств уравнения переноса излучения посвящено большое число монографий, среди которых мы отметим лишь классическую работу [1] и монографии [2], [3].

Наиболее глубоко исследованы краевые задачи для уравнения переноса излучения, в которых на границе раздела сред с различными оптическими свойствами ставится условие непрерывности интенсивности излучения. Согласно этому условию излучение преодолевает границу раздела, не меняя направления и интенсивности. Для невыпуклых областей это предположение приводит к условию "прострела" [1]. В ряде приложений (например, – в теории переноса нейтронов) такие условия физически оправданы. Однако во многих других приложениях (например, – в оптике, томографии, теплофизике) необходимо учитывать эффекты отражения и преломления излучения на границах раздела сред. Зачастую именно из-за наличия отражения и преломления возникают важные физические эффекты, определяющие суть рассматриваемой задачи.

Краевые задачи для уравнения переноса излучения с условиями отражения – преломления на границах раздела сред, несмотря на их важность для приложений, остаются пока практически не исследованными. Некоторые задачи с условиями, учитывающими отражение на границе раздела сред, рассмотрены в [2], [4]. К первым работам, посвященным исследованию математических свойств задач для уравнения переноса излучения с условиями отражения – преломления, отвечающими законам Френеля, можно отнести статьи [5], [6]. В данной работе дается краткое описание результатов, полученных недавно автором в [7], [8], [9].

I Некоторые обозначения и используемые функциональные пространства

Будем обозначать через n_j внешнюю нормаль к границе ∂G_j области G_j . Пусть $\mu_j = \omega \cdot n_j(x)$. Положим

$$\Gamma_j = \Omega \times \partial G_j, \quad \Gamma_j^- = \{(\omega, x) \in \Gamma_j \mid \mu_j < 0\}, \quad \Gamma_j^+ = \{(\omega, x) \in \Gamma_j \mid \mu_j > 0\},$$

$$\Gamma = \Omega \times \partial G = \bigcup_{j=1}^m \Gamma_j, \quad \Gamma^- = \bigcup_{j=1}^m \Gamma_j^-, \quad \Gamma^+ = \bigcup_{j=1}^m \Gamma_j^+.$$

Через $d\omega$ и $d\sigma(x)$ будем обозначать меры, индуцированные мерой Лебега в \mathbb{R}^3 на Ω и ∂G соответственно. Будем предполагать, что на Γ введена мера $d\Gamma(\omega, x) = d\omega d\sigma(x)$. Введем на Γ^- и Γ^+ меры

$$\widehat{d}\Gamma^-(\omega, x) = |\omega \cdot n_j(x)| d\omega d\sigma(x), \quad (\omega, x) \in \Gamma_j^-, \quad 1 \leq j \leq m,$$

$$\widehat{d}\Gamma^+(\omega, x) = \omega \cdot n_j(x) d\omega d\sigma(x), \quad (\omega, x) \in \Gamma_j^+, \quad 1 \leq j \leq m.$$

Обозначим через $\mathcal{W}^p(D)$ банахово пространство функций $f \in L^p(D)$, обладающих обобщенной производной $\omega \cdot \nabla f \in L^p(D)$. Через $f|_{\Gamma_j^\pm}$ и $f|_{\Gamma^\pm}$

будем обозначать следы на Γ^\pm и Γ_j^\pm функций $f \in \mathcal{W}^1(D_j)$ и $f \in \mathcal{W}^1(D)$ соответственно.

Пусть E^\pm – измеримое относительно меры $d\Gamma$ подмножество множества Γ^\pm . Через $\widehat{L}^p(E^\pm)$, где $1 \leq p \leq \infty$, обозначим банахово пространство заданных на E^\pm измеримых функций g , обладающих конечной нормой

$$\|g\|_{\widehat{L}^p(E^\pm)} = \begin{cases} \left(\int_{E^\pm} |g(\omega, x)|^p d\widehat{\Gamma}^\pm(\omega, x) \right)^{1/p}, & 1 \leq p < \infty, \\ \operatorname{ess\,sup}_{(\omega, x) \in E^\pm} |g(\omega, x)|, & p = \infty. \end{cases}$$

Нам потребуются также весовые пространства $\widehat{L}_\rho^p(E^\pm)$, $1 \leq p < \infty$ с весами $\rho_j \in L^\infty(-1, 1)$, $\rho_j > 0$. Элементами пространства $\widehat{L}_\rho^p(E^\pm)$ являются заданные на E^\pm измеримые функции g , обладающие конечной нормой

$$\|g\|_{\widehat{L}_\rho^p(E^\pm)} = \left(\sum_{j=1}^m \int_{E^\pm \cap \Gamma_j^\pm} |g(\omega, x)|^p \rho_j(\mu_j) d\widehat{\Gamma}^\pm(\omega, x) \right)^{1/p}.$$

II Граничные операторы и постановка краевых условий

Обозначим через $J(\omega', x)$ интенсивность излучения, распространяющегося в вакууме и падающего на точку x поверхности ∂G_j в направлении ω' с косинусом угла падения $\mu'_j = \omega' \cdot n_j(x) < 0$. Падающее излучение частично зеркально отражается от поверхности ∂G_j в направлении

$$\omega = \omega' - 2\mu'_j n_j(x) \tag{1}$$

с косинусом угла отражения $\mu_j = \omega \cdot n_j(x) = -\mu'_j > 0$ и – частично преломляется, входя в тело G_j в направлении

$$\widehat{\omega} = \widehat{\mu}_j n_j(x) + \frac{1}{k_j}(\omega' - \mu'_j n_j(x)) \tag{2}$$

с косинусом угла преломления $\widehat{\mu}_j = \widehat{\omega} \cdot n_j(x) = -\eta_j^-(\mu'_j)$, где

$$\eta_j^-(\mu'_j) = \sqrt{1 - k_j^{-2}(1 - (\mu'_j)^2)}.$$

Равенство $\widehat{\mu}_j = -\eta_j^-(\mu'_j)$ отражает закон Снелла (Снеллиуса).

Обратим внимание на то, что $\widehat{\mu}_j \in [-1, -\widehat{\mu}_{j,\text{lim}}]$, где $\widehat{\mu}_{j,\text{lim}} = \sqrt{1 - k_j^{-2}}$.

Отраженное излучение имеет интенсивность, равную $r_j^+(\mu_j)J(\omega', x)$, а преломленное излучение – интенсивность, равную $(1 - r_j^+(\mu_j))k_j^2 J(\omega', x) =$

$(1 - r_j^-(\widehat{\mu}_j))k_j^2 J(\omega', x)$. Здесь r_j^+ и r_j^- – коэффициенты внешнего и внутреннего отражения, связанные формулами

$$r_j^-(\widehat{\mu}_j) = r_j^+(\eta_j^+(\widehat{\mu}_j)), \quad r_j^+(\mu_j) = r_j^-(-\eta_j^-(\mu_j)), \quad (3)$$

где

$$\eta_j^+(\widehat{\mu}_j) = \sqrt{1 - k_j^2(1 - (\widehat{\mu}_j)^2)}.$$

В классической геометрической оптике согласно формулам Френеля коэффициент внешнего отражения для неполяризованного излучения имеет вид

$$r_j^+(\mu_j) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\mu_j - k_j \eta_j^-(\mu_j)}{\mu_j + k_j \eta_j^-(\mu_j)} \right)^2 + \left(\frac{k_j \mu_j - \eta_j^-(\mu_j)}{k_j \mu_j + \eta_j^-(\mu_j)} \right)^2 \right], \quad 0 \leq \mu_j \leq 1.$$

Мы предполагаем, что коэффициенты r_j^+ и r_j^- являются непрерывными четными на $[-1, 1]$ функциями, они связаны формулами (3) и обладают следующими свойствами:

$$r_j^+(0) = 1 \quad \text{и} \quad 0 \leq r_j^+(\mu_j) < 1 \quad \text{для} \quad 0 < |\mu_j| \leq 1.$$

$$r_j^-(\mu_j) = 1 \quad \text{для} \quad |\mu_j| \leq \widehat{\mu}_{j,\text{lim}} \quad \text{и} \quad 0 \leq r_j^-(\mu_j) < 1 \quad \text{для} \quad \widehat{\mu}_{j,\text{lim}} < |\mu_j| \leq 1.$$

Из формулы (1) определяется значение $\omega - 2\mu_j n_j(x)$ направления ω' падающего из вакуума излучения, которое отражается в заданном направлении ω . Из формулы (2), в которой направление преломленного излучения обозначено не через $\widehat{\omega}$, а через ω , следует формула

$$\omega_{\mathcal{P}_j^-}(\omega, x) = -\eta_j^+(\mu_j) n_j(x) + k_j(\omega - \mu_j n_j(x))$$

для направления ω' падающего из вакуума излучения, которое преломляется в заданном направлении ω .

Пусть теперь излучение с интенсивностью $I(\omega', x)$, распространяющееся внутри области G_j , падает на точку $x \in \partial G_j$ в направлении ω' с косинусом угла падения $\mu'_j = \omega' \cdot n_j(x) > 0$. Если $0 < \mu'_j \leq \widehat{\mu}_{j,\text{lim}}$, то имеет место эффект полного внутреннего отражения: излучение полностью отражается поверхностью и распространяется в направлении (1) с косинусом угла отражения $\mu_j = \omega \cdot n_j(x) = -\mu'_j < 0$. Если же $\widehat{\mu}_{j,\text{lim}} < \mu'_j$, то излучение частично отражается от поверхности в направлении (1), а частично преломляется и выходит из тела G_j в вакуум в направлении

$$\widehat{\omega} = \widehat{\mu}_j n_j(x) + k_j(\omega' - \mu'_j n_j(x)) \quad (4)$$

с косинусом угла преломления $\widehat{\mu}_j = \widehat{\omega} \cdot n_j(x) = \eta_j^+(\mu'_j)$. При этом интенсивность отраженного излучения равна $r_j^-(\mu_j)I(\omega', x)$, а интенсивность преломленного излучения равна $(1 - r_j^-(\mu_j))\frac{1}{k_j^2}I(\omega', x) = (1 - r_j^+(\widehat{\mu}_j))\frac{1}{k_j^2}I(\omega', x)$.

Из формулы (1) определяется значение $\omega - 2\mu_j n_j(x)$ направления ω' падающего излучения, которое отражается в заданном направлении ω . Из формулы (4), в которой направление преломленного излучения обозначено не через $\hat{\omega}$, а через ω , следует формула

$$\omega_{\mathcal{P}_j^+}(\omega, x) = \eta_j^-(\mu_j) n_j(x) + \frac{1}{k_j}(\omega - \mu_j n_j(x))$$

для направления ω' падающего излучения, которое преломляется в заданном направлении ω .

Введем множества

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}_j^- &= \{(\omega, x) \in \Gamma_j^- \mid -\hat{\mu}_{j,\text{lim}} < \mu_j < 0\}, \\ \check{\Gamma}_j^- &= \Gamma_j^- \setminus \hat{\Gamma}_j^- = \{(\omega, x) \in \Gamma_j^- \mid -1 \leq \mu_j \leq -\hat{\mu}_{j,\text{lim}}\}. \end{aligned}$$

Определим операторы \mathcal{R}^- и \mathcal{R}^+ внутреннего и внешнего отражений формулами

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^-(\varphi)(\omega, x) &= r_j^-(\mu_j) \varphi(\omega - 2\mu_j n_j(x), x), \quad (\omega, x) \in \Gamma_j^-, \quad 1 \leq j \leq m, \\ \mathcal{R}^+(\psi)(\omega, x) &= r_j^+(\mu_j) \psi(\omega - 2\mu_j n_j(x), x), \quad (\omega, x) \in \Gamma_j^+, \quad 1 \leq j \leq m. \end{aligned}$$

Обратим внимание на то, что $r_j^-(\mu_j) = 1$ для $(\omega, x) \in \hat{\Gamma}_j^-$ и поэтому

$$\mathcal{R}^-(\varphi)(\omega, x) = \varphi(\omega - 2\mu_j n_j(x), x), \quad (\omega, x) \in \hat{\Gamma}_j^-, \quad 1 \leq j \leq m.$$

Введем операторы \mathcal{P}^- и \mathcal{P}^+ преломления внутрь G и вне G формулами

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^-(\psi)(\omega, x) &= \begin{cases} (1 - r_j^-(\mu_j)) k_j^2 \psi(\omega_{\mathcal{P}_j^-}(\omega, x), x), & (\omega, x) \in \check{\Gamma}_j^-, \\ 0, & (\omega, x) \in \hat{\Gamma}_j^-, \end{cases} \quad 1 \leq j \leq m, \\ \mathcal{P}^+(\varphi)(\omega, x) &= (1 - r_j^+(\mu_j)) \frac{1}{k_j^2} \varphi(\omega_{\mathcal{P}_j^+}(\omega, x), x), \quad (\omega, x) \in \Gamma_j^+, \quad q \leq j \leq m. \end{aligned}$$

Введем множества

$$\Sigma_j = \bigcup_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^m (\partial G_j \cap \partial G_i), \quad 1 \leq j \leq m,$$

$$S_j^- = \{(\omega, x) \in \Gamma_j^- \mid x \in \partial G_j \setminus \Sigma_j\}, \quad S^- = \bigcup_{j=1}^m S_j^-,$$

$$S_j^{*-} = \{(\omega, x) \in S_j^-, \mid \{x - t\omega \mid t > 0\} \cap \bar{G} = \emptyset\}, \quad S^{*-} = \bigcup_{j=1}^m S_j^{*-}.$$

Пусть $(\omega, x) \in S^- \setminus S^{*-}$. Положим

$$\tau^-(\omega, x) = \inf \{t > 0 \mid x - t\omega \in \bar{G}\}, \quad X^-(\omega, x) = x - \tau^-(\omega, x)\omega.$$

и введем множество

$$\tilde{S}^- = \{(\omega, x) \in S^- \setminus \overset{*}{S}^- \mid (\omega, X^-(\omega, x)) \in \Gamma^+\}.$$

Определим оператор трансляции T формулой

$$T\varphi(\omega, x) = \varphi(\omega, X^-(\omega, x)), \quad (\omega, x) \in \tilde{S}^-.$$

Пусть $\partial G_j \cap \partial G_i \neq \emptyset$ для некоторых $i \neq j$. Введем операторы отражения и преломления \mathcal{R}_{ij}^- и \mathcal{P}_{ij}^- формулами

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{ij}^-(\varphi)(\omega, x) &= r_{ij}^-(\mu_i)\varphi(\omega - 2\mu_i n_i(x), x), \quad (\omega, x) \in \Gamma_i^- \cap \Gamma_j^+, \\ \mathcal{P}_{ij}^-(\psi)(\omega, x) &= \begin{cases} (1 - r_{ij}^-(\mu_i)) \frac{k_i^2}{k_j^2} \psi(\omega_{\mathcal{P}_{ij}^-}(\omega, x), x), & (\omega, x) \in \overset{\vee}{\Gamma}_i^- \cap \Gamma_j^+, \\ 0, & (\omega, x) \in \widehat{\Gamma}_i^- \cap \Gamma_j^+. \end{cases} \end{aligned}$$

Здесь

$$\omega_{\mathcal{P}_{ij}^-}(\omega, x) = -\eta_{ij}^+(\mu_i) n_i(x) + \frac{k_i}{k_j} (\omega - \mu_i n_i(x)), \quad \eta_{ij}^+(\mu_i) = \sqrt{1 - \frac{k_i^2}{k_j^2} (1 - \mu_i^2)}.$$

Предполагается, что коэффициенты отражения r_{ij}^- являются непрерывными функциями, заданными на отрезке $[-1, 0]$, обладающими следующими свойствами:

$$\begin{aligned} r_{ij}^-(\mu_i) &= 1 \quad \text{для} \quad -\widehat{\mu}_{i,\text{lim}} \leq \mu_i \leq 0, \quad 0 \leq r_{ij}^-(\mu_i) < 1 \quad \text{для} \quad -1 \leq \mu_i < -\widehat{\mu}_{i,\text{lim}}, \\ r_{ji}^-(-\eta_{ij}^+(\mu_i)) &= r_{ij}^-(\mu_i) \quad \text{для} \quad \mu_i \in [-1, -\widehat{\mu}_{i,\text{lim}}]. \end{aligned}$$

В случае, когда в точках касания поверхностей ∂G_i и ∂G_j эти поверхности разделены бесконечно тонким слоем вакуума, справедлива формула [7]

$$r_{ij}^-(\mu_i) = \begin{cases} \frac{r_i^-(\mu_i) + r_j^+(\eta_i^+(\mu_i)) - 2r_i^-(\mu_i)r_j^+(\eta_i^+(\mu_i))}{1 - r_i^-(\mu_i)r_j^+(\eta_i^+(\mu_i))}, & -1 \leq \mu_i < -\widehat{\mu}_{i,\text{lim}}, \\ 1, & -\widehat{\mu}_{i,\text{lim}} \leq \mu_i \leq 0. \end{cases}$$

Для $(\omega, x) \in \tilde{S}^-$ падающее из вакуума на ∂G излучение J приходит от точки $X^-(\omega, x) \in \partial G$. Это излучение складывается из отраженного и преломленного в точке $X^-(\omega, x)$ излучений:

$$J = T\mathcal{R}^+(J) + T\mathcal{P}^+(I|_{\Gamma^+}), \quad (\omega, x) \in \tilde{S}^-.$$

Для $(\omega, x) \in \overset{*}{S}^-$ излучение J приходит извне и считается заданным:

$$J = J_*, \quad (\omega, x) \in \overset{*}{S}^-.$$

Для $(\omega, x) \in S^-$ входящее в G излучение складывается из отраженного и преломленного излучений:

$$I|_{\Gamma^-} = \mathcal{R}^-(I|_{\Gamma^+}) + \mathcal{P}^-(J), \quad (\omega, x) \in S^-.$$

Наконец, для $(\omega, x) \in \Gamma_i^- \cap \Gamma_j^+$ ставится условие

$$I|_{\Gamma_i^-} = \mathcal{R}_{ij}^-(I|_{\Gamma_i^+}) + \mathcal{P}_{ij}^-(I|_{\Gamma_j^+}), \quad (\omega, x) \in \Gamma_i^- \cap \Gamma_j^+.$$

III Краевые задачи для уравнения переноса излучения с условиями отражения – преломления

Рассмотрим краевую задачу

$$\omega \cdot \nabla I + (\varkappa + s)I = s\mathcal{S}(I) + \varkappa k^2 F, \quad (\omega, x) \in D, \quad (5)$$

$$I|_{\Gamma^-} = \mathcal{R}^-(I|_{\Gamma^+}) + \mathcal{P}^-(J), \quad (\omega, x) \in S^-, \quad (6)$$

$$I|_{\Gamma_i^-} = \mathcal{R}_{ij}^-(I|_{\Gamma_i^+}) + \mathcal{P}_{ij}^-(I|_{\Gamma_j^+}), \quad (\omega, x) \in \Gamma_i^- \cap \Gamma_j^+, \quad i \neq j, \quad (7)$$

$$J = T\mathcal{R}^+(J) + T\mathcal{P}^+(I|_{\Gamma^+}), \quad (\omega, x) \in \tilde{S}^-, \quad (8)$$

$$J = J_*, \quad (\omega, x) \in S^{*-}, \quad (9)$$

описывающую перенос излучения в системе полупрозрачных тел $G = \bigcup_{j=1}^m G_j$ с учетом зеркального отражения и преломления в соответствии с законами Френеля на их границах. Функции $F \in L^1(D)$, $J_* \in \widehat{L}^1(S^{*-})$ заданы.

Решением задачи (5) – (9) мы называем функцию $I \in \mathcal{W}^1(D)$, которая удовлетворяет уравнению (5) почти всюду на D и условиям (6), (7) – почти всюду на S^- , $\bigcup_{i \neq j} \Gamma_{ij}^-$ соответственно. При этом входящая в (6) функция

$J \in \widehat{L}_{1-r^+}^1(S^-)$ удовлетворяет условиям (8) и (9) почти всюду на \tilde{S}^- и S^{*-} соответственно.

Заметим, что $\varpi_{\max} = \max_{1 \leq j \leq m} \frac{s_j}{\varkappa_j + s_j} < 1$.

Основным результатом работы [7] является следующая теорема.

Теорема 1. *Решение $I \in \mathcal{W}^1(D)$ задачи (5) - (9) существует и единственно. Если дополнительно $F \in L^p(D)$, $J_* \in \widehat{L}^p(S^{*-})$ с некоторым $p \in (1, \infty]$, то $I \in \mathcal{W}^p(D)$.*

При $1 \leq p < \infty$ для решения справедливы оценки

$$\|\varkappa^{1/p} k^{2/p-2} I\|_{L^p(D)} \leq \left(\|\varkappa^{1/p} k^{2/p} F\|_{L^p(D)}^p + \|J_*\|_{\widehat{L}^p(S^{*-})}^p \right)^{1/p},$$

$$\|\varkappa^{1/p-1} k^{2/p-2} \omega \cdot \nabla I\|_{L^p(D)} \leq \frac{2}{1 - \varpi_{\max}} \left(\|\varkappa^{1/p} k^{2/p} F\|_{L^p(D)}^p + \|J_*\|_{\widehat{L}^p(S^{*-})}^p \right)^{1/p},$$

а при $p = \infty$ – оценки

$$\|k^{-2}I\|_{L^\infty(D)} \leq \max\{\|F\|_{L^\infty(D)}, \|J_*\|_{L^\infty(S^*)}\},$$

$$\|\varkappa^{-1}k^{-2}\omega \cdot \nabla I\|_{L^\infty(D)} \leq \frac{2}{1 - \varpi_{\max}} \max\{\|F\|_{L^\infty(D)}, \|J_*\|_{L^\infty(S^*)}\}.$$

Аналогичная теорема получена в [8] для краевой задачи

$$\begin{aligned} \omega \cdot \nabla I + (\varkappa + s)I &= s\mathcal{S}(I) + \varkappa k^2 F, \quad (\omega, x) \in D, \\ I|_{\Gamma^-} &= \mathcal{R}_d^-(I|_{\Gamma^+}) + \mathcal{P}_d^-(J), \quad (\omega, x) \in S^-, \\ I|_{\Gamma_i^-} &= \mathcal{R}_{d,ij}^-(I|_{\Gamma_i^+}) + \mathcal{P}_{d,ij}^-(I|_{\Gamma_j^+}), \quad (\omega, x) \in \Gamma_i^- \cap \Gamma_j^+, \quad i \neq j, \\ J &= T\mathcal{R}_d^+(J) + T\mathcal{P}_d^+(I|_{\Gamma^+}), \quad (\omega, x) \in \tilde{S}^-, \\ J &= J_*, \quad (\omega, x) \in S^*, \end{aligned}$$

описывающей перенос излучения в системе полупрозрачных тел с учетом диффузного отражения и преломления на их границах. Здесь $\mathcal{R}_d^-, \mathcal{R}_d^+, \mathcal{R}_{d,ij}^-, \mathcal{P}_d^-, \mathcal{P}_d^+, \mathcal{P}_{d,ij}^-$ – операторы диффузного отражения и преломления.

В статье [9] показано, что решение задачи (5) - (9) непрерывным в метрике пространства $\mathcal{W}^1(D)$ образом зависит от данных задачи – коэффициентов поглощения \varkappa и рассеяния s , показателя преломления k , индикатриссы рассеяния θ , источника объемного излучения F и интенсивности падающего излучения J_* . Кроме того, показано, что при стремлении показателя преломления k к единице, решение задачи (5) - (9) сходится в метрике пространства $\mathcal{W}^1(D)$ к решению задачи с условиями "прострела".

Литература

1. *Владимиров В.С.* Математические задачи односкоростной теории переноса частиц // Труды МИАН СССР. 1961. Т. 61. С. 3–158.
2. *Гермогенова Т.А.* Локальные свойства решений уравнения переноса. М.: Наука. 1986.
3. *Agoshkov V.I.* Boundary Value problems for transport equations: functional spaces, variational statements, regularity of solutions. Birkhauser. Boston, Basel, Berlin. 1998.
4. *Гермогенова Т.А.* Обобщенные решения краевых задач для уравнения переноса // Журн. вычисл. матем. и матем. физ. 1969. Т. 9. №3. С. 605 - 625.
5. *Прохоров И.В.* Краевая задача теории переноса излучения в неоднородной среде с условиями отражения на границе // Дифференц. уравнения. 2000. Т. 36. №6. С. 848 - 851.

6. Прохоров И.В. О разрешимости краевой задачи теории переноса излучения с обобщенными условиями сопряжения на границе раздела сред // Известия РАН. Серия математическая. 2003. Т. 67. №6. С. 169 - 192.
7. *Amosov A.A.* Boundary value problem for the radiation transfer equation with reflection and refraction conditions // Journal of Mathematical Sciences. 2013. Vol. 191. №2. p. 101–149.
8. *Amosov A.A.* Boundary value problem for the radiation transfer equation with diffuse reflection and refraction conditions // Journal of Mathematical Sciences. 2013. Vol. 193, №2, p. 151–176.
9. *Amosov A.A.* Boundary value problem for the radiation transfer equation with reflection and refraction conditions. Continuous dependence of solutions from data and the limiting transition to the problem with "shooting" conditions // Journal of Mathematical Sciences. 2013. Vol. 194.

ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ТЕЧЕНИЯ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ ПО СХЕМЕ КАБАРЕ В ПЛОСКОМ КАНАЛЕ ПРИ $Re_m = 5600$ ¹

Асфандияров Д.Г.

*Институт проблем Безопасного Развития Атомной
Энергетики РАН, г.Москва*

I Введение

Исследуется классическая задача течения вязкой несжимаемой жидкости в плоском канале. Приведены данные расчетов этой задачи по схеме Кабаре [1]. При расчете по схеме Кабаре использовалась методика прямого численного моделирования (DNS) – непосредственное решение уравнений Навье-Стокса без применения различных моделей турбулентности.

Численные расчеты задачи о течении в плоском канале начались в 1982 [2], с применением DNS методов – с 1987 [3]. В 1987 году группа Kim et al. [3] провела численное моделирование данной задачи при числе Рейнольдса $Re_m = \frac{u_m 2\delta}{\nu} = 5600$, определенного по высоте канала 2δ и средней скорости в потоке u_m . Сейчас, при сравнительно больших вычислительных мощностях, течение в канале и влияние соответствующих факторов на характеристики течения исследуется на подробных сетках и при больших числах Рейнольдса. Самый крупный расчет в плоском канале был проведен в 2006 году при числе Рейнольдса $Re_\tau = \frac{u_\tau \delta}{\nu} = 2003$ [4] ($u_\tau \equiv \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$ – динамическая скорость [5], τ_w – напряжение трения на стенке, ρ – плотность) на сетке 1.8×10^{10} ($6144 \times 633 \times 4608$) узлов. Данные DNS расчетов турбулентного течения в канале сейчас достаточно надежны, чтобы использоваться для юстировки экспериментальных методов диагностики. Многие данные DNS расчетов в плоском канале сейчас доступны [6, 7]. Схема Кабаре хорошо зарекомендовала себя в задачах однородной изотропной турбулентности и термоконвекции [1]. В данной работе представлены результаты прямого численного моделирования турбулентного течения по схеме Кабаре в плоском канале при числе Рейнольдса $Re = 5600$. Представлены средний профиль скорости, компоненты рейнольдсовского тензора, распределение вязкого напряжения трения в канале, вычислен коэффициент сопротивления. Результаты сравниваются с результатами расчета группы Kim et al (1987).

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №13-01-00201), Министерства образования и науки РФ (соглашение № 14.В37.21.0864) и Совета по грантам при Президенте РФ (проект НШ-2033.2012.1)

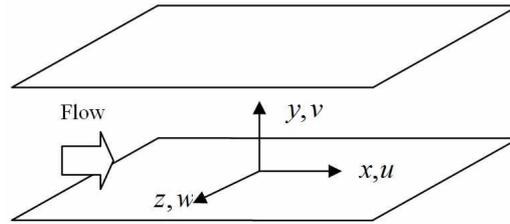


Рис. 1. Координатная система в канале

II Расчетная область и разрешение сетки

Геометрия области и система координат показаны на рис.1. Вдоль продольного и поперечного направления использованы периодические граничные условия. Использование периодических граничных условий может быть оправданно, если геометрия расчетной области позволяет корректно описывать динамику крупных вихрей. Как и в работе [3], выбор расчетной области сделан исходя из изучения данных двухточечной корреляции. Расчет проводился на сетке 4194304 ячеек ($256 \times 128 \times 128$, в направлениях x , y , z соответственно) для числа Рейнольдса $Re_m = 5600$. Расстояние от стенки измеряют обычно в пристенных единицах $y^+ \equiv \frac{u_\tau y}{\nu}$.

Для выбранного числа Рейнольдса размеры области в периодических направлениях взяты, как и в работе [3], $4\pi\delta$ (в продольном направлении) и $2\pi\delta$ (в поперечном направлении). Для расчета использована неравномерная сетка со сгущением возле границы. Размер первой ячейки возле стенки $\Delta y^+ \approx 0.026$ – дальнейшее измельчение сетки возле границы не приводит к изменению коэффициента сопротивления более чем на 0,4%. Размер ячейки в центральной части – $\Delta y^+ \approx 9.16$.

III Вычислительный процесс

Течения несжимаемой жидкости описываются уравнениями Навье-Стокса, которые можно отнести к гиперболическим системам только относительно компонент скорости, если рассматривать давление как параметрическое поле, обеспечивающее выполнение условия несжимаемости. При такой трактовке уравнений, алгоритм их численного решения можно разбить на два этапа: вычисление предварительных значений компонент скорости на последующем временном слое из решения системы уравнений:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla \cdot (u_i \vec{u}) = \mu \Delta u_i, \quad (1)$$

и последующую корректировку найденного поля скоростей с целью придания ему свойства соленидальности:

$$\nabla \vec{u}^{n+1} = 0. \quad (2)$$

Подробный алгоритм вычисления по схеме Кабаре описан в [1] и заключается в последовательном решении явной части схемы (вычисление скоростей на последующем временном слое) и решении уравнения Пуассона для давления. Для расчета на суперкомпьютере используется библиотека MPI. Уравнение Пуассона решается с помощью параллельной реализации алгоритма быстрого прямого метода, изложенного в работе [8] и параллельной прогонки [9]. Расчеты проводились на суперкомпьютере <Ломоносов> на 128 процессорах.

IV Статистика турбулентного течения

Вначале расчет велся как неявный LES – использовалась равномерная расчетная сетка. Затем поле скорости интерполировалось на сгущающуюся расчетную сетку. Осреднение статистических характеристик потока по времени начиналось при достижении статистически устойчивого состояния. Это состояние определялось по линейному профилю общего сдвигового напряжения $-\rho \langle u'v' \rangle + \mu \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y}$ и выходу суммарной кинетической энергии на квазипериодический уровень. Под треугольными скобками подразумевается осреднение по времени и по двум периодическим направлениям x и z , штрих обозначает флуктуацию соответствующей величины. Профиль средней скорости, нормированный на динамическую скорость u_τ , показан на рисунке 2.а. Совпадение профиля средней скорости, соответствующего верхней и нижней половине канала показывает адекватность выбранного промежутка осреднения. Осреднение профиля скорости проводилось в течении 20 пролетов области. Также проводится сравнение с профилем средней скорости Kim et al 1987. Пунктирные линии представляют собой линейный (в пристенном слое – $y^+ < 5$) и логарифмический (в турбулентном ядре) законы.

Коэффициент сопротивления в канале $C_f = \frac{\tau_w}{1/2 \rho u_m^2}$ равен 8.015×10^{-3} (Kim et al 1987 – 8.18×10^{-3}), что хорошо соотносится с экспериментальным законом Dean 1978 $C_f = 0.073 Re_m^{-0.25} = 8.44 \times 10^{-3}$ [10]. Отношение средней скорости в центральной части потока к средней скорости равно u_c/u_m 1.16, что соответствует закону Dean 1978 $u_c/u_m = 1.28 Re_m^{0.0116} = 1.16$ [10]. Среднеквадратические флуктуации скорости, нормированные на динамическую скорость, показаны на рисунке 2.б. На рисунке 3 представлены вязкое $\mu \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y}$, рейнольдсовское $-\rho \langle u'v' \rangle$ и общее напряжение трения $-\rho \langle u'v' \rangle + \mu \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y}$ в зависимости от расстояния от стенки.

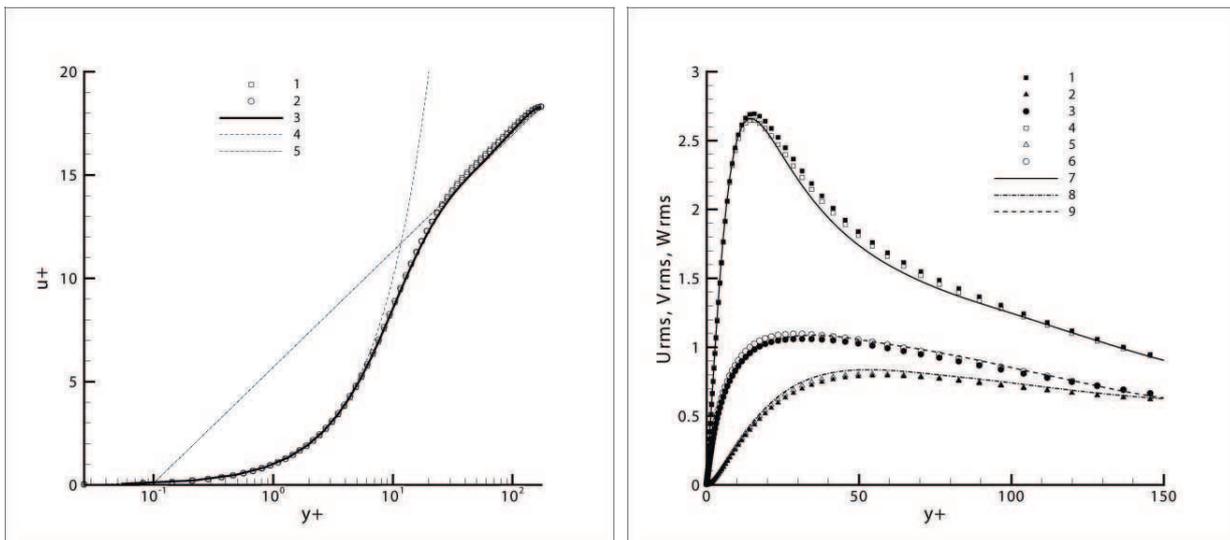


Рис. 2. слева – 1) средний профиль скорости на нижней стенке, 2) средний профиль скорости на верхней стенке, 3) средний профиль скорости в работе [3], 4) $u^+ = y^+$, 5) $u^+ = \frac{\ln(y^+)}{0.41} + 5.7$; справа – Профили среднеквадратических флуктуаций скорости: 1), 2), 3) $\sqrt{\langle u'u' \rangle}, \sqrt{\langle v'v' \rangle}, \sqrt{\langle w'w' \rangle}$ на нижней стенке и 4), 5), 6) на верхней стенке соответственно; 7), 8), 9) – в работе [3] соответственно

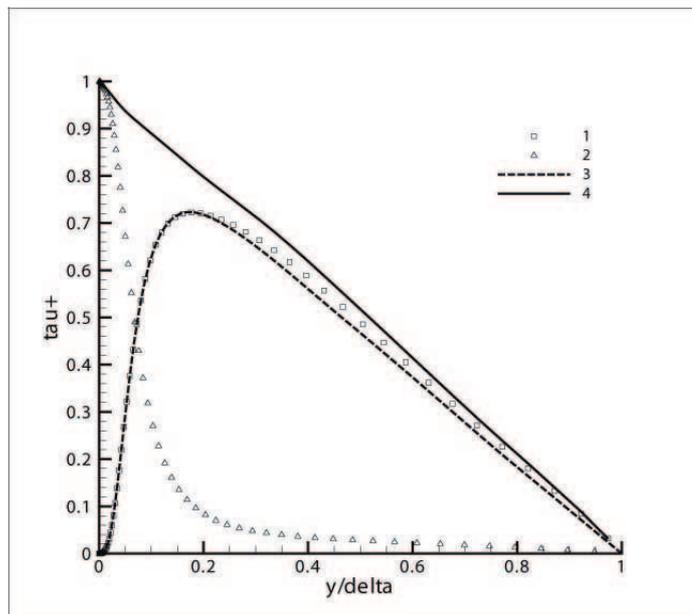


Рис. 3. Средние профили реynoльдсовского – 1), вязкого – 2) и общего напряжения трения – 4); 3) – средний профиль реynoльдсовского напряжения в работе [3].

V Заключение

Схема Кабаре монотонна, бездиссипативна и обладает хорошими дисперсионными свойствами и показала себя как идеальный LES при расчете задач термоконвекции и однородной изотропной турбулентности. В данной работе приведен результат прямого численного моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости по схеме Кабаре в плоском канале. Результаты показали хорошее совпадение с расчетными данными группы Джона Кима (1987г.) и экспериментальным законом Dean 1978. Схема Кабаре явная и поэтому шаг интегрирования по времени сильно завит от разрешения сетки. В данном расчете сетка была взята таким образом, что дальнейшее ее измельчение возле границы не приводит к изменению коэффициента сопротивления более чем на 0,4%.

Литература

1. *В.М. Головизнин, М.А. Зайцев, С.А. Карабасов, И.А. Короткин.* Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов: Монография. - М.: Изд. МГУ, 2013.
2. *Moin P, Kim J.* Numerical investigation of turbulent channel flow. *J. Fluid Mech.* 118(1982):341-377
3. *Kim J, Moin P, Moser R.* Turbulence statistics in fully developed turbulent channel flow at low Reynolds number. *J Fluid Mech* 1987; 177:133-166.
4. *S. Hoyas and J. Jim'enez.* Scaling of the velocity fluctuations in turbulent channels up to $Re = 2003$. *Phys. Fluids* 18, 011702 1-4 (2006).
5. *Лойцянский Л.Г.* Механика жидкости и газа. Изд. 6-е. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987.
6. http://www2.warwick.ac.uk/fac/sci/eng/staff/ymc/research/dns_database/
7. http://www.thtlab.t.u-tokyo.ac.jp/DNS/dns_database.html
8. *Кузнецов Ю.А.* Вычислительные методы в подпространствах // Вычислительные процессы и системы. М.: Наука, 1985. Вып.2. С.265-350
9. *Акимова Е.Н., Белоусов Д.В.* Параллельные алгоритмы решения СЛАУ с блочно-трехдиагональными матрицами на многопроцессорных вычислителях. Вестник УГАТУ, 2011, Т. 15, № 5(45). С. 87-93
10. *Dean R. B.* Reynolds number dependence of skin friction and other bulk flow variables in two-dimensional rectangular duct flow. *Trans. ASME I: J. Fluids Engng* 100,215. (1978)

К ВОПРОСУ ОБ АДЕКВАТНОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ БЕЗОПАСНОСТИ ТЕХНОСФЕРЫ

Белозеров В.В. *, Олейников С.Н. **

* Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону,

** Академия государственной противопожарной службы МЧС
РФ, Москва

Одним из самых острых проявлений общего кризиса индустриальной цивилизации стало признание природоразрушающего характера созданного этой цивилизацией типа хозяйства – так называемой "рыночной экономики". Это признание стало итогом беспрецедентной Конференции ООН по окружающей среде и развитию (Рио-де-Жанейро, 1992). Её генеральный секретарь Морис Стронг подчеркнул: "западная модель развития более не подходит ни для кого. Единственная возможность решения глобальных проблем сегодняшнего дня – это устойчивое развитие". А незадолго до этого было предложено и понятие: "Устойчивое развитие – это такое развитие, которое удовлетворяет потребности настоящего времени, но не ставит под угрозу способность будущих поколений удовлетворять свои собственные потребности".

Научный задел по решению данной проблемы с точки зрения фундаментальной науки, по нашему мнению, принадлежит русским ученым С.А. Подолинскому (1850-1891) и академику В.И. Вернадскому (1863-1945), чьё наследие было развито многими учеными мира в прошлом столетии, и может быть реализовано в XXI веке [1-7].

Как показали результаты исследований [3-7], в нашей стране (таб.1-3) основной экологический ущерб наносится автотранспортными инфраструктурами и теплоэнергетикой:

97,24% нормируемых токсичных выбросов – 48,18% и 49,06% соответственно,

98,92% CO₂, H₂O и др. не нормируемых – 49,59% и 49,33% соответственно.

Несмотря на международные Конвенции, ни в России, ни за рубежом "вред убыли кислорода" выжигаемого из атмосферы не имеет даже оценки, а выбросы углекислого газа и воды не считаются "вредными", поэтому не имеют методологии учета, а, следовательно, и экономических рычагов по снижению вреда от выбросов CO₂ и H₂O (таб.3).

Таблица 1. Нормируемые стандартами выбросы (тыс.тонн в год)

Выбросы (тыс.тонн) Вид транспорта и его объектов	нормируемые							
	CO	CnHm	NOx	C	SO ₂	Всего (норм.)	в %	в %к ненорми- руемым
Автомобильный, в т.ч.:	10652,4	1521,0	1654,9	30,9	162,8	14022,0	48,18%	3,56%
<i>объекты АДТ</i>	<i>162,4</i>	<i>35,0</i>	<i>66,9</i>	<i>7,2</i>	<i>39,7</i>	<i>311,2</i>		<i>5,17%</i>
Речной, в т.ч.:	30,9	11,8	45,1	45	23,5	115,8	0,40%	9,98%
<i>объекты РТ</i>	<i>16,0</i>	<i>0,7</i>	<i>2,8</i>		<i>8,6</i>	<i>28,1</i>		<i>4,68%</i>
Морской, в т.ч.:	20,0	9,4	34,9	2,6	39,4	106,3	0,37%	13,04%
<i>объекты МТ</i>	<i>8,4</i>	<i>1,4</i>	<i>5,5</i>		<i>8,9</i>	<i>24,2</i>		<i>6,38%</i>
Воздушный, в т.ч.:	53,8	12,4	64,6	0,0	13,8	144,6	0,50%	7,23%
<i>объекты ВТ</i>	<i>20,3</i>	<i>6,4</i>	<i>6,6</i>		<i>1,3</i>	<i>34,6</i>		<i>4,61%</i>
Железнодорожный, в т.ч.:	120,5	50,5	203,1	11,7	50,9	436,7	1,50%	9,55%
<i>объекты ЖДТ</i>	<i>76,0</i>	<i>3,0</i>	<i>20,7</i>	<i>1,1</i>	<i>50,9</i>	<i>151,7</i>		<i>5,23%</i>
Тепловые электростанции, котельные и централи	10594,5	1558,6	1900,1	41,4	181,0	14275,6	49,06%	3,65%
Итого	21472,1	3163,8	3902,6	91,1	471,4	29101,0	100,00%	2,51%

Полученные нами данные (таб.3) просто ошеломляют:

143 миллиона россиян "потребляют" O₂ (30,08%) и "выделяют" CO₂ и H₂O (31,45%) менее 1/3 того, что "выжигает" (68,79%) и "выбрасывает" транспортно-энергетическая структура России!

Следовательно, решение научных задач в области безопасности жизнедеятельности необходимо проводить не в соответствии, а вопреки современным моделям научно-технического прогресса, которые, к сожалению, не соответствуют фундаментальным наукам о природе, т.к. выражают развитие прикладных наук и техники, удовлетворяющих, в основном, потребительские парадигмы существующих общественно-экономических формаций [2,3].

Чуть более 100 лет назад компанией "Форд" были выпущены первые серийные автомобили, а сегодня 520 миллионов автомобилей, произведенных за последние 50 лет, выжигают ежегодно 11,89 миллиардов тонн кислорода из 56,63 миллиардов тонн воздуха, выбрасывая в атмосферу 10,91 миллиардов тонн углекислого газа и 4,46 миллиардов тонн воды. Практически с такой же скоростью нарастало аналогичное "потребление и выделение" теплоэнергетикой [4].

Мы построили модель автотранспортных выбросов с момента начала серийного производства автомобилей (рис.1) и получили практически коррелированный результат с моделью П. Джоунса и Тома М.Л. Уигли глобального потепления из-за "парникового эффекта", если добавить к автомобильному транспорту – железнодорожный, водный и аэрокосмический, а затем удвоить результат, учитывая таким образом выбросы тепловой энергетики (рис.2)

Таблица 2. Ненормируемые стандартами выбросы (тыс.тонн в год)

Выбросы (тыс.тонн) Вид транспорта и его объектов	ненормируемые						Выжигание O ₂	в %
	CO	NO	альдегиды	тв. вещества	Всего (не норм.)	в %		
Автомобильный, в т.ч.:	262090,0	131045,0	400,5	10,6	393546,0	49,59%	325161,1	49,68%
объекты АПТ	3995,7	1997,8	16,2	7,7	6017,4		9627,8	
Речной, в т.ч.:	760,3	380,1	10,9	9,3	1160,6	0,15%	1457,5	0,22%
объекты РТ	393,7	196,8	0,7	8,8	600,0		960,0	
Морской, в т.ч.:	492,1	246,0	8,4	68,5	815,1	0,10%	1006,9	0,15%
объекты МТ	206,7	103,3	1,3	68,2	379,5		607,3	
Воздушный, в т.ч.:	1323,7	661,8	15,6	0,0	2001,2	0,25%	2273,5	0,35%
объекты ВТ	499,5	249,7	1,6		750,8		1201,3	
Железнодорожный, в т.ч.:	2964,8	1482,4	59,8	67,7	4574,6	0,58%	5857,8	0,90%
объекты ЖДТ	1869,9	934,9	15,7	66,4	2887,0		4625,7	
Тепловые электростанции, котельные и централи	260665,4	130332,7	459,7	5,0	391462,9	49,33%	318734,9	48,70%
Итого	528296,2	264148,1	955,0	161,2	793560,4	100,00%	654491,8	100,00%

Только "эффект парника" оказался совсем не причем, т.к. "простая арифметика" показывает, что прирост массы атмосферы "за счет сгорания геосферы" (топливо транспорта, ГРЭС и ТЭЦ), увеличиваясь ежегодно, составляет в настоящий момент 11,02 миллиарда тонн в год: 6,96 миллиардов тонн – транспорт и теплоэнергетика плюс ещё 4,06 миллиарда тонн – дыхание и питание населения планеты, численность которого этой осенью превысит 7-ти миллиардов человек.

Таблица 3. Сравнительные данные с населением России

Выбросы (тыс. тонн) Вид транспорта и его объектов	ненормируемые						Выжи- ганне O ₂	в %
	CO ₂	H ₂ O	альде- гиды	тв. вещ- ва	Всего (не норм.)	в %		
Автодорожный, в т.ч.:	262090,0	131045,0	400,5	10,6	393546,0	34,00%	325161,1	34,74%
объекты АТТ	3995,7	1997,8	162	7,7	6017,4		9627,8	
Речной, в т.ч.:	760,3	380,1	10,9	9,3	1160,6	0,10%	1457,5	0,16%
объекты РТ	393,7	196,8	0,7	8,8	600,0		960,0	
Морской, в т.ч.:	492,1	246,0	8,4	68,5	815,1	0,07%	1006,9	0,11%
объекты МТ	206,7	103,3	1,3	68,2	379,5		607,3	
Воздушный, в т.ч.:	1323,7	661,8	15,6	0,0	2001,2	0,17%	2273,5	0,24%
объекты ВТ	499,5	249,7	1,6		750,8		1201,3	
Железнодорожный, в т.ч.:	2964,8	1482,4	59,8	67,7	4574,6	0,40%	5857,8	0,63%
объекты ЖДТ	1869,9	934,9	15,7	66,4	2887,0		4625,7	
Тепловые электростанции, котельные централи	260665,4	130332,7	459,7	5,0	391462,9	33,82%	318734,9	34,05%
Население России, в т.ч.:	258380,4	105622,9			364003,4	31,45%	281595,3	30,08%
Итого	786676,6	369771,0	955,0	161,2	1157563,8	100,00%	936087,1	100,00%

После чего "простая физика" говорит: если за истекшие 100 лет среднее атмосферное давление (P) не изменилось, а масса и, следовательно, объем (V) постоянно увеличиваются, то в соответствии с уравнением Клайперона-Менделеева (Ван-дер-Ваальса – для реальных газов) должна увеличиваться температура (T):

$$PV = RT[\text{или}(P + a/V^2) \cdot (V - b) = RT], \text{ где } R - \text{газовая постоянная} \quad (1)$$

А дальше вступает в дело уже не "простая физика", а термодинамика, которой ничего не остается, как привести нашу атмосферу в равновесное состояние, т.е. "перемещать и перемешивать" прибывающие массы выбросов

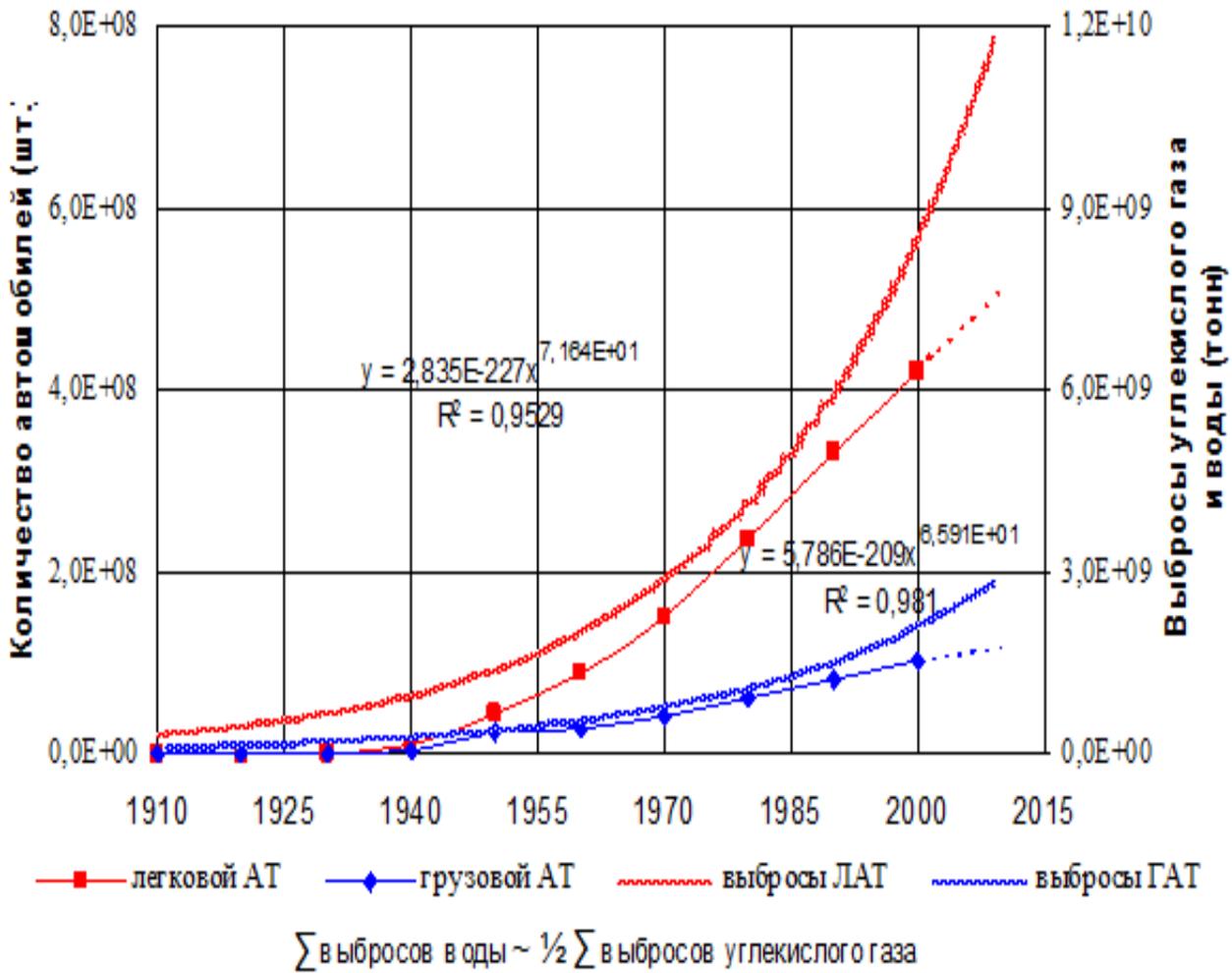


Рис. 1. Модель роста автотранспортного парка и его выбросов

вместо выжигаемого кислорода с помощью ветров, ураганов и бурь, выравнивая их концентрации и плотности, а избыток воды "сбрасывать нам на головы" в виде града, снега и дождя.

Сети дорог и тротуаров, покрытий зданий и сооружений, имеющие значительные коэффициенты черноты, которые строители (в соответствии с "измышлениями архитекторов") делают открытыми, поднимают турбулентность атмосферы своими конвективными потоками, не хуже, чем это происходит в "долине смерти" на стыке штатов Невада и Калифорния, или в "Аллее торнадо" районов Миссисипи и Огайо, в результате чего – ураганы, наводнения, сели, снежные лавины, которые наносят обществу огромный социально-экономический ущерб, а воспринимаются – как изменения климата [3,4].

Анализ существующих дорожно-транспортно-энергетических инфраструктур позволил синтезировать новые принципы их формирования, "отслеживающие" и минимизирующие прирост энтропии в них (S), через функцию



Рис. 2. Модель "парникового эффекта".

суммарного "производства энтропии" ($\Delta S = \sum \delta_i S / \delta Y_j \cdot dY_j / dt$), которая связана с вероятностью возникновения флуктуаций (по Пригожину), а в нашем случае с вероятностью "вреда" (дорожно-транспортного, пожарного, энергетического и т.д.), формулой Эйнштейна:

$$P = B \cdot \exp(\Delta S/k), \text{ где } k - \text{ постоянная Больцмана, } B - \text{ функция масштаба} \quad (2)$$

Основная причина происходящего заключается, по нашему мнению в том, что все существующие в мире стандарты и нормы, ориентированы на рассеивание выбросов (транспорта, ГРЭС и ТЭЦ) с помощью устройств выхлопа отработавших газов и строительства "дымовых труб" соответствующей высоты. Это нарушает три основных природных цикла, обеспечивающих жизнедеятельность на нашей планете: суточно-сезонный цикл круговорота кислорода в системе атмосфера-биосфера-гидросфера, сезонно-годовой цикл круговорота воды в системе атмосфера-геосфера/гидросфера и семилетний цикл круговорота углерода в системе атмосфера-биосфера-геосфера/гидросфера, т.к.

транспорт и теплоэнергетика, "сжигая геосферу" (углеводородное топливо), выбрасывают воду и углерод (окислы углерода) в атмосферу [5,6].

Естественными поглотителями воды, оксидов углерода и токсичных выбросов транспортно-энергетических инфраструктур, являются зеленые насаждения, которые не только снабжают жителей регионов и городов кислородом, но и благотворно влияют на микроклимат. Так за один теплый солнечный день 1 га лесных насаждений поглощает из воздуха 220-280 кг CO_2 и выделяет 180-220 кг O_2 . Зеленые насаждения, особенно бесгашишная конопля, очищают атмосферу от CO , сводят его концентрацию к естественной (0,00001%), снижают температуру воздуха и скорость ветра, стабилизируют относительную влажность воздуха [6]. Следовательно, можно локализовать и поглотить "дорожно-транспортный вред", если "оградить дороги" специальной посадкой деревьев и кустарников, зависящей от интенсивности движения и сезонных изменений. И такая модель смешанной обсадки дорог хвойными и лиственными видами деревьев и кустарников была разработана [7].

Если учитывать требования модели "КАСКАД" (коммуникационной адаптивной системы контроля автотранспортного движения), в части обеспечения перехода населением улиц города только по пешеходным переходам и остановки (стоянки) автотранспорта только в установленном месте, организуя с помощью сплошной кустарниковой обсадки обочины дорог "профилактику указанных нарушений", а комбинацией их "вечнозеленых и сезонных" видов – адаптивность "шумоподавления" и "пылезащиты", получим (рис.3) вариант схемы обсадки участка 2-х полосной дороги в городе [7].

При 4-х и 6-ти полосных участках дорог (а также площадей), имеющей в 2-3 раза больше пропускную способность транспортных средств, вариант схемы обсадки участка дороги (площади) тиражируется, в соответствии с количеством полос движения. При этом "биотуннель для проезда оперативного автотранспорта" может быть один, а полосы движения должны разделяться так, чтобы обеспечить закрытие дорожного полотна от солнечных лучей и осадков кронами деревьев, что снижает термо-фотодеструкцию дорог и увеличивает их долговечность, а также устраняет конвективные потоки от дорожных покрытий [6,7].

Выделение полосы для движения транспортных средств аварийных служб (пожарных, скорой медицинской помощи и т.д.) обусловлено тем, что исследования времён прибытия и радиусов выезда на пожары в Ростовской области и Краснодарском крае в 1995-2006 г.г. показали, что днем средняя скорость передвижения пожарного автомобиля составляет 31,2 км/ч, в то время как ночью (при отсутствии движения) – 54,6 км/ч. Следовательно, необходимо увеличить скорость следования оперативных автомобилей к месту происшествия путем изоляции его в "биотуннелях" от общих транспортных потоков [8].

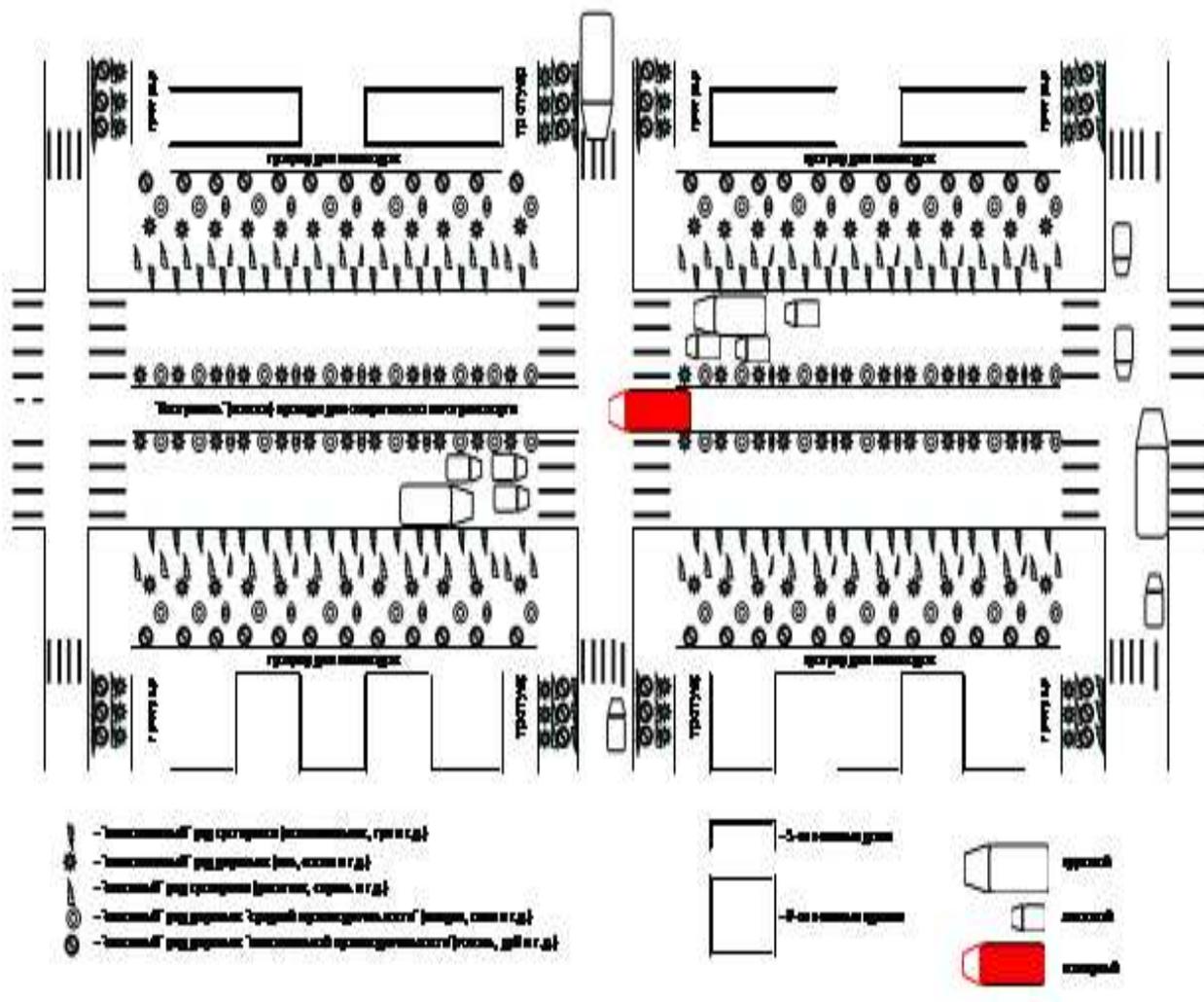


Рис. 3. Модель биоархитектуры улиц городов

Вероятностно-физическое моделирование пропускной способности "суженных предлагаемой обсадкой" улиц показало увеличение их пропускной способности за счет повышения средней скорости проезда при управлении движением с помощью макросистемы "КАСКАД", т.к. при реализации "красно-зеленых волн" в системе управления движением с помощью "радиосветофоров" и "радиознаков", средняя скорость проезда V_{CP} по улицам города возрастает примерно в 1,5 раза, имея для 2-х полосной дороги предел, зависящий от количества АТС в "волновом пакете" и конструктивной скорости автомобиля V_K :

$$\lim_{N \rightarrow 100} V_{CP} = V_K / (1 + 0,23 \cdot \lg N) = 0,685 \cdot V_K, \quad (3)$$

При этом за счет обсадки обочин дорог кустарниками вероятность ДТП с наездом на пешеходов сокращается на 30%, а за счет посадки сплошного

ряда деревьев и кустарников на "осевой линии", прерывающегося только на перекрестке, общее количество ДТП снижается вдвое, т.к. 50% из них вызваны нарушением правил обгона и выездом на встречную полосу движения [5,7].

При невозможности изменения исторически сложившихся архитектурных решений, дополнительным резервом биоархитектуры городов являются "зеленые" (деревяно-кустарниковые) ограждения вместо каменных, стальных и бетонных заборов, а также обсадка, например, льном и бесгашишной коноплей, реконструируемых соответствующим образом крыш зданий [6].

Применение "биотуннелей" вместо труб котельных, ГРЭС и ТЭЦ, локализуя и поглощая их выбросы, практически "закрывает экологические проблемы" теплоэнергетики, а биогумусная и биотермическая технологии продуктов опада "биотуннелей", возвращая углерод в геосферу, завершают восстановление нарушенных природных циклов [7,9].

Литература

1. *Чесноков В.С.* Сергей Андреевич Подолинский - М., Наука, 2001.
2. *Белозеров В.В., Загускин С.Л., Минкин В.М., Топольский Н.Г.* Концепция интегральной опасности – в сб.Межд.конф. "Современные проблемы национальной безопасности: Россия в XXI век с миром и согласием" /ISBN 5-89288-054-0/, Ростов н/Д, АПНБ(РЮИ МВД РФ),1999, с.267-272.
3. *Баранов П.П., Белозеров В.В., Верещагин В.Ю., Ворович И.И., Гапонов В.Л., Загускин С.Л., Труфанов В.Н.* Философские, правовые, политические и научно-технические проблемы безопасности жизнедеятельности – в сб. мат.рег.науч.-теор.конф. "Политико-правовая культура и духовность"/ISBN 5-89288-078-8/, Ростов н/Д, РЮИ МВД, 2001,с.277-288.
4. *Белозеров В.В., Пащинская В.В., Травин В.И.* Синергетика экономики, безопасности и права – жур. "Успехи современного естествознания", № 8, 2006, М., РАЕ, с. 62-65.
5. *Белозеров В.В., Богуславский Е.И., Пащинская В.В., Прус Ю.В.* Адаптивные системы подавления энтропии в техносфере – в жур. "Успехи современного естествознания", № 11, 2006 , М., РАЕ, с. 59-62.
6. *Айдаркин Е.К., Баранов П.П., Белозеров В.В., Громова Л.М., Травин В.И., Пащинская В.В.* Биотехнология в транспортных инфраструктурах – в сб.мат-лов 5-й конф с междунар.участием "Эффективность реализации научного, ресурсного и промышленного потенциала в современных условиях" /Карпаты, 21-25 февраля 2005/ Киев, УИЦ "Наука, техника, технология", 2005, С.3-7.

7. *Азаров А.Д., Бадалян Л.Х., Белозеров В.В., Денисенко П.Ф., Пашинская В.В., Рейзенкинд Я.А., Шевчук П.С. "КАСКАД" – Адаптивная система безопасности дорожного движения – в сб. мат-лов 7-й Всерос.науч.-практ.конф. "Техносферная безопасность" /2 ч., ISBN 5-89071-036-2, Ростов н/Д-Новочеркасск-Туапсе/, Ростов н/Д, РГСУ, 2002, с.191-197.*
8. *Белозеров В.В., Видецких Ю.А., Викулин В.В., Гаврилей В.М., Мешалкин Е.А., Назаров В.П., Новакович А.А., Прус Ю.В. "БАКСАН-ПА": автомобиль скорой пожарной помощи – в жур. "Современные наукоемкие технологии", № 4, 2006, М., РАЕ, с.87-89.*
9. *Айдаркин Е.К., Белозеров В.В., Богуславский Е.И., Викулин В.В., Костырев Н.П., Новакович А.А., Романовский А.Б., Топольский Н.Г. Физико-химические и хронобиологические методы и технологии в системе подавления вреда и пожарной защиты ТЭЦ – в жур. "Современные наукоемкие технологии", № 4, 2006, М., РАЕ, с.86-87.*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХСКОРОСТНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ДВУХФАЗНОЙ ЖИДКОСТИ В ТРЕЩИНОВАТО-ПОРИСТЫХ ПЛАСТАХ¹

Бервено Е.В., Калинин А.А., Лаевский Ю.М.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Введение

На сегодняшний день методы математического моделирования широко используются в практике проектирования и оптимизации разработки месторождений и решения задач фильтрации. Создание моделей, адекватно описывающих строение пластов, а также происходящие в них фильтрационные процессы, является актуальной задачей.

Ранее в рамках данной тематики авторами статей [1,2] исследовались модели фильтрации двухфазной несжимаемой жидкости в однородной среде с различным расположением скважин для выявления наиболее эффективных вариантов с точки зрения скорости процесса вытеснения нефти из нефтеносного пласта водой.

В последующих исследованиях акцент ставился на изучение того, как неоднородности в почве могут влиять на процесс фильтрации, в результате чего стала очевидной неточность классической теории фильтрации в пористых средах при применении её для описания коллекторов некоторых структур трещиновато-пористого типа. Внимание было заострено на том, как такие параметры, как пористость и проницаемость влияют на картину поведения потока жидкости в нефтеносном пласте. В статье [3] приведены эксперименты, описывающие значительное влияние неоднородностей в пористой среде коллектора на процесс фильтрации. Задача была реализована с применением высокопроизводительных кластерных вычислений, необходимость чего была обусловлена сложностью и большим объемом задачи. Вычисления производились в Сибирском СуперКомпьютерном Центре (ССКЦ) на кластере НКС-30Т содержащем 60 вычислительных узлов, каждый из которых содержит 2 процессора Intel®Xeon®E5540 с 8Gb RAM. В итоге алгоритм продемонстрировал эффективную работу на компьютерах с распределенной памятью и хорошую масштабируемость до 256 процессов.

В данной статье мы будем рассматривать двухфазное течение, соответствующее вытеснению первоначально заполнявшей поры пласта нефти, подаваемой в коллектор под давлением водой в трещиновато-пористой среде, характерная особенность которой состоит в том, что движение жидкости в

¹Работа поддержана проектами РФФИ №13-01-00019 и №12-01-31046.

ней происходит в основном по трещинам, в то время как объем трещин мал и основные запасы жидкости заключаются в пористых блоках.

I Двухскоростная модель фильтрации

Идея создания модели фильтрации двухфазной жидкости, корректно задающей систему уравнений для трещиновато-пористых пластов, является расширением рассматриваемой ранее задачи с включением блоков сменной пористости и проницаемости в работе [3].

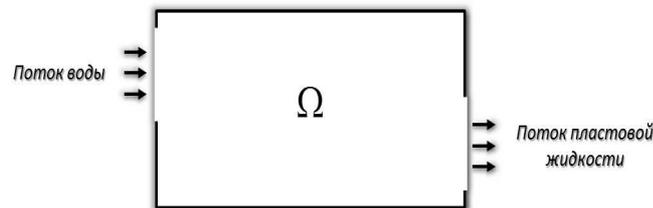


Рис. 1. Процесс фильтрации

Название модели обусловлено тем, что основными характеристиками двухфазного течения являются насыщенность и скорость фильтрации. Доля объема пор в элементарном макрообъеме, охватывающем данную произвольную точку, занятого i -й фазой, называется насыщенностью порового пространства этой фазой в данной точке и обозначается s_i , в соответствии с определением Баренблатта [4], и $s_1^{(j)} + s_2^{(j)} = 1$. Здесь и далее подстрочный индекс i означает номер фазы, где $i = 1$ соответствует вытесняемой фазе (нефть), $i = 2$ вытесняющей фазе (вода), а надстрочный индекс (j) означает, что переменная описывает поры при $j = 1$, и трещины при $j = 2$.

Модель, рассмотренная в работе [3] включает в себя закон сохранения массы компонент двухфазной несжимаемой жидкости и закон Дарси:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{k(s)} \mathbf{v} + \nabla \psi &= \mathbf{G}(s), \\
 \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0, \\
 \frac{1}{k(s)} \mathbf{w} &= \nabla \sigma(s), \\
 \mathbf{v}_2 - \frac{k_2(s)}{k(s)} (\mathbf{v} - \mathbf{w}) &= -k_2(s) \mathbf{G}(s), \\
 m \frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_2 &= 0,
 \end{aligned} \tag{1}$$

где \mathbf{v}_i – векторы скоростей фильтрации фаз, $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2$, ψ – обобщенное давление, k_i – проницаемость фаз, $k = k_1 + k_2$, s – насыщенность второй фазы, $G(s)$ – вектор гравитации, m – пористость.

Приведенные выше соотношения, характеризующие процесс фильтрации в однородных средах, используются нами для построения модели вытеснения нефти водой в двухскоростной модели фильтрации двухфазной жидкости в трещиновато-пористых пластах.

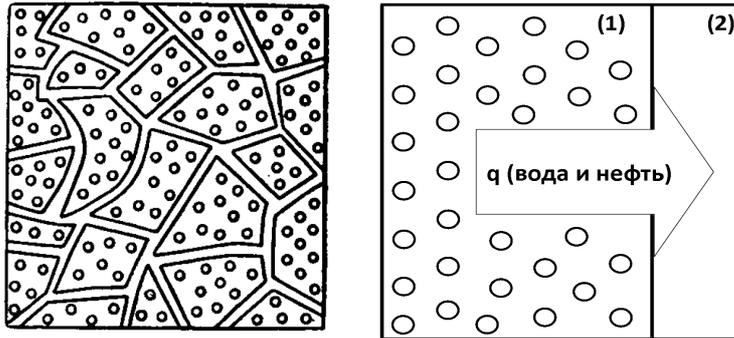


Рис. 2. Трещиновато-пористая среда

В новой модели каждой точке пространства соответствуют две системы уравнений. Одна система уравнений описывает процесс фильтрации для пор, вторая система уравнений – процесс движения жидкости в трещинах. А поскольку вместо одного давления жидкости в каждой точке среды два: давление в трещинах $p^{(1)}$ и давление в порах блоков $p^{(2)}$, то эти две системы уравнений связаны аналогом закона теплообмена ньютоновской жидкости.

Переход от задачи (1) к обобщенной смешанной постановке для задачи Неймана происходит в соответствии с [6]. Особенность моделирования в работах [1, 2] заключается в том, что способ задания скважин не требует сгущения сетки в прискважинных зонах и соразмерности диаметра скважин шагу сетки.

Для аппроксимации по времени уравнения насыщенности вытесняющей фазы используется явная схема типа предиктор-корректор второго порядка аппроксимации, как и в работе [1], с одним вычислением правой части на шаге интегрирования. Данная схема, предложенная в статье [5], продемонстрировала эффективность при численных экспериментах и в работе [3].

Для построенной модели применяется разработанная в ходе предыдущих исследований методика распараллеливания трехмерной задачи с использованием MPI технологии [7] для компьютерных систем, удовлетворяющих кластерной структуре.

Литература

1. *Yu. M. Laevsky, P. E. Popov, A. A. Kalinkin* Simulation of two-phase fluid filtration by mixed finite element method // *Matem. Mod.* 2010. Vol. 22. N 3. P. 74–90.
2. *P.E. Popov, A.A. Kalinkin.* The method of separation of variables in a problem with a saddle point // *Russian J. Numer. Anal. Math. Model.* 2008. Vol. 23. N 1. P. 97–106.
3. *E.V. Berveno* Simulation of two-phase fluid filtration with nonuniform media on clusters (в печати)
4. *Г. И. Баренблатт, В. М. Ентов, В. М. Рыжик* Движение жидкостей и газов в природных пластах. М., Недра, 1984. 104-112, 147–149 с.
5. *Г. В. Демидов, Е. А. Новиков* Экономичный алгоритм интегрирования нежестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. // *Численные методы в математической физике*, 1979, Новосибирск: ВЦ СО СССР, с 69-83.
6. *F. Brezi and M. Fortin* Mixed and Hybrid Finite Element Methods // New York: Springer-Verlag, 1991.
7. MPI: A Message-Passing Interface Standard // Version 3.0, September 21, 2012, <http://mpi-forum.org/docs/mpi-3.0/mpi30-report.pdf>

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ MPI/OPENMP РЕАЛИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ АСИНХРОННОЙ РАБОТЫ С ПОТОКАМИ ДЛЯ ТРЕХМЕРНОЙ СХЕМЫ РАСЩЕПЛЕНИЯ В ЗАДАЧАХ ТЕПЛОПЕРЕНОСА¹

Воронин К.В., Калинин А.А.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Введение

В работе представлены результаты численного исследования параллельного алгоритма реализации векторных схем расщепления на основе технологий MPI и OpenMP с асинхронной работой с потоками для решения трехмерных задач теплопереноса. Проводится сравнение следующих параллельных алгоритмов: “чистый” MPI, “прямолинейный” MPI/OpenMP и “гибридный” MPI/OpenMP с выделением потоков-“почтальонов”. Под “прямолинейным” MPI/OpenMP понимается простое применение *#pragma omp* директив к MPI коду. Достаточно хорошо известно, что “чистая” MPI реализация для алгоритмов, где распределение данных по процессам возникает естественным образом (явные схемы для параболических уравнений, метод разделения переменных для эллиптических уравнений, методы декомпозиции области и т.п.), показывает высокую эффективность (почти линейное шкалирование времени от числа MPI процессов). Для достижения сравнимой производительности для OpenMP реализации внутри одного вычислительного узла обычно осуществляется значительная модификация кода с введением локальных массивов для каждого из OpenMP потоков. В данной работе исследован другой способ повышения эффективности MPI/OpenMP реализации – основная идея заключается в выделении на каждом из узлов с общей памятью одного потока, отвечающего за выполнение обменов данными между процессами (между узлами – MPI). Данный подход позволяет организовать одновременное выполнение полезных вычислений и обменов данными [1]. Для этого необходимо дополнительно разбить данные на каждом узле на блоки меньшего размера. Эффективность подобной гибридной MPI/OpenMP реализации сильно зависит в том числе и от размера этих блоков, который подбирался (экспериментально) оптимальным для рассматриваемых задач. В итоге, общее время работы алгоритма сводится к максимуму из времени, затрачиваемого на вычисления, и времени, затрачиваемого на обмен данными.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №13-01-00019, №12-01-31046 и Интеграционного проекта СО РАН №76.

Исследование эффективности такого подхода было проведено для трехмерной схемы расщепления в смешанном методе конечных элементов для задачи теплопереноса [2], [3]. Одной из характерных особенностей данной схемы является то, что благодаря использованию параллелепипедальных сеток и конечных элементов низкого порядка реализация данной схемы на каждом временном шаге сводится к выполнению (в несколько дробных шагов) независимых прогонок вдоль линий сетки. Данная схема является лишь одним из примеров векторных схем расщепления для задачи теплопереноса, записанной в терминах "температура – тепловой поток", поэтому все полученные результаты имеют достаточно общий характер и распространяются на весь класс схем, предложенных в рамках указанного подхода. В настоящее время подобные векторные схемы расщепления в смешанном МКЭ применяются, например, для моделирования геотермальных процессов в литосфере [4].

Результаты проведенного численного исследования позволяют заключить, что для рассматриваемого класса алгоритмов использование гибридного MPI/OpenMP подхода с выделением потоков-“почтальонов” значительно улучшает “простую” (без локальных массивов для каждого потока) MPI/OpenMP реализацию, но не приводит к повышению эффективности по сравнению с “чистой” MPI реализацией.

I Постановка задачи и схема расщепления

Рассмотрим следующую систему дифференциальных уравнений первого порядка, описывающую процесс теплопереноса в трехмерной области Ω :

$$\begin{cases} c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla^T \mathbf{w} = f, x \in \Omega, \\ \lambda^{-1} \mathbf{w} = -\nabla T, x \in \Omega. \end{cases}$$

Здесь T и \mathbf{w} – искомые функции температуры и теплового потока, c_p , ρ и λ – коэффициенты теплоемкости, плотности и теплопроводности соответственно, f – распределенные внутри области источники тепла. Первое уравнение представляет собой закон сохранения энергии, второе – закон Фурье. К системе добавляются начальные данные для температуры, на границе ставятся краевые условия Неймана или Дирихле. Для пространственной аппроксимации применяется смешанный метод конечных элементов с элементами Равьяра-Тома наименьшей степени для вектор-функций и кусочно-постоянными элементами для скаляров. После дискретизации по пространству возникает следующая система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} M \frac{dT_h}{dt} + B^T \mathbf{w}_h = f_h, \\ \mathbf{A} \mathbf{w}_h = B T_h + g_h, \end{cases}$$

где матрица масс для потока \mathbf{A} – блочно-диагональная с трехдиагональными блоками, M – диагональная матрица масс для температуры, прямоугольные матрицы \mathbf{B} и \mathbf{B}^T соответствуют операторам градиента и дивергенции.

Использованная в данной работе схема расщепления [2], [3] основана на схеме Дугласа и Гана для сеточной дивергенции потока, имеет второй порядок точности по времени и пространству и обеспечивает абсолютно устойчивое вычисление температуры. Реализация схемы сводится к пяти дробным шагам, на каждом из которых необходимо (для вычисления потоковых переменных) выполнять прогонки вдоль линий сетки, правая часть для прогонки аппроксимирует вторые смешанные производные по пространству от промежуточных потоковых переменных.

II Распределение данных по MPI процессам

Для всех сеточных функций используется следующая нумерация: скалярные величины нумеруются в порядке возрастания индексов $y - z - x$; x -компоненты векторных величин – в порядке возрастания индексов $x - y - z$, y -компоненты – $y - z - x$, z -компоненты – $z - y - x$. При такой нумерации естественным образом организуется распределение данных по процессам – данные “нарезаются” по внешнему индексу. Для реализации данной схемы требуется три обмена данными типа “all-to-all” на каждом шаге по времени – пересылки компонент потоков по x , y и z . Выполнение каждого из дробных шагов схемы сводится к обращению трехдиагональных матриц на ассемблируемых векторах правой части, т.е. к выполнению независимых прогонок вдоль линий сетки, что позволяет на каждом MPI процессе выполнять решение соответствующих систем малой размерности независимо. В силу несимметричности схемы выбор внешних индексов нумерации был оптимальным с точки зрения количества необходимых обменов данными на каждом временном слое.

III MPI/OpenMP реализация с асинхронной работой с потоками

Коммуникации между вычислительными узлами осуществляются с помощью процедур MPI, поэтому данные между вычислительными узлами распределяются так, как это описано в предыдущем разделе. На каждом из вычислительных узлов используется распараллеливание с помощью OpenMP. Главным для MPI/OpenMP реализации с асинхронной работой с потоками (с “почтальонами”) является организация наложения вычислений и обменов данными на каждом из вычислительных узлов. Для этого на каждом из вычислительных узлов среди всех OpenMP потоков выделяется один поток (поток-“почтальон”), который будет выполнять обмены данными. При этом данные на каждом вычислительном узле (MPI процессе) дополнительно разбиваются на блоки меньшего размера. Каждая такая часть обрабатывается параллельно потоками-“решателями”, в то время как поток-“почтальон” выполняет динамически пересылку обработанных на каждом MPI процессе

к текущему моменту времени блоков. Выбор размера блока для обработки OpenMP потоками-“решателями” должен быть оптимальным с точки зрения следующих ограничений. С одной стороны, слишком маленький размер блоков может привести к зависимости по памяти и многократной перекачке данных между кэшами каждого из потоков, с другой стороны – слишком большой размер блоков увеличивает время возможного простоя из-за необходимости синхронизации и уменьшает возможный выигрыш во времени из-за уменьшения гибкости гибридной части алгоритма. При исследовании эффективности алгоритма размер блоков подбирался экспериментально. Также необходимо отметить, что помимо разбиения процесса вычислений на части, следует разбивать и процесс сборки векторов правой части для прононок, причем размер частей разбиения для правой части также зависит от размера кэша и от размера блоков для вычислений (для тех слагаемых, в которых участвуют данные, полученные в ходе межузловых коммуникаций). Кратко основная идея подобной MPI/OpenMP реализации может быть также сформулирована в виде следующего псевдокода:

```

if(my_thread_ID != 0){ /* “solver” threads: */
    #pragma omp parallel
    foo1(); // solving small chunks in parallel
    #pragma omp flush
    foo2(); // telling the “postman” about chunks ready to be exchanged
}
else{ /* “postman” thread: */
    while{ /*not all chunks are exchanged */
        foo3(); //MPI_Alltoallv(chunks)
    }
}

```

IV Сравнение MPI, MPI/OpenMP и MPI/OpenMP реализации

В данном разделе представлены результаты сравнения MPI реализации с “прямолинейной” MPI/OpenMP и MPI/OpenMP реализацией с “почтальонами”. Под “прямолинейной” MPI/OpenMP реализацией подразумевается простое использование *#pragma omp* директив в MPI-коде. Представленные результаты были получены на кластере ССКЦ СО РАН [5] на двойных блейд-серверах HP BL2x220 G7 (ОП модуля – 24 Гбайт, каждый узел состоит из двух бти ядерных процессоров Intel Xeon X5670 2.93 GHz (Westmere)). Расчеты проводились на тестовом решении, соответствующем правой части $f = (f_{i,j,k})$, где $f_{i,j,k} = h_x^i h_y^j h_z^k 10^{-4} \frac{t}{t+1} \frac{i+j+k}{i+j+k+2}$. Для гибридных MPI/OpenMP реализаций число MPI процессов совпадало с числом вычислительных узлов. Т.к. основное отличие от MPI реализации состоит в использовании общей памяти внутри узла, использовались

только два вычислительных узла. При этом для MPI/OpenMP реализации с “почтальонами” был проведен ряд оптимизаций, связанных с локальной перенумерацией данных. Ниже на Рис.1 приведены результаты сравнения MPI, MPI/OpenMP и MPI/OpenMP реализаций для сетки 384x384x384, при этом оптимальный размер частей для реализации с “почтальонами”, на которые делились данные внутри узла, был подобран экспериментально.

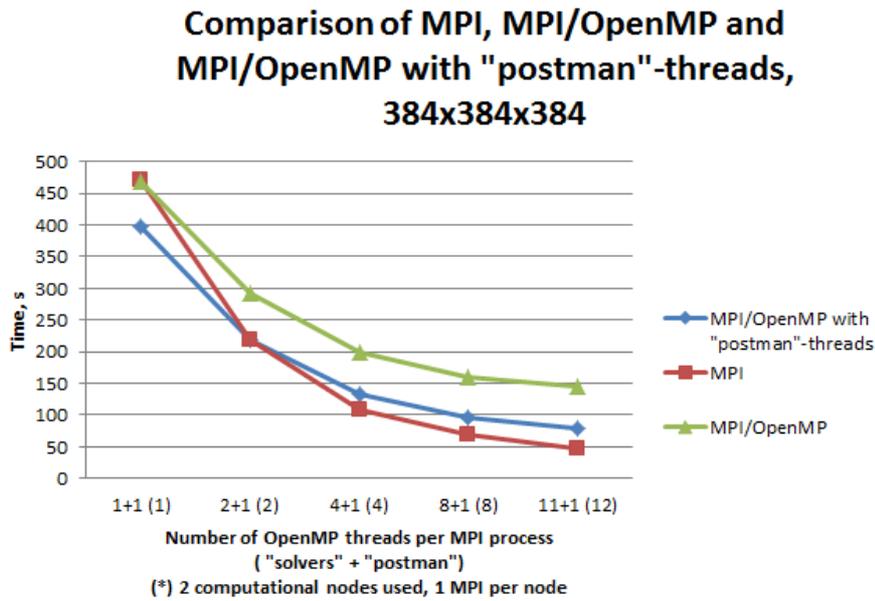


Рис.1 Зависимость времени выполнения от числа OpenMP потоков на выч. узле (числа MPI процессов на узле для MPI реализации), 2 выч. узла, сетка 384x384x384.

Как можно заметить на Рис.1, наложение вычислений и обменов данными позволило существенно повысить эффективность простой MPI/OpenMP реализации, однако MPI реализация все равно показывает лучший результат. Это происходит не столько за счет возникновения дополнительных накладных расходов организации “гибридности” кода, сколько из-за того, что значительно увеличивается время, затрачиваемое на пересылки (т.к. всего 2 MPI процесса для MPI/OpenMP и 24 для MPI). Следует также заметить, что чистая MPI реализация показывают очень высокую эффективность (80% при использовании 12 процессов на узле по сравнению с 1). Более того, при увеличении размера задачи шкалирование MPI реализации еще улучшается (при условии, что выделено достаточное количество выч. узлов). Необходимо отметить также одну из важных особенностей MPI/OpenMP реализации с почтальонами, а именно – сильную зависимость эффективности от размера блоков, на которые дополнительно делятся данные на каждом процессе. При этом априорный выбор оптимального размера требует тщательного анализа особенностей общей памяти на выч. узле.

V Заключение

Результаты проведенного численного исследования позволяют сделать вывод, что для рассматриваемого класса алгоритмов использование гибридного MPI/OpenMP подхода с выделением потоков-“почтальонов” значительно улучшает “прямолинейную” (без создания локальных массивов для каждого потока) MPI/OpenMP реализацию, но не приводит к повышению эффективности по сравнению с “чистой” MPI реализацией.

Литература

1. *Rabenseifner R., Hager G., Jost G.* Hybrid MPI/OpenMP Parallel Programming on Clusters of Multi-Core SMP Nodes.// Proceedings of the 2009 17th Euromicro International Conference on Parallel, Distributed and Network-based Processing, 427-436 (2009).
2. *Воронин К.В., Лаевский Ю.М.* О схемах расщепления в смешанном методе конечных элементов. Сиб. журн. вычисл. математики, 15(2), 101-107 (2012).
3. *Воронин К.В., Лаевский Ю.М.* Схемы расщепления в смешанном методе конечных элементов решения задач теплопереноса. Матем. моделирование, 24(8), 109-120 (2012).
4. *Верниковская А.Е., Даценко В.М., Верниковский В.А., Матушкин Н.Ю., Лаевский Ю.М., Романова И.В., Травин А.В., Воронин К.В., Лепехина Е.Н.* Эволюция магматизма и карбонатит-гранитная ассоциация в неопретерозойской активной континентальной окраине Сибирского кратона: термохронологические реконструкции. Доклады Академии Наук, 448(5), 555-562 (2013).
5. *Сибирский Суперкомпьютерный центр, <http://www2.sccc.ru/>*

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯВЛЕНИЯ АССИМЕТРИЧНОЙ КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ В РАСТВОРЕ ЭЛЕКТРОЛИТА¹

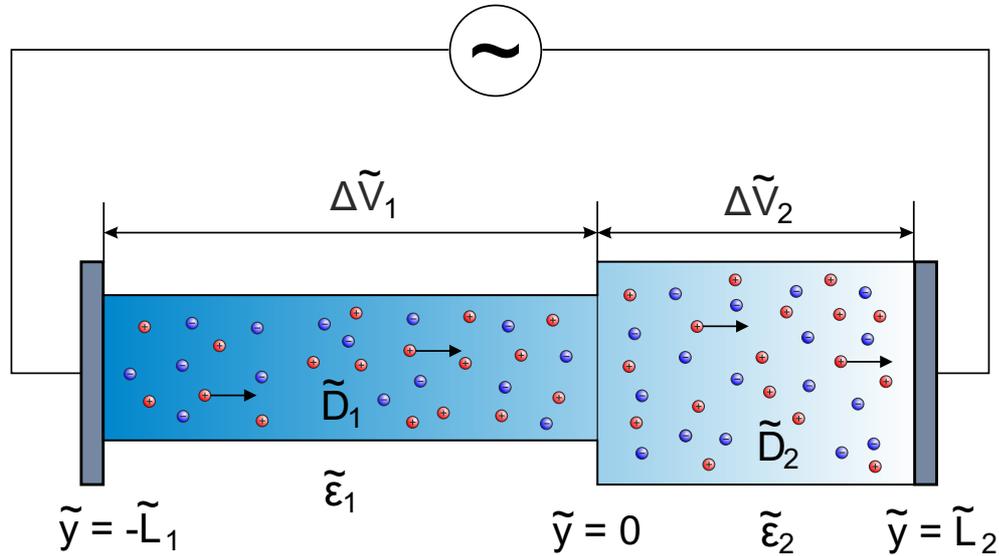
Горбачева Е.В., Франц Е.А., Ганченко Г.С.

Кубанский государственный университет, Краснодар

Микрофлюидная технология возникла около 20 лет назад с развитием микронных размеров хроматографов, микро-насосов, микро-клапанов, датчиков расхода и др. Современная тенденция технологического развития заключается в интегрировании микро- и наноустройств разделения, смешивания, и анализа различных процессов в одном микрочипе. Такая технология называется лабораторией на чипе (*lab-on-chip*). Эти устройства часто используют электрокинетические эффекты для переноса, смешивания, разделения различных субстанций и др. Важным эффектом, применяемым в лаборатории на чипе, который будет исследоваться в настоящей статье, является выпрямление электрического тока. Новые идеи выпрямления тока в растворе электролита, в отличие от старого полупроводникового способа, были выдвинуты в 60-х годах прошлого века и интенсивно развивались все последующее время [1-8]. Рассмотрен новый метод выпрямления электрического тока в микро- и наномасштабах, основанный на асимметричной концентрационной поляризации в растворе электролита. Предложена простая схема выпрямляющего устройства, состоящая из двух микроканалов с разной геометрией, заполненных жидкостями с различными диэлектрическими проницаемостями и коэффициентами диффузии. Таким образом, схема обладает разными видами асимметрии. Предполагалось, что микро-каналы содержат ионы полностью диссоциированного вещества, а на границе раздела имеется поверхностный заряд. Хорошим приближением для описания электро-химических процессов являются нестационарные нелинейные уравнения Нернста-Планка-Пуассона с соответствующими краевыми условиями: непроницаемости для анионов и уравнением Аррениуса для катионов. Нелинейность системы и сложные краевые условия препятствуют ее аналитическому решению, поэтому был разработан специальный метод точного численного решения. Окрестность электродов и границы раздела жидкостей содержат двойные ионные слои с резким изменением неизвестных, поэтому для дискретизации по пространственной переменной применялся метод Галеркина с полиномами Чебышева в качестве базисных функций. Сгущение нулей полиномов Чебышева на границах интервала их определения позволяет лучшее разрешение схемы в области двойных ионных слоев. Так как полиномы Чебышева не удовлетворяли краевым условиям задачи, применялась τ -разновидность метода Галеркина. Динамическая система относительно галеркинских коэффициентов ввиду ее

¹Работа была финансирована грантами РФФИ №12-08-00924а, №11-08-00480а.

исключительной жесткости интегрировалась по времени методом Гира. В работе выявлены параметры системы, при которых степень выпрямления наиболее сильная и оценены их оптимальные значения. Кроме того, проведено экспериментальное исследование выпрямляющего ток эффекта, качественно соответствующие теории.



Рассматривается тонкая трубка, заполненная двумя жидкостями с различными коэффициентами диффузии \tilde{D}_1 и \tilde{D}_2 , различными диэлектрическими проницаемостями $\tilde{\varepsilon}_1$, $\tilde{\varepsilon}_2$. В обеих жидкостях предполагается наличие ионов некоторой полностью диссоциированной субстанции. Стенки трубки считаются изоляторами; на торцах трубки помещены электроды, разность напряжения на которых меняется по синусоидальному закону. Наличие тильды означает размерную величину, а ее отсутствие – безразмерную. Уравнения транспорта одновалентных катионов \tilde{c}^+ и анионов \tilde{c}^- и уравнение Пуассона для электрического потенциала $\tilde{\Phi}$ для первой жидкости в области $-\tilde{L}_1 < \tilde{y} < 0$ имеют вид:

$$\frac{\partial \tilde{c}^+}{\partial \tilde{t}} = \frac{\tilde{D}_1 \tilde{F}}{\tilde{R} \tilde{T}} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left(\tilde{c}^+ \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{y}} \right) + \tilde{D}_1 \frac{\partial^2 \tilde{c}^+}{\partial \tilde{y}^2}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \tilde{c}^-}{\partial \tilde{t}} = -\frac{\tilde{D}_1 \tilde{F}}{\tilde{R} \tilde{T}} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left(\tilde{c}^- \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{y}} \right) + \tilde{D}_1 \frac{\partial^2 \tilde{c}^-}{\partial \tilde{y}^2}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{\Phi}}{\partial \tilde{y}^2} = \frac{\tilde{F}}{\tilde{\varepsilon}_1} (\tilde{c}^- - \tilde{c}^+). \quad (3)$$

Уравнения для второй жидкости в области $0 < \tilde{y} < \tilde{L}_2$ аналогичны:

$$\frac{\partial \tilde{s}^+}{\partial \tilde{t}} = \frac{\tilde{D}_2 \tilde{F}}{\tilde{R} \tilde{T}} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left(\tilde{s}^+ \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{y}} \right) + \tilde{D}_2 \frac{\partial^2 \tilde{s}^+}{\partial \tilde{y}^2}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \tilde{s}^-}{\partial \tilde{t}} = -\frac{\tilde{D}_2 \tilde{F}}{\tilde{R} \tilde{T}} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} \left(\tilde{s}^- \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{y}} \right) + \tilde{D}_2 \frac{\partial^2 \tilde{s}^-}{\partial \tilde{y}^2}. \quad (5)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{y}^2} = \frac{\tilde{F}}{\tilde{\varepsilon}_2} (\tilde{s}^- - \tilde{s}^+), \quad (6)$$

На поверхности раздела фаз $\tilde{y} = 0$ концентрации катионов и анионов, их потоки и потенциал считаем непрерывными, а напряженности поля, связаны через диэлектрические проницаемости среды с учетом поверхностной плотности заряда $\tilde{\sigma}$. Уравнения Нернста-Планка-Пуассона неплохо описывают электрохимические процессы, но граничные условия на электродах уже не так очевидны. Мы сформулируем граничные условия для нашей задачи, основанные на классических моделях двойного ионного слоя [9], [10], [11]. Условие для потенциала запишем, учитывая наличие неподвижного заряженного слоя Штерна [12] с разностью потенциала $\Delta \tilde{\Phi}$ между электролитом и электродом. Далее, при условии, что анионы не адсорбируются на поверхности анода, запишем условие отсутствия потока отрицательных ионов на обоих электродах. Последняя пара краевых условий относится к потоку катионов. Пусть на электродах происходит реакция с некоторой скоростью \tilde{Q} . Положительные ионы принимают электроны, становясь электронейтральными молекулами, или молекулы отдают электрон, становясь ионами. В итоге мы получим последние два граничных условия. Система краевых условий замыкается, если определены зависимости скорости реакции и падения потенциала в слое Штерна от параметров задачи. Скорость реакции \tilde{Q} в пределе разбавленного электролита задается зависимостью Аррениуса в форме, примененной в [13] и предполагается зависящей только от концентрации катионов и падения потенциала в слое Штерна. В начальный момент времени полагаем раствор нейтральным, с некоторой равновесной концентрацией ионов при этом должно выполняться сохранение количества анионов во всем объеме устройства. Система уравнений приводится к безразмерному виду и описывается 12 безразмерными параметрами, наиболее важными являются:

$$\alpha = \frac{\tilde{D}_2 \tilde{L}_1}{\tilde{D}_1 \tilde{L}_2}, \quad \gamma = \frac{\tilde{L}_1}{\tilde{L}_1 + \tilde{L}_2}. \quad (7)$$

Проведено исследование, численно решалась нелинейная система, для случая малых слоев Дебая по сравнению с характерным геометрическим размером. С точки зрения влияния разности потенциала ΔV известно [9], что при постоянном токе или медленном его изменении вольт-амперная характеристика имеет два характерных участка: (а) при малой разности потенциала ток пропорционален ΔV , этот режим называется омическим или допредельным; (б) при увеличении разности потенциала происходит явление запираения и насыщения тока, когда при увеличении ΔV ток практически не меняется и

выходит на плато, этот режим называется предельным. Для полноты изложения отметим, что при дальнейшем увеличении разности потенциала возникает еще и третий участок вольт-амперной характеристики, так называемые сверхпредельные токи [14], когда ток опять становится пропорциональным ΔV , однако для описания этого интересного режима, называемого еще режимом электроконвекции, одномерной модели недостаточно. В результате наших вычислений был выяснен интересный феномен: для лучшего качества выпрямления необходимо чтобы в одной из частей микро-канала режим был допредельным, а во второй – предельным. Характерное время входит в задачу в виде двух параметров $\Lambda_{1,2}$. Входящее в параметры отношение $\tilde{L}_{1,2}^2/\tilde{D}_{1,2}$ представляет собой характерное время в диффузионной части каналов и для микро-каналов имеет порядок $10^{-3} \div 10^{-1}$ sec. Если ставить задачей выпрямление тока порядка $1 \div 5$ Hz, то $\Omega_{1,2}$ имеют порядок десятых долей или единицы. Мы исследовали, исходя из вышеизложенного $\Omega_{1,2}$ порядка $0.1 \div 10$.

Литература

1. *Riess H.* Chemical Effects Due to the Ionization of Impurities in Semiconductors // 1953. J. Chem. Phys. v. 21, p. 1209-1218.
2. *Wei Ch., Bard A.J., Mirkin M.V.* // Scanning Electrochemical Microscopy. Application of SECM to the study of charge transfer processes at the liquid/liquid Interface 1995, v. 99(43), p. 16033 – 16042.
3. *Daiguji H., Oka Y., Shirono K.* Nanofluidic Diode and Bipolar Transistor // 2005, Nano Lett. v. 5, p. 2274-2280.
4. *Vlassioux I., Smirnov S., Siwy Z.* Ionic Selectivity of Single Nanochannels // 2008 Nano Lett. v. 8, p. 1978 – 1985.
5. *Siwy Z.* Ion-Current Rectification in Nanopores and Nanotubes with Broken Symmetry // 2006, Adv. Funct. Mater. v. 16, p. 735-746.
6. *Jung J., Joshi P., Petrossian L., Thornton T., Posner J.* Electromigration Current Rectification in a Cylindrical Nanopore Due to Asymmetric Concentration Polarization // 2009, Anal. Chem. v. 81, p. 3128-3133.
7. *Yossifon G., Chang H.-C.* Selection of Nonequilibrium Overlimiting Currents: Universal Depletion Layer Formation Dynamics and Vortex Instability // 2008 Phys. Rev. Lett. v. 101, 254501-254505.
8. *Chang H.-C., Yossifon G.* Understanding electrokinetics at the nanoscale: A perspective // 2009 Biomechanics v. 3, 012001-012016.
9. *Левич В. Г.* Физико-химическая гидродинамика. М.: ГИФМЛ, 1959., с. 700.

10. *Delahay P.* Double Layer and Electrode Kinetics, Interscience, New York, 1965, p. 321.
11. *Bard A. J. and Faulkner L.R.* Electrochemical Methods, John Wiley and Sons, New York, 2001, p. 815.
12. *Stern O.* Zur theorie der elektrolytischen doppelschicht // Z. Elektrochem. 1924. V. 30, p. 508-516.
13. *Bazant M.Z., Chu K. T., Bayly D.J.* Current-voltage relations for electrochemical thin films. // SIAM J. Appl.Math. 2005, v. 65(5), p. 1463-1484.
14. *Newman J., Tiedermann W.* Porous-electrode theory with battery applications // AIChE Journal 1975. V. 21. № 1. p. 25-41.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ КДВБ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВОЛН В ПАРОЖИДКОСТНЫХ СРЕДАХ

Горбенко Н.И.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

I Введение

Уравнение Кортевега-де-Вриза-Бюргерса (КдВБ) является одним из основных математических инструментов для описания процессов распространения волновых процессов в средах с дисперсионными и нелинейными свойствами, см. монографии [1] и цитируемую в них литературу. Целью данной работы является построение устойчивых алгоритмов численного решения на длительных временных интервалах для уравнения КдВБ с правой частью интегрального вида, которое имеет следующий вид:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \gamma p \frac{\partial p}{\partial x} - \sigma \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial^3 p}{\partial x^3} = -W \int_0^t \frac{\partial p}{\partial \tau} \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}}, \quad (1)$$

Параметры γ, σ, β являются характерными критериями нелинейной дисперсионной волновой динамики с диссипацией, а W характеризует процесс массообмена в волне, обусловленным фазовым переходом первого рода.

Положим $W = 0$ и введем новые переменные $\varphi_x = p, v = \beta p_x, w = v_x - \sigma p_x + \frac{1}{2}\varphi_t - \gamma p^2$ и четырехмерный вектор $\bar{z} = (\varphi, p, v, w)^T$. В результате мы приходим от уравнения (1) к системе уравнений в частных производных первого порядка

$$K \bar{z}_t + L \bar{z}_x = \nabla_z S(\bar{z}), \quad (2)$$

где $S(\bar{z}) = \frac{1}{2\beta}v^2 - pw + \frac{\gamma}{6}p^3$ есть гамильтонова функция, а K и L – матрицы следующего вида:

$$K = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \sigma & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

При $\sigma = 0$ получается уравнение КдВ и матрицы M, K являются кососимметричными, и в таком случае говорят, что уравнение (1) записано в мультисимплектической форме (2)[2]. Применение метода конечных объемов к уравнению, записанному в мультисимплектической форме, приводит к разностным

схемам сохраняющим геометрическую структуру решения. Мультисимплектические схемы были построены для широкого класса волновых уравнений и показали лучшую по сравнению со стандартными методами численную устойчивость при долговременных вычислениях

В данной работе приведены явные и неявные разностные схемы для уравнения КдВБ, построенные на основе метода конечных объемов, которые совпадают при $\sigma = 0$ с мультисимплектическими бокс схемами для уравнения КдВ, а также предлагается алгоритм для вычисления так называемого интеграла с памятью (интеграл Дюамеля) в (1) с фиксированным объемом памяти. В п. 3 обсуждаются результаты вычислительных экспериментов для модельных задач.

II Описание вычислительных схем

Первая схема для (1) $\sigma = 0, W = 0$ была предложена в [3] и привела к открытию солитонов:

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} - \frac{\gamma \Delta t}{3\Delta x} (u_{j+1}^n + u_j^n + u_{j-1}^n)(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) - \frac{\beta \Delta t}{\Delta x^3} (u_{j+2}^n - 2u_{j+1}^n + 2u_{j-1}^n - u_{j-2}^n).$$

Далее для компактности мы будем записывать схемы с помощью шаблона, который для предыдущей схемы выглядит следующим образом

$$\frac{1}{\Delta t} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} u + \frac{\gamma}{3\Delta x} [1 \ 1 \ 1] u [-1 \ 0 \ 1] u + \frac{\beta}{\Delta x^3} [1 \ -2 \ 0 \ 2 \ -1] u = 0.$$

Несмотря на то, что она достаточно точна, чтобы выявить понятие солитона, при длительных расчетах численные результаты показывают нефизические осцилляции и развал решения, независимо от величины шага по времени. В последние годы появилось много численных схем, основанных на конечных разностях, элементах или объемах, спектральных и псевдо спектральных методах и многих других, которые базируются на концепции мультисимплектической [3] для этого уравнения при $\sigma = 0, W = 0$. Мультисимплектические интеграторы показали себя очень надежными, точными и эффективными при долговременных вычислениях и при этом обладают хорошими консервативными свойствами. Исходя из этого мы применили метод конечных объемов для уравнения КдВБ записанной в виде системы (2) и, исключив введенные дополнительные переменные, получили конечно-объемные разностные схемы, которые являются мультисимплектическими при $\sigma = 0, W = 0$. Было протестировано несколько схем, но здесь мы остановимся только на трех схемах.

Первая схема основанная на [4]

$$\frac{1}{2\Delta t} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} u + \frac{\gamma}{4\Delta x} [1 \ 1]u [-1 \ 0 \ 1]u - \frac{\sigma}{\Delta x^2} [1 \ -2 \ 1]u + \frac{\beta}{\Delta x^3} [-1 \ 3 \ 0 \ -3 \ 1]u = I_h^n. \quad (3)$$

Здесь и далее I_h^n есть аппроксимация интегрального члена в (1), см. ниже. Вторая схема неявная и была широко использовалась при моделировании распространении волн в жидкости с пузырьками пара [1].

$$\frac{1}{2\Delta t} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} + \frac{\gamma}{4\Delta x} [-1 \ 1]u^2 - \frac{\sigma}{\Delta x^2} [1 \ -2 \ 1]u + \frac{\beta}{\Delta x^3} [1 \ -2 \ 0 \ 2 \ -1]u. \quad (4)$$

Третья схема [5] может быть представлена 12-точечной формулой :

$$\frac{1}{16\Delta t} \begin{bmatrix} 1 & 3 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -3 & -3 & -2 \end{bmatrix} u + \frac{\gamma}{4\Delta x} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \left(\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} u \right)^2 - \frac{\sigma}{4\Delta x^2} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 2 & -4 & 2 \\ 1 & -2 & 1 \end{bmatrix} u + \frac{\beta}{4\Delta x^3} \begin{bmatrix} -1 & 3 & -3 & 1 \\ -2 & 6 & -6 & 2 \\ -1 & 3 & -3 & 1 \end{bmatrix} u = I_h^n. \quad (5)$$

Алгоритм вычисления интеграла в правой части (1) имеет следующий вид:

1. Выбираем шаг по времени Δt , положительные числа m, l , причем $m \gg l$.

2. На первых $m+l$ шагах вычисляем интеграл по формулам и запоминаем все данные.

$$\begin{aligned} \tilde{E}_2 &= \sum_{k=n+1-m}^{n-l} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{\partial p}{\partial \tau} \frac{d\tau}{\sqrt{t_{n+1}t - \tau}} \\ &= 2\sqrt{\Delta t} \left(\frac{1}{2\sqrt{m}} \left(\frac{\partial p}{\partial \tau} \right)_{n+1-m} + \sum_{k=0}^{n-m} \frac{1}{\sqrt{n+1-k}} \left(\frac{\partial p}{\partial \tau} \right)_k + \frac{1}{2\sqrt{l}} \left(\frac{\partial p}{\partial \tau} \right)_{n+1-l} \right), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\tilde{E}_3 = \frac{1}{\Delta t} \left(\sum_{j=n+1-l}^{n+1} C_j^1 \left(t_j \frac{\partial p}{\partial t}(t_{j-1}) - t_{j-1} \frac{\partial p}{\partial t}(t_j) \right) + C_j^2 \left(\frac{\partial p}{\partial t}(t_j) - \frac{\partial p}{\partial t}(t_{j-1}) \right) \right), \quad (7)$$

где коэффициенты C_j^1, C_j^2 вычисляются интегрированием

$$C_j^1 = \int_{t_{j-l}}^{t_j} \frac{d\tau}{\sqrt{t_{n+1} - \tau}}, \quad C_j^2 = \int_{t_{j-l}}^{t_j} \frac{\tau d\tau}{\sqrt{t_{n+1} - \tau}}.$$

3. Когда $n > m + 1$ мы используем описанный алгоритм для вычисления y_{n+1} , при котором интеграл разбивается на две части (7). Первая часть вычисляется по итеративной формуле

$$I_1^{n+1} = I_1^n + 2\sqrt{\Delta t} \left(\frac{\partial p}{\partial \tau} \right)_0 [\sqrt{n+1} - \sqrt{n}], \tag{8}$$

а вторую часть мы вычисляем по формулам из пункта 2.

Следовательно, для вычисления интеграла нам требуется фиксированное количество памяти, необходимое для запоминания $m + l + 1$ векторов.

Общая ошибка дискретизации алгоритма для приближенного вычисления интеграла Дюамеля имеет вид

$$E \leq 2\Delta t^{1.5} M_1 (\sqrt{n+1} - \sqrt{m}) + \Delta t^3 \frac{(m-l)M_2}{12} + \frac{(\Delta t)^2 M_3}{8} \int_{t_{n+1-l}}^{t_{n+1}} \frac{d\tau}{\sqrt{t_{n+1} - \tau}}$$

III Примеры численных экспериментов

Представим результаты численных экспериментов для тестовых задач с аналитическим решением для КдВ уравнения, который описывает двух солитонную волну. В наших численных экспериментах с аналитическим решением мы рассматриваем уравнение (9) с $\sigma = W = 0$ на отрезке $[-40, 40]$ с периодическими граничными условиями и начальными данными (аналитическое решение) при $t = 0$. Сеточная область содержит 500 узлов ($h = 0.016$) с отношением $\frac{\tau}{h} = 0.005$ для явных схем и $\frac{\tau}{h} = 0.5$ для неявных.

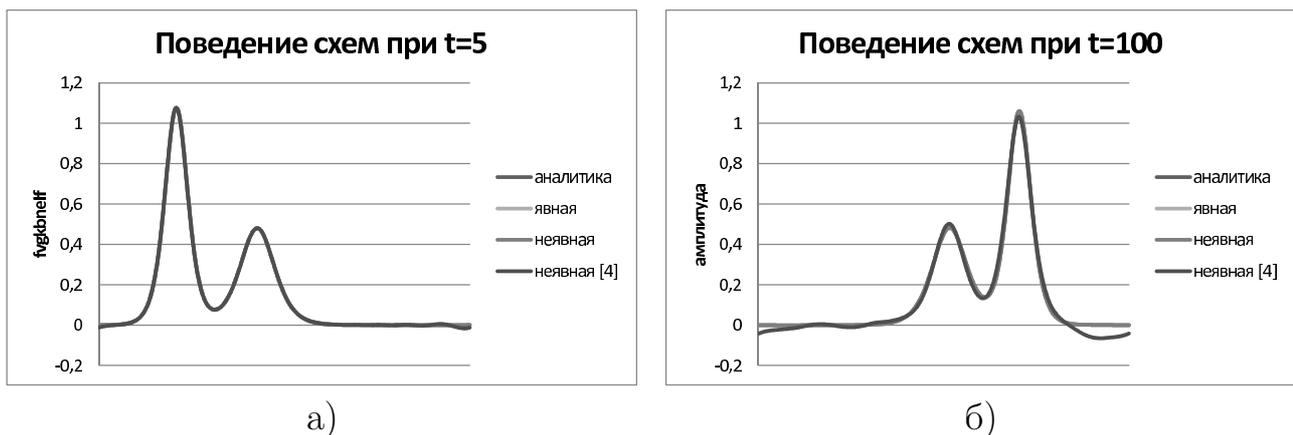


Рис. 1. Результаты решения модельной двухсолитонной задачи

На рис. 1 а,б приведены результаты расчета модельной задачи для уравнения с $\gamma = \beta = 1$ для моментов времени $t=5$ и $t=100$ соответственно. На каждом из рисунков приведены точные решения, а также численные решения по явной (3) и неявной мультисимплектичным схемам (5), а также по неявной схеме (4). Как наглядно видно мультисимплектичные схемы дают хорошую точность, в то время как неявная схема (4) имеет небольшую погрешность

на концах отрезка при $t=5$, которая существенно увеличивается при $t=100$. Экспериментальные данные с различными сеточными шагами подтверждают второй порядок сходимости и действительно высокую устойчивость.

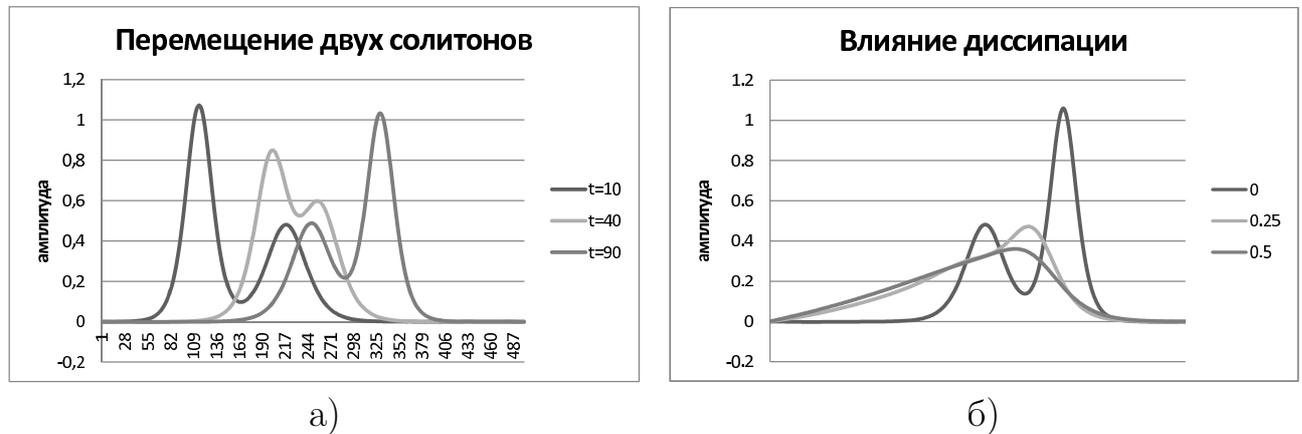


Рис. 2. Динамика взаимодействия двух солитонов: а) в разные моменты времени без диссипации; б) влияние диссипации при $t=100$

На рис. 2 приведено поведение двух солитонов в разные моменты времени и влияние диссипации на поведение солитонов. На рис. 2а приведены результаты расчетов взаимодействия двух солитонов без диссипации для этого же тестового примера. По конфигурации решений видно как солитон с большей амплитудой обгоняет солитон с низкой амплитудой. На рис. 2б показаны решения при $t=100$ для разных значений диссипативного коэффициента $\sigma = 0, 0.25, 0.5$ демонстрирующие естественный эффект расширения солитонов описываемых уравнением КдВБ с ростом диссипации.

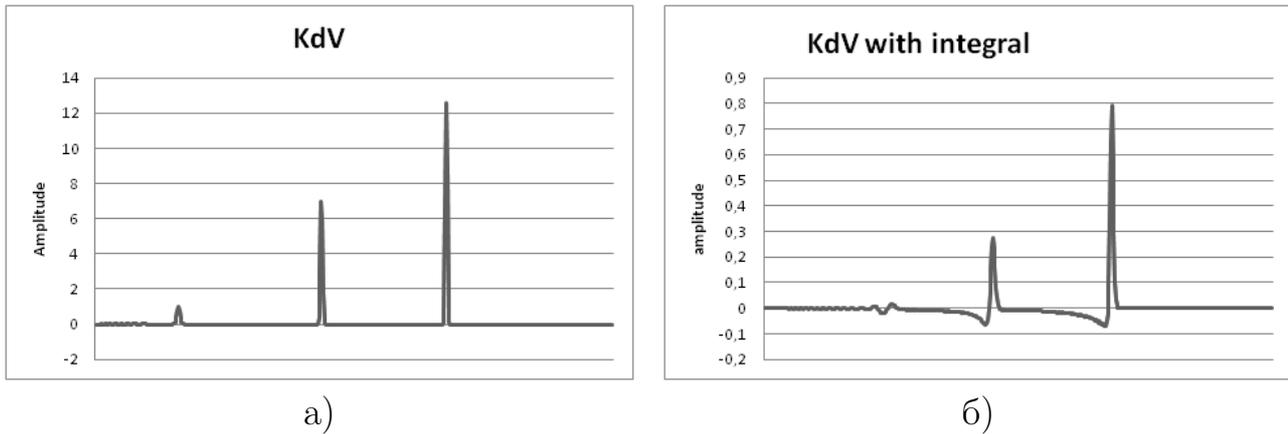
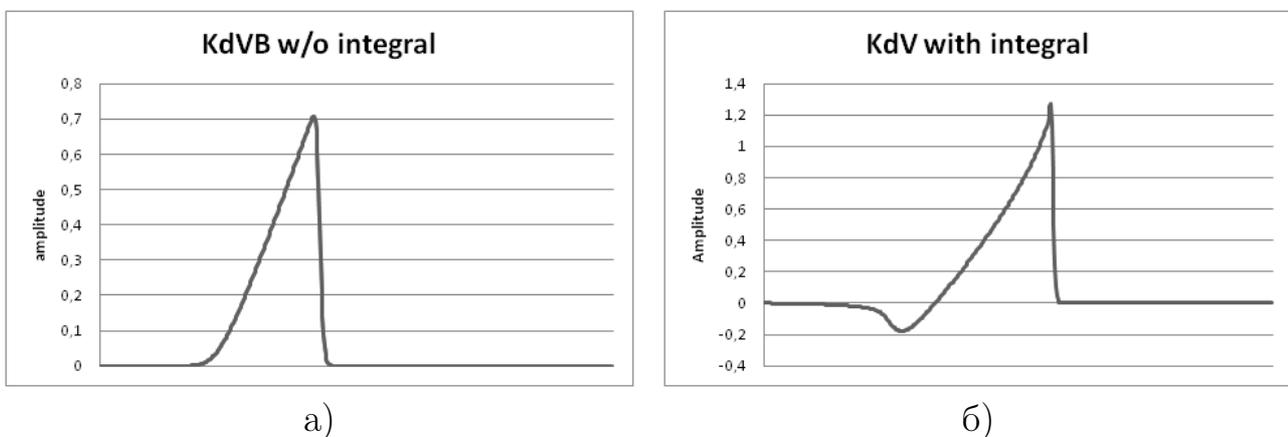
Второй цикл экспериментов был выполнен для уравнения (1) с нулевыми начальными данными для того чтобы продемонстрировать влияние интегрального члена и вязкости. На левой границе ставилось условие Дирихле вида

$$p(t, 0) = \begin{cases} p_0 \frac{t}{t_0}, & 0 < t < t_1 \\ p_0 \frac{1-(t-t_1)}{t_2}, & t_1 < t < t_2 \\ 0, & t > t_2 \end{cases}$$

Все вычисления были проведены при следующих данных:

$$\begin{aligned} x \in [0, 44], \tau = 0.0002, h = 0.008, W = 0.25, \gamma = 1, \\ \beta = 10^{-6}, \nu = 10^{-2}, p_0 = 10, t_1 = 0.01, t_2 = 0.025, \\ T = 10. \end{aligned}$$

На Рис.3-Рис.4 показаны следующие численные результаты: KdV уравнение ($\sigma = W = 0$), KdV уравнение с интегральным членом ($\sigma = 0, W = 0.25$), KdVB уравнение с вязкостью и интегральным членом ($\sigma = 10^{-2}, W = 0.25$),

Рис. 3. Численное решение при $t=10$, $\sigma = 0$ а) $w = 0$, б) $w = 0.25$ Рис. 4. Численное решение при $t=10$, $\sigma = 0.01$ а) $w = 0$, б) $w = 0.25$

KdVB уравнение без интегрального члена ($\sigma = 10^{-2}$, $W = 0$). Можно видеть, что рассмотренные задачи имеют различное волновое поведение.

Накоряков В.Е., Покусаев Б.Г., Шрейбер И.Р. Волновая динамика газо- и парожидкостных сред. М.: Энергоатомиздат, 1990.

Bridges T., Reich S., Numerical methods for Hamiltonian PDEs, J. Phys. A. : Math. Gen., 39 (2006) 5287-5320.

Zabusky N.J., Kruskal M.D. Interaction of 'soliton' in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. Phys. Rev. 15, 1965, 240-243.

Wang Y.S., Wang B., Chen X. An explicit scheme for the KdV equation. Chinese Phys., Lett., 25, 2008, 2335.

Zhao P.F., Qin M.Z. Multisymplectic geometry and multisymplectic Preissmann scheme for the KdV equation. J. Phys. A, 33(18), 2000, 3613-3626.

Литература

1. Накоряков В.Е., Покусаев Б.Г., Шрейбер И.Р. Волновая динамика газо- и парожидкостных сред. М.: Энергоатомиздат, 1990.

2. *Bridges T., Reich S.* Numerical methods for Hamiltonian PDEs, J. Phys. A. : Math. Gen., 39 (2006) 5287-5320.
3. *Zabusky N.J., Kruskal M.D.* Interaction of 'soliton' in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. Phys. Rev. 15, 1965, 240-243.
4. *Wang Y.S., Wang B., Chen X.* An explicit scheme for the KdV equation. Chinese Phys., Lett., 25, 2008, 2335.
5. *Zhao P.F., Qin M.Z.* Multisymplectic geometry and multisymplectic Preissmann scheme for the KdV equation. J. Phys. A, 33(18), 2000, 3613-3626.

КОМПАКТНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ДИФФУЗИИ И ШРЁДИНГЕРА¹

Гордин В.А., Цымбалов Е.А.

Национальный исследовательский университет "Высшая Школа Экономики", Гидрометцентр России, Москва

Сравниваются свойства (устойчивость, порядок сходимости, эффективность, монотонность, сохранение первого интеграла) классических и компактных схем для решения линейных уравнений диффузии и Шрёдингера. Излагается общий подход к построению различных компактных схем. Этот подход может быть применен для компактной аппроксимации различных задач математической физики.

Введение

Рассматриваются компактные разностные схемы для решения задачи Коши на окружности

- для уравнения диффузии:

$$\partial_t u = D \partial_x^2 u + f, \quad (1)$$

где $u = u(t, x)$ – концентрация, $f = f(t, x)$ – источник, $D > 0$ – коэффициент диффузии,

- для уравнения Шрёдингера:

$$\partial_t u = iD \partial_x^2 u + f, \quad (2)$$

где $D = \hbar/2m > 0$, \hbar – постоянная Планка, m – масса.

Все приведенные компактные схемы имеют при фиксированном параметре Куранта $\nu = D\tau h^{-2}$, где τ – шаг разностной схемы по времени, h – ее шаг по пространству, четвертый порядок аппроксимации по h .

Компактные разностные схемы

Аналитические и численные оценки получены для перечисленных ниже разностных (не только компактных) схем при периодических граничных условиях. Компактная разностная схема на заданном шаблоне должна быть точна на парах функций (u_{km}, f_{km}) , где $u_{km} = t^k x^{2m}$, $f_{km} = (\partial_t - A) u_{km}$, множество $\langle k, m \rangle$ задается диаграммой

¹Работа была выполнена при поддержке исследовательского гранта Научно-исследовательского университета – Высшая школа экономики № 13-09-0124 и гранта РФФИ № 13-01-00703

Ньютона. Здесь A – пространственный линейный дифференциальный оператор в абстрактном дифференциальном уравнении $\frac{du}{dt} = Au + f$. При сравнении рассматривались следующие схемы, аппроксимирующие уравнения (1) и (2).

- **Е3:** Явная трехточечная схема Эйлера для уравнения теплопроводности (2-й порядок аппроксимации по h при постоянном параметре Куранта ν ; устойчива при $\nu \leq 1/2$):

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = h^{-2}[u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n] + f_j^n.$$

- **Е5:** Явная пятиточечная схема Эйлера для уравнения теплопроводности (2-й порядок аппроксимации по h при $\nu = const$; устойчива при $\nu \leq 3/8$):

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = h^{-2} \left[\frac{-1}{12}u_{j-2}^n + \frac{4}{3}u_{j-1}^n - \frac{5}{2}u_j^n + \frac{4}{3}u_{j+1}^n - \frac{1}{12}u_{j+2}^n \right] + f_j^n.$$

- **СЕ5.** Компактная разностная схема

$$\begin{aligned} a_0(u_{-2h,0} + u_{2h,0}) + b_0(u_{-h,0} + u_{h,0}) + c_0u_{0,0} + u_{0,\tau} = \\ = p_0(f_{-2h,0} + f_{2h,0}) + q_0(f_{-h,0} + f_{h,0}) + r_0f_{0,0} + \\ + p_1(f_{-2h,\tau} + f_{2h,\tau}) + q_1(f_{-h,\tau} + f_{h,\tau}) + r_1f_{0,\tau} \end{aligned} \quad (3)$$

явная и однослойная (точки шаблона отвечают двум соседним моментам времени).

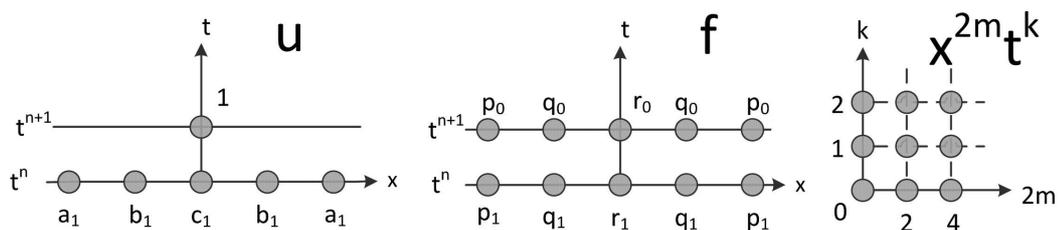


Рис. 1. Компактная схема **С5Е**; шаблоны для функций u и f и диаграмма Ньютона мономов $u_{km} = t^k x^{2m}$

Используются шаблоны и диаграмма Ньютона, показанные на Рис.1. Из условия точности на указанных на Рис.1 парах функций, получаем систему из 9 линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов схемы, решая которую получаем следующее решение:

$$\begin{aligned} a_1 = \frac{\nu(6\nu-1)}{12}; b_1 = -\frac{2\nu(3\nu-2)}{3}; c_0 = 3\nu^2 - 5\nu/2 + 1; p_0 = p_1 = \frac{\tau\nu(6\nu-1)}{48}, \\ q_0 = q_1 = -\frac{\tau\nu(3\nu-2)}{6}; r_0 = r_1 = \frac{\tau}{2} + \frac{3\tau\nu^2}{4} - \frac{5\tau\nu}{8}. \end{aligned}$$

Нетрудно убедиться, что схема (3) имеет 4-й порядок аппроксимации по h при $\nu = const$, устойчива для уравнения (1) при $\nu \leq 2/3$ и абсолютно неустойчива для уравнения (2).

- **C5x2E**: пятипараметрическое семейство явных двухслойных пятиточечных компактных схем (шаблоны и диаграмма Ньютона см. Рис.2)

$$\begin{aligned}
 & a_2(u_{-2h,0} + u_{2h,0}) + b_2(u_{-h,0} + u_{h,0}) + c_2u_{0,0} + \\
 & + a_1(u_{-2h,\tau} + u_{2h,\tau}) + b_1(u_{-h,\tau} + u_{h,\tau}) + c_1u_{0,\tau} + u_{0,2\tau} = \\
 & = p_2(f_{-2h,0} + f_{2h,0}) + q_2(f_{-h,0} + f_{h,0}) + r_2f_{0,0} + \\
 & + p_1(f_{-2h,\tau} + f_{2h,\tau}) + q_1(f_{-h,\tau} + f_{h,\tau}) + r_1f_{0,\tau} + \\
 & + p_0(f_{-2h,2\tau} + f_{2h,2\tau}) + q_0(f_{-h,2\tau} + f_{h,2\tau}) + r_0f_{0,2\tau},
 \end{aligned} \tag{4}$$

где можно выбрать q_1, q_2, r_0, r_1, r_2 в качестве свободных параметров, через которые линейно выражаются остальные коэффициенты схемы (4). Область устойчивости зависит от выбора этих параметров.

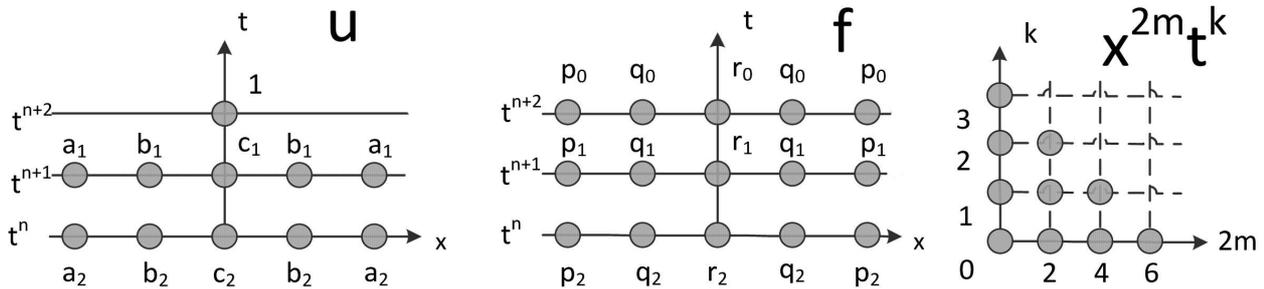


Рис. 2. Компактная схема **C5x2E**; шаблоны для функций u и f и диаграмма Ньютона мономов $u_{km} = t^k x^{2m}$

В численных экспериментах по свободным параметрам схемы была произведена минимизация погрешности решения в евклидовой норме.

- **CN**: классическая неявная однослойная схема Кранка-Николсон:

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\tau} = [A_h (u^{n+1} + u^n) + f^{n+1} + f^n] / 2, \quad (A_h u)_j = h^{-2} [u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}]$$

имеет 2-й порядок аппроксимации при $\nu = const$; она абсолютно устойчива для (1) и (2).

- **C3I**: неявная трехточечная однослойная компактная схема (см. Рис.3).

При решении соответствующей СЛАУ 8-го порядка получаем коэффициенты:

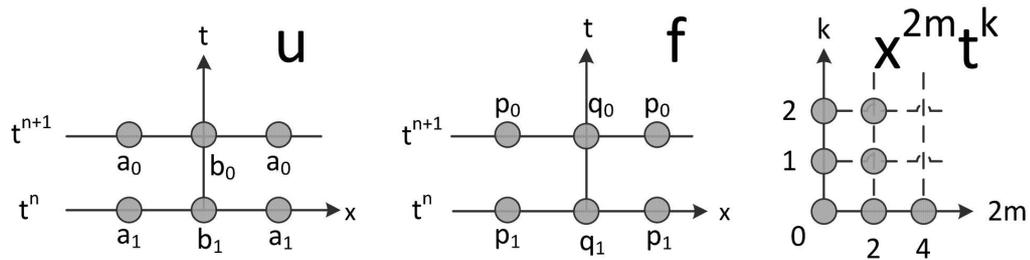


Рис. 3. Компактная схема **C3I**; шаблоны для функций u и f и диаграмма Ньютона мономов $u_{km} = t^k x^{2m}$

$$a_0 = 2(6\nu - 1); a_1 = 2(6\nu + 1); b_0 = -4(6\nu + 5); b_1 = -4(6\nu - 5);$$

$$p_0 = p_1 = -\tau; q_0 = q_1 = -10\tau.$$

Можно доказать, что схема **C3I** абсолютно устойчива для уравнений (1) и (2).

- **C3x3I**: двухпараметрическое семейство неявных трехточечных двухслойных (т. е. участвуют значения неизвестной функции u в 3 момента времени) компактных схем (см. Рис.4).

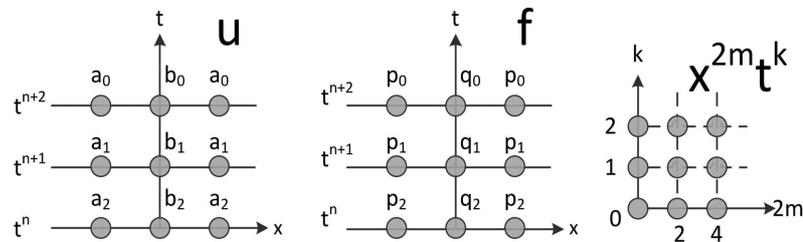


Рис. 4. Компактная схема **C3x3I**; шаблоны для функций u и f и диаграмма Ньютона мономов $u_{km} = t^k x^{2m}$

Для **C3x3I**, аппроксимирующей для уравнения (1) и (2), найдены значения свободных параметров, при которых эта схема абсолютно устойчива.

- **C5I**: неявная пятиточечная однослойная компактная схема (см. Рис.5) Схема абсолютно устойчива для уравнений (1) и (2).

Для компактных схем **C5x2E**, **C3x3I**, **C5I** коэффициенты получены, но формулы здесь не приводятся ввиду громоздкости.

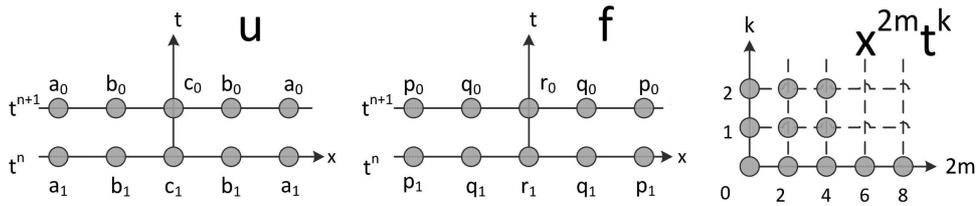


Рис. 5. Компактная схема **C5I**; шаблоны для функций u и f и диаграмма Ньютона мономов $u_{km} = t^k x^{2m}$

Порядок эффективности

Традиционно сравнение разностных схем происходит по порядку сходимости при $\nu = \text{const}$. Наши эксперименты подтвердили 4-й порядок приведенных компактных схем.

На практике необходимо найти (а это требует численных экспериментов) оптимальное значение ν для каждой разностной схемы. Поэтому в нашей работе используется также иной критерий для сравнения эффективности схем. Зафиксируем Q – количество арифметических операций (умножений и делений) и произведем минимизацию нормы погрешности по количеству шагов пространственно-временной сетки (где N – количество узлов по пространственной переменной, M – по времени). Необходимо учесть, что разные схемы используют разное количество Q_* арифметических операций на узел сетки. Тогда выполняется следующее соотношение:

$$Q = MNQ_* \tag{5}$$

Таблица 1. Количество арифметических операций Q_* , приходящихся на вычисление одного узла пространственно-временной сетки для различных разностных схем.

Схема	E3	E5	C5E	C5x2E	C3I	C5I	CN	C3x3I
Однородное уравнение	3	5	5	10	6	15	6	12
Неоднородное уравнение	4	6	15	25	12	21	6	18

Рассмотрим разностную схему для уравнения (1). Пусть $\tilde{u}(t)$ – численное решение задачи Коши для некоторых начального условия и правой части уравнения. Пусть $E(t) = \|u(t) - \tilde{u}(t)\|$ – норма погрешности. Число d назовем порядком эффективности разностной схемы, если выполняется следующее условие: $E(T) = O(Q^{-d})$ при $Q \rightarrow \infty$. Порядок эффективности зависит от выбора нормы, от свойств аналитического решения $u(t)$ и от времени интегрирования T . Порядок эффективности является, возможно, более адекватной численной характеристикой разностной схемы, чем порядок аппроксимации и порядок погрешности, потому что (как показывают численные эксперименты) оптимальный по эффективности параметр Куранта для

разностной схемы не постоянен, а зависит от Q .

В численных экспериментах были использованы следующие тестовые решения на отрезке $x \in [0, 2\pi]$ для однородного и неоднородного уравнения, соответственно:

- i) $\tilde{u}_k(0, x) = \sin^k(x) \exp(x)$, $\tilde{f}_k(t, x) \equiv 0$, $k=0, 2$ для уравнения (1) и $k=2, 4$ для уравнения (2).
- ii) $u_k^*(t, x) = \sin(t) \sin^k(x) \exp(x)$, $f_k^*(t, x) = [\partial_t - D\partial_x^2] u_k^*(t, x)$, $k = 2, 4$ для уравнения (1) и $f_k^*(t, x) = [\partial_t - iD\partial_x^2] u_k^*(t, x)$ для уравнения (2).

Таблица 2. Порядок эффективности для различных разностных схем в зависимости от нормы и гладкости тестового решения для неоднородного уравнения (1).

k	2		4	
	С	L^2	С	L^2
E3	0.3426	0.3452	0.6315	0.6767
E5	0.3592	0.3600	0.9311	0.8248
C5E	0.4003	0.4002	1.3613	1.3676
C5x2E	1.7498	0.9703	1.3490	1.3417
C3I	0.6705	0.6749	1.3486	1.3283
C5I	0.6602	0.6717	1.3483	1.3374
C3x3I	0.7538	0.6683	1.3578	1.3985
CN	0.6638	0.6647	1.0057	1.0032

Из Табл.2 следует, что вне зависимости от гладкости решения, компактные схемы имеют больший порядок эффективности, нежели классические явные схемы и схема Кранка-Николсон. Победитель среди негладких решений – схема **C5x2E** – была оптимизирована по свободным параметрам (5 параметров схемы и число N в условии (5)).

Таблица 3. Порядок эффективности для различных разностных схем в зависимости от нормы и гладкости тестового решения для неоднородного уравнения (2).

k	2		4	
	С	L^2	С	L^2
C3I	0.5925	0.6923	1.3185	1.3893
C5I	0.6772	0.6740	1.3520	1.3949
C3x3I	0.6857	0.6465	0.8121	0.8077
CN	0.5728	0.7033	0.9886	0.9836

Из Табл.3 следует, что на гладких решениях уравнения (2) предпочтительны схемы **C3I** и **C5I**, в то время как для негладких решений практически все рассмотренные схемы эффективны одинаково.

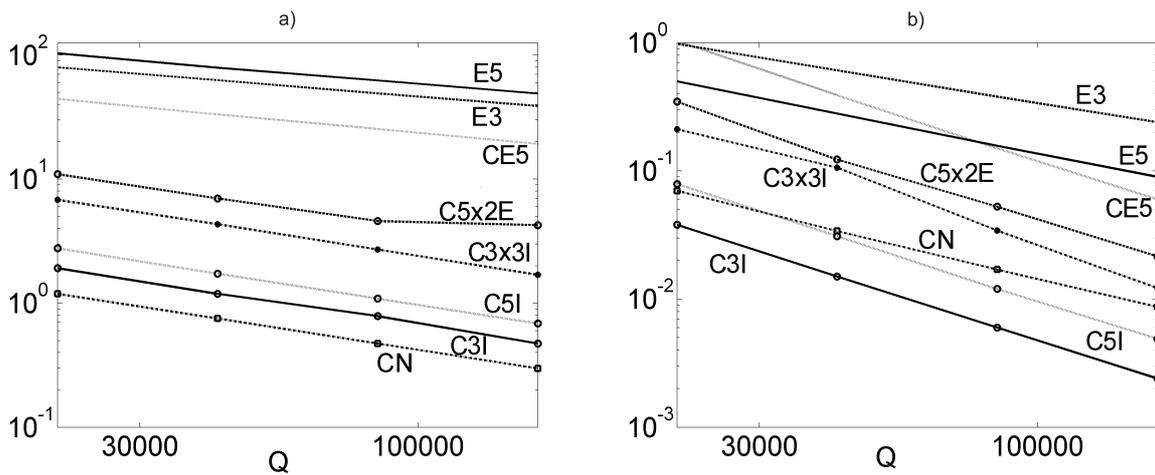


Рис.6. Зависимость евклидовой нормы погрешности решения задачи Коши для неоднородного уравнения (1) от количества арифметических операций Q . Тестовое решение i). а) $k=2$ б) $k=4$. Для каждой схемы в эксперименте использовался свой оптимальный параметр Куранта ν . Билогарифмическая система координат.

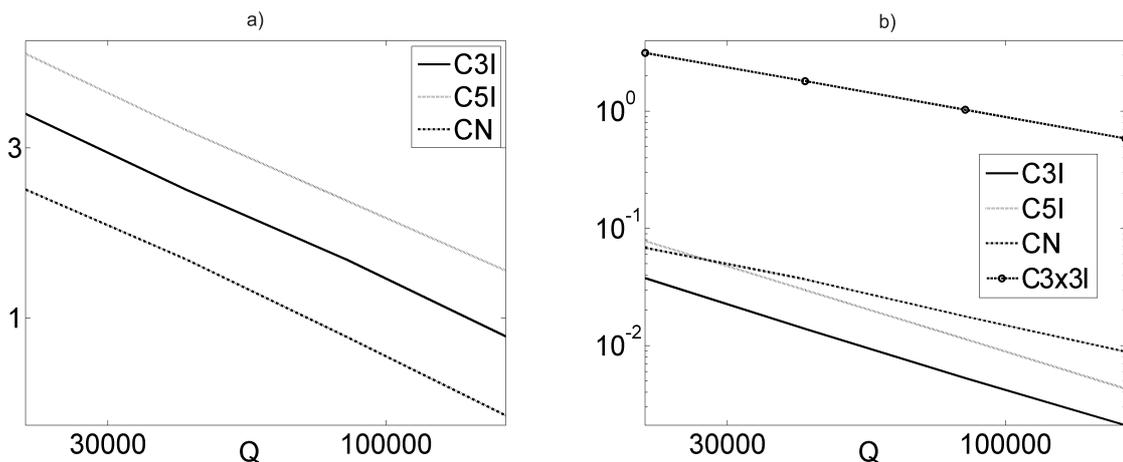


Рис.7. То же для уравнения (2). Тестовое решение i). а) $k=2$ б) $k=4$. Рассмотрены только неявные схемы, так как явные схемы неустойчивы для уравнения (2).

Рис. 6 и 7 показывают превосходство схемы **СЗІ** для гладких решений и схемы **СН** для негладких. Схема Кранка-Николсон, однако, для достижения малых погрешностей использует огромные значения параметра Куранта ν ; поэтому, если существенно свойство монотонности решения (см. следующий пункт), то победителем в таком соревновании снова будет схема **СЗІ**.

Из Рис. 8 и 9 видно, что для однородных уравнений (1) и (2) предпочтительны неявные схемы, все имеющие примерно одинаковый порядок эффективности. Схемы **СН** и **СЗІ** показали наилучшие результаты; однако при небольших параметрах Куранта ν среди этих двух схем предпочтительнее схема **СЗІ**.

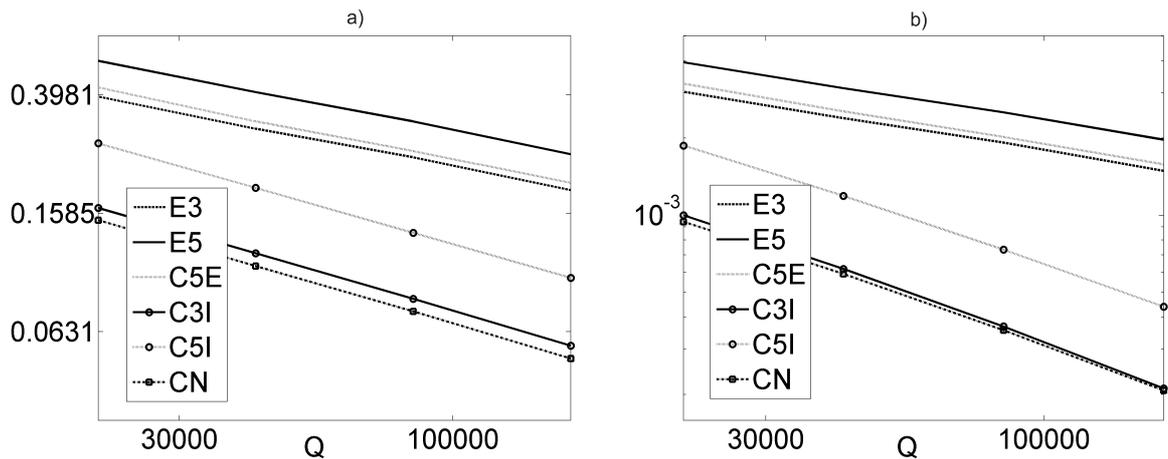


Рис.8. Зависимость евклидовой нормы погрешности решения задачи Коши для однородного уравнения (1) от количества арифметических операций. Тестовое решение ii). а) $k=0$ б) $k=2$. Для каждой схемы в эксперименте использовался оптимальный параметр Куранта ν . Билогарифмическая система координат.

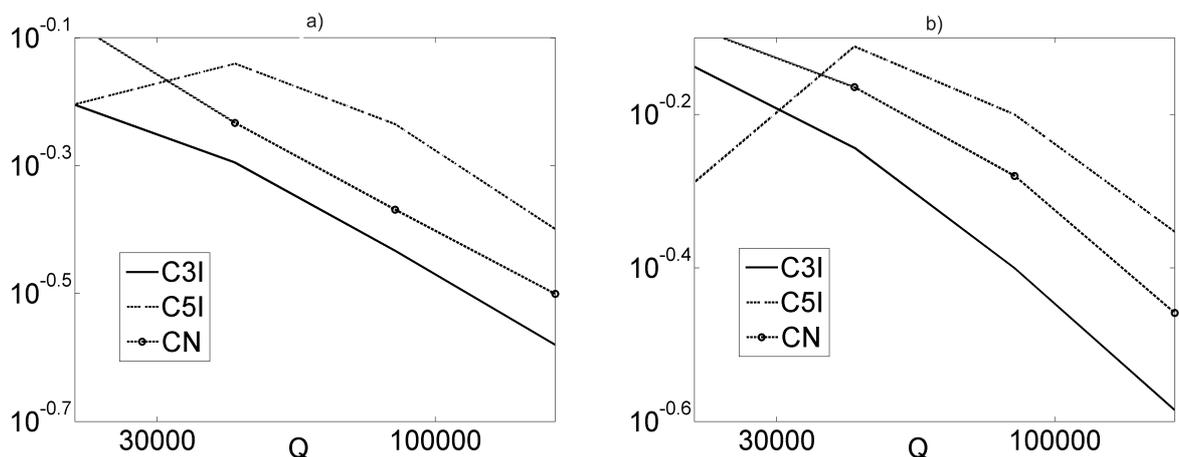


Рис.9. То же для уравнения (2). Тестовое решение ii). а) $k=2$ б) $k=4$. Рассмотрены только неявные схемы, так как явные схемы для уравнения (2) неустойчивы.

Монотонность и сохранение первого интеграла

Решение задачи Коши для уравнения диффузии (1) на прямой при $t > 0$ принимает лишь значения на отрезке $\left[\min_x u_0(x), \max_x u_0(x) \right]$. В частности, при неотрицательной начальной функции решение также неотрицательно. Схему, аппроксимирующую уравнение (1) назовем монотонной, если она обладает этим свойством.

Функция Грина этой задачи (обобщенное решение задачи Коши с δ -функцией в качестве начального условия) имеет максимум по x в начале координат при всех $t > 0$. Будем говорить, что разностная схема физична, если при начальном условии $\delta_{N/2}^j$ ($j = 1, \dots, N$) решение $u(\tau, j) = A_h \delta_{N/2}^j$

обладает этим же свойством (единственный максимум при $j=0$). Здесь δ_k^m – символ Кронекера.

Проведенные расчеты и численные эксперименты дали следующие результаты.

На интервале $\nu < \nu_1$ некоторые разностные схемы оказываются слабо немонотонны, что выражается в колебании знака функции $u(\tau, j)$ при больших $|j-N/2|$. Этот эффект, однако, практически важен только для негладких решений.

На интервале $\nu > \nu_2$ разностные схемы теряют физичность.

На интервале $\nu > \nu_3$ разностные схемы теряют монотонность, т. е. решение $u(\tau, j)$ принимает отрицательные значения.

Таблица 4. Границы различных типов монотонности.

	ЕЗ	СЕ5	СЗІ	С5І	СN
ν_1	0	1/6	1/6	0.69	0
ν_2	1/3	17/30	0.53	0.47	0.71
ν_3	1/2	2/3	1.21	1.13	1.49

Для разностных схем, аппроксимирующих уравнение Шрёдингера (2), существенно сохранение со временем полной вероятности:

$$\forall t \int_0^{2\pi} |u(t, x)|^2 dx = 1$$

Для всех представленных неявных схем: **СN**, **СЗІ**, **С5І** и **СN** дискретный аналог первого интеграла $\sum_{j=1}^N |u(t, x_j)|^2$ с машинной точностью совпадает с теоретическим значением. Явные схемы для (2) неустойчивы.

Заключение

Рассмотрены различные типы компактных схем для эволюционных уравнений в частных производных; приведен алгоритм построения схем.

Классический подход к построению разностной схемы: два отдельных алгоритма для аппроксимации по пространству и по времени. Компактный: аппроксимация происходит одновременно, с учетом конкретного дифференциального уравнения. Порядок аппроксимации обычно выше у компактных схем. Подход может быть обобщен на случай переменных коэффициентов, многих пространственных переменных, уравнений и систем более высокого порядка. Эффективность разностных схем может зависеть от гладкости точных решений, на которых схемы сравниваются.

Для разных шаблонов и наборов пар функций, на которых компактная схема точна, найдены коэффициенты компактных схем; проведено сравнение их между собой и с известными классическими схемами. Пользователь может выбрать из перечня наиболее подходящую схему для конкретной краевой задачи. Как правило, компактные схемы имеют значительное преимущество.

Существует несколько видов ограничений из-за монотонности для параметров разностных схем, аппроксимирующих однородное уравнение диффузии. Компактные схемы, однако, предпочтительны и при таких ограничениях.

Неявные компактные схемы сохраняют значение дискретного аналога первого интеграла для однородного уравнения Шрёдингера $\int_0^{2\pi} |u(t, x)|^2 dx$ с машинной точностью.

Таким образом, компактные схемы предпочтительны для широкого класса прикладных вычислительных задач. Наиболее универсальной схемой, по мнению авторов, является **СЗІ**.

Выражаем нашу признательность Ф.Л.Быкову за полезные обсуждения.

Литература

1. *В.А.Гордин*. Математические задачи гидродинамического прогноза погоды. Вычислительные аспекты. Л., Гидрометеоиздат, 1987.
2. *V.A.Gordin*. Mathematical Problems and Methods in Hydrodynamical Weather Forecasting, Gordon & Breach Publ. House, Amsterdam et al., 2000.
3. *В.А.Гордин*. Математика, компьютер, прогноз погоды и другие сценарии математической физики. М., Физматлит, 2010, 2012.
4. *B.Gustafson, H.Kreiss, and J.Oliger*. Time Dependent Problems and Difference Methods, John Wiley & Sons, New York, 1995.
5. *W. F. Spatz*. High-Order Compact Finite Difference Schemes for Computational Mechanics. PhD thesis, University of Texas at Austin, Austin, TX, 1995.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНОЙ СРЕДЫ В ОДНОСКОРОСТНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ПОСРЕДСТВОМ СХЕМЫ КАБАРЕ

Данилин А.В. *, Головизнин В.М. **

*Институт проблем Безопасного Развития Атомной
Энергетики РАН, Москва*

Введение

В данной работе предложена модель двухфазной среды, представляющей собой смесь идеального газа и несжимаемой жидкости. Рассмотрены уравнения движения указанной среды. На основе схемы КАБАРЕ построен алгоритм для численного решения уравнений движения. При помощи полученного алгоритма проведен ряд тестовых расчетов на разрывных начальных данных.

I Уравнения движения

В общем виде одномерное движение двухфазной газожидкостной смеси описывается, как показано в работе [1], системой из семи уравнений, приведение которых выходит за рамки данных тезисов. Вводя предположения о несжимаемости одной из сред, об однотемпературности компонентов смеси и об отсутствии проскальзывания между фазами, можно сократить количество уравнений движения до четырех. Совместное движение отдельных фаз при этом можно рассматривать как движение среды с некоторыми усредненными параметрами. При этом данная среда требует отдельного определения её уравнения состояния, энтропии, скорости звука и некоторых других термодинамических параметров. Модель двухкомпонентной среды в обозначенных выше предположениях названа "односкоростным приближением". Приведем уравнения движения модельной среды в одномерном случае:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + v \frac{\partial \alpha}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v^2 + P)}{\partial x} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial v(\rho E + P)}{\partial x} = 0 \quad (4)$$

где α – объемное содержание жидкости, $\rho = \alpha\rho_l + (1 - \alpha)\rho_g$ – средняя плотность среды (ρ_l – плотность жидкости, ρ_g – плотность газа), v – скорость, P – давление, $E = e + \frac{v^2}{2}$ – полная энергия единицы массы.

Система (1-4) должна быть дополнена уравнением состояния среды:

$$e = \frac{P}{\rho - \alpha\rho_l} \left(\beta + \frac{\alpha\delta}{\rho} \right) \quad (5)$$

где $\beta = \beta_0(1 - \alpha)$, $\beta_0 = \frac{1}{\gamma-1}$, γ – показатель адиабаты газа, $\delta = \delta_0(1 - \alpha)$, $\delta_0 = \frac{(C_l - C_g)\mu_0\rho_l}{R}$, C_l – удельная теплоемкость жидкости, C_g – удельная теплоемкость газа, μ_0 – молярная масса газа, R – универсальная газовая постоянная.

II Характеристическая форма уравнений движения

Система уравнений (1-4) приводится к следующему характеристическому виду:

$$\frac{\partial R}{\partial t} + (v + c)\frac{\partial R}{\partial x} = f_1 \quad (6)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + (v - c)\frac{\partial Q}{\partial x} = f_2 \quad (7)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + v\frac{\partial S}{\partial x} = f_3 \quad (8)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + v\frac{\partial \alpha}{\partial x} = f_4 \quad (9)$$

где R, Q – инварианты Римана, S – энтропия, α – объемная концентрация жидкости, u – скорость, c – локальная скорость звука, $f_{1,2,3,4}$ – правые части.

Условие гиперболичности системы (5-8) (легко проверить выполнение данного условия):

$$\frac{\partial P}{\partial e} \frac{P}{\rho} + \frac{\partial P}{\partial \rho_g} \frac{\rho}{1 - \alpha} > 0 \quad (10)$$

Инварианты Римана:

$$R = v + \int \frac{dP}{c\rho} \quad (11)$$

$$Q = v - \int \frac{dP}{c\rho} \quad (12)$$

Энтропия:

$$S = P \left(\rho + \frac{\delta\alpha}{\beta} \right)^{-\frac{1}{\delta} + \frac{\beta-1}{\beta}} \rho^{-1+\frac{1}{\delta}} (\rho - \alpha\rho_l)^{-1} \quad (13)$$

Скорость звука:

$$c = \frac{P}{\rho} \left(1 + \frac{\rho}{\rho - \alpha\rho_l} + \frac{\rho(1 - \beta) - \alpha\rho_l}{\beta\rho + \delta\alpha} \right) \quad (14)$$

III Численный алгоритм

Численный алгоритм для решение системы уравнений (1-4) построен на основе схемы КАБАРЕ, современная форма которого представлена в работе [2]. Схема оперирует двумя типами переменных: консервативными и потоковыми. Консервативные переменные относятся к центрам расчетных ячеек и имеют смысл средних значений величин по ячейкам. Поточковые переменные соответствуют узлам ячеек и отвечают за обмен величин между ячейками. Схема является двухслойной по времени с введением вспомогательного "полуцелого" временного слоя. Дополнительно в схеме применяется монотонизация в соответствии с принципом максимума, описанная в работе [3]. К основным свойствам данной схемы можно отнести второй порядок аппроксимации по времени и пространству, устойчивость счета, монотонность получаемых решений. В данной работе используется пространственная сетка с постоянным шагом. Длина расчетной области $L = 100$. Количество расчетных ячеек $N = 100$. В качестве граничных условий выбраны условия свободного выхода. Шаг по времени определяется условием Куранта-Фридрихса-Леви с числом Куранта $CFL = 0.3$.

IV Результаты расчетов

В ходе испытания численного алгоритма было проведено две серии расчетов. Первая серия – калибровочная – проводилась на задаче о распаде произвольного разрыва с смеси с постоянной концентрацией жидкости во всей расчетной области (для этого случая существует аналитическое решение). При этом проводилось сравнение результатов численных экспериментов с аналитическим решением. Эксперименты проводились для значения объемного содержания жидкости в $\alpha = 0, 0.001, 0.1$. Результат одного из экспериментов данной серии приведен на рис. 1. Нужно отметить, что при нулевой концентрации жидкости алгоритм полностью переходит в схему КАБАРЕ для решения системы одномерных уравнений газовой динамики. При этом в точности воспроизводятся свойства оригинального алгоритма: монотонность, разрешение ударной волны двумя расчетными ячейками. Вторая

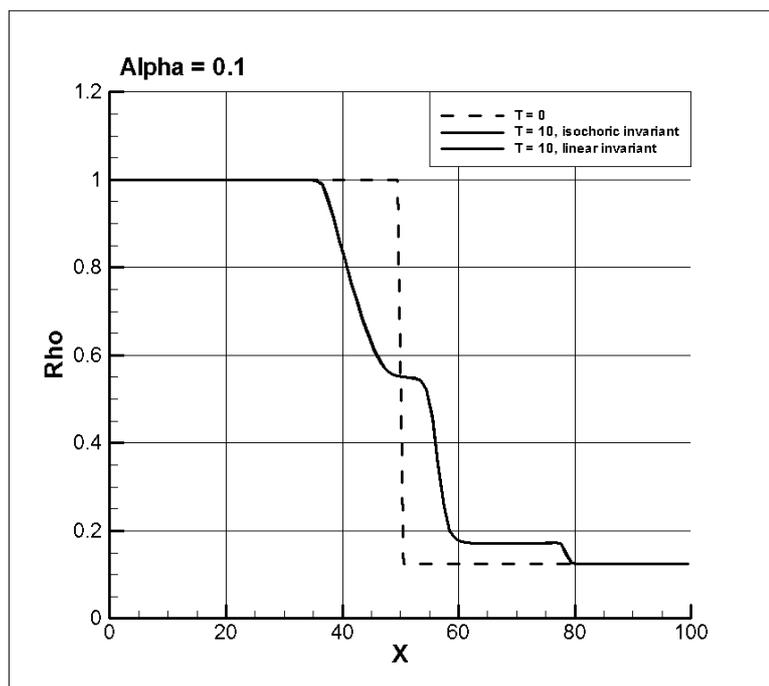


Рис. 1. Тестирование численного алгоритма на задаче о распаде произвольного разрыва с постоянным объемным содержанием жидкости. $N = 100$, $CFL = 0.3$, $\alpha = 0.1$

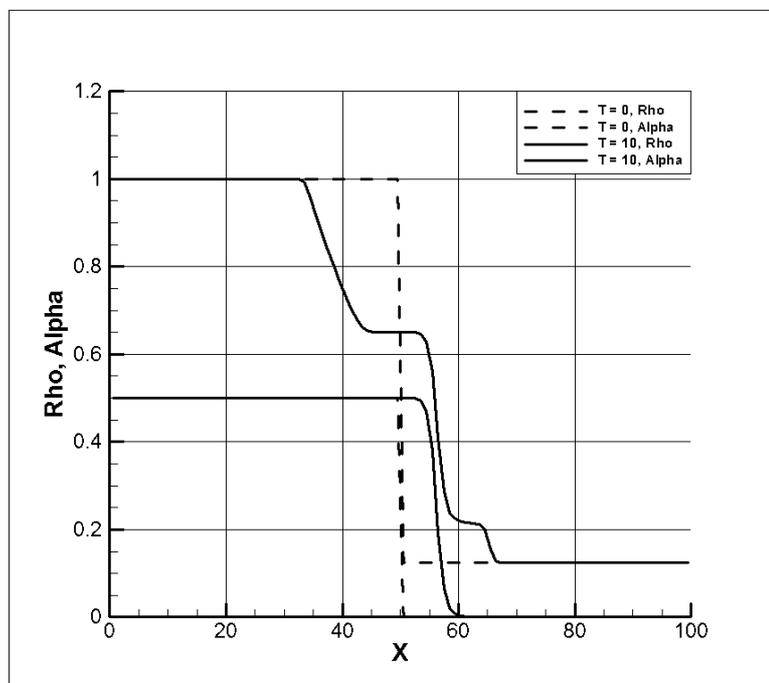


Рис. 2. Тестирование численного алгоритма на задаче о распаде произвольного разрыва с разрывом объемного содержания жидкости. Верхняя кривая соответствует общей плотности среды, нижняя кривая соответствует доле плотности, вносимой жидкостным компонентом. $N = 100$, $CFL = 0.3$

серия численных экспериментов проводилась на задаче о распаде произвольного разрыва с разрывом объемного содержания жидкости. Проведение данной серии обусловлено необходимостью проверить возможности предложенного алгоритма на произвольных начальных данных. Результат одного из экспериментов данной серии приведен на рис. 2.

Заключение

В данной работе представлена односкоростная модель двухфазной среды "идеальный газ - несжимаемая жидкость". Рассмотрены уравнения движения данной среды в одномерном случае. Представлено условие гиперболичности данной системы уравнений. Данные уравнения приведены к характеристическому виду. Для численного решения системы уравнений (1-4) на основе схемы КАБАРЕ [2] был построен и протестирован надежный вычислительный алгоритм, показавший устойчивый счет и высокое качество получаемых решений даже при сильных разрывах в начальных данных.

Литература

1. *Richard Sourel, Remi Abgral / A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows. // Jour. of Comp. Phys. 150, 425-467 (1999).*
2. *Головизнин В.М., Карабасов С.А., Кобринский И.М. Балансно-характеристические схемы с разделенными консервативными и потоковыми переменными. // Математическое моделирование, 2003, т.15, № 9, с. 29-48.*
3. *Головизнин В.М., Карабасов С.А. Нелинейная коррекция схемы Кабаре // Математическое моделирование, 1998, т.10, №12, с. 107-123.*

ЛОКАЛЬНЫЕ НЕОТРАЖАЮЩИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ В ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ И РАЗНОСТНЫХ ЗАДАЧАХ¹

Дородницын Л.В.

Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова, Москва

Обсуждается проблематика искусственных граничных условий при численном моделировании различных задач. Изложение иллюстрируется примерами из газовой динамики.

Около половины прикладных задач математической физики ставятся в неограниченных областях. Типичный пример — задача аэродинамического обтекания. В целях компьютерного моделирования требуется, как правило, использовать область конечного размера, а затем построить дискретную аппроксимацию задачи. Тем самым математическое моделирование проходит три этапа.

- Основные уравнения и начальные условия при $\mathbf{x} \in \Omega$, граничные условия при $\mathbf{x} \in \Gamma$: **исходная задача**.
- Ограниченная подобласть $\Omega' \subset \Omega$. Те же уравнения при $\mathbf{x} \in \Omega'$ и граничные условия при $\mathbf{x} \in \Gamma$; искусственные граничные условия при $\mathbf{x} \in \Gamma'$: **редуцированная задача**.
- Сетка $\Omega'_h \subset \Omega'$. Дискретные аналоги уравнений при $\mathbf{x} \in \Omega'_h$ и граничных условий на Γ_h и Γ'_h : **разностная задача**.

Наличие искусственных границ приводит к отражению волн внутрь области. Различные исследователи более полувека занимались проблемой задания искусственных граничных условий, и более 30 лет существует понятие неотражающих граничных условий. В.С. Рябенький сформулировал в [1] концепцию точного переноса граничных условий с бесконечности на искусственную границу. В наших терминах можно сказать, что у редуцированной задачи должно существовать единственное решение, совпадающее с решением исходной задачи при $\mathbf{x} \in \Omega'$.

Вместе с тем, конечная цель моделирования состоит в том, чтобы получить решение разностной задачи, близкое к решению исходной задачи. Погрешность возникает неизбежно, ввиду самой дискретизации. Поэтому задачу построения *точного* граничного условия не следует абсолютизировать.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ: Проекты №№ 12-01-00486 и 12-01-00769

I Линейные дифференциальные задачи

Неотражающие граничные условия для линейных задач математической физики представляют собой локальные уравнения (алгебраические или дифференциальные) либо нелокальные (интегральные, псевдодифференциальные).

Рассмотрим простой пример: одномерное волновое уравнение, для которого ставится задача Коши с финитными начальными условиями

$$u_{tt} = c_0^2 u_{xx}, \quad -\infty < x < \infty, \quad t > 0, \quad u|_{t=0} = \varphi(x), \quad u_t|_{t=0} = \psi(x), \\ \text{supp } \varphi \subset (0, X), \quad \text{supp } \psi \subset (0, X).$$

Задача на конечном отрезке $x \in [0, X]$ дополняется краевыми условиями

$$(u_t - c_0 u_x)|_{x=0} = 0, \quad (u_t + c_0 u_x)|_{x=X} = 0, \quad (1)$$

которые описывают простые волны, бегущие влево и проходящие через левую границу и, соответственно, вправо через правую границу.

Двумерное волновое уравнение

$$u_{tt} - c_0^2 (u_{xx} + u_{yy}) = 0, \quad 0 < x < X,$$

не позволяет построить локальное неотражающее условие. Применяем общий математический аппарат — преобразование Фурье, т.е. ищем решения в виде

$$u = \exp\{i\omega t - ikx - i\ell y\}, \quad \omega \geq 0, \quad k \in \mathbb{C}, \quad \ell \in \mathbb{R}.$$

Дифференциальное уравнение переходит в дисперсионное соотношение

$$-\omega^2 + c_0^2 (k^2 + \ell^2) = 0.$$

Чтобы найти волны, взаимодействующие с левой и правой вертикальными границами, разрешим выписанное выражение относительно k :

$$k = k_1(\omega, \ell) \equiv \frac{\omega}{c_0} \sqrt{1-s^2}, \quad k = k_2(\omega, \ell) \equiv -\frac{\omega}{c_0} \sqrt{1-s^2}, \quad \text{где } s = \frac{c_0 \ell}{\omega}.$$

Обратное преобразование Фурье дает псевдодифференциальные уравнения, т.е. *нелокальные* граничные условия.

Чтобы получить локальные граничные условия, необходимо выполнить рациональную аппроксимацию радикала, например,

$$\sqrt{1-s^2} = 1 - s^2/2 + O(s^4).$$

Оставляя один или два члена разложения и подставляя полученные выражения вместо $k = k_1$, приходим, по аналогии с (1), к двум вариантам правого граничного условия:

$$(u_t + c_0 u_x)|_{x=X} = 0; \\ (2u_{tt} + 2c_0 u_{xt} - c_0^2 u_{yy})|_{x=X} = 0.$$

Таким образом, в большинстве задач приходится делать выбор между точными нелокальными и приближенными локальными неотражающими условиями.

Нелокальные граничные усл.

Локальные граничные условия

- | | |
|---|---|
| (+) Точны для линейных многомерных гиперболических систем | (-) Приближенные в многомерном случае (проблема отражения косых волн) |
| (+) Устойчивы в большинстве случаев | (-) Многие варианты приводят к неустойчивости |
| (-) Громоздки и трудны в реализации | (+) Обычно не сложнее основных уравнений |
| (-) Вычислительные затраты — как у основной схемы либо значительно выше | (+) Вычислительные затраты намного меньше, чем у основной схемы |
| (-) Трудны в распараллеливании | (+) Легко распараллеливаются |
| (-) Плохо описывают нелинейные эффекты близ границы | (+) Многие варианты допускают нелинейные обобщения |

Если граничное условие является приближенным, возникает проблема его устойчивости, т.е. корректности постановки начально-краевой редуцированной задачи с данным граничным условием. Пример — многомерное волновое уравнение с «одномерным» неотражающим граничным условием

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c_0^2 \Delta u = 0, \quad t > 0, \quad \mathbf{x} \in G, \quad \frac{\partial u}{\partial t} + c_0 \frac{\partial u}{\partial n} = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial G,$$

для решения которого $u(\mathbf{x}, t)$ выполняется тождество

$$\frac{d}{dt} \int_G \left[(u_t)^2 + c_0^2 (\nabla u)^2 \right] d^n x = -2c_0^3 \int_{\partial G} \left(\frac{\partial u}{\partial n} \right)^2 d\sigma \leq 0.$$

II Разностные задачи

Разностная задача требует специальной постановки граничных условий. Данная проблематика относительно мало освещается в литературе. Две основные трудности заключаются в том, что:

- 1) обычно разностная схема требует большего количества граничных уравнений, чем дифференциальная система уравнений;
- 2) в большинстве разностных схем присутствуют дополнительные («ложные», «паразитные») волны, не имеющие физических аналогов.

Мы рассмотрим простейшее уравнение — линейное одномерное уравнение переноса — и две его аппроксимации: центрально-разностную схему на 3-точечном шаблоне и высокоточную схему на широком шаблоне, которая известна в вычислительной аэроакустике как схема, сохраняющая дисперсионные соотношения, — DRP-схема [2]. Общим дискретным моделям присущи пилообразные осцилляции, которые можно существенно подавить при помощи дискретных краевых условий, разработанных в [3, 4].

III Нелинейные задачи

Нелинейные системы уравнений в редких случаях допускают точные неотражающие условия. Класс точных граничных условий возможно выделить для одномерных уравнений Эйлера и им подобных гиперболических систем [3]. Если граничные условия являются приближенными, то теоретически оценивать их качество весьма затруднительно.

Для нелинейных разностных задач с граничными условиями автором разработан математический инструмент, который заключается в разложении решения на гладкий фон и пилообразное возмущение. Таким способом обнаружен, в частности, эффект «неправильной асимптотики», подтвержденный расчетами, и предложены способы его уменьшения [3].

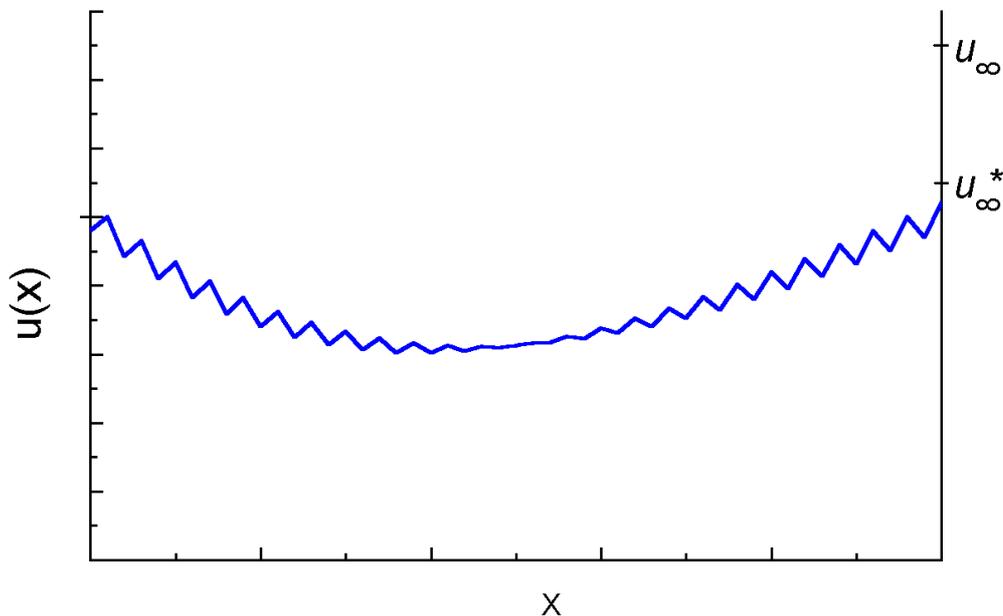


Рис. 1. Иллюстрация эффекта «неправильной асимптотики»

Покажем методику на примере квазилинейного уравнения переноса и центрально-разностной схемы для него:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (u^2) = 0 \mapsto \frac{du_l}{dt} + \frac{u_{l+1}^2 - u_{l-1}^2}{4h} = 0.$$

Пусть задано правое граничное условие — релаксация к u_∞ — и пусть оно аппроксимируется с использованием направленной разности:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \beta (u_\infty - u) \mapsto \frac{u_N - u_{N-1}}{h} = \beta (u_\infty - u_N).$$

По аналогии с известным методом дифференциального приближения, представим решение разностной задачи в виде

$$u = \bar{u}(x_l, t) + (-1)^l a(x_l, t), \quad |a| \ll |\bar{u}|,$$

где $\bar{u}(x, t)$, $a(x, t)$ — гладкие функции непрерывных аргументов. Разложение дает уравнение для фоновой составляющей в виде ее релаксации к измененному значению (см. рис. 1):

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

IV Примеры расчетов

- i) Одномерный перенос прямоугольного импульса, моделируемый с помощью DRP-схемы. В расчете проявляются гладкие и пилообразные волны, причем последние распространяются против потока; разностные неотражающие условия на обоих концах отрезка позволяют тем и другим свободно проходить через границы.
- ii) Гауссовы импульсы (акустический и энтропийный) в двумерных линеаризованных уравнениях Эйлера (рис. 2). Высокоточная DRP-схема и неотражающие граничные условия приводят к тому, что волны не отражаются от искусственных границ и почти не нарушается цилиндрическая симметрия.
- iii) Вихревая дорожка позади квадратного цилиндра в вязком газе при $Re = 150$ (рис. 3). Решение естественным путем выходит на периодический режим, и искажения формы вихревых областей почти не наблюдаются.

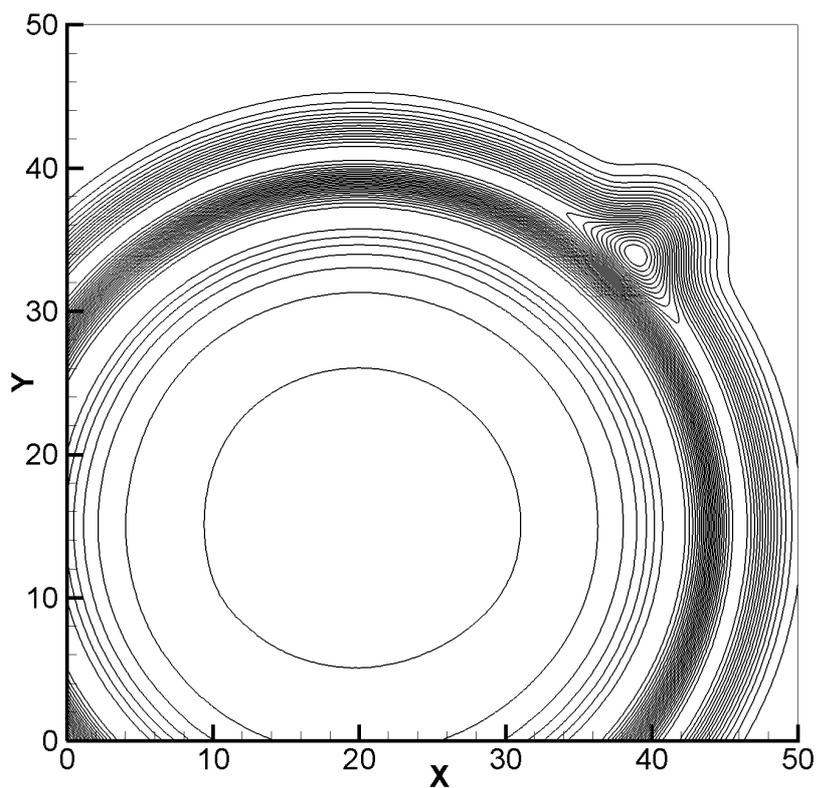


Рис. 2. Распространение двух гауссовых импульсов; 2D линейризованные уравнения Эйлера; DRP-схема: изолинии ρ'

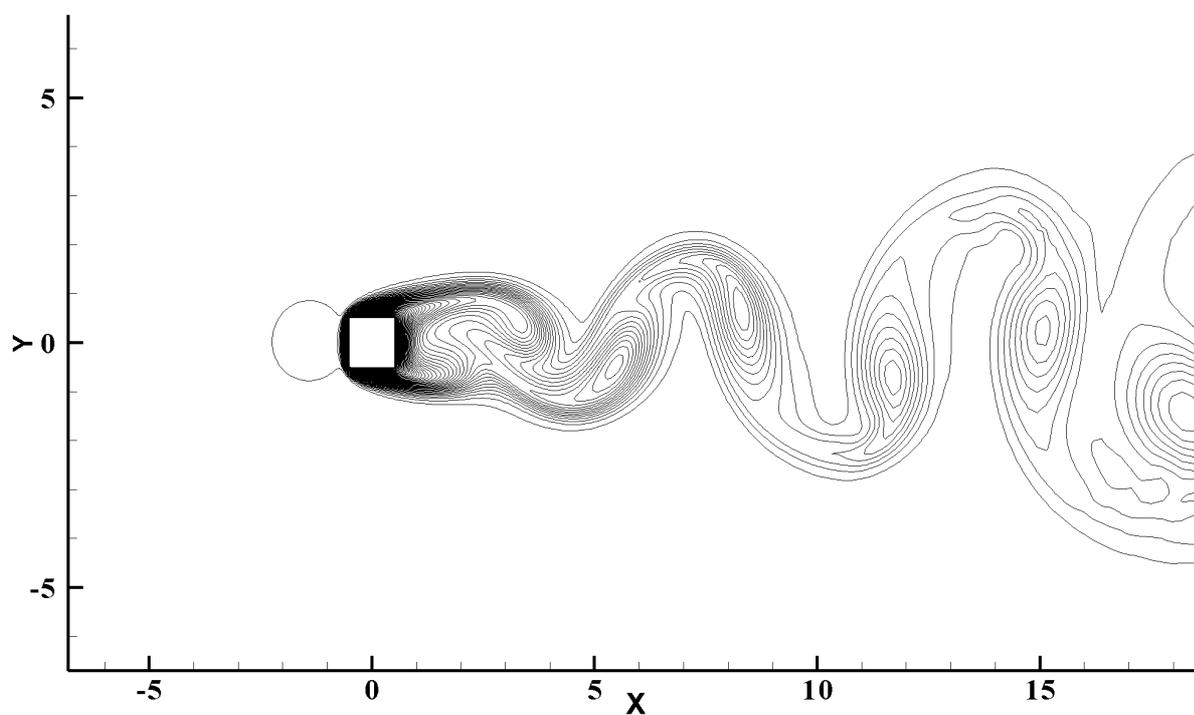


Рис. 3. Обтекание квадратного цилиндра вязким газом: изотермы T

Литература

1. *Рябенский В.С.* Точный перенос краевых условий // Вычислительная механика деформируемого твердого тела. 1990. Вып.1. С.129–145.
2. *С.К.В. Tam, J.C. Webb.* Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics // J. Comput. Phys., v.107, 1993, pp.262–281.
3. *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.
4. *L.W. Dorodnicyn.* Artificial boundary conditions for high-accuracy aeroacoustic algorithms // SIAM J. Scientific Computing. 2010. V.32. No.4. P.1950–1979.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ЭФФЕКТОВ В ПЛАЗМЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА¹

Ефимова А.А., Берендеев Е.А.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Введение

Работа направлена на исследование нелинейных процессов формирования турбулентного спектра в замагниченной плазме под действием мощного электронного пучка. Для оценки адекватности основных теоретических моделей, используемых для описания плазменной турбулентности в магнитном поле, а так же для выбора оптимальных режимов пучково-плазменного взаимодействия как с точки зрения эффективного нагрева плазмы, так и с точки зрения генерации электромагнитного излучения в пучково-плазменных экспериментах необходимо проводить численное моделирование. В численных расчетах выбирались параметры пучка и плазмы характерные для экспериментов по нагреву плазмы в открытой ловушке ГОЛ-3 (ИЯФ СО РАН) [1]. Исследования проводились с помощью двумерной численной модели, основанной на методе частиц в ячейках. Рассматривались различные тестовые задачи: установление температуры в плазме без пучка, задача о пучковой неустойчивости, возникновение модуляции плотности. Выполнен дисперсионный анализ задачи в полной гидродинамической постановке. На основе этих тестовых задач проведены исследования численной сходимости решения в зависимости от счетных параметров, установлено оптимальное количество частиц в ячейках, получено хорошее соответствие с аналитическими решениями. Для изучения процессов спектральных перекачек волновой энергии отдельно от эффектов, связанных с нелинейной динамикой пучка в поле резонансных колебаний, рассматривается следующая задача: роль накачки выполняет "жесткий" пучок, не взаимодействующий с возбуждаемыми электромагнитными полями. Эти задачи очень ресурсоемки, поэтому для расчетов используется супер-ЭВМ.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 11-01-00249

I Постановка задачи

Модель использует приближение бесстолкновительной плазмы [2], [3], [4]. Плазма описывается системой уравнений Власова-Максвелла:

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + (\mathbf{v}, \Delta) f_k + \frac{q_k}{m_k} (\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{H}]) \frac{\partial f_k}{\partial \mathbf{p}} = 0, \quad (1)$$

$$\text{rot } \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad (2)$$

$$\text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\text{div } \mathbf{E} = 4\pi \rho, \quad (4)$$

$$\text{div } \mathbf{H} = 0, \quad (5)$$

$$\mathbf{j} = \sum_k q_k \int \mathbf{v} f_k(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{p}, \quad (6)$$

$$\rho = \sum_k q_k \int f_k(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{p}, \quad (7)$$

где f_k – функция распределения частиц сорта k (электроны или ионы), m_k – масса частицы сорта k , \mathbf{H} – напряженность магнитного поля, \mathbf{E} – напряженность электрического поля, c – скорость света, ρ – плотность электрического заряда, \mathbf{j} – плотность электрического тока, q_k – заряд частицы сорта k . Уравнение (1) является бесстолкновительным кинетическим уравнением Власова, уравнения (2) – (5) образуют систему уравнений Максвелла, уравнения (6), (7) определяют плотности тока и заряда через функции распределения частиц. Предполагаем, что все величины зависят от пространственных декартовых координат, рассматривались двумерная и трехмерная постановки задачи. Расчетная область имеет форму параллелепипеда, направление инжекции пучка параллельно оси. Граничные условия периодические. Налагались условия однородности начальной плотности электронов, ионов и электронов пучка. Распределение по скоростям ионов и электронов задавалось максвелловским. Плазма в начальный момент изотермическая.

II Решение основных уравнений

Решение уравнения Власова производится в лагранжевых координатах – характеристики этого уравнения описывают движение модельных частиц (8):

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{q_k}{m_k} (\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{H}]), \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}. \quad (8)$$

Для решения этих уравнений используется схема с перешагиванием [4]. Уравнения Максвелла решаются в эйлеровых координатах. Плотности заряда и плотности тока вычисляются по формулам, предложенным Вилласенором и Бунеманом [4]. При таком подходе разностный аналог уравнения (9) выполняется автоматически.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j = 0. \quad (9)$$

Для нахождения электрических и магнитных полей используется схема, в которой напряженность электрического и магнитного полей вычисляются на сетках, смещенных относительно друг друга по времени и пространству [5]:

$$\frac{H^{m+1/2} - H^{m-1/2}}{\tau} = -c \operatorname{rot}_h E^m$$

$$\frac{E^{m+1} - E^m}{\tau} = -4\pi j^{m+1/2} + \operatorname{rot}_h H^{m+1/2}$$

H вычисляется на дробном шаге по времени, E вычисляется на целом шаге по времени.

III Вычислительный эксперимент

Главной задачей моделирования являлось воспроизведение нелинейных эффектов в плазме под действием электронного пучка.

Для тестирования были рассмотрены задача установления температуры частиц к равновесному состоянию и задача о двухпотоковой неустойчивости. В первой задаче плазма состоит из двух сортов частиц. Температура электронов задана, температура ионов в начальный момент времени – нулевая. В этом случае температура ионов и электронов должна устанавливаться, причем к одному значению. Для контроля решения использовалось изменение энергии, а темпы изменения скорости частиц являлись результатом тестирования. В задаче электростатической двухпотоковой неустойчивости ионы образуют однородный неподвижный фон. Начальное распределение электронов пространственно однородно и представляет собой суперпозицию двух встречных максвелловских пучков:

$$f_0(v) = a_1 \exp\left[-\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2}{2\sigma_1^2}\right] + a_2 \exp\left[-\frac{(\mathbf{v} + \mathbf{v}_0)^2}{2\sigma_2^2}\right].$$

На основе этих тестовых задач было проведено исследование влияния числа частиц в ячейке, шага сетки и шага по времени на решение. Показано, что зависимость решения от этих счетных параметров сходящаяся, что позволяет моделировать температурные эффекты в плазме методом частиц.

Известно, что электронный пучок, распространяющийся в плотной плазме, неустойчив по отношению к продольной модуляции плотности. Для нахождения гармоник с максимальным инкрементом нарастания напряженности электрического поля проводился дисперсионный анализ. Рассматривалась трехмерная полная гидродинамическая постановка задачи в предположении, что движение происходит вдоль оси x . Численное моделирование показало хорошее соответствие результатов с полученным аналитическим решением [6].

Была исследована эволюция плотности заряда электронного пучка с развитием плазменной турбулентности. В начальный момент времени заряд электронов пучка распределен по области равномерно. При взаимодействии с плазмой в результате резонансных колебаний образуются участки модуляции плотности. Как предполагается, именно за счет этого эффекта происходит подавления продольной электронной теплопроводности на торцы установки в процессе инжекции РЭП.

Для исследования процессов установления квазистационарного турбулентного состояния в замагниченной плазме под действием постоянной накачки рассматривается упрощенная задача, в которой роль накачки выполняет "жесткий" пучок, не взаимодействующий с возбуждаемыми электромагнитными полями. В такой постановке можно ограничиться рассмотрением достаточно малых пространственных масштабов и использовать периодические граничные условия. Такое упрощение позволяет изучать процессы спектральных перекачек волновой энергии отдельно от эффектов, связанных с нелинейной динамикой пучка в поле резонансных колебаний.

Для решения задачи был разработан эффективный масштабируемый параллельный алгоритм, в котором используется смешанная эйлерово-лагранжевая декомпозиция [7]. Необходимость применения суперкомпьютерных вычислений обусловлена тем, что требуется, во-первых, достаточно подробная сетка для воспроизведения резонансного взаимодействия релятивистского электронного пучка с плазмой, и, во-вторых, большое количество модельных частиц, чтобы промоделировать возникающую в дальнейшем неустойчивость. Расчеты проводились на суперкомпьютере "Ломоносов" (МГУ имени М.В.Ломоносова. Процессоры Intel Xeon 5570 2932 МГц, Cache 8 Mb) и суперкомпьютере "НКС-30Т" (ССЦ ИВМиМГ СО РАН. Процессоры Intel Xeon E5540 2530 МГц, Cache 8 Mb). Разработанный алгоритм позволил проводить расчеты на сетках 1024×1024 узла, при этом общее число модельных частиц составило 5 242 880 000. На суперкомпьютере "Ломоносов" использовалось до 8192 процессорных ядер. Программа реализована на языке Fortran-90 с использованием MPI.

IV Заключение

В работе представлена созданная модель и программа для моделирования нелинейных эффектов в плазме. Рассматриваемая задача достаточно ресурсоемка, но разработанный масштабируемый параллельный алгоритм, обеспечивающий равномерную загрузку вычислительных ядер, позволяет выполнять сложные расчеты. Тестирование проведено на различных тестовых задачах, также удалось воспроизвести тонкие физические эффекты, возникающие при взаимодействии пучка с плазмой.

Авторы выражают благодарность В.А. Вшивкову и Г.И. Дудниковой за полезные обсуждения.

Литература

1. *Бурдаков А.В., Поступаев В.В.* Особенности переноса тепла при пучковом нагреве плазмы в экспериментах на установке ГОЛ-3 // Препринт ИЯФ СО РАН. Новосибирск. - 1992. № 9. С. 3 - 20.
2. *C.K. Birdsall, and A.B. Langdon.* Plasma Physics via Computer Simulation. Hilger, Bristol. 1991. 504 С.
3. *Березин, Ю.А., Вшивков В.А.* Метод частиц в динамике разреженной плазмы. Новосибирск: Наука. 1980. 96 С.
4. *Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А., Федорук М.П.* Численное моделирование методами частиц-в-ячейках. Новосибирск: Издательство СО РАН. 2004. 360 С.
5. *Langdon, A.B., Lasinski B.F.* Electromagnetic and relativistic plasma simulation models // Meth. Comput. Phys. 1976. Vol. 16. P. 327-366.
6. *А.А. Ефимова, Е.А. Берендеев.* Численное моделирование резонансного возбуждения колебаний плазмы, нагреваемой электронным пучком. // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ 2013): труды международной научной конференции (г. Челябинск, 1-5 апреля 2013 г.). Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. 2013. С. 288-294.
7. *Берендеев Е.А., Ефимова А.А.* Реализация эффективных параллельных вычислений при моделировании больших задач физики плазмы методом частиц в ячейках // Вестник УГАТУ. Уфа. 2013. т.17, №2 (55). С. 112-116.

ДИФФУЗИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ В МОДЕЛЯХ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫХ ТРОФИЧЕСКИХ ЦЕПЕЙ ТИПА <РЕСУРС-ПОТРЕБИТЕЛЬ> С КРОСС-ДИФФУЗИЕЙ

Завалишин Н.Н.

*ФГБУН Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова
РАН, Москва*

Трофические цепи типа <ресурс-потребитель>, однородные по пространству, могут иметь устойчивые равновесия, периодические и хаотические колебательные режимы. Стационарные состояния в пространственно-неоднородных моделях трофических цепей могут терять устойчивость посредством механизма Тьюринга с образованием диссипативных структур. Исследуются условия возникновения бифуркации Тьюринга в открытой однокомпонентной цепи типа <ресурс-потребитель>.

I Введение: модели трофических цепей

Исследование структуры и динамики трофических цепей (ТЦ) стало классической задачей математической экологии, которой посвящено огромное число работ и которая до сих пор далека до окончательного решения. Среди наиболее интересных особенностей биологических сообществ с вертикальной структурой, которые и называются трофическими цепями, если их последовательные компоненты связаны между собой отношениями типа <хищник-жертва> (Свирежев, Логофет, 1978), значительное место занимает детерминированный хаос и условия его практического воплощения в природных популяциях. Особый интерес представляют эксплуатируемые трофические цепи с точки зрения прогноза численности участвующих популяций при вариациях промысла и с позиций оценки изменений структуры и функционирования экосистемы под действием климатических изменений. Существуют два различных модельных представления трофических цепей: одно основано на уравнениях динамики популяций, взаимодействующих по типу хищник-жертва, а второе рассматривает цепь с точки зрения поступающего на вход ресурса, задавая его баланс в системе явно. Такую цепь будем называть трофической цепью типа <ресурс-потребитель>. Если плотности составляющих уровней неоднородны по пространству, то возникает задача реакции-диффузии о динамике системы <ресурс-потребитель>. В результате потери устойчивости пространственно-однородного решения в трофической цепи <ресурс-потребитель> может появиться устойчивое пространственно-неоднородное равновесие, называемое диссипативной структурой (Свирежев,

1987). В работах последних лет показано, что эффект кросс-диффузии (движение потребителя по градиенту ресурса) играет важную роль в появлении диссипативных структур в системах реакции-диффузии (Ванаг, 2008). В водных экосистемах на динамику трофических цепей сильное воздействие оказывает перенос ресурса и потребителей течениями (адвекция).

Пусть трофическая цепь состоит из n уровней с плотностями N_i , первый из которых потребляет ресурс R , поступающий в систему с фиксированной скоростью Q_0 . Удельная зависимость скорости выедания жертв N_{i-1} особями хищника N_i от плотности популяции жертв называется трофическим откликом V_i и в произведении с численностью хищников дает поток биомассы от одного уровня цепи к другому. Балансовые уравнения трофической цепи имеют вид:

$$\begin{cases} \frac{dN_0}{dt} = Q_0 - V_0(N_0)N_1 + \sum_{i=1}^n a_i m_i N_i; \\ \frac{dN_i}{dt} = -m_i N_i + k_i V_{i-1}(N_{i-1})N_i - V_i(N_i)N_{i+1}, \quad N_{n+1} = 0, \quad i = 1, \dots, n. \end{cases} \quad (1)$$

где m_i – коэффициенты смертности, a_i – коэффициенты утилизации ресурса, k_i – коэффициенты усвоения ресурса на i -ом уровне. Частично замкнутой трофической цепью называется цепь с $0 < k_i < 1$, $0 < a_i < 1$ и $Q_0 > 0$. Замкнутой трофической цепью называется цепь с $k_i = a_i = 1$ и $Q_0 = 0$. В этом случае общее количество вещества сохраняется: $C = const$ и является естественным параметром динамической системы. При нарушении какого-либо из этих равенств система называется частично замкнутой или открытой. Установлено необходимое условие их устойчивости: скорость поступления ресурса должна быть ограничена снизу и сверху некоторыми величинами, зависящими от параметров цепи. Для частично замкнутой цепи это условие является и достаточным (Свирежев, Логофет, 1978). Бифуркационный анализ по параметру C и с вольтерровскими, и с функциями с насыщением показывает потерю устойчивости нетривиального равновесия и появление предельных циклов, а также возникновение хаотических колебательных режимов (Свирежев, 1987; Jorgensen, Svirezhev, 2004).

Целью настоящей работы является исследование условий диффузионной неустойчивости однородного стационарного решения в пространственно-неоднородной трофической цепи типа “ресурс-потребитель” при учете явления таксиса – направленного движения особей по градиенту ресурса, обозначающего направленный поиск пищи.

II Одноуровневая неоднородная трофическая цепь типа “ресурс-потребитель”.

Пространственно-неоднородная трофическая цепь типа “ресурс-потребитель” локально имеет тот же вид, что и (1), а при добавлении пространственных факторов принимает вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial N_0}{\partial t} = D_R \Delta N_0 + Q_0 - V_0(N_0)N_1 + \sum_{i=1}^n a_i m_i N_i - A_0^0 \nabla N_0 \\ \frac{\partial N_i}{\partial t} = D_i \Delta N_i - \nabla N_i (A_0^i + 2A_1^i N_i) - \nabla (P_i(N_0) S_i(N_i) \nabla N_0) - m_i N_i + \\ + k_i V_{i-1}(N_{i-1}) N_i - V_i(N_i) N_{i+1}, \\ i = 1, \dots, n, N_{n+1} = 0, \end{cases} \quad (2)$$

где учитываются случайные перемещения особей (диффузия) с коэффициентами D_R, D_i , направленные перемещения по градиенту ресурса (таксис) и адвективные перемещения, обусловленные физическими процессами в окружающей среде. К этим уравнениям добавляются начальные условия и граничные условия Дирихле, либо Неймана, либо смешанного типа.

Далее будем рассматривать одноуровневую систему (2) с $n=1$ на одномерном отрезке $\Omega = [0, L]$. Ресурс N_0 обозначен через R . Функции Φ и Ψ характеризуют таксис и адвекцию: следуя работам (Березовская, Карев, 1999) и (Ванаг, 2009), выберем интенсивность таксиса $\Phi(R, N_1)$ в мультипликативном виде $\Phi(R, N_1) = P(R)S(N_1)$, поскольку при $R = 0$ или $N_1 = 0$ она должна быть равна нулю по биологическому смыслу. Скорость адвекции Ψ в свою очередь складывается из постоянной части, обусловленной факторами внешней среды (ветер, течения), и плотностно-зависимой части, отражающей биологическое воздействие: $\Psi(N_1) = A_0^1 + A_1^1 N_1$ (Petrovskii and Li, 2003). Интенсивность входного потока ресурса Q_0 зависит от точки пространства, ресурс подвержен адвективному переносу с плотностно-независимой постоянной интенсивностью A_0^0 . Тогда получаем систему из двух уравнений реакции-диффузии, в которых учет таксиса приводит к появлению кросс-диффузионного слагаемого:

$$\begin{cases} \frac{\partial R}{\partial t} = D_R \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + Q_0(x) - V_0(R)N_1 + a_1 m_1 N_1 - A_0^0 \frac{\partial R}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 N_1}{\partial x^2} - m_1 N_1 + k_1 V_0(R)N_1 - \\ - \frac{\partial N_1}{\partial x} (A_0^1 + 2A_1^1 N_1) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial R}{\partial x} P(R)S(N_1) \right) \end{cases} \quad (3)$$

Модель (3) дополняется начальными условиями и граничными условиями Неймана:

$$\begin{cases} R|_{t=0} = R_0(x); & \frac{\partial R}{\partial \nu} |_{\partial \Omega} = 0 \\ N_1|_{t=0} = N_1^0(x); & \frac{\partial N_1}{\partial \nu} |_{\partial \Omega} = 0 \end{cases} \quad (4)$$

Задача (3)-(4) имеет единственное стационарное решение, однородное по пространству: $[R^*; N_1^*] = [V_0^{-1}(\frac{m_1}{k_1}); \frac{Q_0}{m_1(1/k_1 - a_1)}]$. Для локальной системы оно асимптотически устойчиво, поскольку из вида матрицы Якоби

$$J_L = \begin{pmatrix} -N_1^* \frac{dV_0}{dR} |_{R^*} & a_1 m_1 - V_0(R^*) \\ k_1 N_1^* \frac{dV_0}{dR} |_{R^*} & k_1 V_0(R^*) - m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ d & e \end{pmatrix}$$

следует выполнение условий Рауса-Гурвица: $\det J_L > 0$ $tr J_L < 0$. Линеаризация распределенной системы в окрестности её стационарного однородного

решения имеет общее решение вида: $Ce^{\lambda t}e^{-ikx}$, а матрица Якоби выражается через якобиан локальной системы ОДУ:

$$J_M = J_L - \mu^2 \begin{pmatrix} D_R & 0 \\ P(R^*)S(N_1^*) & D_1 \end{pmatrix} - \mu \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2iA_1^1 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где μ – волновое число. Пусть условия $\det J_L > 0$ и $\text{tr} J_L < 0$ выполнены. Тогда в распределенной задаче может возникнуть неустойчивость Тьюринга однородного стационарного состояния. Необходимым условием этой неустойчивости является неравенство $\det J_M < 0$. Равенством определяются критические значения волнового числа, при которых происходит бифуркация Тьюринга, в результате которой однородное по пространству равновесие может смениться диссипативной структурой. Определитель матрицы J_M имеет вид:

$$\det J_M = \det \begin{pmatrix} a - \mu^2 D_R & b \\ d - \mu^2 P^* S^* & e - \mu^2 D_1 - 2\mu i A_1^1 \end{pmatrix} = \\ D_R D_1 \mu^4 + 2i D_R A_1^1 \mu^3 + \mu^2 (b P^* S^* - a D_1 - e D_R) - 2i a A_1^1 \mu + \det J_L < 0. \quad (6)$$

III Кросс-диффузионная неустойчивость пространственно-однородного стационарного решения одноуровневой ТЦ без адвекции.

Пусть адвективные слагаемые отсутствуют: $A_1^1 = 0, A_0^0 = 0$, т.е. динамика цепи определяется только биологическими факторами. Тогда соотношение (6) становится биквадратным относительно μ :

$$D_R D_1 \mu^4 + \mu^2 (b P^* S^* - a D_1 - e D_R) + \det J_L < 0. \quad (7)$$

Ветви параболы направлены вверх, поэтому неравенство (7) удовлетворяется для тех значений μ , которые попадают в интервал между корнями полинома при условии $b P^* S^* - a D_1 - e D_R < 0$ (условие Гурвица для (5)). Замечая, что в силу равновесности $e = 0$ и делая преобразования в (7), получаем необходимое условие неустойчивости Тьюринга:

$$m_1 (1/k_1 - a_1)^2 P^* S^* > D_1 Q_0 \frac{dV_0}{dR} \Big|_{R^*} + 2(1/k_1 - a_1) \sqrt{D_1 D_R Q_0 k_1 \frac{dV_0}{dR} \Big|_{R^*}} \quad (8)$$

Корни биквадратного полинома (7) при подстановке значений $[R^*; N_1^*]$ вычисляются по стандартной формуле корней квадратного уравнения:

$$\mu_{1,2}^2 = \frac{1}{2D_R} \left[\frac{m_1}{D_1} \left(\frac{1}{k_1} - a_1 \right) P(V_0^{-1}(\frac{m_1}{k_1})) S\left(\frac{Q_0}{m_1(1/k_1 - a_1)}\right) - \frac{Q_0}{m_1(1/k_1 - a_1)} \frac{dV_0}{dR} \Big|_{R^*} \pm \frac{1}{D_1} \sqrt{D} \right], \quad (9)$$

где $D = [m_1(\frac{1}{k_1} - a_1)P(V_0^{-1}(\frac{m_1}{k_1}))S(\frac{Q_0}{m_1(1/k_1 - a_1)}) + \frac{D_1 Q_0}{m_1(1/k_1 - a_1)}]^2 - 4D_R D_1 k_1 Q_0 \frac{dV_0}{dR} |_{R^*}$.

Собственными значениями оператора $-\Delta$ с граничными условиями Неймана на отрезке Ω являются $\lambda_n = (\frac{\pi n}{L})^2$ с $n = 0, 1, 2, \dots$. Следовательно, достаточным условием возникновения диффузионной неустойчивости однородного стационарного решения задачи (3)-(4) является попадание хотя бы одного из этих собственных чисел в интервал (μ_1, μ_2) . Это означает, что длина интервала должна превышать как минимум $\frac{\pi}{L}$. Попадание волнового числа в интервал (μ_1, μ_2) означает, что длина интервала должна быть больше или равна как минимум $\frac{\pi}{L}$: $\mu_1 - \mu_2 \geq \frac{\pi}{L}$, т.е. $(\mu_1 - \mu_2)^2 \geq (\frac{\pi}{L})^2$. Это неравенство эквивалентно $tr J_M - 2det J_L \geq D_R D_1 (\frac{\pi}{L})^2$, которое после подстановки принимает вид:

$$Q_0 \frac{dV_0}{dR} |_{R^*} (\frac{D_1}{m_1(1/k_1 - a_1)} - 2k_1) \geq D_1 D_R (\frac{\pi}{L})^2 + m_1(1/k_1 - a_1) P(V_0^{-1}(\frac{m_1}{k_1})) S(\frac{Q_0}{m_1(1/k_1 - a_1)}). \quad (10)$$

Отсюда получается критерий диффузионной неустойчивости:

Теорема. Стационарное однородное решение задачи (3)-(4), устойчивое для локальной системы ОДУ, неустойчиво, если выполнено условие (8) и среди собственных чисел оператора $-\Delta$ с граничными условиями Неймана $0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots$ найдется хотя бы одно, попадающее в интервал (μ_1, μ_2) , что эквивалентно условию (10).

Из неравенства (10) видно, что присутствие кросс-диффузии повышает порог значений скорости притока внешнего ресурса Q_0 , при которой происходит потеря устойчивости пространственно однородного стационарного состояния трофической цепи, по сравнению со случаем, когда диффузия является единственным пространственным фактором.

IV Выводы

Диффузионная неустойчивость и образование диссипативных структур в трофических цепях типа "ресурс-потребитель" исследовались в работах 80-х годов (Свирижев, 1987). Однако важный с биологической точки зрения эффект таксиса как направленного движения особей по градиенту ресурса учтен в моделях этого типа цепей не был. Учет этого природного эффекта приводит к появлению кросс-диффузионных слагаемых в обычных уравнениях реакции-диффузии. В настоящей работе показано, что даже для простой одноуровневой ТЦ типа "ресурс-потребитель" присутствие кросс-диффузии ведет к потере устойчивости однородного стационарного состояния по механизму Тьюринга. Причем важно то, что в агрегированной ТЦ с одним уровнем не происходит потери устойчивости единственного нетривиального равновесия. Поэтому следующим логическим шагом является доказательство возможности кросс-диффузионной неустойчивости в ТЦ длины два и более,

а также численно-аналитическое исследование свойств образующихся в этом случае диссипативных структур.

Литература

1. *Свирежев Ю.М., Логофет Д.О.* Устойчивость биологических сообществ. - М., Наука, 1978.
2. *Свирежев Ю.М.* Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии. - М., Наука, 1987, 366 с.
3. *Ванаг В.К.* Диссипативные структуры в реакционно-диффузионных системах: эксперимент и динамика. - "Регулярная и хаотическая динамика Москва-Ижевск, 2008, 300 с.
4. *Березовская Ф.С., Карев Г.П.* Бифуркации бегущих волн в популяционных моделях с таксисом. // *Успехи физических наук*, т. 169, №9, 1999, с. 1011-1024.
5. *Jorgensen S.-E., Svirezhev Y.M.* Towards a thermodynamic theory for ecological systems. Elsevier, 2004, 366 p.
6. *Petrovskii S., Li B.-L.* An exactly solvable model of population dynamics with density-dependent migrations and the Allee effect. // *Mathematical Biosciences*, v. 186, 2003, p. 79-91.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СМЕШЕНИЯ РАЗНОТЕМПЕРАТУРНЫХ СТРУЙ МЕТОДОМ КАБАРЕ

Зайцев А.М.

*Институт проблем Безопасного Развития Атомной
Энергетики РАН, г.Москва*

I Введение

Работа посвящена проверке возможности прямого численного моделирования процесса смешения разнотемпературных струй. Этот процесс, в частности, имеет место над активной зоной (а.з.) ядерного реактора типа БН с натриевым теплоносителем, где сходятся и перемешиваются выходящие из разных тепловыделяющих сборок (ТВС) а.з. струи теплоносителя. В случае частичных блокировок сечений ТВС, деформаций решеток топливных стержней и других дефектов могут возникать локальные перегревы теплоносителя на выходе ТВС и, следовательно, температурные неоднородности потока. Поведение температурного "следа", возникающего при смешивании разнонагретых струй, представляет большой интерес с точки зрения температурного контроля теплоносителя над активной зоной. Измерение флуктуаций температуры натрия в зоне смешивания может быть использовано для обнаружения наличия дефектной ТВС, степени перегрева натрия в ней и, возможно, ее местоположения.

Для исследования характеристик распределения температуры на выходе из ТВС с разными температурами теплоносителя ГНЦ РФ-ФЭИ был проведен специальный эксперимент [1], в котором измерялось распределение температур над выходными отверстиями ТВ.

II Подготовка геометрической модели теплообменника

Для обнаружения струи с меньшей скоростью, но с большей температурой, для начала необходимо промоделировать сборку из семи оголовков в целях получения сравнительных характеристик пульсаций в течении после места смешивания.

III Подготовка сетки и её декомпозиция для параллельных вычислений

Представлен один из вариантов сетки содержащий 4 600 000 ячеек. При расчете по данной сетке в качестве начальных условий было использовано

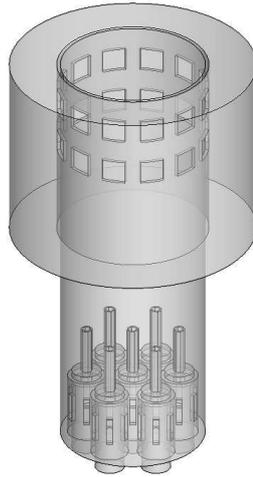


Рис. 1. Вид геометрии сетки 4.6 млн. ячеек для изучения смешивания в двух шестигранных каналах и её разбиение на ячейки.

решение по k -epsilon модели турбулентности, для исключения большей части фазы установления. Задача решается методом установления. Сравнение средних значений на интервале от 4 до 6 и от 6 до 12 секунд показывает, что установившееся решение достигается в течении 4 секунд. Критерием установления является стационарность средних значений установившегося течения. Модель жидкости соответствует модели слабо сжимаемой жидкости.

Время обработки одного элемента за шаг по времени зависит от эффективности алгоритма декомпозиции, загруженности кластерной системы и колеблется от 6 до 20 секунд на шаг по времени на миллион элементов. Число шагов до установления до 1000000.

IV Результаты расчета по методике САВАРЕТ

Постпроцессинг осуществлялся на рабочем компьютере с перекачкой скомпрессованных данных с кластеров. Параметры расчета следующие: плотность 904кг/м^3 , кинематическая вязкость 0.5×10^{-6} , число Прандтля 0.0077, что соответствует параметрам натрия для средней температуры в осевом сечении. Температура на входе в центральном устройстве 148.1, в периферийных устройствах 122.5. Скорости на входе определялись по средней скорости в тепловыделяющих сборках. Данные соответствуют опыту 5 из [3]. Расчет проводился на кластере Ломоносов на 512 процессорах в течении 72 часов с шагом по времени 7 микросекунд. Осреднение проводилось по интервалу 4-12.5 секунды.

Ниже представлены графики сравнения средних разниц температур моделирования и эксперимента на сечениях $z = 0, 0.2$. Значения моделирования

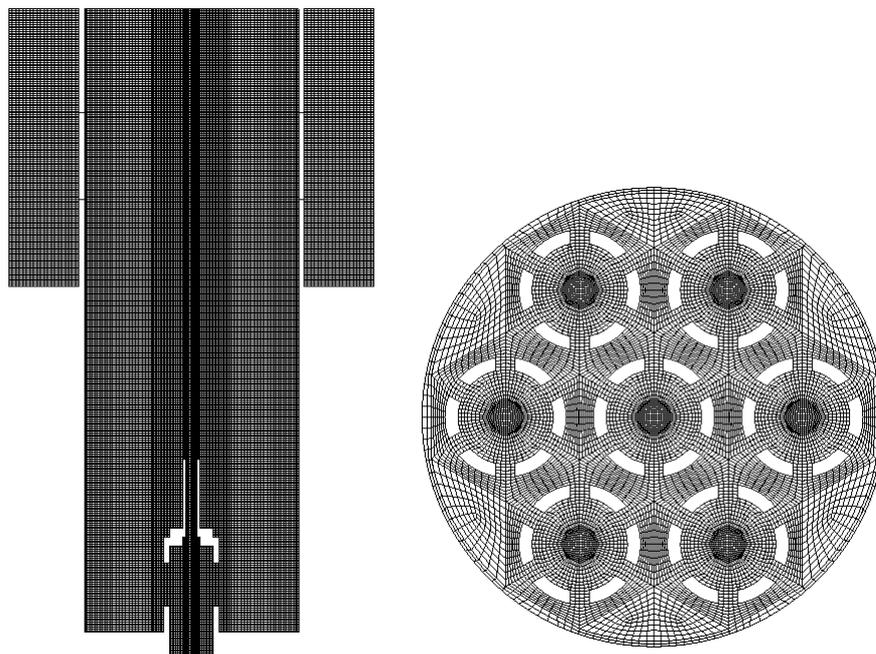


Рис. 2. Вид сетки в вертикальном и горизонтальном сечении.

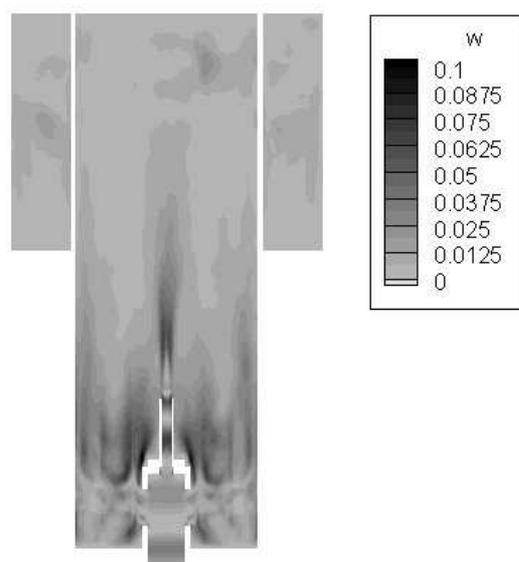


Рис. 3. Распределение средних значений осевой компоненты скорости.

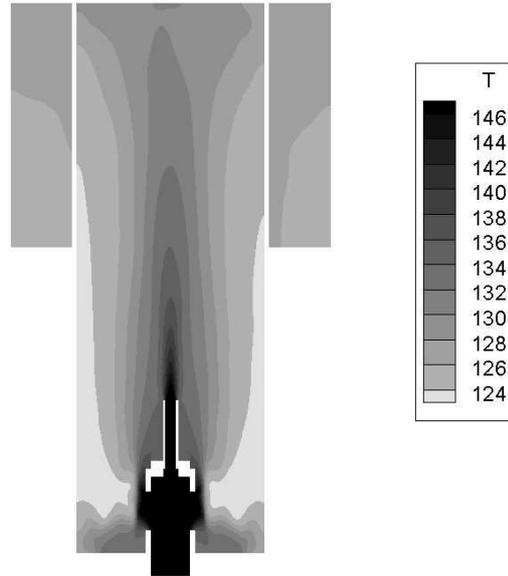


Рис. 4. Распределение средних значений температуры.

получены осреднением по 6 равноудаленным точкам от оси струи (термопары по радиусам $R_1 = 0$, $R_2 = 12.5$, $R_3 = 22.5$, $R_4 = 34$, $R_5 = 39$) средних по времени значений в соответствующих сечениях.

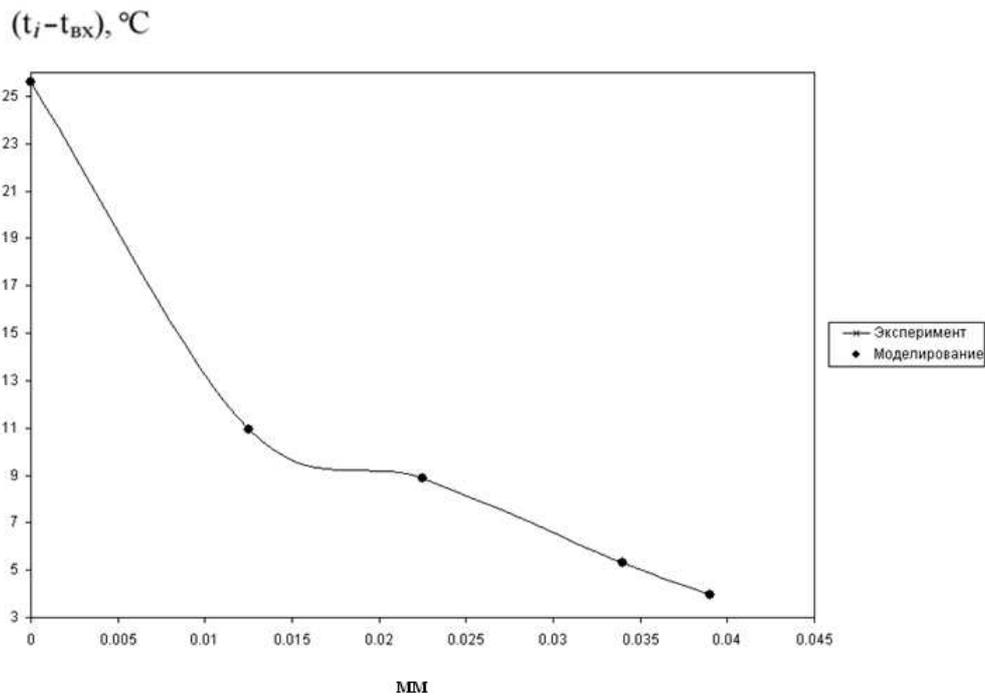


Рис. 5. Разницы температур в зависимости от удаления от центра струи в сечении $z = 0$.

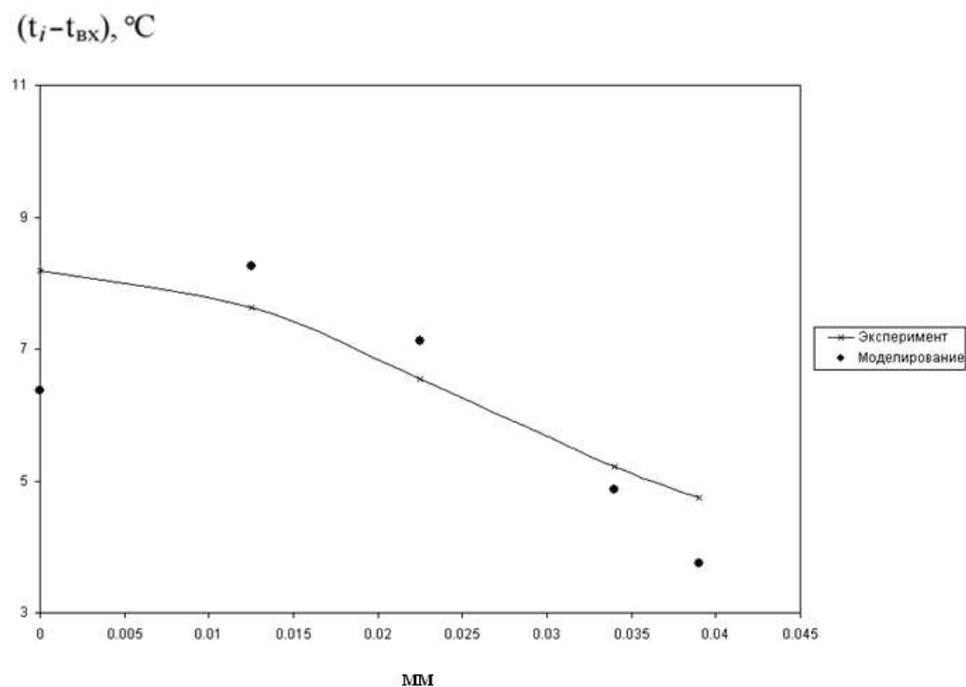


Рис. 6. Разницы температур в зависимости от удаления от центра струи в сечении $z = 0.2$.

Литература

1. *А.В. Жуков, Ю.А. Кузина, А.П. Сорокин, Н.А. Денисова, А.Б. Мужанов, Е.Ф. Иванов* Некоторые вопросы смешения разнотемпературных струй теплоносителя над активной зоной быстрого реактора., ГНЦ РФ-ФЭИ, г. Обнинск.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ ЗА ВЫСТУПОМ В КАНАЛЕ ПРИ ПЕРЕХОДЕ К ТУРБУЛЕНТНОСТИ¹

Калинин Е.И.* , Мазо А.Б.* , Молочников В.М.**

* Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань

** Исследовательский научный центр проблем энергетики
КазНЦ РАН, Казань

Введение

При течении вязкой жидкости в канале с препятствием наблюдается отрыв потока и формирование упорядоченных крупномасштабных вихревых структур, которые квазипериодически выносятся из области отрыва. При достаточно больших значениях числа Рейнольдса в следе происходит распад крупных вихрей на каскад мелких с переходом к турбулентности. Механизм формирования и турбулентного распада этих структур изучался в работах [1, 2], однако до настоящего времени нет общей точки зрения на причины данного феномена.

Визуализация течения, проведенная авторами в работах [3, 4], показала, что с ростом числа Рейнольдса на внешней границе рециркуляционной области за выступом сначала возникают колебания струек дыма, затем появляются гребнеобразные возмущения. При определенном критическом значении числа Рейнольдса на некотором расстоянии от выступа формируются крупномасштабные вихревые структуры.

Подробный анализ экспериментальных результатов показал, что ламинарно-турбулентный переход при отрыве потока за препятствиями в каналах имеет особенности, связанные с неустойчивостью течения в направлении трансверсальной координаты. Для выявления этих особенностей в рамках настоящей работы детальные визуальные исследования структуры рассматриваемого течения дополнены результатами прямого численного моделирования, достоверность которых подтверждается сопоставлением с данными визуализации и ранее выполненных термоанемометрических и PIV-измерений скорости потока и завихренности за выступом. Сочетание эксперимента и численного моделирования позволило составить ясное представление о развитии структуры отрывного течения за препятствием в канале и формировании крупномасштабных вихревых структур на поздних стадиях перехода к турбулентности.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 13-01-00368

I Экспериментальные исследования

Изучался отрыв потока за полуцилиндрическим поперечным выступом, расположенным в канале прямоугольного поперечного сечения высотой $H = 20$ и шириной 50 мм с плавным входом, выполненным по лемнискате Бернулли. Выступ устанавливался на расстоянии 106 мм от входного сечения рабочего участка и имел высоту h (радиус сечения R), равную 3 мм. Экспериментальная установка подробно описана в [5].

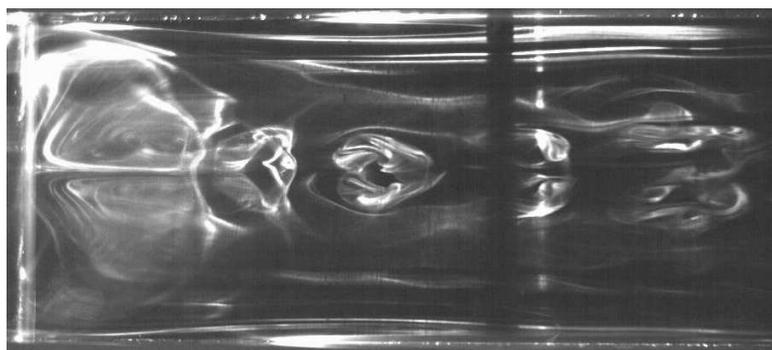


Рис. 1. Визуализация течения при $Re_H = 1553$ ($Re_h = 233$) в плоскости, параллельных нижней стенке на высоте 3 мм от нее

Эксперименты проводились в диапазоне изменения числа Рейнольдса $Re_H = U_0 H / \nu = 390 \dots 2930$, где U_0 – средняя скорость потока, ν – кинематическая вязкость воздуха. Соответствующее число Рейнольдса, вычисленное по высоте препятствия h , изменялось в диапазоне $Re_h = 58.5 \dots 439.5$.

По данным визуализации потока установлено, что формирование крупномасштабных поперечных вихревых структур в слое смешения за выступом начинается при критическом значении числа Рейнольдса $Re_H = 1300$ ($Re_h = 195$). С увеличением Re_H интенсивность этих структур возрастает, а область начала их формирования смещается в сторону выступа. На всех рассмотренных режимах непосредственно за выступом наблюдалось сложное кругообразное движение жидкости от боковых стенок к центру канала. Это движение отображается на визуализации картины течения в форме двух симметричных угловых вихрей (рис. 1).

С ростом Re круговое движение жидкости от боковых стенок канала к его центру сохраняется, однако масштаб этого движения по продольной координате уменьшается, зона начала формирования вихревых сгустков смещается в сторону выступа вверх по потоку. Область, занимаемая этими сгустками, расширяется как по трансверсальной координате, так и в сторону нижней стенки. Процесс сопровождается дроблением крупных вихрей на более мелкие, усиливаются пульсации потока, течение в следе за препятствием ниже линии присоединения приобретает черты турбулентного режима.

II Численное моделирование

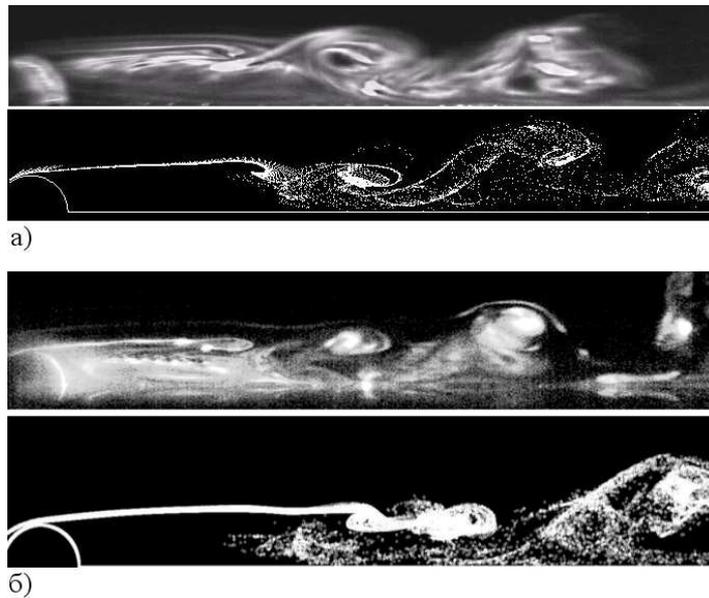


Рис. 2. Результаты визуализации (сверху) и расчета (снизу) мгновенной картины течения за выступом: а – $Re_H = 1800$ ($Re_h = 165$); б – 3200 (480)

Для составления более полной картины ламинарно-турбулентного перехода в канале с полуцилиндрическим выступом было выполнено прямое численное моделирование исследуемого течения в пакете Ansys Fluent 14.5 (лицензия #625482 ANSYS Academic Research). Расчетная область в точности соответствовала конфигурации рабочего участка лабораторной установки. Решалась трехмерная нестационарная задача Навье-Стокса в переменных “скорость-давление” для несжимаемой жидкости при числах Рейнольдса в диапазоне $1100 < Re_H < 3200$ ($165 < Re_h < 480$). На стенках канала и выступе ставились граничные условия прилипания, во входном сечении задавался равномерный профиль продольной скорости и нулевое давление, в выходном сечении канала – “мягкие” граничные условия.

Число Re_h отвечает за отрыв и присоединение потока, формирование вихревых структур в ближнем следе за телом, зарождение и развитие возмущений потока в виде турбулентных пульсаций скорости и давления. Роль числа Re_H сводится к развитию, либо подавлению возмущений в области вниз по потоку. Эти соображения были учтены при построении неструктурированной расчетной сетки с сильным сгущением в области препятствия и отрыва-присоединения, а также в пограничном слое на нижней стенке канала. Общее количество ячеек сетки – 1.5 млн.; пространственный шаг сетки λ в областях выбирался сгущения приблизительно равен 0.01, а в зонах разрежения – 0.3 (все размеры нормированы на высоту препятствия h). Безразмерный шаг по времени $\tau = 0.02$. Данные параметры сетки по порядку величины соответствуют колмогоровским пространственным и временным масштабам диссипативных вихрей для указанных выше чисел Рейнольдса:

$$0.01 < \lambda_h = \text{Re}_h^{-3/4} < 0.022, \quad 0.01 < \tau_h = \text{Re}_h^{-1/2} < 0.078$$

$$0.0024 < \lambda_H = \text{Re}_H^{-3/4} < 0.0052, \quad 0.018 < \tau_H = \text{Re}_H^{-1/2} < 0.03$$

Для тестирования расчетной схемы была проведена серия расчетов при числах Рейнольдса $\text{Re}_H = 1100; 1500; 1800$ и 3200 . Выполнены сравнения картины течения с экспериментальными данными. Во всех случаях получено вполне удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных результатов. Некоторые из них представлены на рис.2.

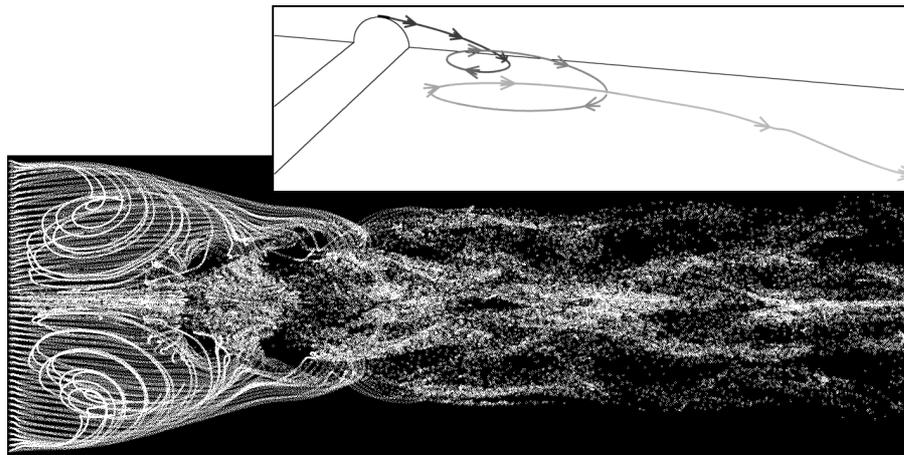


Рис. 3. Расчет спиралевидных траекторий частиц на режиме зарождения турбулентности при $\text{Re}_H = 1500$ ($\text{Re}_h = 225$)

На рис.3 показаны построенные по результатам численного моделирования сложные пространственные спиралевидные траектории движений жидкости от боковых стенок к центру канала за выступом при $\text{Re}_H = 1500$, где хорошо видны образование и унос вихревых сгустков в центральной области и переход к турбулентности в следе ниже линии присоединения.

Был подсчитан тензор турбулентных напряжений $\boldsymbol{\tau}$ и его инвариант $\sqrt{\tau_{ij}\tau_{ji}}$, характеризующий интенсивность пульсаций. Значение этого инварианта, осредненное по времени, представлено на рис.4. Хорошо видно, что даже при закритических значениях числа Рейнольдса отрывная зона за препятствием является ламинарной, а турбулентность развивается в следе за линией присоединения.

III Заключение

Выполнены лабораторные исследования и прямое численное моделирование течения за поперечным полуцилиндрическим выступом в канале на ламинарном и переходном к турбулентному режимам течения. Установлено, что непосредственно за выступом формируется пара симметричных стационарных вихрей, включающих спиралевидное движение жидкости от боковых

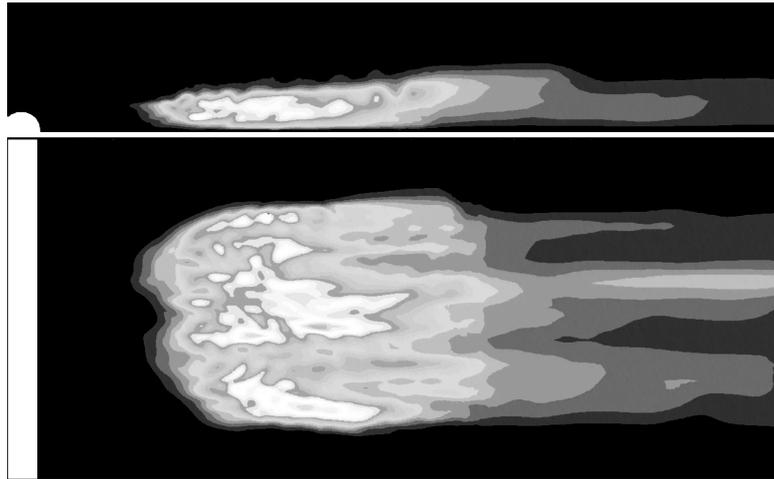


Рис. 4. Осредненное поле интенсивности пульсаций скорости в вертикальной (вверху) и горизонтальной плоскости при $Re_H = 3200$ ($Re_h = 480$)

стенок к центру канала по периферии этих вихрей и застойные области в их центральной части. При увеличении числа Рейнольдса выше критического, энергия циркуляции жидкости, накапливаемая в замкнутой отрывной области, превышает энергию, отводимую от ее границы во внешний поток за счет вязкости. В этих условиях течение в отрывной области в зоне положительного градиента давления теряет устойчивость, образуются поперечные вихревые структуры, которые периодически выносятся из рециркуляционной области во внешний поток.

Литература

1. Довгаль А.В., Сорокин А.М. Экспериментальное моделирование периодического вихреобразования при отрыве течения за уступом поверхности // Теплофизика и аэромеханика. 2002. Т. 9. N 2. С. 193–200.
2. Диковская И.Д., Довгаль А.В., Сорокин А.М. Переход к турбулентности и образование регулярных вихрей в зоне отрыва пограничного слоя // Теплофизика и аэромеханика. 1999. Т. 6. N 1. С. 27–36.
3. Молочников В.М., Михеев Н.И., Паерелий А.А., Хайрнасоев К.Р. Отрыв потока за выступом в канале при ламинарном режиме течения // Теплофизика и аэромеханика. 2008. Т. 15. N 4. С. 611–621.
4. Душина О.А., Молочников В.М., Паерелий А.А. и др. Структура потока за выступом в канале в условиях ламинарно-турбулентного перехода // Теплофизика и аэромеханика. 2010. Т. 17. N 3. С. 349–361.
5. Душина О.А., Молочников В.М., Михеев Н.И., Паерелий А.А. Эволюция кинематической структуры потока за поперечным выступом в канале на переходных режимах течения // Теплофизика и аэромеханика. 2012. Т. 19. N 2. С. 235–243.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВУХФАЗНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ В ОКРЕСТНОСТИ ТЕКТОНИЧЕСКИХ РАЗЛОМОВ И ТРЕЩИН ГИДРОРАЗРЫВА ПЛАСТА¹

Калинин Е.И., Мазо А.Б., Поташев К.А.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань

Введение

Фильтрационные течения в нефтесодержащих пластах имеют особенности, связанные с нарушениями сплошности горных пород. Эти нарушения могут быть обусловлены как индустриальными, так и природными факторами. К особенностям первого вида относятся трещины гидроразрыва пласта (ГРП), искусственно сформированные около добывающих или нагнетающих скважин для повышения их дебита или приемистости. Трещины ГРП, которые имеют абсолютную проницаемость на несколько порядков выше средней проницаемости пласта, многократно увеличивают фильтрационную поверхность скважины, что оказывает существенное влияние на перераспределение потоков в прискважинной зоне пласта.

К природным нарушениям относятся геологические разломы без смещения (трещина, сдвиг) или со смещением пород (сброс) по поверхности разрыва, возникшие вследствие движения земной коры. Разработка месторождений углеводородов в зоне с тектоническими разломами осложняется наличием перетоков жидкости через трещину разлома.

В настоящее время для моделирования разработки нефтяных залежей применяются полномасштабные фильтрационные модели, в которых используются расчетные сетки с горизонтальным размером ячейки порядка нескольких десятков метров. Разрешения таких сеток недостаточно для отражения обозначенных особенностей, так как ширина трещин не превышает нескольких сантиметров.

В настоящей работе предложен метод численного решения задачи о фильтрации двухфазного флюида в пласте с тектоническими нарушениями, учитывающий перетоки жидкости через трещины. Для моделирования течений в разломах использованы уравнения фильтрации, осредненные по ширине трещины; таким образом, представленные методики не требуют построения детальных сеток для адекватного отражения перетоков внутри разлома.

I Течение в трещине гидроразрыва пласта

Математические модели ГРП основаны на известных уравнениях пьезопроводности и различаются формой трещины и граничными условиями на

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты 13-01-97031, 13-01-97044

ее поверхности. В простейших случаях однородных пластов и канонических форм трещины получены аналитические решения задачи [1]. В настоящей работе предлагается математическая модель ГРП, в которой трещина представлена вертикальной пластиной конечных размеров, проходящей через ось вертикальной скважины. Рассматривается однофазное стационарное приближение. Данная модель предназначена для оценки дополнительного дебита скважины за счет гидроразрыва.

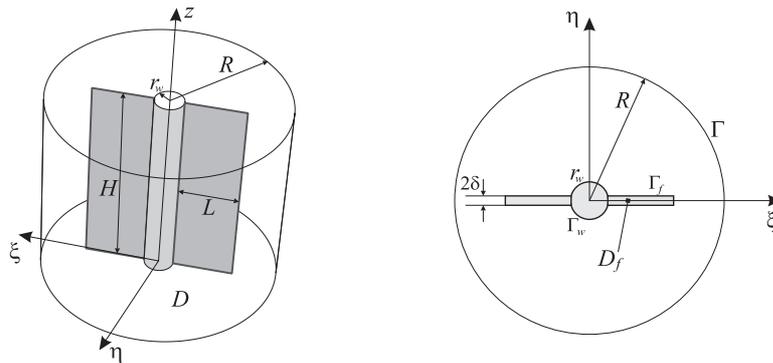


Рис. 1. Вертикальная трещина гидроразрыва пласта

Рассматривается задача о притоке флюида к вертикальной скважине с трещиной интервального гидравлического разрыва пласта. Трещина представлена вертикальной пластиной конечных размеров, проходящей через ось скважины. Расчетная область D представляет собой цилиндрический контейнер с боковой границей Γ , содержащий скважину радиуса r_w , с трещиной D_f длиной $2L$, высотой H и шириной 2δ . Ортогональная система координат (ξ, η, z) вводится согласно рис. 1.

Краевая задача для давления во внешней области D и трещине D_f имеет вид

$$\nabla \cdot (\sigma k \nabla p) = 0; \quad \Gamma : p = p_\Gamma; \quad \Gamma_w : p = p_w, \quad z = 0, H : \frac{\partial p}{\partial n} = 0; \quad (1)$$

здесь p_Γ – давление на боковой границе Γ расчетной области D , p_w – забойное давление в скважине Γ_w . Если вместо забойного давления задан суммарный дебит жидкости q из скважины Γ_w и трещины Γ_f , то постановка задачи дополняется нелокальным интегральным условием:

$$q = - \int_{\Gamma_w} \sigma k \frac{\partial p}{\partial n} d\gamma - \int_{\Gamma_f} \sigma k \frac{\partial p}{\partial n} d\gamma,$$

метод учета которого при решении уравнения Пуассона (1) изложен в [2].

Задача о течении внутри трещины рассматривается отдельно. Ширина трещины мала, поэтому вместо давления p в трещине определяется среднее

по сечению трещины давление $\langle p \rangle$. Тогда, осредняя исходную задачу (1) по ширине $[-\delta, \delta]$, получим соотношение для определения $\langle p \rangle$

$$2\delta k_f \left[\frac{\partial \langle p \rangle}{\partial \xi} + \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial z} \right] + k \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_{-\delta}^{\delta} = 0; \quad \xi = r_w : \langle p \rangle = p_w; \quad (2)$$

где k_f – проницаемость трещины, которую будем считать постоянной. Второе слагаемое в соотношении (2) определяется решением внешней задачи (1), которая в свою очередь зависит от решения задачи в трещине через условие первого рода: $\Gamma_f : p = \langle p \rangle$.

При обезразмеривании задачи по линейному размеру L и пластовой проницаемости k_0 , решение задачи определяется безразмерным комплексом $M = 2\delta k_f / k_0 L$. На рис. 2 представлено численное решение модельной задачи при $\sigma = 1$, $k/k_0 = 1$, $p_\Gamma = 1$, $R/L = 10$, $r_w/L = 0.01$, $H/L = 1$, $M = 10$ с заданным дебитом $q = 1$. Распределение давления в поперечном направлении к трещине ГРП близко к логарифмическому, тогда как вдоль трещины оно имеет характерную особенность в виде точки излома при переходе в ненарушенный пласт, что вполне согласуется с теоретическими результатами [1, 3].

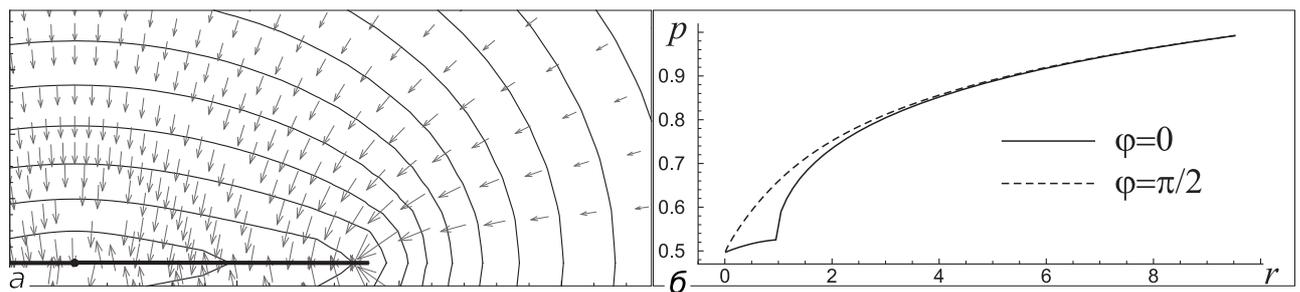


Рис. 2. Изобары и скорость фильтрации (а), распределение давления вдоль ($\varphi = 0$) и поперек ($\varphi = \pi/2$) трещины (б) для $M = 10$

II Течение в тектоническом разломе

Рассматривается модельная задача о двумерной двухфазной (нефть, вода) фильтрации жидкости в коллекторе D с трещиной D^f (рис. 3). Будем считать, что верхняя Γ_{top} и нижняя Γ_{bot} границы коллектора непроницаемы, на левой границе Γ^+ задано давление $p = 1$ и водонасыщенность $s = 1$; на правой границе Γ^- – давление $p = 0$. Нестационарная безразмерная система уравнений для описания фильтрации в коллекторе D имеет вид:

$$\beta \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad \mathbf{U} = -\sigma k(x, y) \nabla p, \quad \sigma = \frac{k_w(s) + K_\mu k_o(s)}{\mu_w}, \quad K_\mu = \frac{\mu_w}{\mu_o}, \quad (3)$$

$$m \frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot (f(s) \mathbf{U}) = 0, \quad f = \frac{k_w}{k_w + K_\mu k_o}, \quad k_w = s^{n_w}, \quad k_o = (1 - s)^{n_o}.$$

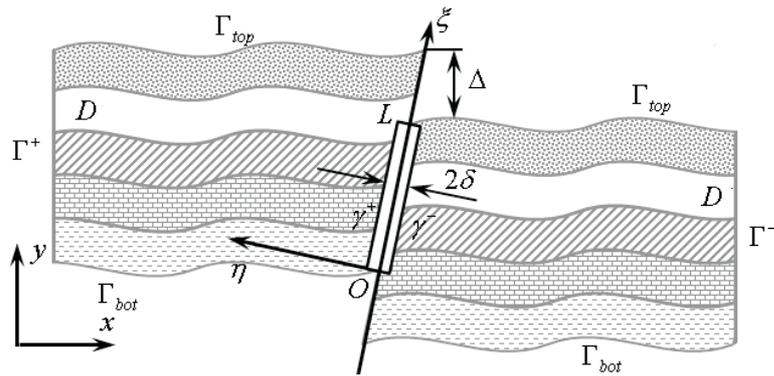


Рис. 3. Схема разлома типа “сброс” и основные обозначения.

Здесь t – время, x, y – декартовы координаты, \mathbf{U} – скорость фильтрации флюида, β – упругоемость, $f(s)$ – доля воды в потоке (функция Баклея-Левретта), μ_w, μ_o – вязкости воды и нефти, n_w, n_o – степени относительных фазовых проницаемостей для воды и нефти.

Вывод определяющих уравнений для течения в разломе D^f основан на осреднении по толщине разлома системы уравнений вида (3) без учета упругости. При этом изменение давления поперек разлома аппроксимируется квадратичной зависимостью. Тогда можно сформулировать одномерную задачу для средних значений давления $\langle p \rangle (\xi)$ и насыщенности $\langle s \rangle (\xi)$

$$-\frac{\delta^2}{3} \frac{\partial^2 \langle p \rangle}{\partial \xi^2} + \langle p \rangle = \tilde{p}; \quad m_f \frac{\partial \langle s \rangle}{\partial t} + \frac{\partial f(\langle s \rangle) \langle u \rangle}{\partial \xi} + W = 0; \quad \langle u \rangle = -k_f \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial \xi}$$

$$W = \frac{k_f}{2\delta^2} \{ f(\tilde{s}^+) V^{f+} - f(\tilde{s}^-) V^{f-} \}; \quad V^{f\pm} = \mp (2p^\pm + p^\mp - 3 \langle p \rangle), \quad (4)$$

$$\langle p, s \rangle (\xi) = \frac{1}{2\delta} \int_{-\delta}^{\delta} p^f, s^f d\eta, \quad \tilde{p} = \frac{p^+ + p^-}{2}, \quad \tilde{s}^\pm = \begin{cases} \langle s \rangle, & \pm V^{f\pm} > 0 \\ s^\pm, & \mp V^{f\pm} > 0, \end{cases}$$

где m_f, k_f – пористость и проницаемость трещины, p^\pm, s^\pm – давление и насыщенность на левой и правой границах трещины γ^\pm , $V^{f\pm}$ – поперечная скорость течения флюида слева и справа от трещины.

Условием сопряжения задачи в коллекторе (3) и задачи в трещине (4) является равенство давлений и потоков, проходящих через границы γ^\pm :

$$\gamma^\pm: \quad p = p^\pm, \quad \sigma \frac{\partial p}{\partial n} = -\frac{k_f}{\delta} (2p^\pm + p^\mp - 3 \langle p \rangle). \quad (5)$$

Аппроксимация уравнений (3 – 5) проводилась на основе метода конечных объемов. На каждом временном слое сначала на основе полученных сеточных уравнений строилась единая система линейных уравнений для определения давления, которая решалась точным методом, а затем по явной противоположной схеме проводился пересчет поля водонасыщенности.

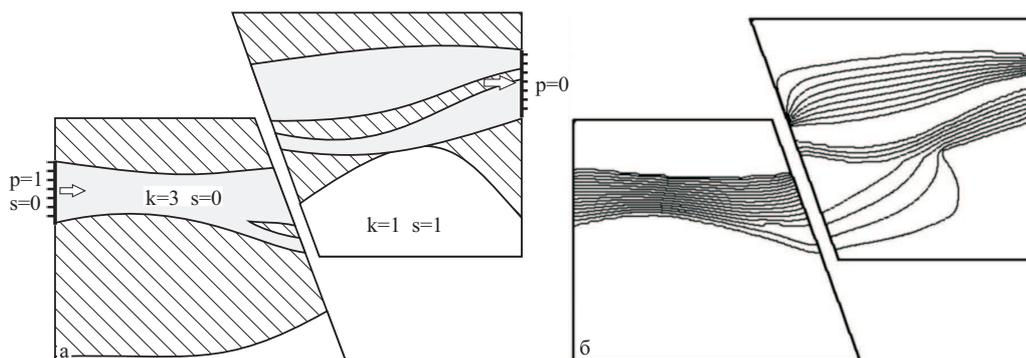


Рис. 4. Область расчета и начальные условия (а); линии тока (б).

В качестве демонстрации работы алгоритма была рассмотрена задача о фильтрации в неоднородном пласте с разломом ширины $2\delta = 0.06$ и проницаемости $k_f = 50$. Проницаемость пласта и начальные условия задачи представлены на рис. 4а.

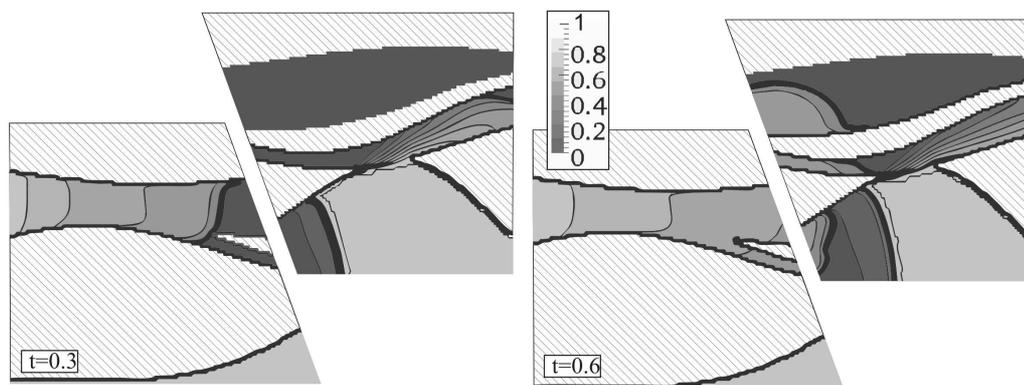


Рис. 5. Поля приведенной водонасыщенности.

На рис. 4б представлены линии тока полученного течения, которые хорошо иллюстрируют перетоки флюида вдоль разлома; соответствующие поля насыщенности представлены на рис. 5.

Литература

1. Каневская Р.Д. Математическое моделирование разработки месторождений нефти и газа с применением гидравлического разрыва пласта. М.: ООО "Недра-Бизнесцентр", 1999. – 212 с.
2. Калинин Е.И., Мазо А.Б. Численное решение задач обтекания системы тел в переменных "функция тока-завихренность" // Ученые записки КазГУ. Серия физ.-мат. науки. 2009. Т. 151. кн 3. С. 149–159.
3. Бадертдинова Е.Р., Салимьянов И.Т. Численное решение обратной задачи фильтрации в пласте, содержащем трещину гидроразрыва // Всероссийский семинар молодых ученых "Сеточные методы для краевых задач и приложения" Казань: Каз. ун-т, 2010. N. 4. С. 105–109.

ПЕРВЫЕ ИНТЕГРАЛЫ ОБЫКНОВЕННЫХ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ, НЕ ОБЛАДАЮЩИХ ВАРИАЦИОННОЙ ПОСТАНОВКОЙ¹

Капцов Е.И.

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

ЗАО "Тандер", Краснодар

В докладе делается обзор результатов, полученных совместно с Винтерницем П., Дородницыным В.А., и Козловым Р.В. [1].

Предложен новый метод, основанный на операторном тождестве Лагранжа. Это тождество связывает симметрию данного ОДУ, решения соответствующего сопряженного уравнения и закон сохранения. В работе строится разностный аналог этой конструкции.

I Тождество Лагранжа в случае обыкновенного дифференциального уравнения

Рассмотрим уравнение

$$F(x, u, \dot{u}, \ddot{u}, \dots, u^{(n)}) = 0, \quad (1)$$

обладающее симметриями

$$X = \xi(x, u) \frac{\partial}{\partial x} + \eta(x, u) \frac{\partial}{\partial u} + \zeta_1 \frac{\partial}{\partial \dot{u}} + \zeta_2 \frac{\partial}{\partial \ddot{u}} + \dots + \zeta_k \frac{\partial}{\partial u^{(k)}} + \dots, \quad (2)$$

где

$$\zeta_k = D^k(\eta - \xi \dot{u}) + \xi u^{(k+1)}$$

и D — оператор полного дифференцирования.

Сопряженное уравнение для (1) имеет вид:

$$\begin{aligned} F^* &= \frac{\delta}{\delta u}(vF) = \\ &= v \frac{\partial F}{\partial u} - D \left(v \frac{\partial F}{\partial \dot{u}} \right) + D^2 \left(v \frac{\partial F}{\partial \ddot{u}} \right) + \dots + (-1)^n D^n \left(v \frac{\partial F}{\partial u^{(n)}} \right) = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где v — некоторая функция от x .

В работах [2], [3] предложено решать сопряженное уравнение в терминах решений исходного уравнения. Это позволяет находить законы сохранения, исходя только из симметрий данного уравнения. Справедлива следующая теорема [3], [4]:

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта N 12-01-00940-а)

Теорема 1. Пусть сопряженное уравнение (3) удовлетворяется на всех решениях исходного ОДУ (1) при подстановке

$$v = \varphi(x, u), \quad \varphi \neq 0. \quad (4)$$

Тогда любая симметрия (2) уравнения (1) приводит к первому интегралу:

$$I = \sum_{i=0}^{n-1} D^i(\eta - \xi u) \frac{\delta}{\delta u^{(i+1)}}(vF), \quad (5)$$

в котором v и ее производные следует исключить с учетом уравнения (4) и его дифференциальных следствий.

II Дискретный аналог тождества Лагранжа

Рассмотрим дискретное уравнение n -ого порядка:

$$F(m, u_m, u_{m+1}, u_{m+2}, \dots, u_{m+n}) = 0, \quad (6)$$

допускающее симметрии вида

$$X = \eta_m \frac{\partial}{\partial u_m} + \eta_{m+1} \frac{\partial}{\partial u_{m+1}} + \dots + \eta_{m+n} \frac{\partial}{\partial u_{m+n}}, \quad \eta_k = \eta(u_k) \quad (7)$$

Соответствующее сопряженное уравнение имеет вид

$$F^* = \frac{\delta}{\delta u_m}(v_m F) = 0, \quad (8)$$

где

$$\frac{\delta}{\delta u_m} = \sum_{k=0}^{\infty} S_-^k \frac{\partial}{\partial u_{m+k}} = \frac{\partial}{\partial u_m} + S_- \frac{\partial}{\partial u_{m+1}} + \dots + S_-^k \frac{\partial}{\partial u_{m+k}} + \dots \quad (9)$$

— разностный вариационный оператор,

$$S_- m = m - 1, \quad S_- u_m = u_{m-1} \quad (10)$$

— оператор сдвига влево.

В явном виде сопряженное уравнение можно записать следующим образом:

$$F^* = v_m \frac{\partial F}{\partial u_m} + v_{m-1} S_- \left(\frac{\partial F}{\partial u_{m+1}} \right) + \dots \\ + v_{m-k} S_-^k \left(\frac{\partial F}{\partial u_{m+k}} \right) + \dots + v_{m-n} S_-^n \left(\frac{\partial F}{\partial u_{m+n}} \right) = 0. \quad (11)$$

Теорема 2. Пусть сопряженное уравнение (8) удовлетворяется на всех решениях исходного уравнения (6) при подстановке

$$v_m = \varphi(m, u_m), \quad \varphi \neq 0. \quad (12)$$

Тогда любая симметрия (7) уравнения (6) приводит к первому интегралу

$$J = \sum_{j=1}^n \eta_{m+j} \frac{\delta}{\delta u_{m(j)}} (v_m F), \quad (13)$$

в котором v_m, \dots, v_{m-n} следует исключить в силу уравнения (12) и его левых сдвигов.

III Пример

Уравнение

$$F = \frac{\ddot{u}}{\dot{u}} - \frac{3}{2} \left(\frac{\ddot{u}}{\dot{u}} \right)^2 = 0, \quad (14)$$

допускает симметрии

$$X_1 = \frac{\partial}{\partial u}, \quad X_2 = u \frac{\partial}{\partial u}, \quad X_3 = u^2 \frac{\partial}{\partial u}, \quad (15)$$

$$X_4 = \frac{\partial}{\partial x}, \quad X_5 = x \frac{\partial}{\partial x}, \quad X_6 = x^2 \frac{\partial}{\partial x}. \quad (16)$$

Сопряженное уравнение (3) имеет простой вид

$$F^* = \frac{\ddot{v}}{\dot{v}} = 0. \quad (17)$$

Используя три его независимых решения

$$v_a = 1, \quad v_b = x, \quad v_c = x^2, \quad (18)$$

с помощью Теоремы 1 можно найти три независимых интеграла (верхний индекс совпадает с номером симметрии, а нижний — с индексом решения сопряженного уравнения):

$$I_a^1 = \frac{\dot{u}^2}{2 \dot{u}^3}, \quad I_a^2 = \frac{u \dot{u}^2}{2 \dot{u}^3} - \frac{\ddot{u}}{\dot{u}}, \quad I_b^1 = \frac{x \dot{u}^2}{2 \dot{u}^3} + \frac{\ddot{u}}{\dot{u}^2}. \quad (19)$$

Интегралы (19) позволяют выписать общее решение уравнения (14):

$$u(x) = \frac{1}{C_1 x + C_2} + C_3, \quad (20)$$

где $C_1 \neq 0$, C_2 и C_3 — константы.

Рассмотрим разностную схему для уравнения (14), полученную в [5], [6]:

$$\mathcal{F} = \frac{(u_{m+3} - u_{m+1})(u_{m+2} - u_m)}{(u_{m+3} - u_{m+2})(u_{m+1} - u_m)} - K = 0, \quad (21)$$

$$\mathcal{H} = \frac{(x_{m+3} - x_{m+1})(x_{m+2} - x_m)}{(x_{m+3} - x_{m+2})(x_{m+1} - x_m)} - K = 0,$$

где K — постоянная, не равная нулю.

В разностном случае появляется дополнительное уравнение \mathcal{H} , называемое уравнением сетки.

В данной схеме произошло разделение переменных на два однотипных уравнения.

Сопряженное уравнение, после некоторых упрощений, приводится к виду:

$$\mathcal{F}^* = v_m + (1 - K)v_{m-1} + (K - 1)v_{m-2} - v_{m-3} = 0. \quad (22)$$

Здесь мы рассмотрим только случай $K = 4$.

Линейное уравнение (22) имеет три независимых решения:

$$v_a = 1, \quad v_b = m, \quad v_c = m^2. \quad (23)$$

Используя эти решения, с помощью Теоремы 2 можно найти три независимых интеграла (верхний индекс совпадает с номером симметрии, а нижний — с индексом решения сопряженного уравнения):

$$J_a^1 = 2 \left(\frac{K}{u_{m+2} - u_m} - \frac{1}{u_{m+2} - u_{m+1}} - \frac{1}{u_{m+1} - u_m} \right), \quad (24)$$

$$J_a^2 = \frac{K(u_{m+2} + u_m)}{u_{m+2} - u_m} - \frac{2u_{m+1}}{u_{m+2} - u_{m+1}} - \frac{2u_{m+1}}{u_{m+1} - u_m}, \quad (25)$$

$$J_b^1 = 2m \left[\frac{K}{u_{m+2} - u_m} - \frac{1}{u_{m+2} - u_{m+1}} - \frac{1}{u_{m+1} - u_m} \right] - K \left(\frac{1}{u_{m+2} - u_m} + \frac{1}{u_{m+1} - u_m} \right) + \frac{3}{u_{m+2} - u_{m+1}} + \frac{3}{u_{m+1} - u_m}. \quad (26)$$

С помощью этих интегралов нетрудно найти общее решение для функции u_m :

$$u_m = \frac{1}{A_1 m + A_2} + A_3, \quad (27)$$

где $A_1 \neq 0$, A_2 и A_3 — константы.

С помощью точно такой же процедуры находим решение для функции x_m :

$$x_m = \frac{1}{B_1 m + B_2} + B_3, \quad (28)$$

где $B_1 \neq 0$, B_2 и B_3 — константы.

Исключая m из (27), (28), нетрудно получить общее решение системы (21). Легко видеть, что оно в точности соответствует решению ОДУ (14), т.е. схема (23) является точной.

Литература

1. Винтерниц П., Дородницын В.А., Капцов Е.И., Козлов Р.А. (2013) Первые интегралы разностных уравнений, не имеющих вариационной постановки // ДАН (принято в печать, см. англ. версию <http://arxiv.org/abs/1307.7585>)
2. N. H. Ibragimov (2011) Nonlinear self-adjointness and conservation laws // J. Phys A: Math. Gen. **44** 432002.
3. N. H. Ibragimov (2010–2011) Nonlinear self-adjointness in constructing conservation laws // Archives of ALGA **7/8**, ALGA Publications, Karlskrona, Sweden.
4. S. Anco and G. Bluman (1997) Direct construction of conservation laws from field equations, // Phys. Rev. Lett. **78** 2869-2873.
5. A. Bourlioux, C. Cyr-Gagnon, P. Winternitz (2006) Difference schemes with point symmetries and their numerical tests // J. Phys A: Math. Gen. **39** (22) 6877–6896.
6. A. Bourlioux, R. Rebelo, P. Winternitz (2008) Symmetry preserving discretization of $SL(2, \mathbb{R})$ invariant equations // J. of Nonlinear Math. Phys **15** 362–372.

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ПАКЕТА "TIMES"¹

Клочкова Л.В., Тишкин В.Ф.

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

Аннотация

Представляемая работа направлена на решение фундаментальных проблем математического прогнозирования качества окружающей среды при антропогенных и техногенных воздействиях. В статье обсуждаются результаты построения математических моделей, вычислительных методов и алгоритмов для интегрированных экспертных систем прогнозирования развития нестационарных процессов, описываемых дифференциальными уравнениями в частных производных. Основная идея состоит в том, чтобы разработать системный подход к математическому прогнозированию и постановке вычислительных экспериментов при решении актуальных прикладных проблем, с которыми сталкиваются исследователи при развитии науки и техники, – наиболее общими фундаментальными проблемами вычислительной математики.

Введение

При многофакторном анализе влияния развития различных социальных структур в течение продолжительного времени на окружающую среду мегаполисов приходится решать сложные вычислительные задачи. То же требуется для проведения исследований конкретных характеристик состояния атмосферных слоёв и приземного слоя перемешивания, определяющего качество воздуха в мегаполисе. Одним из методов является разработка модели слоя перемешивания при сложном рельефе местности с помощью параболических уравнений. Такая математическая модель позволяет проводить вычислительные эксперименты распространения з агрязнений на далёкие расстояния от множественных источников в условиях городской и промышленной застройки. Но такой подход требует развития специальных вычислительных методов. Проблема тем более осложняется, если ставится задача оценить изменяющиеся процессы распространения токсичных выбросов от сложных переменных источников в меняющихся природных условиях при сложных течениях в каньонах городской застройки. В таком случае необходимо провести исследование различных факторов, влияющих на нестационарные процессы распространения опасных примесей в атмосфере городов, что

¹Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №11-01-00444-а

является в настоящий момент актуальной проблемой. Применяемые модели должны учитывать рельеф местности и метеорологические условия, в которых проходят сложные физико-химические процессы в многокомпонентных смесях, выбрасываемых одновременно из множественных источников токсичных веществ в атмосферу. В настоящее время устойчивым представлением о распространении примеси в турбулентных потоках воздуха являются модели турбулентной диффузии. В этих моделях негласно предполагается, что рождение вихря, обусловленное неустойчивостью в некоторой точке поля течения, случайно. Турбулентность атмосферы, присутствующая практически во всех перемещениях слоёв газов, учитывается в виде коэффициентов турбулентной диффузии. Для описания движений масс воздуха в любых слоях атмосферы, несущих многокомпонентные и многофазные примеси, этот подход является основным. Он содержится в перечне моделей, принятых МАГАТЭ. Вся масса воздуха рассматривается как совокупность вихрей, спектр размеров которых определяет коэффициенты турбулентной диффузии. Авторами проведено сравнение различных подходов описания турбулентных газодинамических течений. Методы описания являются комбинацией аналитических, асимптотических и численных решений, полученных на основе математического моделирования с помощью разностных схем и полуэмпирических статистических модельных представлений, систем дифференциальных уравнений в частных производных. Также как известное крылатое выражение А.А.Самарского, что математическое моделирование покоится на трёх слонах: модель – алгоритм – программа, так и вычислительная математика на трёх китах: аппроксимация, интерполяция, экстраполяция. Правильно подобранная аппроксимирующая функция позволяет правильно провести регрессию, так, чтобы измеренные значения величин экспериментально совпали для заданной точки в координатно-временном пространстве с теоретической моделью.

I Интегрированный пакет "TIMES"

Интегрированный пакет "TIMES", (транспортно-информационная модель для экологических систем) представляет собой визуально-прогностический пакет, позволяющий решать задачи о распространении загрязнений в воздушном бассейне с учетом ветрового поля и получать графические отображения решений.

Этот пакет является оригинальной разработкой авторов, как по применяемым адаптированным математическим моделям, так и методам решения систем уравнений, опирающихся на специально разработанные методики численного моделирования. Базовая модель этого программного комплекса – оперативная конвективно-диффузионная модель или транспортная модель [1]. Моделирование рассеяния примесей в турбулентном потоке атмосферы включает модель поля ветра, безотрывно обтекающего строения

городской застройки, малые холмы и крутые препятствия.

Метод построения поля ветра, как над местностью сложного рельефа, так и в условиях городской застройки, основывается на одной методике: задания начального приближения, задания вертикального профиля ветра с помощью степенной функции, зануления дивергенции ветра, учета влияния препятствий, итерационного сглаживания поля ветра, минимизации дивергенции ветра.

При построении начального приближения основным является правильное задание граничных условий. Начальное приближение задается на анемометрической высоте. Вертикальная компонента полагается равной 0. В ячейках разностной сетки, где расположены метеостанции, ветер задается особым образом: вектора по направлениям координатных осей направлены в центр. В остальных ячейках направление поля ветра определяется по ближайшей метеостанции, но компоненты ветра равны 0 внутри возвышений, а также равны 0 нормальные к возвышениям компоненты.

Исходными данными для математического моделирования являются данные, получаемые с метеостанций, расположенных внутри расчетной области. На метеостанциях определяются скорости анемометрического и геострофического ветра, интенсивность влажного осаждения и другие физические величины. Программная система позволяет по эмпирическим данным моделировать поле скоростей ветра и коэффициенты вертикальной и горизонтальной турбулентности. Прогноз концентрации загрязнений производится в пределах каждой ячейки сетки моделируемой области. Высота верхней границы слоя перемешивания и высоты приземного слоя оценивается на метеостанциях по совокупности эмпирических показателей, таких как диапазон скоростей ветра, углов горизонтальной флуктуации направления ветра, коэффициентов горизонтальной и вертикальной турбулентной диффузии, определяющих в целом класс атмосферной стабильности.

В блоке начальных данных задаются параметры сетки, некоторые коэффициенты в исходном уравнении переноса и граничные условия. Варьируя их, можно проследить влияние вычислительных схем на корректность получаемых результатов. Там же задаются метеопараметры: скорость ветра, количество метеостанций, температурные градиенты и параметры, необходимые при использовании прогностической модели поля ветра.

Уравнения транспортно-диффузионной модели (см., например, [2]) представляют собой уравнения параболического типа для описания нестационарных процессов, переходящие в эллиптические уравнения для стационарных процессов, и выражают массовый баланс. При постоянно действующем источнике определённой мощности устанавливается поток токсичных загрязнений, и изменение концентрации вещества не происходит.

Система параболических уравнений, описывающая математическую модель распространения загрязнений, решается методом расщепления на процессы. В данной системе выделяются следующие процессы: перенос ветром в горизонтальных плоскостях, горизонтальная турбулентная диффузия и вер-

тикальная турбулентная диффузия. Отдельные процессы описываются набором различных методов решений. Уравнение горизонтальной турбулентной диффузии – с помощью метода сопряженных градиентов, уравнение вертикальной турбулентной диффузии – с помощью метода прогонки, уравнения конвекции – с помощью сеточно-характеристического метода либо специального метода частиц. С помощью послойной записи транспортно-диффузионного уравнения осуществляется трёхмерное моделирование процессов.

При визуализации результатов обеспечивается отображение результатов расчета: поля ветра, распределения концентрации загрязняющих веществ, метеопараметров – с возможностью наложения их на географические карты при использовании программного комплекса в ГИС.

Заключение

В этой статье сделана попытка систематизации всех применяемых методов, разработанных для пакета "TIMES". Развитие этих методов можно последовательно проследить по публикациям в сборниках трудов Всероссийской школы – семинара "Современные проблемы математического моделирования" в "Абрау - Дюрсо", начиная с 2000 года и других публикациях авторов этого периода. Как и в предыдущих статьях за эти годы хочется подчеркнуть, что пакет всё время находится в процессе усовершенствования и разработке новых исполнительных модулей, так как любая конкретная реальная проблема требует своей постановки задачи. Однако есть фундаментальные решения, которые могут быть положены в основу решения многих новых прикладных проблем.

Литература

1. Белов И.В., Беспалов М.С., Клочкова Л.В., Кулешов А.А., Сузан Д.В., Тишкин В.Ф. Транспортная модель распространения газообразных примесей в атмосфере города // Математическое моделирование. 2000. Т. 12. № 11. С. 39.
2. Клочкова Л.В., Повещенко Ю. А., Тишкин В.Ф. Развитие методов математического прогнозирования качества окружающей среды на длительный период времени // Южный федеральный университет, Сборник трудов XIV Всероссийской конференции "Современные проблемы математического моделирования 2011, Новороссийск, Россия. Ростов-на-Дону: ЮФУ, 2011.

ПРИКЛАДНЫЕ АСПЕКТЫ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБЪЕКТОВ ПО АЭРОКОСМИЧЕСКИМ ИЗОБРАЖЕНИЯМ ЗЕМНОЙ ПОВЕРХНОСТИ¹

Козодеров В.В.* , Дмитриев Е.В.**

** Московский государственный университет*

им. М.В. Ломоносова, Москва

*** Институт вычислительной математики РАН, Москва*

Введение

Распознавание образов – обширный раздел прикладной математики, связанный с разработкой математических моделей, которые стремятся построить по принципу организации сетей нервных клеток живых организмов (головного мозга). Мировые корпорации занимаются такими направлениями этого раздела, как распознавание отпечатков пальцев в криминалистике, определение выражения лица людей и другими проблемами. С созданием Фонда перспективных исследований в Российской Федерации ставится задача добиться такого уровня развития машинно-обучающих алгоритмов распознавания (людей в камуфляжной форме, замаскированных технических устройств и т.п.) при обработке оптических изображений, который не уступал бы возможностям опытного специалиста-дешифровщика.

Президент Б.Обама в обращении к Конгрессу США в феврале 2013 года обозначил необходимость базовых исследований работы головного мозга приоритетным направлением: "Настало время выйти на уровень научных исследований и разработок, не виданный с момента пика космической гонки" (цитируется в переводе из сетевого издания strf.ru "Наука и технологии Российской Федерации"). В России идут по пути объединения разработок в области нано-, био-, информационных, когнитивных и даже социогуманитарных исследований (НБИКС, Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт"). Когнитивные технологии составляют основу распознавания образов (pattern recognition). Распознавание аэрокосмических изображений включает два этапа: классификация объектов по выбранным признакам и их идентификация на основе тех или иных подходов к валидации результатов обработки данных.

В наших разработках отрабатывается математический аппарат такой реализации вычислительного процесса обработки оптических изображений, который применим для нерегулярных и неупорядоченных структур [2]. Пример – одновременный анализ освещенных и затененных элементов одного и

¹Исследования проводятся при финансовой поддержке грантов РФФИ № 12-01-00009, 13-01-00185 и ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013 годы.

того же класса таких сложных объектов, как лесной покров разного породного состава и возраста. В НБИКС-технологиях к этому только приступают: при рентгеновской дифракции излучения известного источника как метода изучения соответствующих материалов исследуются упорядоченные структуры (кристаллическая решетка), но углеродные композиты, керамика, другие соединения вместо дифракции выдвигают на передний план разные типы рассеяния излучения на неупорядоченных структурах.

Современная обработка оптических изображений высокого спектрального и пространственного разрешения реализуется с помощью машинно-обучающих алгоритмов распознавания природно-техногенных объектов. Возникла даже специальная дисциплина, названная "компьютерным видением". До тех пор, пока эти изображения были невысокого пространственного разрешения, ограничивались использованием различных комбинаций измерительных каналов аэрокосмического зондирования (эти комбинации обычно называются "вегетационными индексами") [10]. Было показано, что пространственное разрешение воздействует на точность распознавания объектов намного больше, чем спектральное разрешение [9].

По мере увеличения пространственного разрешения аппаратуры аэрокосмического зондирования возникла необходимость разработки новых подходов к распознаванию объектов по текстурным признакам. Распознавание природно-техногенных объектов по спектральным признакам основывается на вычислительных процедурах разделения выбранных классов объектов в многомерном признаковом пространстве. Каждая точка этого пространства характеризует регистрируемый спектр дистанционного зондирования. Точки могут объединяться, образуя кластеры в указанном пространстве. Возможно чисто геометрическое разделение выделенных кластеров, но возможны и статистические подходы к распознаванию на основе распределений вероятности: априорных знаний об объектах и правдоподобия этих знаний и текущих распределений обрабатываемых данных [11].

Для изображений высокого пространственного разрешения требуется также контекстуальное распознавание текстур. Контекст характеризуется воздействием соседних пикселей: например, объект "лесная растительность определенного породного состава и возраста" относится к одному классу до тех пор, пока не появится граница с другим объектом. При массовой обработке "свечение" отдельных пикселей заданного класса может восприниматься как шум, учет контекста в этом случае приводит к повышению общей точности распознавания, но отдельно стоит задача обнаружения таких специфических объектов. Аналогично "всплески" в спектральном ходе отдельных пикселей (каждый спектр пикселя формируется с помощью весовых функций составных элементов соответствующих объектов – end-members) относительно окружающего фона могут использоваться для обнаружения объектов по спектральным признакам с учетом отношений "сигнал/шум" аппаратуры [8].

Основу моделей компьютерного видения составляют вычислительные процедуры оптимизации, необходимость которых возникает вследствие

неопределенностей в интерпретации получаемых данных дистанционного зондирования, обусловленных шумами аппаратуры и возможными радиометрическими, геометрическими и другими искажениями этих данных. Поэтому вместо недостижимых абсолютно точных решений задач распознавания объектов применяются процедуры компьютерной оптимизации получаемых решений [12].

Существующие подходы к распознаванию образов объектов на фото-, многоспектральных (до десятка каналов) и гиперспектральных (сотни каналов) изображениях включают следующие методы: искусственные нейронные сети, кластеризация данных в многомерном признаковом пространстве, линейный и нелинейный дискриминантный анализ, байесовский классификатор (вычислительная процедура) с обучением по тестовой выборке. Рассмотрим эти подходы.

I Процедуры обучения

Искусственные нейронные сети (ИНС) – это некоторые математические модели функционирования нервных клеток, модели можно подвергнуть обучению, что при наличии узлов (вход, выход, скрытые слои) позволяет решать задачи распознавания образов. ИНС – это система взаимодействующих между собой простых процессоров (искусственных нейронов), каждый процессор имеет дело с сигналами. С точки зрения машинного обучения ИНС представляют частный случай методов распознавания образов, дискриминантного анализа, методов кластеризации и др. Как сказано выше, распознавание образов включает процесс классификации объектов и их последующей идентификации. Дискриминантный анализ – раздел вычислительной математики, связанный со статистическими методами разделения имеющихся наборов данных на группы. Кластерный анализ – это многомерная статистическая процедура упорядочения объектов в сравнительно однородные классы (классификатор без обучения).

С математической точки зрения обучение нейронных сетей – это многопараметрическая задача нелинейной оптимизации. Возможность обучения – одно из главных преимуществ ИНС перед традиционными вычислительными алгоритмами. Обучение – это нахождение коэффициентов связи между нейронами в процессе выявления сложных зависимостей между входными и выходными данными, включая искаженные ("зашумленные") данные. Суть моделей ИНС в определении класса функций $f : X \rightarrow Y$ при наличии распределений X и Y . В реальности функция $f(x)$ определяется как комбинация функций $g_i(x)$, которые могут быть комбинациями других функций. Наиболее часто используется нелинейная сумма синаптических весов w_i , так что

$$f(x) = K \left(\sum_i w_i g_i(x) \right),$$

где K – так называемая функция активации (часто используется гиперболический тангенс). Для заданного класса функций F обучение означает использование множества наблюдений для нахождения оптимальной функции $f^* \in F$. В процедурах обучения с учителем речь идет о том, чтобы на основе множества пар прецедентов (x, y) , $x \in X$, $y \in Y$ найти функцию $f: X \rightarrow Y$ соответствия этих множеств в смысле минимизации среднеквадратической ошибки между выходной функцией сети $f(x)$ и некоторым эталонным значением y соответствующих пар прецедентов.

Несмотря на наличие успешных примеров решения ряда прикладных задач и в отличие от головного мозга, который обрабатывает сигналы посредством графа нейронов (идет параллельная обработка сигналов), технологии реализации ИНС на обычном компьютере требуют многих миллионов баз данных для соответствующих соединений, т.е. огромной оперативной и дисковой памяти. При этом технологии параллельных вычислений и машинно-обучающих алгоритмов приближают создание экспертных систем искусственного интеллекта, но для реализации ИНС затрачиваются слишком значительные вычислительные ресурсы, что составляет основу критики концепции ИНС [7]. Для практических приложений необходимы альтернативные решения возникающих задач.

Можно сделать вывод, что для решения прикладных задач обработки оптических изображений (в том числе гиперспектральных изображений) надо искать другие подходы в сравнении с ИНС. Среди них – кластеризация спектров в многомерном признаковом пространстве, дискриминантный анализ, распознавание с обучением (supervised learning). В игру вступают математические понятия множеств и меток в многомерном признаковом пространстве. Каждый спектр гиперспектрального изображения представляется точкой в этом пространстве, размерность которого равна числу спектральных каналов дистанционного зондирования. Множество точек характеризуют соответствующие пиксели гиперспектрального изображения. Часть пикселей может быть определенным образом помечена с помощью соответствующих меток, и тогда говорят о помеченной классификации объектов.

В случае двух классов объектов имеется два множества: X – множество спектров или их некоторых характеристик (признаки), Y – множество наименований объектов. Необходимо построить отображение $X \rightarrow Y$, которое каждому элементу $x \in X$ ставит в соответствие элемент $y \in Y$. В случае отсутствия априорной информации говорят о классификации без обучения: множество Y изначально не определено, элементы множества X группируются на основе предполагаемой меры близости. Итог группировки – построение множества Y . Оптимизация такой задачи состоит в поиске максимального количества минимально перекрывающихся групп (кластеров). Разбиение проводится оптимальным образом с помощью поверхности (кривой), называемой дискриминантной поверхностью.

На рис.1 приведены примеры построения дискриминантной поверхности (для двух каналов аэрокосмического зондирования $R1$, $R2$): а – линейный

дискриминант для бинарной классификации, б – линейный дискриминант для случая многих классов, в – нелинейный дискриминант для случая многих классов. Упрощенный линейный дискриминантный анализ на практике дает более низкие точности классификации объектов в сравнении, например, с квадратичным дискриминантным анализом [1]. Рассмотрим теперь более общие подходы теории видения при обработке зашумленных (искаженных) аэрокосмических изображений.

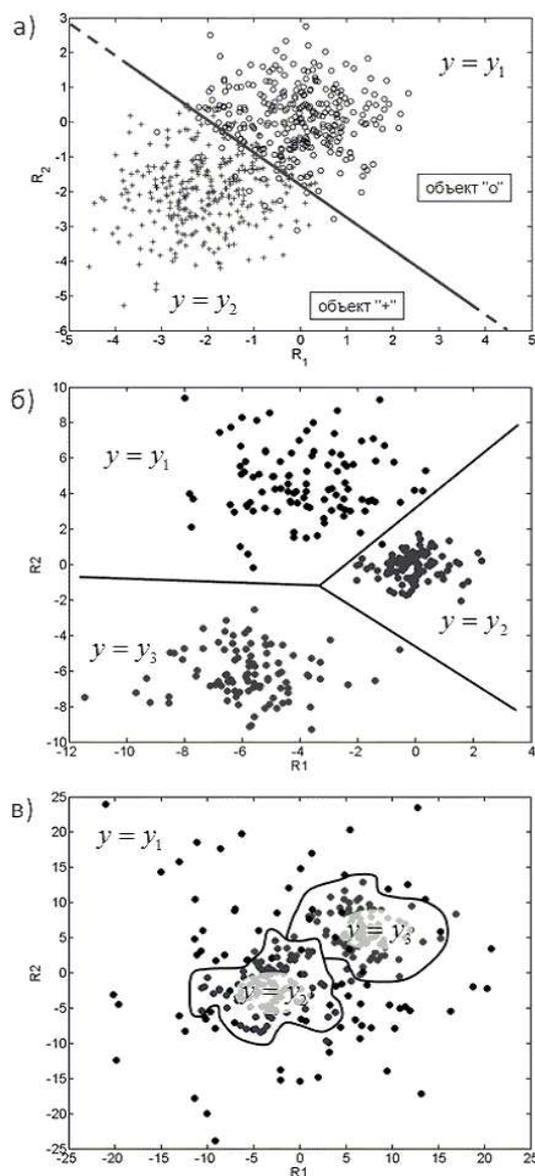


Рис. 1. Примеры построения дискриминантной поверхности (два канала R_1 , R_2): а – линейный дискриминант для бинарной классификации, б – линейный дискриминант для случая многих классов, в – нелинейный дискриминант для случая многих классов.

II Участки, метки и нерегулярные структуры

В практических приложениях распознавания текстур на аэрокосмических изображениях рассматриваются участки (sites, множество S) и метки классов (labels, множество L). Отдельная метка – это событие, которое может произойти на выбранном участке. Множество $f = \{f_1, \dots, f_m\}$ дает помеченные участки на множестве S в терминах меток на множестве L . Говорят об отображении (mapping) множества участков на множестве меток $f: S \rightarrow L$. При этом реализуются следующие примеры обработки аэрокосмических изображений:

- множество S – все пиксели изображения, множество L – непрерывные изменения меток: вычислительные процедуры реставрации всего изображения при его искажениях за счет шума и других эффектов;
- сегментация отдельных классов, т.е. реставрация только внутри выделенных контуров объектов;
- появление смыслового группирования (perceptual grouping), когда участки с сегментированными признаками (точки, линии, "регионы") нерегулярно распределены и возникает проблема соответствия (matching) этих признаков – собственно распознавание;
- участок означает заданное соответствие, а метка представляет собой допустимую трансформацию (ортогональное, аффинное или другое преобразование).

Распознавание нерегулярных структур включает рассмотрение совместных и условных распределений вероятности. Соответственно, проблема контекста при обработке изображений определяется локально в терминах условных вероятностей

$$P(f_i | \{f_{i'}\}),$$

где $\{f_{i'}\}$ означает множество меток для других пикселей $i' \neq i$. Общая вероятность $P(f)$ при независимости меток друг от друга (отсутствие контекста) выражается через произведение локальных вероятностей

$$P(f) = \prod_{i \in S} P(f_i).$$

В этом случае условная вероятность приравнивается к общей вероятности

$$P(f_i | \{f_{i'}\}) = P(f), \quad i' \neq i,$$

что означает: глобальное распределение меток можно рассчитать с помощью локальных меток.

При наличии контекста (пространственного влияния разных пикселей) метки становятся взаимно зависимыми, а теория Марковских случайных полей (МСП) обеспечивает математическую основу для решения возникающих задач.

Пара множеств участков и N соседей-пикселей для заданного класса объектов символически записывается как граф: $(S, N) \sim G$, когда множество таких участков содержит узлы (nodes) и связи (links) для соседних элементов. Для такого графа вводится условие замыкания c (clique) как подмножество участков на множестве S . Это условие может относиться к отдельному участку $c = \{i\}$, к паре соседних участков $c = \{i, i'\}$, к триплету $c = \{i, i', i''\}$ и т.д. Тип замыкания для графа (S, N) на регулярной решетке определяется его размером, формой и ориентацией. Возможна система соседств первого порядка (4 соседних пикселя), второго порядка (8 пикселей, включая диагональные, рис.2) и более высоких порядков с разными уровнями замыкания. Для нерегулярных участков система замыканий уже не будет иметь фиксированной формы.

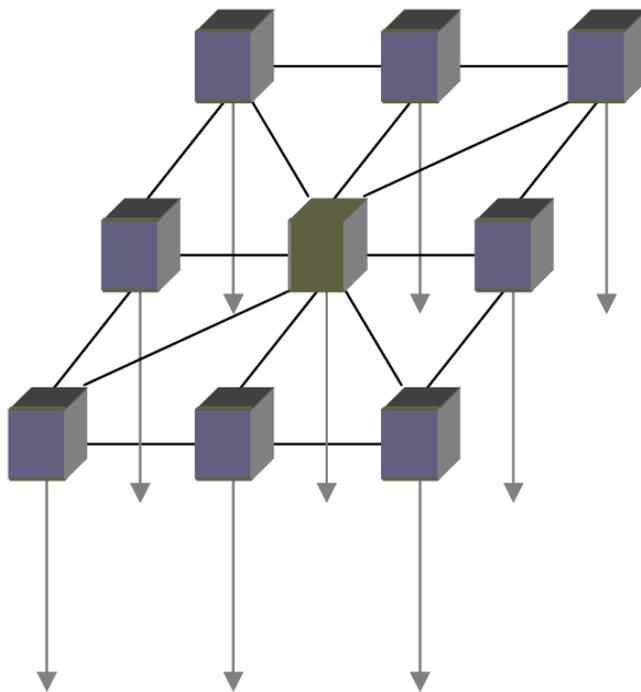


Рис. 2. Графическое отображение модели Марковских случайных полей для соседства пикселей второго порядка. Стрелки обозначают применение данного примера соседства для всех каналов обрабатываемого гиперспектрального изображения.

Все перечисленные этапы рассмотрения участков, меток, нерегулярных структур и соседства пикселей приводят к байесовскому формализму нахождения максимума апостериорной вероятности при распознавании объектов на оптических изображениях. Если i – общее число пикселей на изображении, которое может быть разбито на k классов, то через $d(x_k) \equiv d_k$ можно

обозначить яркости тех пикселей изображения, которые принадлежат k -му классу, а всё изображение для пикселей как случайных полей записать как $d = \{d_1, \dots, d_i\}$. Этому изображению можно сопоставить набор функций распределения $f = \{f_1, \dots, f_i\}$ для соответствующих классов объектов (d и f являются вектор-функциями при обработке гиперспектральных изображений). При этом неизбежны какие-то предположения относительно этих функций распределения, наиболее естественным из которых служит предположение о возможном сглаживании получаемых решений для выбранного класса объектов.

С учетом сделанных замечаний известная байесовская парадигма увязывает следующие условные вероятности:

$$P(f|d)P(d) = P(d|f)P(f).$$

Типичным для такой классификации объектов является решение, основанное на нахождении максимума апостериорной вероятности:

$$f^* = \arg \max_f [P(d|f)P(f)].$$

Условная вероятность $P(d|f)$ обычно моделируется в терминах гауссовского распределения метода максимального правдоподобия, а априорная вероятность $P(f)$ – с помощью Марковских случайных полей с учетом влияния соседних пикселей для заданных классов объектов. Представим семейство $F = \{F_1, \dots, F_m\}$ случайных переменных, определенных на множестве S ; в этом семействе каждая переменная F_i принимает значение f_i на множестве меток L . Семейство F называется случайным полем, а совместное распределение вероятности $P(F = f) = P(F_1 = f_1, \dots, F_m = f_m)$ обычно обозначается как $P(f)$. Говорят, что семейство F является Марковским случайным полем (МСП) на множестве S относительно системы соседей N , тогда и только тогда, если выполняются следующие два условия:

$$P(f) > 0 \text{ (положительность),}$$

$$P(f_i | f_{S-\{i\}}) = P(f_i | f_{N_i}) \text{ (марковость),}$$

где $S - \{i\}$ – разность множеств, $f_{S-\{i\}}$ – функция распределения этой разности множеств, а обозначение

$$f_{N_i} = \{f_{i'} | i' \in N_i\}$$

характеризует распределение множеств меток на участках, соседствующих с участком, проиндексированным как i . Обладая анизотропными свойствами, модель МСП играет важную роль в анализе текстур изображения.

В приложениях доказываем эквивалентность локальной модели МСП и глобального распределения Гиббса [5]. Вероятностное распределение Гиббса

для набора случайных переменных $f \in F$:

$$P(f) = \exp[-U(f)/T] / Z, \quad \text{где } Z = \sum_{f \in F} \exp[-U(f)/T],$$

$$U(f) = \sum_{c \in C} V_c(f), \quad Z - \text{константа нормализации,}$$

называемая также функцией разделения, T – постоянная величина (температура, здесь и далее равна 1), $U(f)$ – функция энергии, равна сумме потенциалов замыкания $V_c(f)$ на множестве C . Модель МСП позволяет определять априорные вероятности для каждого пикселя с учетом локальных соседних пикселей для заданных классов объектов. В терминах случайных полей проблема распределения меток (построения конфигураций) означает выбор пространственного распределения энергетической яркости или каких-то иных признаков, характеризующих соответствующий класс объектов. В статистической физике нахождение априорной вероятности $P(f)$ определяет вероятность появления определенной конфигурации для функции f : более вероятными конфигурациями являются те, которые имеют более низкие энергии; температура T контролирует форму соответствующих распределений – когда значения T велики, конфигурации стремятся к равномерному распределению, при $T \rightarrow 0$ распределения концентрируются вблизи глобального минимума энергии.

Введение понятия энергии обрабатываемой сцены (заданного класса объектов или определенного ландшафта на изображении) позволяет свести упомянутую выше задачу максимизации апостериорной вероятности к минимизации соответствующей функции энергии как целевой функции минимизации расхождений между регистрируемыми данными и свойствами распределений, аппроксимирующих эти данные. Рассмотрение энергии уточняет понятие классов на изображении (от однородных объектов до объектов с большим разнообразием регистрируемых яркостей), а возможное визуальное восприятия сглаживания пикселей дает основание это разнообразие для заданного класса объектов уменьшить.

Порядок n производной функции распределения $f^{(n)}(x)$ (x – пиксели для выбранных классов объектов) определяет число соседей: $n = 1$ соответствует паре участков потенциала $[f^{(n)}(x)]^2$ сглаживания и т.д.; разные порядки производной подразумевают разные классы сглаживания. Если эта функция (в нашем случае яркость объектов) постоянная для всех пикселей $f(x) = a_0$ (говорят о плоской поверхности), т.е. производная $f'(x) = 0$, то имеем дело с априорной энергией струны (в двумерном случае мембраны)

$$U(f) = \int [f'(x)]^2 dx$$

(энергия имеет равный нулю минимум для такой упрощенной модели и положительна в противном случае), в дискретном случае

$$U(f) = \sum_i [f_i - f_{i-1}]^2.$$

Возможно априорное предположение о постоянстве градиента яркостей для изображения или отдельных его сегментов

$$f(x) = a_0 + a_1x, \quad f''(x) = 0,$$

и получаем известное выражение из математического анализа для энергии стержня

$$U(f) = \int [f''(x)]^2 dx.$$

Возможно также априорное предположение о постоянстве кривизны соответствующей поверхности

$$f'''(x) = 0, \quad U(f) = \int [f'''(x)]^2 dx$$

и т.д. Порядок производной определяет число соединяемых участков (например, при $n = 1$ это пара соседних участков, хотя исходное соседство пикселей на изображении может быть первого, второго и более высоких порядков).

III Нахождение оптимальных решений

Часто рассматривают нормальную (гауссовскую) модель апостериорной энергии, когда для каждого пикселя i заданного класса объектов наблюдение есть "истина" плюс независимый гауссовский шум

$$d_i = f_i + \varepsilon_i,$$

где ε_i определяется средним значением яркости соответствующего класса и среднеквадратическим отклонением σ_i^2 . В этой модели энергия правдоподобия есть [6]

$$U(d|f) = \sum_{i=1}^m (f_i - d_i)^2 / (2\sigma_i^2),$$

а апостериорная энергия для модели плоской поверхности

$$E(f) \equiv U(f|d) = U(d|f) + U(f) = \sum_{i=1}^m (f_i - d_i)^2 / (2\sigma_i^2) + \sum_{i=1}^m (f_i - f_{i-1})^2.$$

В общем случае регуляризованное решение, которое переводит некорректно поставленную задачу (решение может быть неединственным) в корректно

поставленную задачу, получается путем минимизации энергии следующего типа:

$$E(f) = \sum_{i \in A} [f(x_i) - d(x_i)]^2 + \lambda \int_a^b [f^{(n)}(x)]^2 dx,$$

A – множество индексов выборочных данных, локализация которых дается точками x_i , множитель $\lambda \geq 0$ служит весовым фактором при рассмотрении интеграла от квадрата производной указанной функции на интервале $[a, b]$, $n \geq 1$ – порядок производной. Первое слагаемое в правой части характеризует меру близости искомого решения и исходных данных обрабатываемого изображения. Второе слагаемое – собственно регуляризатор, который накладывает априори ограничение на решение по возможному сглаживанию используемых при этом функций. Минимум функции энергии может достигаться не одновременно для этих двух слагаемых, но введение параметра регуляризации λ согласовывает используемые априорные предположения о свойствах функции распределения и функцию правдоподобия.

Выражение для апостериорной энергии в виде

$$E(f) = \sum_{i \in S} [f_i - d_i]^2 + \lambda \sum_{i \in S} \sum_{i' \in N_i} g(f_i - f_{i'}),$$

где на производную функции g накладывается ограничение

$$\lim_{\eta \rightarrow \infty} |g'(\eta)| = \text{const} < \infty,$$

приводит к прекращению сглаживания пикселей на границах объектов и маркировке этих границ.

Дальнейшее усложнение гауссовской модели

$$d_i = \varphi(f_i) + \varepsilon_i$$

и функции потенциала правдоподобия до

$$V(d_i | f_i) = [\varphi(f_i) - d_i]^2 / (2\sigma_i^2)$$

позволяет строить модели текстур и их распознавания. При этом оптимальное распознавание соответствует поиску глобального минимума целевой функции энергии.

Локальные свойства рассмотренных моделей МСП приводят к тому, что в задачах контекстуального распознавания текстур становится возможным применение параллельных вычислений на суперкомпьютерах, т.е. могут быть задействовано большое число процессоров, выполняющих параллельные вычисления.

Нахождение оптимальных решений задачи распознавания объектов на оптических изображениях высокого пространственного разрешения реализуется в два этапа:

- нахождение контуров – границ между разными классами объектов (разным классам соответствует неодинаковое число пикселей на обрабатываемом изображении);
- однотипные преобразования, допускающие распараллеливание вычислений в пределах каждого контура (класса) по минимизации энергии соответствующих сцен путем использования функций f , т.е. нахождение сглаженного решения задачи в функциональном пространстве Соболева W_n^2 . Это пространство, каждая точка в котором есть функция f , $(n - 1)$ -я производная которой $f^{(n-1)}$ абсолютно непрерывна, а n -я производная $f^{(n)}$ квадратично интегрируема.

На этих двух этапах реализуется распознавание объектов по текстурным признакам при использовании байесовского классификатора и локальных свойств МСП. Далее следует распознавание по спектральным признакам (определение более тонких нюансов свойств этих объектов; например, различение породного состава и возраста лесной растительности) с обучением по тестовой выборке.

Как упоминалось во введении, при обработке данных оптического дистанционного зондирования ставится задача довести алгоритмы распознавания до уровня соответствия результатам обработки, которые получает профессиональный специалист-дешифровщик. Привлечение данных гиперспектрального зондирования (сотни спектральных каналов в видимой и ближней инфракрасной области с разрешением в единицы нанометров) позволяет использовать дополнительную информацию о спектральном распределении отражательной способности исследуемых объектов. Использование новой информации усложняет решение задачи, поскольку требуется оптимизация используемых каналов вследствие их возможной корреляции при таком высоком спектральном разрешении в дополнение к упомянутой минимизации энергии для выбранного класса объектов при анализе пространственного распределения пикселей.

В работе [4] показаны особенности вычислительных процедур распознавания объектов с выделением наиболее информативных каналов гиперспектрального аэрозондирования выбранной тестовой территории. Информативность каналов оценивалась с помощью метода последовательного дополнения. В качестве основного подхода классификации с учителем использовался квадратичный дискриминантный анализ. В качестве параметра отбора использовалась полная вероятность ошибки многоклассовой классификации.

Процесс уменьшения полной вероятности ошибки в случае использования всех обучающих ансамблей данных гиперспектрометра для тестовой территории представлен на рис.3. Можно заметить, что уже после 6-го канала, уменьшение априорной ошибки классификации становится достаточно малым. Приблизительно при использовании 19 каналов (в зависимости от выбранного уровня значимости) добавление последующих не приводит к значимому уменьшению погрешности классификатора. Соответствующим образом

можно найти оптимальные спектральные каналы.

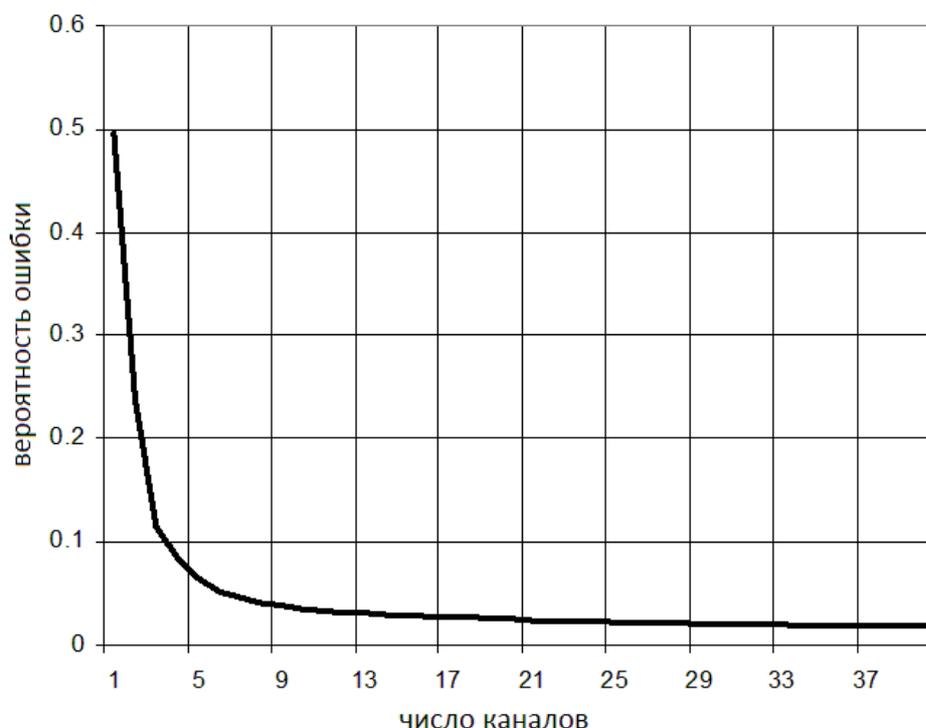


Рис. 3. Изменение полной вероятности ошибки при добавлении новых спектральных каналов.

Заключение

Прикладные аспекты распознавания природно-техногенных объектов по оптическим изображениям высокого пространственного разрешения включают реализацию различных подходов искусственного интеллекта. Использование концепции искусственных нейронных сетей может быть полезной процедурой вычислительных технологий, связанных с применением параллельных компьютеров, но требует дополнительных исследований при реализации прикладных задач распознавания природно-техногенных объектов на гиперспектральных аэрокосмических изображениях. Предлагаются усовершенствования байесовского классификатора, который позволяет повысить вычислительную эффективность методов распознавания объектов по спектральным и текстурным признакам на гиперспектральных изображениях и провести оптимизацию спектральных каналов, но требует развития новых подходов к валидации результатов распознавания при сравнении получаемой информационной продукции с данными наземных обследований, часто нуждающихся в обновлении.

Литература

1. *Дмитриев Е.В.* Классификация лесного покрова Тверской области на основе гиперспектральных аэроизображений // Исследование Земли из космоса. 2013. N 3. С. 22–32.
2. *Козодеров В.В.* Применение данных оптического дистанционного зондирования для изучения природно-климатических процессов // Климат и природа. 2012. N 2(3), С. 3–16.
3. *Козодеров В.В., Дмитриев Е.В.* Аэрокосмическое зондирование почвенно-растительного покрова: модели, алгоритмическое и программное обеспечение, наземная валидация // Исследование Земли из космоса. 2010. N 1. С. 69–86.
4. *Козодеров В.В., Дмитриев Е.В.* Дистанционное зондирование лесного покрова: инновационный подход // Вестник Московского государственного университета леса – Лесной Вестник. 2012. N 1(84). С. 19–33.
5. *Besag J., Green P.J.* Spatial statistics and bayesian computation // Journal of the Royal Statistical Society. Series B. 1993. N 55(1). P. 25–37.
6. *Cross G.C., Jain A.K.* Markov random field texture models // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 1983. N 5(1). P. 25–39.
7. *Dewdney A.K.* A Mathematical Mystery Tour: Discovering the Truth and Beauty of the Cosmos. New York: Wiley, 2001. 388 p.
8. *Foody G.M.* Thematic map comparison: evaluating the statistical significance of differences in classification accuracy // Photogrammetric Engineering and Remote Sensing. 2004. Vol. 70. N 5. P. 627–633.
9. *Jimenez L., Landgrebe D.* Supervised Classification in High Dimensional Space: Geometrical, Statistical, and Asymptotical Properties of Multivariate Data // IEEE Transactions on System, Man, and Cybernetics. 1998. Vol. 28. N 1. P.39–54.
10. *Kozoderov V.V., Dmitriev E.V.* Remote sensing of soils and vegetation: regional aspects // International Journal of Remote Sensing. 2008. Vol. 29. N 9. P. 2733–2748.
11. *Kozoderov V.V., Dmitriev E.V.* Remote sensing of soils and vegetation: pattern recognition and forest stand structure assessment // International Journal of Remote Sensing. 2011. Vol. 32. N 20. P. 5699–5717.
12. *Li S.Z.* Markov random field modeling in computer vision. New York-Berlin-Heidelberg-Tokyo: Springer-Verlag, 1995. 350 p.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХМЕРНЫХ ТЕЧЕНИЙ СХЕМОЙ КАБАРЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ СЛАБОЙ СЖИМАЕМОСТИ

Кондаков В.Г.

Институт проблем Безопасного Развития Атомной Энергетики РАН, Москва

Введение

Рассматривается трехмерная система уравнений Навье-Стокса для конвекции, тепло- и массообмена в приближении Буссинеска. Среду будем считать слабо сжимаемой, удовлетворяющей уравнению состояния $p = (\rho - \rho_0)c^2$. На серии тестовых задач будет проведена верификация и валидация предложенной методики. В качестве примеров будут рассмотрены задачи о свободной конвекции в замкнутой области, конвекция Рэлея-Бенара и задача течения за обратным уступом.

I Схема Кабаре

Методика построения схемы Кабаре подразумевает составление двух систем уравнений: дивергентную систему уравнений для расчета консервативных переменных и систему характеристических уравнений для вычисления т.н. потоковых переменных. Из исходных уравнений составляется линеаризованная система уравнений относительно первых производных от переменных компонент скорости, температуры и давления. Для приведенной к матричному виду системе линеаризованных уравнений производится поиск собственных значений и левых собственных векторов. В силу гиперболичности системы матрица составленная из строк, являющихся транспанированными собственными левыми собственными векторами, будет матрицей перехода к системе характеристических уравнений. Таким образом для рассматриваемой системы уравнений мы нашли выражения для т.н. квазиинвариантов Римана. Система характеристических уравнений представляет собой 5 уравнений переноса, где в качестве переносимой величины выступают квазиинварианты Римана, при этом скорость переноса будет равна характеристическим числам (собственным значениям линеаризованной матрицы). Учитывая все вышеизложенное напишем системы уравнений для данной постановки:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial z} = \mathbf{Q}$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ T \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ uT \end{pmatrix}, \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ vT \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ wT \end{pmatrix}, \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mu \Delta u - \rho \beta g_x (T - T_0) \\ \mu \Delta v - \rho \beta g_y (T - T_0) \\ \mu \Delta w - \rho \beta g_z (T - T_0) \\ \chi \Delta T \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где ρ – плотность, (u, v, w) – скорость, p – давление, T – температура, T_0 – равновесная температура, β – температурный коэффициент расширения, μ – динамическая вязкость, (g_x, g_y, g_z) – вектор силы тяжести (ускорение свободного падения), χ – коэффициент температуропроводности.

Система характеристических уравнений в направлении оси x записывается в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(u - \frac{p}{\rho c} \right) + (u - c) \frac{\partial}{\partial x} \left(u - \frac{p}{\rho c} \right) &= f_1 \\ \frac{\partial}{\partial t} v + u \frac{\partial}{\partial x} v &= f_2 \\ \frac{\partial}{\partial t} w + u \frac{\partial}{\partial x} w &= f_3 \\ \frac{\partial}{\partial t} T + u \frac{\partial}{\partial x} T &= f_4 \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(u + \frac{p}{\rho c} \right) + (u + c) \frac{\partial}{\partial x} \left(u + \frac{p}{\rho c} \right) &= f_5 \end{aligned} \quad (2)$$

где f_1, f_2, f_3, f_4, f_5 – правые части не зависящие от частных производных по направлению оси x , которые являются комбинацией из частных производных по оставшимся направлениям (y, z). Аппроксимация системы характеристических уравнений по трем направлениям приводит к следующим матричным уравнениям:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{Inv}_x + \Lambda_{x_{i+1/2, j+1/2}}^{n+1/2} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{Inv}_x &= \mathbf{g}_x, \\ \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{Inv}_y + \Lambda_{y_{i+1/2, j+1/2}}^{n+1/2} \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{Inv}_y &= \mathbf{g}_y, \\ \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{Inv}_z + \Lambda_{z_{i+1/2, j+1/2}}^{n+1/2} \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{Inv}_z &= \mathbf{g}_z, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\Lambda_{x_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}}^{n+1/2} = \text{diag}(U - c, U, U, U, U + c)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^{n+1/2}$, $\Lambda_{y_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}}^{n+1/2} = \text{diag}(V - c, V, V, V, V + c)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^{n+1/2}$, $\Lambda_{z_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}}^{n+1/2} = \text{diag}(W - c, W, W, W, W + c)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^{n+1/2}$ – дискретные аналоги матриц преобразования на полуслое по времени в ячейке с индексами $i + 1/2, j + 1/2, k + 1/2$, и вектора имеют вид:

$$\mathbf{Inv}_x = \begin{pmatrix} u - \frac{p}{\rho_0 c} \\ v \\ w \\ T \\ u + \frac{p}{\rho_0 c} \end{pmatrix}, \mathbf{Inv}_y = \begin{pmatrix} v - \frac{p}{\rho_0 c} \\ u \\ w \\ T \\ v + \frac{p}{\rho_0 c} \end{pmatrix}, \mathbf{Inv}_z = \begin{pmatrix} w - \frac{p}{\rho_0 c} \\ u \\ v \\ T \\ w + \frac{p}{\rho_0 c} \end{pmatrix}$$

Схема Кабаре может быть представлена четырьмя этапами: первый этап вычисляет консервативные переменные на полушаге по времени; второй этап делает поправку в консервативные переменные, связанные учетом правых частей системы дивергентных уравнений; третий этап рассчитывает потоковые переменные на новом временном слое; четвертый заключительный этап вычисляет консервативные переменные на новом временном слое. Ниже приведена конечно-разностная схема КАБАРЕ в общем виде:

$$\frac{\mathbf{U}_C^{n+1} - \mathbf{U}_C^n}{\tau} + \frac{\tilde{\mathbf{F}}_R - \tilde{\mathbf{F}}_L}{x_{i+1} - x_i} + \frac{\tilde{\mathbf{G}}_T - \tilde{\mathbf{G}}_B}{y_{j+1} - y_j} + \frac{\tilde{\mathbf{H}}_F - \tilde{\mathbf{H}}_N}{z_{k+1} - z_k} = \mathbf{Q}_C^{n+1/2} \quad (4)$$

где через знак тильды означает $\tilde{\eta} \equiv \frac{\eta^{n+1} + \eta^n}{2}$ – полусумму переменных с двух временных слоев, а нижние индексы векторов соответствуют точкам из вычислительного шаблона:

$$\begin{aligned} f_C &= f_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}, \\ f_R &= f_{i+1, j+1/2, k+1/2}, f_L = f_{i, j+1/2, k+1/2}, \\ f_T &= f_{i+1/2, j+1, k+1/2}, f_B = f_{i+1/2, j, k+1/2}, \\ f_F &= f_{i+1/2, j+1/2, k+1}, f_N = f_{i+1/2, j+1/2, k}. \end{aligned}$$

Полученная разностная схема (4) является, вообще говоря, неявной. Для того чтобы разрешить эту систему, применим метод предиктор-корректора: первый шаг-предиктор вычисляет консервативные переменные на промежуточном временном слое, второй шаг-корректор находит консервативные переменные на новом временном слое. Для осуществления шага-корректора нам необходимо знать значения потоковых переменных на новом временном слое, эту процедуру будем проводить с помощью линейной экстраполяции квазиинвариантов в ячейке в ту сторону куда указывают характеристические числа. Помимо этого необходимо проводить аппроксимацию правой части на полушаге по времени и учитывать вклад правой части системы (1) после шага-предиктора. В итоге разностная схема КАБАРЕ может быть разбита на четыре этапа:

Этап 1. Шаг-предиктор.

$$\frac{\tilde{\mathbf{U}}_C^{n+1/2} - \mathbf{U}_C^n}{\tau/2} + \frac{\mathbf{F}_R^n - \mathbf{F}_L^n}{x_{i+1} - x_i} + \frac{\mathbf{G}_T^n - \mathbf{G}_B^n}{y_{j+1} - y_j} + \frac{\mathbf{H}_F^n - \mathbf{H}_N^n}{z_{k+1} - z_k} = 0 \quad (5)$$

Этап 2. Учет вязкости и теплопроводности.

$$\frac{\mathbf{U}_C^{n+1/2} - \tilde{\mathbf{U}}_C^{n+1/2}}{\tau} = \mathbf{Q}_C^{n+1/2} \quad (6)$$

Этап 3. Линейная экстраполяция квазиинвариантов.

$$\begin{aligned} \mathbf{Inv}_{xL}^{n+1} &= 2\mathbf{Inv}_{xC}^{n+1/2} - \mathbf{Inv}_{xR}^n, & \mathbf{Inv}_{xR}^{n+1} &= 2\mathbf{Inv}_{xC}^{n+1/2} - \mathbf{Inv}_{xL}^n, \\ \mathbf{Inv}_{yB}^{n+1} &= 2\mathbf{Inv}_{yC}^{n+1/2} - \mathbf{Inv}_{yT}^n, & \mathbf{Inv}_{yT}^{n+1} &= 2\mathbf{Inv}_{yC}^{n+1/2} - \mathbf{Inv}_{yB}^n, \\ \mathbf{Inv}_{zN}^{n+1} &= 2\mathbf{Inv}_{zC}^{n+1/2} - \mathbf{Inv}_{zF}^n, & \mathbf{Inv}_{zF}^{n+1} &= 2\mathbf{Inv}_{zC}^{n+1/2} - \mathbf{Inv}_{zN}^n. \end{aligned} \quad (7)$$

Далее в зависимости от знаков характеристических чисел $\lambda_x = (U - c, U, U + c)^T$, $\lambda_y = (V - c, V, V + c)^T$, $\lambda_z = (W - c, W, W + c)^T$ составим уравнения на потоковые переменные. Остается вопрос как определить характеристические числа до вычислений. Ответом на вопрос станут следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \lambda_{x_{i,j+1/2,k+1/2}}^{n+1} &\approx \left(\lambda_{x_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}}^{n+1/2} + \lambda_{x_{i-1/2,j+1/2,k+1/2}}^{n+1/2} \right) / 2, \\ \lambda_{y_{i+1/2,j,k+1/2}}^{n+1} &\approx \left(\lambda_{y_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}}^{n+1/2} + \lambda_{y_{i+1/2,j-1/2,k+1/2}}^{n+1/2} \right) / 2, \\ \lambda_{z_{i+1/2,j+1/2,k}}^{n+1} &\approx \left(\lambda_{z_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}}^{n+1/2} + \lambda_{z_{i+1/2,j+1/2,k-1/2}}^{n+1/2} \right) / 2. \end{aligned}$$

Допустим теперь, что $\left(\lambda_{x_{i,j+1/2,k+1/2}}^{n+1} \right)_2 < 0$ тогда получим следующую систему уравнений:

$$\begin{pmatrix} u - \frac{p}{\rho_0 c} \\ v \\ w \\ T \\ u + \frac{p}{\rho_0 c} \end{pmatrix}_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{Inv}_{xL}^{n+1} 1 \\ \mathbf{Inv}_{xL}^{n+1} 2 \\ \mathbf{Inv}_{xL}^{n+1} 3 \\ \mathbf{Inv}_{xL}^{n+1} 4 \\ \mathbf{Inv}_{xR}^{n+1} 5 \end{pmatrix}$$

Рассмотрим противоположный случай, когда $\left(\lambda_{x_{i,j+1/2,k+1/2}}^{n+1} \right)_2 \geq 0$:

$$\begin{pmatrix} u - \frac{p}{\rho_0 c} \\ v \\ w \\ T \\ u + \frac{p}{\rho_0 c} \end{pmatrix}_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{Inv}_{xR}^{n+1} 1 \\ \mathbf{Inv}_{xR}^{n+1} 2 \\ \mathbf{Inv}_{xR}^{n+1} 3 \\ \mathbf{Inv}_{xR}^{n+1} 4 \\ \mathbf{Inv}_{xR}^{n+1} 5 \end{pmatrix}$$

Этап 4. Шаг-корректор.

$$\frac{U_C^{n+1} - U_C^{n+1/2}}{\tau/2} + \frac{F_R^{n+1} - F_L^{n+1}}{x_{i+1} - x_i} + \frac{G_T^{n+1} - G_B^{n+1}}{y_{j+1} - y_j} + \frac{H_F^{n+1} - H_N^{n+1}}{z_{k+1} - z_k} = 0 \quad (8)$$

II Тестовые расчеты

II.1 Трехмерный турбулентный тест Ergoftag

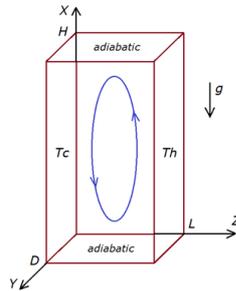


Рис. 1. Тепловая конвекция в трехмерной области

Для исследования естественной конвекции воздуха в вытянутой прямоугольной области был проведен следующий эксперимент [1], [2]. Область в форме параллелепипеда со сторонами $H = 2.18$ м, $W = 0.076$ м и $D = 0.52$ м заполнена воздухом при нормальном давлении. Разность температур между левой и правой вертикальными стенками поддерживается постоянной и составляет 19.6° и 39.9° (два варианта). Остальные стенки – адиабатически изолированы.

Стенки параллелепипеда непроницаемы, скорость теплоносителя на границах области равна нулю (условие прилипания).

В расчетах приняты следующие параметры:

Кинематическая вязкость: $0.151 \times 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$;

Число Pr: 0.71;

Температуропроводность: $0.2127 \times 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$;

Коэффициент темп. лин. расширения: $0.3272 \times 10^{-2} 1/\text{К}$;

Ускорение свободного падения: $9.81 \text{ м}/\text{с}^2$.

Таким образом, эксперимент проведен при двух различных числах Рэлея: 0.86×10^6 и 1.43×10^6 (Число Рэлея рассчитано по ширине области).

Помимо средних характеристик теплоотдачи в эксперименте были измерены пульсации температуры в трех контрольных точках. Места, в которых размещены датчики, измеряющие пульсации температуры, находятся на середине высоты области, между адиабатическими вертикальными стенками, на расстоянии 0.005, 0.0381 и 0.0712 м от холодной стенки. Значения температур с датчиков считывались с временным интервалом 0.015674 с.

При данных параметрах в эксперименте течение газа между пластинами было полностью турбулентным. Экспериментально получены следующие средние числа Нуссельта: 5.85 – для течения с $Ra = 0.86 \times 10^6$, 7.57 – для течения с $Ra = 1.43 \times 10^6$.

Данная тестовая задача была также решена численно как с помощью стандартной $\kappa - \epsilon$ модели, так и с помощью ее модификаций в работе [3]. Кроме того, имеются результаты более ранних экспериментов в очень похожей экспериментальной установке [4].

При расчетах по схеме КАБАРЕ использовался параллельный алгоритм на

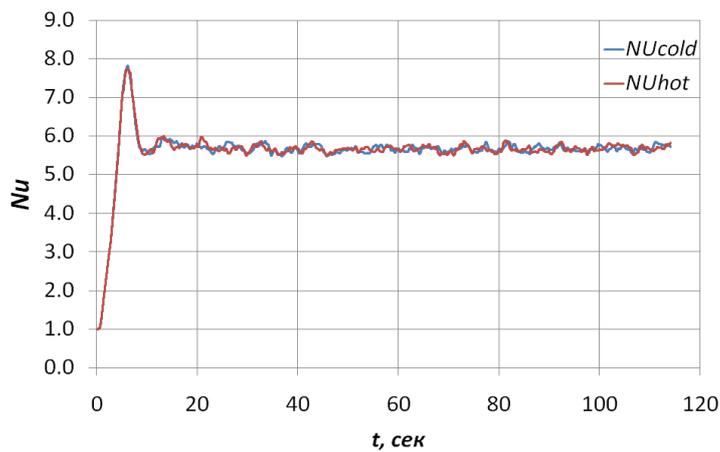


Рис. 2. Зависимость среднего числа Нуссельта для горячей и холодной стенок от времени

сетке $800 \times 100 \times 100$ ячеек. Расчет производился в каждой из подобластей отдельным процессором независимо, граничные условия при этом выбирались исходя из условий сшивки. Каждый шаг по времени между процессорами по необходимости выполнялся обмен данными на границах подобластей. Все полученные и найденные в упомянутых выше работах средние числа Нуссельта сведены в таблице 1.

Таблица 1. Средние числа Нуссельта, полученные с помощью различных экспериментальных и вычислительных методик.

Ra	Эксп. [1]	Эксп. [4]	$\kappa - \epsilon$	$\kappa - \epsilon$ модель +Yap correction	$\kappa - \epsilon$ +Yap +GGDH	КАБАРЕ сетка $800 \times 100 \times 100$
0.86×10^6	5.85	4.9	6.53	4.66	4.74	5.75 (2%)
1.43×10^6	7.57					6.9 (9%)

II.2 Обтекание обратного уступа

Задача течения за обратным уступом привлекает внимание исследователей тем, что при довольно простой геометрии области течение может оказаться

настолько сложным, что простых моделей будет не достаточно для описания. Первые шаги по изучению турбулентного течения за обратным уступом были сделаны в работе Armaly [5], где исследовалась зависимость характеристик течения от числа Рейнольдса. В этой работе был показан сложный характер перехода течения из ламинарного в турбулентный режим, и как он влияет на размеры зоны рециркуляции за уступом. Было выдвинуто предположение, что при числах Рейнольдса больших $Re > 400$ модель квазидвумерного течения уже не корректно описывает течение, так как зона рециркуляции в расчетах оказывается намного меньше наблюдаемых величин. Входная часть расчетной области ($L_{in} = 10h$) была выбрана из соображений, что за 10 размеров высот ступеньки входной поток турбулизируется. Проточная часть ($L_x - L_{in} = 20h$) имеет длину 20 высот ступеньки, чтобы была возможность охватить весь диапазон возможных значений длины присоединения. А размеры вдоль осей y, z брались равными $2h$. Размеры области и параметры течений использованные для расчетов приведены в таблице 2

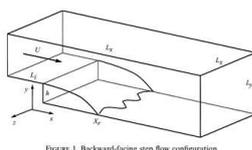


FIGURE 1. Backward-facing step flow configuration.

Рис. 3. Расчетная область для задачи обтекания обратного уступа

Таблица 2. Размеры и деления сеточной области для различных режимов течения.

	U	ν	L_x	L_y	L_z	N_x	N_y	N_z
1	100	0.067	30	2	2	961	65	65
2	100	0.027	30	2	2	961	65	65
3	100	0.067	30	2	2	1921	129	129

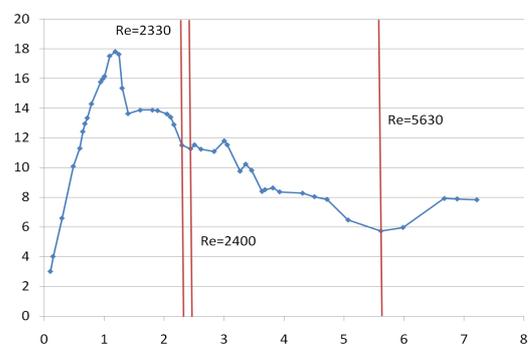


Рис. 4. Зависимость длины присоединения потока от числа Рейнольдса [5]. Красными линиями указаны точки, в которых были произведены расчеты

Таблица 3. Результаты измерения длины присоединения

	$U_{max, x = 7h}$	Re	X_r [5]	X_r CABARET	$\epsilon\%$
1	117	2330	11.5	8.3	28
2	114	5630	5.74	6.2	8
3	121	2400	11.24	8.65	23

Как видно из расчетов 1 и 3 измельчение сетки в двое приближает длину присоединения к экспериментальным данным. Но отличие от табличных данных все же остается существенным. Последнее можно объяснить тем, что число Рейнольдса $Re = 2400$ лежит в интервале переходной области из ламинарного в турбулентное. Следовательно течение является существенно нестационарным, и предположение о квазипериодичности течения тут не применимо (вычисление длины присоединения из осредненного поля скорости). Как только мы выставили турбулентное число Рейнольдса $Re = 5630$ величина длины присоединения легла в доверительный интервал экспериментальной точки и относительное отклонение составило всего 8%.

Заключение

В данной работе представлена явная конечно-разностная схема КАБАРЕ для системы уравнений Навье-Стокса и уравнения теплопроводности. Для проверки эффективности предложенной схемы были выбраны два теста: задача естественной конвекции и задача обтекания обратного уступа. Для каждой из задач получены удовлетворительные результаты.

Литература

1. *Betts, P.L. and I.H. Bokhari* Experiments on turbulent natural convection in an enclosed tall cavity. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2000. 21: p. 675-683.
2. *Bokhari, I.H.* Turbulent Natural Convection in a Tall Cavity, 1996, University of Manchester Institute of Science and Technology (UMIST).
3. *Ince, N.Z. and B.E. Launder*, On the computation of buoyancy-driven turbulent flows in rectangular enclosures. International Journal of Heat and Fluid Flow, 1989. 10:2: p. 110-117.
4. *Betts, P.L. and A.A. Dafa'Alla* Turbulent buoyant air flow in a tall rectangular cavity. in ASME Annual Winter Meeting. 1986.
5. *B.F. Armaly et al.* Experimental and theoretical investigation of backward-facing step flow, J.Fluid Mech.(1983), vol.127, pp.473-496.

АНАЛИЗ СОСУЩЕСТВОВАНИЯ КОНКУРИРУЮЩИХ ПОПУЛЯЦИЙ НА ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНОМ КОЛЬЦЕВОМ АРЕАЛЕ

Кругликов М. Г.

*Институт проблем Безопасного Развития Атомной
Энергетики РАН, Москва*

Введение

В последнее время большой интерес вызывает моделирование популяций в условиях пространственно-временной неоднородности среды [1–3]. Для описания экосистем, допускающих сосуществование родственных видов на одном ареале, в работах [4–6] были построены модели со свойством косимметрии [7].

В настоящей работе анализируется распределение двух популяций на кольцевом ареале в условиях переменных по пространству коэффициентов роста и функции ресурса [6]. Рассматривается система параболических уравнений с нелинейностью логистического типа и условиями периодичности. В численном эксперименте проанализировано формирование стационарных распределений плотностей популяций. В зависимости от значений параметров реализуются следующие сценарии: выживание одной из популяций или сосуществование популяций. При выполнении условий косимметрии имеется возможность формирования сосуществующих популяций, плотности которых определяются начальными распределениями.

I Математическая модель

Рассматривается математическая модель в виде системы нелинейных уравнений параболического типа, описывающая изменение плотностей распределения популяций $w_i = w_i(x, t)$, $i = 1, \dots, M$:

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} = -\frac{\partial q_i}{\partial x} + \eta_i w_i f, \quad q_i = -k_i \frac{\partial w_i}{\partial x}, \quad f = 1 - \frac{1}{P^m} \sum_{j=1}^M w_j^m. \quad (1)$$

Коэффициенты диффузии k_i , роста η_i и функция ресурса P являются положительными функциями пространственной переменной x . Функция f описывает уменьшение прироста при приближении плотностей популяций к предельным значениям, случай $m = 1$ отвечает логистическому закону.

Уравнения (1) рассматриваются в кольцевой области $x \in [0, a]$, условия периодичности имеют вид:

$$w_i(0, t) = w_i(a, t), \quad k_i(0) \frac{\partial w_i(0, t)}{\partial x} = k_i(a) \frac{\partial w_i(a, t)}{\partial x}, \quad i = 1, \dots, M. \quad (2)$$

В начальный момент времени заданы распределения популяций:

$$w_i|_{t=0} = w_{i0}(x), \quad i = 1, \dots, M. \quad (3)$$

Для интегрирования системы (1)–(2) применяется метод прямых с аппроксимацией уравнений на равномерной сетке. На отрезке $[0, a]$ в узлах $x_k = hk, k = 0, \dots, n$ с шагом $h = a/n$ определяются переменные $w_{i,k}, i = 1, \dots, M$.

Производные аппроксимируются разностными операторами на трехточечном шаблоне. Дискретный аналог уравнений (1)–(2) записывается в виде $M \times n$ обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\dot{w}_{i,k} = k_i \frac{w_{i,k-1} - 2w_{i,k} + w_{i,k+1}}{h^2} + \eta_i(x_k) w_{i,k} f_k, \quad i = 1, \dots, M. \quad (4)$$

$$f_k = 1 - \frac{1}{P^m(x_k)} \sum_{s=1}^M w_{s,k}^m, \quad k = 1, \dots, n.$$

$$w_{i,n+1} = w_{i,1}, \quad w_{i,0} = w_{i,n}.$$

Для вектора узловых переменных $Y = (w_{1,1}, w_{1,2}, \dots, w_{2,1}, \dots, w_{M,n})$ система (4) записывается в виде:

$$\dot{Y} = AY + F(Y) \equiv \Phi(Y). \quad (5)$$

Диагональная матрица $A = \text{diag}(k_1 \hat{A}, \dots, k_M \hat{A})$ отвечает диффузионной части задачи, \hat{A} – трехдиагональная матрица, соответствующая оператору Лапласа на кольцевом интервале. Система (5) дополняется дискретным аналогом начальных условий (2). Компоненты вектора $F(Y) = (F_1, F_2, \dots, F_{M \times n})$ даются формулами:

$$F_j = \eta_i Y_j f_k, \quad j = n(i - 1) + k, \quad i = 1, \dots, M, \quad k = 1, \dots, n \quad (6)$$

Для интегрирования по времени t системы (4) применяется метод Рунге-Кутты четвертого порядка.

II Анализ распределения двух конкурирующих популяций

Далее рассматривается $M = 2$. В этом случае возможно появление непрерывных семейств стационарных распределений популяций [6]. При соотношении коэффициентов $k_2 \eta_1 = k_1 \eta_2$ косимметрией системы является вектор $L = (k_2 w_2, -k_1 w_1)$.

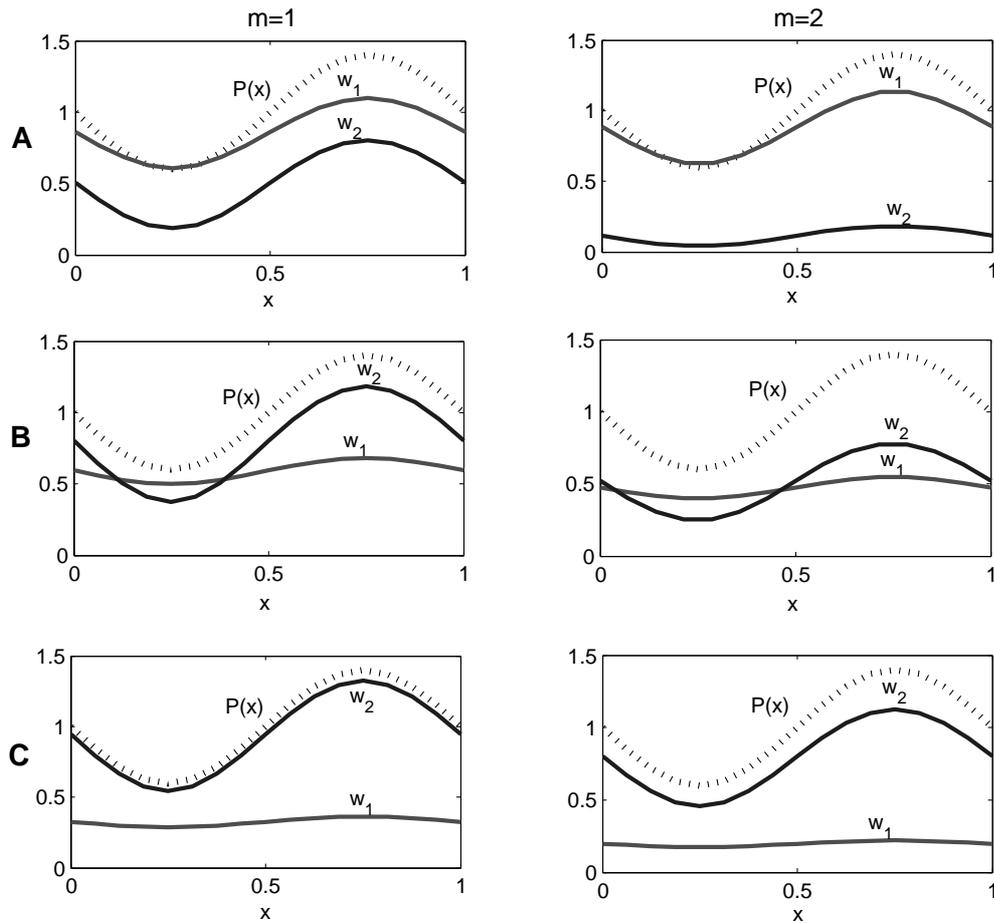


Рис. 1. Стационарные распределения популяций $w_1(x, t)$, $w_2(x, t)$ при $m = 1$ и $m = 2$ для значений параметров, соответствующих сосуществованию популяций: А — $\eta_1 = 3$, $\eta_{21} = 6$; В — $\eta_1 = 2$, $\eta_{21} = 6$; С — $\eta_1 = 2$, $\eta_{21} = 5$.

Ниже представлены результаты расчетов, в которых анализировалось влияние переменного коэффициента роста $\eta_2 = \eta_{20} + \eta_{21} \sin(2\pi x/a)$ на распределение популяций при постоянном коэффициенте роста η_1 . Расчеты производились при следующих значениях параметров: $k_1 = 0.02$, $k_2 = 0.04$, $m = 1$ и $m = 2$, функции обобщенного ресурса $P(x) = 1 - \mu \sin(2\pi x/a)$, $\mu = 0.4$. Значение $\eta_{20} = 16$ было фиксированным, в расчетах менялись параметры η_1 и η_{21} . Система обладает косимметрией при $\eta_1 = 8$, $\eta_{21} = 0$.

В расчетах получено, что при зависимом от x параметре роста $\eta_2(x)$ сосуществование популяций наблюдается не только в случае косимметрии, но и при других комбинациях параметров.

На рис. 1 представлены профили финальных распределений популяций $w_1(x, t)$, $w_2(x, t)$ для значений параметров, при которых наблюдается сосуществование популяций. Графики В, С построены при одном значении η_1 . Видно, что уровень плотности популяции $w_1(x, t)$ снижается при уменьшении η_{21} , а плотность $w_2(x, t)$ растет. С уменьшением параметра модуляции η_{21} плотность популяции $w_2(x, t)$ снижается. Графики А, В отвечают одина-

ковому значению η_{21} . С ростом η_1 происходит увеличение плотности популяции $w_1(x, t)$. При $m = 1$ профили плотностей распределений имеют более выраженную пространственную неравномерность. Видно, что распределение $w_2(x, t)$ повторяет график $P(x)$, а $w_1(x, t)$ слабо меняется по ареалу. При фиксированном параметре η_1 и меняющейся модуляции η_{21} возможны разные варианты заполнения ареала популяциями: от преимущественного присутствия одной до близких уровней, различающихся амплитудой модуляции.

На рис. 2 приведены распределения популяций с функцией ресурса $P(x) = 1 - \mu \sin(4\pi x/a)$, $\mu = 0.4$, отвечающей случаю двух благоприятных для роста зон. Расчеты производились при следующих значениях парамет-

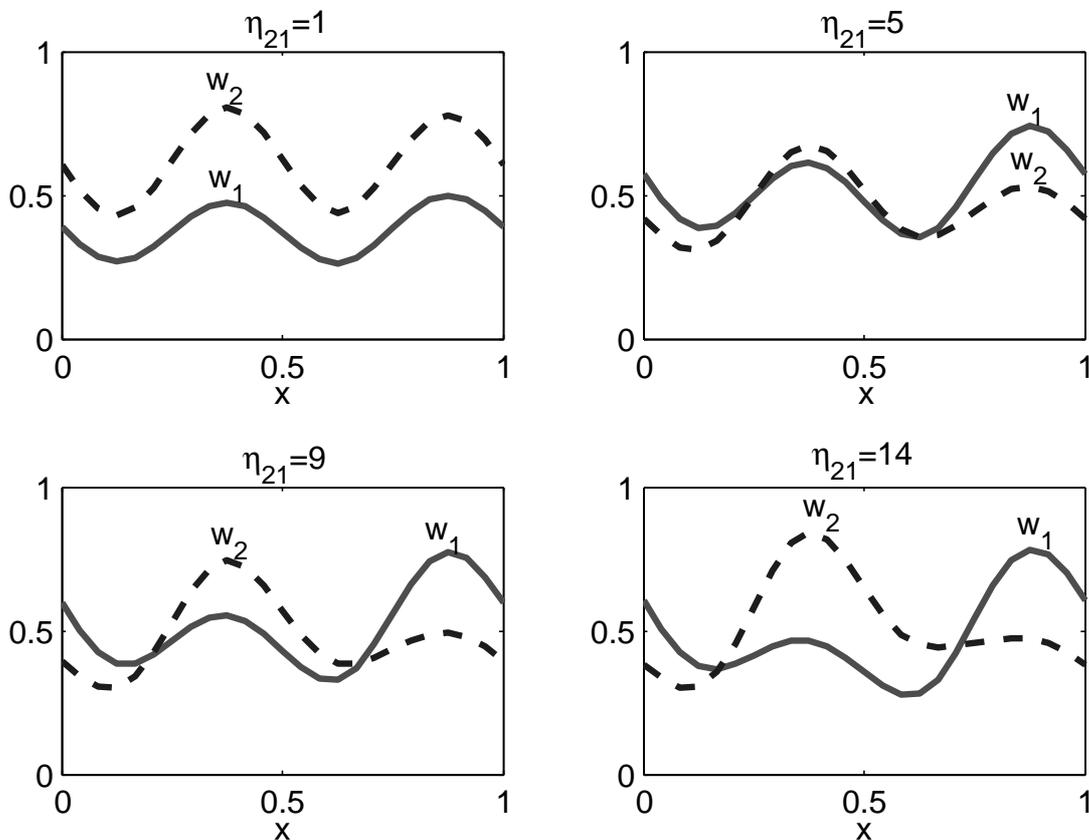


Рис. 2. Стационарные распределения по x популяций $w_1(x, t)$, $w_2(x, t)$ для значений параметра $\eta_{21} = 1, 5, 9, 14$, $\eta_1 = 8$, $\eta_{20} = 16$.

ров: $k_1 = 0.02$, $k_2 = 0.04$, $m = 1$. Рассматривались различные значения параметра $\eta_{21} = 1, 5, 9, 14$. Из графиков распределения популяций $w_1(x, t)$, $w_2(x, t)$ видно, что чем выше неравномерности роста (параметр η_{21}), тем более выражено расселение популяций по разным благоприятным областям на ареале.

Литература

1. *Gejji R., Lou Y., Munther D., Peyton J.* Evolutionary Convergence to Ideal Free Dispersal Strategies and Coexistence // *Bull Math Biol*, 2012. Vol. 74. P. 257–299
2. *Cantrell R. S., Cosner C., Lou Y., Xie C.* Random dispersal versus fitness-dependent dispersal // *J. Diff. Eq.*, 2013. Vol. 254. P. 2905–2941.
3. *Murray J. D.* *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications.* — Springer, New York: 2003. 811 p.
4. *Ковалева Е.С., Цибулин В.Г., Фришмут К.* Семейство стационарных режимов в модели динамики популяций // *Сиб. журн. индустр. математики*. 2009. Т. XII. № 1(37). С. 98–107.
5. *Будянский А.В., Цибулин В.Г.* Моделирование пространственно-временной миграции близкородственных популяций // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2011, Т. 3., № 4., С. 477–488.
6. *Кругликов М.Г., Цибулин В.Г.* Тр. XVI междунар. конф. «Современные проблемы механики сплошной среды» // *Изд-во ЮФУ*, 2012, Т. 2., С. 119–123.
7. *Юдович В.И.* Косимметрия, вырождение решений операторных уравнений, возникновение фильтрационной конвекции // *Математические заметки*. 1991, Т. 49. Вып. 5. С. 142–148.

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ ЛОКАЛИЗАЦИИ СПЕКТРА ПРОИЗВЕДЕНИЯ ДВУХ НЕСАМОСОПРЯЖЕННЫХ МАТРИЦ¹

Крукиер Л.А., Крукиер Б.Л.

*Южно-Российский региональный центр информатизации
ЮФУ, Ростов-на-Дону*

Предлагается для локализации спектра произведения двух несамосопряженных матриц использовать понятие числовой области матрицы. Получены формулы, связывающие числовые области исходных матриц, и собственные числа матрицы произведения. Показано, что данную методику можно эффективно применять при исследовании сходимости переобусловленных итерационных методов.

Введение

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

$$Ax = f. \quad (1)$$

Одним из эффективных методов решения таких систем является процесс переобуславливания исходной системы

$$B^{-1}Ax = B^{-1}f. \quad (2)$$

с последующим решением полученной задачи итерационным или прямым методом. При переобуславливании системы стараются добиться улучшения некоторых свойств исходной матрицы. Например, уменьшения числа обусловленности системы, более равномерного распределения спектра, близости собственных значений получаемой матрицы к 1, и других. К сожалению, на данный момент общая теория построения переобуславливателей отсутствует и каждый раз, вопрос о выборе переобуславливателя решается отдельно. Кроме перечисленных выше свойств, переобуславливатель должен легко обращаться.

Напомним, что если матрица A_0 положительно определена, то матрица A называется диссипативной [4], а если спектр матрицы A лежит в правой полуплоскости, то матрица называется устойчивой [2].

В данной работе предлагается использовать для исследования вопросов локализации спектра произведения двух матриц понятие числовой области матрицы [3]. Были получены формулы, связывающие числовые области исходных матриц A , B , и собственных чисел матрицы произведения.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант N12-01-00022а

Локализация спектра матрицы произведения двух несамосопряженных матриц

Пусть λ_j – собственное число матрицы $F = B^{-1}A$ и

$$\lambda_j = \operatorname{Re}\lambda_j + i\operatorname{Im}\lambda_j.$$

Таким образом, задача о локализации спектра свелась к решению задачи на обобщенное собственное значение

$$Fx = \lambda x \Rightarrow B^{-1}Ax = \lambda x$$

или

$$\Rightarrow Ax = \lambda Bx. \quad (3)$$

Отметим, что матрицы A и B в (3) действительны, а собственные вектора и собственные числа в случае, если ($A \neq A^T$), комплексны.

Учитывая, что любую матрицу можно представить в виде суммы симметричной и кососимметричной матриц, получим

$$(A_0 + A_1)x = \lambda(B_0 + B_1)x$$

или

$$(A_0 - \lambda B_0)x = (\lambda B_1 - A_1)x. \quad (4)$$

Найдем числовую область матрицы F в этом случае. Для этого умножим (4) скалярно на комплексный вектор x и разделим все выражение на (x, x) . Получим

$$\frac{(A_0x, x)}{(x, x)} - \lambda \frac{(B_0x, x)}{(x, x)} = \lambda \frac{(B_1x, x)}{(x, x)} - \frac{(A_1x, x)}{(x, x)}. \quad (5)$$

Обратим внимание, что в равенстве (5) все матрицы действительны, A_0 и B_0 – симметричные, а A_1 и B_1 – кососимметричные матрицы. В этом случае числовая область матриц A_0 и B_0 вещественна, а у матрицы A_1 и B_1 – чисто мнимая [2].

Обозначим числовую область матрицы Ψ через $R(\Psi)$. Пусть

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha = \alpha(A_0) = \frac{(A_0x, x)}{(x, x)} \in R(A_0), \\ \beta = \beta(B_0) = \frac{(B_0x, x)}{(x, x)} \in R(B_0), \\ i\gamma = i\gamma(A_1) = \frac{(A_1x, x)}{(x, x)} \in iR(A_1), \\ i\delta = i\delta(B_1) = \frac{(B_1x, x)}{(x, x)} \in iR(B_1). \end{array} \right. \quad (6)$$

Множества $R(A_0)$, $R(B_0)$ и $R(A_1)$, $R(B_1)$ вещественны и т.к. матрицы A_0 , B_0 и A_1 , B_1 нормальны [1], то числовые области этих матриц ограничены минимальным и максимальным собственными числами соответствующих матриц [2], т.е

$$\begin{cases} R(A_0) \in [\alpha_0, \alpha_1], \alpha_0 = \lambda_{min}(A_0), \alpha_1 = \lambda_{max}(A_0), \\ R(B_0) \in [\beta_0, \beta_1], \beta_0 = \lambda_{min}(B_0), \beta_1 = \lambda_{max}(B_0), \\ R(A_1) \in [-\gamma_1, \gamma_1], \gamma_1 = |\gamma_{max}(A_1)|, \\ R(B_1) \in [-\delta_1, \delta_1], \delta_1 = |\delta_{max}(B_1)|. \end{cases} \quad (7)$$

Запишем (5) с учетом равенств (6) в следующем виде:

$$\alpha - \lambda\beta = (\lambda\delta - \gamma)i$$

и учитывая, что

$$\lambda = \lambda_0 + i\lambda_1$$

комплексное собственное число матрицы F , получим

$$\alpha - \lambda_0\beta - i\lambda_1\beta = \lambda_0\delta - i\gamma + \lambda_1\delta. \quad (8)$$

Приравняв действительную и мнимую части равенства (8), имеем

$$\begin{cases} \alpha - \lambda_0\beta = -\lambda_1\delta, \\ -\lambda_1\beta = \lambda_0\delta - \gamma \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} \beta\lambda_0 - \delta\lambda_1 = \alpha, \\ \delta\lambda_0 + \beta\lambda_1 = \gamma. \end{cases} \quad (9)$$

Решая (9), получаем

$$\begin{cases} \lambda_0 = \frac{\delta\gamma + \alpha\beta}{\delta^2 + \beta^2}, \\ \lambda_1 = \frac{\beta\gamma - \delta\alpha}{\delta^2 + \beta^2}, \end{cases} \quad (10)$$

где $\alpha \in R(A_0)$, $\beta \in R(B_0)$, $\gamma \in R(A_1)$, $\delta \in R(B_1)$ – действительные параметры
 Отметим, что в (10) знаменатель

$$D = \delta^2 + \beta^2 \geq 0$$

и обращается в 0 только, если $\delta = \beta = 0$. Этого случая можно избежать, т.к. матрицу B мы строим сами и, не нарушая общности, можем потребовать, чтобы $B_0 = B_0^T > 0$, т.е. $\beta_0 > 0$.

В этом случае $D > 0$ и система (9) корректна.

Теорема 1. Пусть выполняются условия (6) и (7) и $\beta_0 > 0$. Тогда для действительной и мнимой части собственных чисел λ матрицы $F = B^{-1}A$ выполняется равенство (10).

Замечание 2. Отметим, что $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ это некоторые числа из числовой области матриц, заданные равенствами (7). Найти их достаточно тяжело, но зная границы изменения этих чисел, мы можем найти границы изменения величин λ_0 и λ_1 , т.е. локализовать спектр матрицы F .

Дальнейшее изучение этих формул позволит нам сделать выводы о сходимости переобусловленных итерационных методов для случаев различного расположения спектра исходной матрицы на плоскости.

Литература

1. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М.: Наука, 1967. - 576с.
2. Маркус М., Минк Х. Обзор по теории матриц и матричных неравенств. М.: Наука, 1972. - 232с.
3. Krukier L.A., Krukier B.L. Convergence of skew-symmetric iterative methods, Russian Mathematics, V.55, Issue 6, 2011, Pages 64-67
4. Taussky O. Positive definite matrices and their role in the study of the characteristic roots of general matrices// Adv. Math. 1968. v.2. pp.175-186.

ЛИМИТЕР ПОВЫШЕННОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ ДЛЯ РАЗРЫВНОГО МЕТОДА ГАЛЕРКИНА НА ТРЕУГОЛЬНЫХ СЕТКАХ

Ладонкина М.Е., Неклюдова О.А., Тишкин В.Ф.

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

Введение

Для решения задач газовой динамики в настоящее время широко применяется метод Галеркина с разрывными базисными функциями, который характеризуется высоким порядком точности получаемого решения. Как известно, для обеспечения монотонности решения, полученного данным методом, необходимо вводить так называемые ограничители наклона, или лимитеры, в особенности в том случае, если решение содержит сильные разрывы. Идея классического лимитера Кокбурна [1, 2] легко реализуется как в одномерном, так и в двумерном и трехмерном случаях, причем на произвольных треугольных и тетраэдральных сетках. Но при использовании данного лимитера, к сожалению, снижается точность решения [3, 4]. При использовании разрывного метода Галеркина высокого порядка точности хорошо зарекомендовал себя "моментный" лимитер [5]. Однако, при решении задач с двумя или тремя пространственными переменными применение "моментного" лимитера возможно лишь при использовании ортогональных сеток. В данной работе предложен новый лимитер, сохраняющий высокий порядок точности на гладких решениях, являющийся обобщением "моментного" лимитера на треугольные сетки.

I Применение разрывного метода Галеркина к решению системы уравнений Эйлера

Рассмотрим уравнения двумерной идеальной газовой динамики, записанные в виде

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} + \frac{\partial G(U)}{\partial y} = 0,$$

где $U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix}$, $F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (E + p)u \end{pmatrix}$, $G = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (E + p)v \end{pmatrix}$ (1)

величины ρ, ε, p соответствуют плотности, удельной внутренней энергии и давлению газа, u, v – компоненты вектора скорости, а $E = p \left(\varepsilon + \frac{u^2 + v^2}{2} \right)$ – полная энергия на единицу объема. Для определения давления p будем использовать уравнение состояния идеального газа:

$$p = (\gamma - 1)\rho\varepsilon, \quad (2)$$

где γ – показатель адиабаты.

Для применения разрывного метода Галеркина покроем область Ω , на которой ищется решение треугольной сеткой T_h .

На каждом треугольнике приближенное решение системы уравнений (1) будем искать в виде полиномов $P(x, y)$ степени s зависящими от времени коэффициентами. Будем рассматривать случаи представления решения в виде линейных $p = 1$ и квадратичных $p = 2$ полиномов.

Приближенное решение системы (1) в разрывном методе Галеркина ищется как решение следующей системы [1]:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int_{T_j} U_h(x, y, t) \cdot \phi_k(x, y) dx dy + \oint_{\partial T_j} h(U_h^+(x, y, t), U_h^-(x, y, t), n) \cdot \phi_k(x, y) dS - \\ & - \int_{T_j} \left[F(U_h(x, y, t)) \cdot \frac{\partial \phi_k(x, y)}{\partial x} + G(U_h(x, y, t)) \cdot \frac{\partial \phi_k(x, y)}{\partial y} \right] dx dy = 0, \quad (3) \\ & \forall \phi_k(x, y), \quad k = 0, x, y, xx, xy, yy, \end{aligned}$$

где $U_h(x, y, t) = (\rho_h(x, y, t), \rho u_h(x, y, t), \rho v_h(x, y, t), E_h(x, y, t))^T$ – вектор решения, n – вектор внешней единичной нормали по границе элемента ∂T_j . Величины, обозначенные через $U_h^+(x, y, t)$ вычисляются на границе ∂T_j элемента по значениям внутри элемента T_j , в то время как величины, обозначенные через $U_h^-(x, y, t)$ вычисляются на границе ∂T_j по значениям в соседней к данному элементу T_j ячейке. $h(U_h^+(x, y, t), U_h^-(x, y, t), n)$ – численная потоковая функция, зависящая от значений приближенного решения по обе стороны границы элемента, и от направления единичного нормального вектора n , для которой выполнено условие согласования

$$h(U_h^+(x, y, t), U_h^-(x, y, t), n) = F(U_h(x, y, t)) \cdot (n_x)_{\partial T_j} + G(U_h(x, y, t)) \cdot (n_y)_{\partial T_j}.$$

В качестве численного потока в данной работе был использован поток Годунова [8].

II Используемые лимитеры

Прямое использование формул (3) для расчета решений, содержащих разрывы может привести к возникновению осцилляций в окрестностях разрывов.

Для устойчивого счета в разрывном методе Галеркина используются специальные ограничители.

Ограничитель "лимитер" представляет собой некоторый оператор, действующий на функцию приближенного решения на каждом интервале. В данной работе исследовались два типа ограничителей.

Первый – классический ограничитель Кокбурна, подробно описанный в работах [1, 4]. В качестве второго варианта лимитера был исследован обобщенный "моментный" лимитер, предложенный в данной работе. Он характеризуется тем, что сохраняет максимально возможный порядок схемы.

III Описание тестовой задачи

В качестве тестовой задачи, на которой возможно исследовать порядки точности метода, будем использовать простую волну, в которой энтропия p/ρ^γ и инвариант Римана $R^+ = u + (2/(\gamma - 1))c$ являются постоянными [3, 6].

Проведены серии расчетов без использования лимитера, с классическим лимитером Кокбурна и с "моментным" лимитером. Расчеты выполнены на равномерных сетках с шагом $h_x = h_y = 0.013, 0.006, 0.003$ и 0.0015 , с временным шагом $\Delta T = 1 \cdot 10^{-5}$. Определены порядки точности исследуемого метода в нормах L^1 , L^2 и L^4 на два момента времени $T = 0.05$ и $T = 0.07$.

Таблица 1.

	N	Без лимитера		Лимитер Кокбурна		"Моментный" лимитер	
		ошибка	порядок	ошибка	порядок	ошибка	порядок
L^1	150	1.21e-05		1.02e-04		2.89e-05	
	300	1.69e-06	2.84	2.69e-05	1.92	6.09e-06	2.25
	600	1.44e-07	3.55	5.87e-06	2.19	9.18e-07	2.73
	1200	1.41e-08	3.34	1.28e-06	2.19	9.32e-08	3.29
L^2	150	2.19e-04		1.10e-03		4.29e-04	
	300	3.95e-05	2.47	3.55e-04	1.64	1.39e-04	1.62
	600	3.80e-06	3.37	8.89e-05	1.99	2.70e-05	2.36
	1200	3.58e-07	3.40	1.92e-05	2.20	3.35e-06	3.01
L^4	150	1.62e-03		7.03e-03		2.93e-03	
	300	3.23e-04	2.32	2.48e-03	1.50	1.16e-03	1.32
	600	3.65e-05	3.14	6.71e-04	1.88	2.48e-04	2.23
	1200	3.55e-06	3.36	1.45e-04	2.21	3.52e-06	2.81

В таблице 1 приведены результаты расчетов для квадратичных полиномов на момент времени $T = 0.07$ с параметрами лимитера Кокбурна и "моментного" лимитера равными $\mu = 2$, N – число ячеек сетки по направлению Ox .

IV Заключение

При численном решении задач на треугольных сетках разрывным методом Галеркина с использованием квадратичных базисных функций лимитер Кокбурна не дает порядок точности выше второго, в то время как применение нового "моментного" лимитера при определенном выборе параметров позволяет получить решение третьего порядка. Таким образом, для сохранения высокого порядка точности на гладких решениях разрывным методом Галеркина необходимо применять "моментный" лимитер с соответствующими значениями параметров лимитирования.

Литература

1. *Bernardo Cockburn* An Introduction to the Discontinuous Galerkin Method for Convection – Dominated Problems // Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations (Lecture Notes in Mathematics). 1998. Vol. 1697, P. 151-268.
2. *Галанин М.П., Грищенко Е.В., Савенков Е.Б., Токарева С.А.* Применение RKDG метода для численного решения задач газовой динамики // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН: Москва. 2006. N 52.
3. *Ладонкина М.Е., Неклюдова О.А., Тиликин В.Ф.* Исследование влияния лимитера на порядок точности решения разрывным методом Галеркина // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН: Москва. 2012. N 34.
4. *Ладонкина М.Е., Неклюдова О.А., Тиликин В.Ф.* Исследование влияния лимитера на порядок точности решения разрывным методом Галеркина // Математическое моделирование. 2012. N 24. Т 12. С.124-128.
5. *Krivodonova L.* Limiters for high-order discontinuous Galerkin methods // Journal of Computational Physics. 2007. Vol. 226, P. 879-896.
6. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Гидродинамика / Теоретическая физика. Москва: Физматлит, 2001. Т. VI.
7. *Уизем Дж.* Линейные и нелинейные волны. Москва: Мир, 1977.
8. *Годунов С.К.* Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики. Математический сборник. 1959. Т. 47(89):3. С. 271-306.

НОВАЯ СТРУКТУРА ДАННЫХ ДЛЯ РАСЧЕТА БЛИЖНЕГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МЕТОДАХ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ¹

Малышев В. Л. *, Марьин Д. Ф. **, Моисеева Е. Ф. *

* БашГУ, Центр Микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем, Уфа

** Институт механики Уфимского научного центра РАН, Уфа

Введение

В настоящее время при проведении исследования микро- и наномасштабных явлений и объектов значительное внимание уделяется вопросам применения методов молекулярной динамики. При исследовании одноатомных жидкостей широко используется потенциал взаимодействия Леннарда—Джонса. Так как он является близкодействующим (на каждый атом существенно влияние лишь его ближайшего окружения), то нет необходимости в расчете сил взаимодействия каждой молекулы с каждой. Упростить этот процесс можно за счет использования структуры данных.

Первые попытки в этом направлении были описаны М. Р. Allen и Д. J. Tildesley [1] с построением списка соседей. Использование такого метода было основано на малом радиусе взаимодействия потенциала Леннарда—Джонса.

Позже были разработаны иерархические структуры данных. Такие структуры сложны в реализации, но имеют преимущество в реализации далекодействующих потенциалов. Один из способов построения такой структуры можно найти в работе [2].

В представленной работе описан процесс построения новой структуры данных. Данный подход позволяет ускорить вычисления при помощи метода молекулярной динамики для гетерогенных систем с использованием близкодействующих потенциалов.

I Математическая модель

Молекулярная динамика — метод, используемый для определения макроскопических свойств системы из N тел, в котором движение частиц подчиняется второму закону Ньютона. Система состоит из атомов, взаимодействующих друг с другом согласно некоторому потенциалу (или нескольким потенциалам) взаимодействия. В классической молекулярной динамике положения

¹Работа выполнена при поддержке гранта Министерства Образования и Науки РФ (11.G34.31.0040) и гранта РФФИ (код проекта №12-01-31083 "мол _ а").

атомов вычисляются из начальных условий $(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$ посредством разрешения уравнений движения

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{\mathbf{F}(\mathbf{r}_i)}{m_i}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{r}_i) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \mathbf{U}_i(\mathbf{r}^N),$$

где \mathbf{r}_i — положение i -ой молекулы; m_i — её масса; \mathbf{v}_i — скорость молекулы; $\mathbf{r}^N = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}$ — множество координат всех молекул; $\mathbf{U}_i(\mathbf{r}^N)$ — суммарный потенциал взаимодействия i -ой молекулы со всеми остальными. Наиболее широко используемый потенциал взаимодействия, первоначально предложенный для жидкого аргона,—потенциал Леннарда—Джонса [3].

$$u_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right].$$

II Алгоритм построения структуры данных

Опишем основные моменты построения структуры данных. Алгоритм состоит из следующих шагов:

- i) Построение сетки. Определение основных параметров: количество боксов, их линейные размеры, порядок нумерации, положение центра каждого бокса.
- ii) Построение списка соседей для каждого бокса и центрированного вектора соседей.
- iii) Сортировка частиц по боксам и вычисление "маркеров".
- iv) Преобразование позиций в локальные координаты.

Ниже приведем описание каждого из представленных пунктов.

Число боксов и их нумерация

Предположим, что исследуемая область имеет размер $L_x \times L_y \times L_z$, радиус взаимодействия Леннарда—Джонса r_{cutoff} , тогда область можно разбить на боксы, где их число в каждом направлении равно

$$N_{xBox} = \left\lceil \frac{L_x}{r_{cutoff}} \right\rceil, \quad N_{yBox} = \left\lceil \frac{L_y}{r_{cutoff}} \right\rceil, \quad N_{zBox} = \left\lceil \frac{L_z}{r_{cutoff}} \right\rceil,$$

Тогда общее количество боксов $N_{AllBox} = N_{xBox} N_{yBox} N_{zBox}$.

Линейные размеры каждого бокса

$$l_x = \frac{L_x}{N_{xBox}}, \quad l_y = \frac{L_y}{N_{yBox}}, \quad l_z = \frac{L_z}{N_{zBox}}.$$

Исходя из этих данных можно вычислить положение центра каждого бокса.

Введем два вида индексации боксов: сквозную и декартову. Сквозной индекс будем обозначать n , а декартов $[i, j, k]$. Нумерацию будем производить с нуля. Сквозной индекс представляет собой последовательную нумерацию всех боксов с "быстрым" индексом вдоль оси x и "медленным" вдоль оси z . Т.е. сквозной индекс проходит по кривой, заполняющей область (space filling curve). Декартов способ определяет бокс согласно сдвигу вдоль каждой из осей относительно начала отсчёта (началом отсчёта выбирается левый нижний угол).

Вычисление соседей

4	0	1	2	3	4	0
24	20	21	22	23	24	20
19	15	16	17	18	19	15
14	10	11	12	13	14	10
9	5	6	7	8	9	5
4	0	1	2	3	4	0
24	20	21	22	23	24	20

Рис. 1. Периодизация системы

Согласно построенному разбиению области каждый атом, расположенный в каком-либо боксе, может взаимодействовать лишь с атомами, находящимися в соседних боксах. Для нахождения соседних боксов удобно использовать декартову нумерацию. Таким образом, для любого бокса с координатами $[i, j, k]$, соседними будут 27 ячеек (включая себя): $[i - 1, j - 1, k - 1]$, $[i, j - 1, k - 1]$, ..., $[i + 1, j + 1, k + 1]$. Возникает вопрос в нахождении соседей для боксов, находящихся на границе области. Их можно найти путём использования периодических граничных условий. Схема построения представлена на рис. 1. Таким образом, может быть составлен список, состоящий из $27 \cdot N_{AllBox}$ элементов, который каждому боксу ставит в соответствие всех его соседей. Введем понятие центрированного вектора соседей. Построим 27 векторов (включая нулевой вектор), которые соединяют центр произвольного бокса с центрами боксов всех его соседей. В общем случае это вектора $[-l_x, -l_y, -l_z]$, $[0, -l_y, -l_z]$, $[l_x, -l_y, -l_z]$, ..., $[l_x, l_y, l_z]$.

Сортировка позиций и вычисление "маркеров"

Для эффективного применения параллельных алгоритмов необходим удобный и быстрый доступ к данным. При использовании метода молекулярной динамики в системе постоянно происходит движение частиц и их миграция между боксами. Так как мы произвели разбиение на боксы и работаем с ними, то самым лучшим способом будет расположить координаты в такой последовательности, когда сначала идут все частицы находящиеся в 0 боксе, далее в 1, и так до последнего бокса ($N_{AllBox} - 1$). А так же вычислить "маркеры", которые показывают в новом, отсортированном, массиве частиц чему равно значение индекса первого и последнего атома, в заданном боксе.

Преобразование позиций в локальные координаты

Преобразуем все координаты в вектор $\bar{r}_i^* = \bar{r}_i - \bar{r}_{BoxCenter(i)}$, где \bar{r}_i – позиция частицы, $\bar{r}_{BoxCenter(i)}$ – центр бокса, в котором находится i -ая частица.

В случае введения таких дополнительных векторов вычисление расстояния между двумя точками можно записать следующим образом (см. рис. 2). Предположим, необходимо вычислить расстояние $\bar{r}_{ij} = \bar{r}_i - \bar{r}_j$. Так как все координаты были преобразованы в локальные, то вместо векторов \bar{r}_i, \bar{r}_j есть вектора \bar{r}_R, \bar{r}_S . Также существует один из векторов соседей (обозначен \bar{r}_N). Согласно правилу суммирования векторов $\bar{r}_{ij} = \bar{r}_R - \bar{r}_N - \bar{r}_S$. Такой подход позволяет унифицировать процесс вычисления расстояния между частицами, а в последствии и вычисление сил взаимодействия при использовании периодических граничных условий.

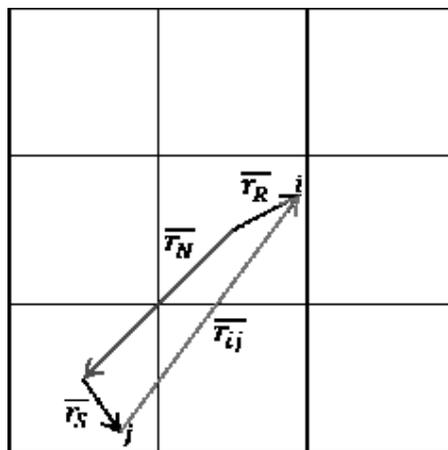


Рис. 2. Расстояние между точками

III Результаты

В данной работе производится моделирование динамики жидкого аргона с использованием описанной структуры данных. Рассматривается жидкость с плотностью 1013 кг/м^3 при температуре 130 К и $r_{cutoff} = 3.5\sigma$. Вычисления производились на гетерогенной рабочей станции с двумя 6-ядерными CPU

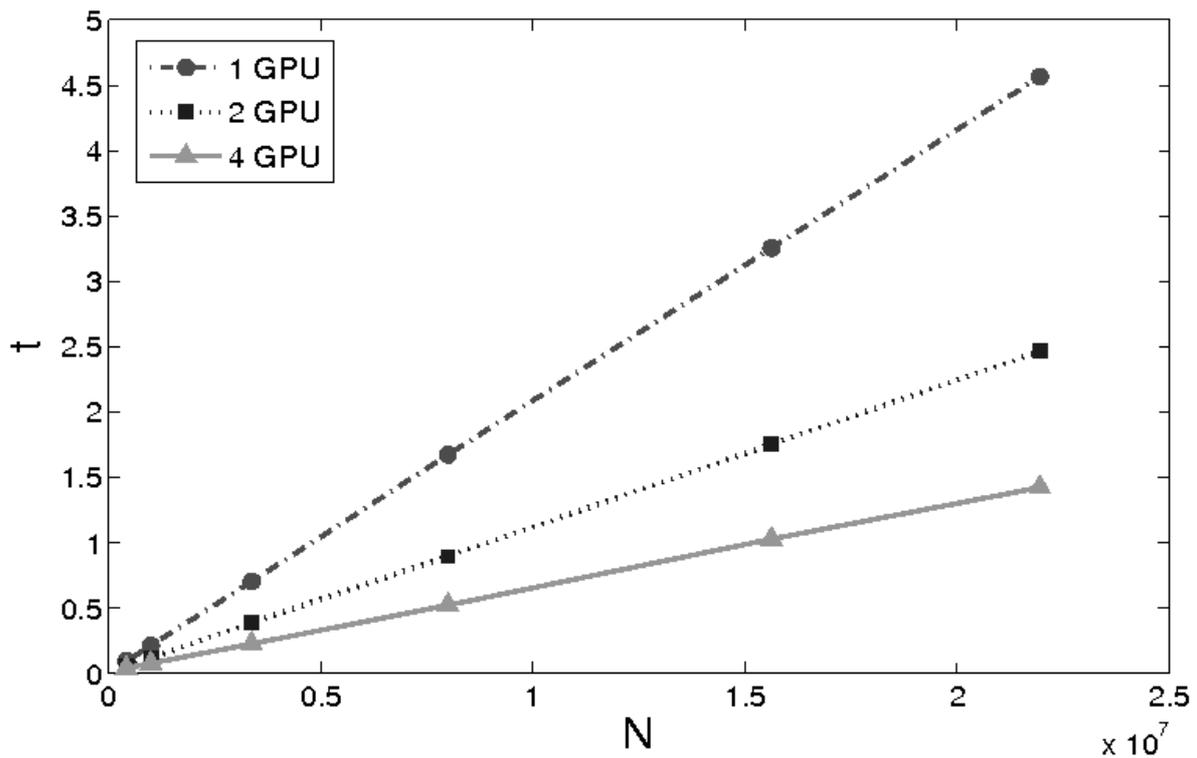


Рис. 3. Время расчета сил взаимодействия

Intel Xeon 5660 2.8 GHz (всего 12 физических ядер и 12 виртуальных ядер, используя технологию Hyper-Threading), 12 GB RAM, и 4x GPU NVIDIA Tesla C2075 с 6 GB RAM. На рис. 3 представлено время расчета сил взаимодействия при различном числе частиц в системе.

Использование структуры данных, описанной в данной работе позволяет значительно ускорить процесс вычисления сил для близкодействующих потенциалов взаимодействия. Применение такого подхода позволяет вычислить один шаг алгоритма для системы, состоящей из 20 миллионов частиц, менее чем за 2 секунды.

Литература

1. *Allen M. P., Tildesley D. J.* Computer Simulation of Liquids // Clarendon Press, Oxford, 1987.
2. *Gumerov N. A, Duraiswami R.* Fast multipole methods on graphics processors // Journal of Computational Physics. 2008. Vol. 227(18). P.8290-8313.
3. *Jones J. E.* On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas // Royal Society of London Proceedings Series A. 1924. Vol. 106. P. 463–477.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ УСЛОВНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ЭФФЕКТИВНЫМИ ИТЕРАЦИОННЫМИ МЕТОДАМИ¹

Мартынова Т.С.

ЮГИНФО ЮФУ, Ростов-на-Дону

Введение

В работе рассматриваются итерационные методы для систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) блочной структуры, которые имеют в качестве решения седловую точку. Применительно к СЛАУ это обычно означает знаконеопределенность матрицы, которая может быть как симметричной, так и несимметричной. Системы такого типа возникают во многих областях: математическое программирование, вычислительная гидродинамика, электромагнетизм и др. Обширная литература по решению седловых проблем представлена в [1]. Теория релаксационных и обобщенных методов для решения седловых задач, а также проблемы переобуславливания и оптимизации итерационных методов подробно исследованы в [2]. Несмотря на то, что существует множество итерационных методов решения седловых задач, проблем в этой области еще немало. В данной работе мы исследуем возможность применения метода, представленного в [3] для решения задач условной оптимизации. Данный метод основан на идеях симметричного-кососимметричного расщепления матрицы СЛАУ и обобщен для решения седловых проблем. В [3] дано приложение метода к решению классической задачи Стокса. В данной работе сравнивается эффективность нового метода с классическим методом решения седловых задач: обобщенным методом последовательной верхней релаксации GSOR [4].

I Постановка задачи

Ряд инженерных задач связан с оптимизацией при наличии некоторого количества ограничений в виде равенств и/или неравенств на переменные. При решении некоторых задач условной оптимизации возникают знаконеопределенные СЛАУ с седловой точкой или ККТ-системы (системы Каруша-Куна-Таккера) следующего вида:

$$\begin{pmatrix} M & E^T \\ E & -N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}. \quad (1)$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-01-00022а)

Здесь $M \in \mathbb{R}^{p \times p}$, $N \in \mathbb{R}^{q \times q}$ – симметричные положительно-полуопределенные матрицы, возможно, $N = 0$, матрица $E \in \mathbb{R}^{q \times p}$ имеет полный строчный ранг, $q \leq p$, $f \in \mathbb{R}^p$ и $g \in \mathbb{R}^q$ – два заданных вектора.

Существуют различные подходы к решению СЛАУ со знаконеопределенной матрицей. Иногда ее преобразуют к положительно-определенной форме, но при этом может сильно ухудшаться обусловленность системы, что приведет к плохой сходимости итерационных методов. Можно применять методы, подходящие для решения знаконеопределенных систем. В данной работе используется следующий подход – преобразование (1) к эквивалентной несимметричной СЛАУ, матрица которой имеет спектр, лежащий в правой полуплоскости [1, 4]. Причем, если матрица M положительно определена, то соответствующая несимметричная матрица будет положительно устойчивой, если же M является положительно-полуопределенной, то несимметричная матрица будет положительно-полуустойчивой [1]. Следует отметить, что в ряде работ решена задача (1) для случая, когда $M \neq M^T \in \mathbb{R}^{p \times p}$, но матрица M является положительно устойчивой [5]. В данной работе этот случай не исследуется.

Перепишем систему (1) в несимметричном виде:

$$\mathcal{A}z \equiv \begin{pmatrix} M & E^T \\ -E & N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ -g \end{pmatrix} = \mathbf{F}. \quad (2)$$

Известно [1], что если матрица M положительно определена, то (1) имеет единственное решение, если же матрица M является положительно-полуопределенной, то это не так. Определим два множества:

$$\mathcal{K}_g = \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^p : E\mathbf{v} = \mathbf{g}\}, \mathcal{K}_0 = \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^p : E\mathbf{v} = \mathbf{0}\} = Ker(E).$$

Тогда, в последнем случае, СЛАУ (1) разрешима однозначно, если матрица M положительно определена на подпространстве \mathcal{K}_0 , и решение задачи может быть получено, в частности, с использованием расширенного лагранжевого метода.

Характерной задачей, приводящей к решению СЛАУ с седловой точкой, является следующая задача квадратичного программирования: необходимо найти минимум \mathbf{u} целевого функционала $J(\mathbf{v})$ из \mathbb{R}^p при наличии $q < p$ линейных ограничений (заданных в виде равенств)

$$J(\mathbf{v}) \equiv \frac{1}{2} \mathbf{v}^T M \mathbf{v} - \mathbf{v}^T \mathbf{f}, \quad (3)$$

$$E\mathbf{v} = \mathbf{g}. \quad (4)$$

Одним из методов решения данной задачи является метод множителей Лагранжа (ММЛ), преобразующий (3)-(4) в задачу безусловной минимизации с неизвестными параметрами. Пусть $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^q$ вектор лагранжевых множителей, тогда функционал Лагранжа имеет вид:

$$\Psi(\mathbf{v}, \mathbf{h}) = J(\mathbf{v}) + \mathbf{h}^T (E\mathbf{v} - \mathbf{g}). \quad (5)$$

Седловой точкой функционала (5) является решение СЛАУ (1)-(2) в случае, когда $N = 0$.

II Расширенный Лагранжевый метод

Данный метод зависит от параметра и может применяться как в случае, когда матрица M в СЛАУ (1) является плохо обусловленной или вырожденной, так и в случае, когда матрица M невырождена [6].

Заменим целевой функционал $J(\mathbf{v})$ (3) на следующий:

$$J_\gamma(\mathbf{v}) \equiv J(\mathbf{v}) + \gamma \|E\mathbf{v} - \mathbf{g}\|_W^2,$$

где $\gamma > 0$ – параметр, $W = W^T > 0$, $W \in \mathbb{R}^{q \times q}$ – весовая матрица.

Соответствующий расширенный функционал Лагранжа имеет вид:

$$\Psi_\gamma(\mathbf{v}, \mathbf{h}) = J(\mathbf{v}) + \frac{\gamma}{2} \|E\mathbf{v} - \mathbf{g}\|_W^2 + \mathbf{h}^T (E\mathbf{v} - \mathbf{g}),$$

и вместо исходной СЛАУ (1) теперь необходимо решить следующую (расширенную) систему (при $N = 0$) [1, 7]:

$$\begin{pmatrix} \tilde{M} & E^T \\ E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f + \gamma E^T W g \\ g \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где $\tilde{M} \equiv M + \gamma E^T W E$. Матрица \tilde{M} будет положительно определена, если $\gamma > 0$. Оптимальный выбор γ дан в [6].

III Обобщенный треугольный кососимметрический метод (GSTS)

В [3] представлен итерационный метод GSTS (Generalized Skew-hermitian Triangular Splitting) решения системы (2), дано доказательство сходимости и оценка итерационных параметров.

Симметричная и кососимметричная части \mathcal{A}_0 , \mathcal{A}_1 матрицы \mathcal{A} из (2) имеют вид:

$$\mathcal{A}_0 = \begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & N \end{pmatrix}, \mathcal{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 & E^T \\ -E & 0 \end{pmatrix}.$$

Кососимметричная часть \mathcal{A}_1 , в свою очередь, расщепляется естественным образом на

$$\mathcal{A}_1 = \mathcal{K}_L + \mathcal{K}_U = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -E & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & E^T \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

где O – нулевая матрица подходящей размерности, $\mathcal{K}_L, \mathcal{K}_U$ – строго нижне-треугольная и верхнетреугольная матрицы, соответственно.

Для решения СЛАУ (2) используем двухслойную итерационную схему, которую запишем в следующем виде:

$$\mathbf{z}^{(k+1)} = \mathcal{G}(\omega_1, \omega_2, \tau)\mathbf{z}^k + \tau\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2)^{-1}\mathbf{F},$$

где $\mathcal{G}(\omega_1, \omega_2, \tau)$ – оператор перехода итерационного метода,

$$\mathcal{G}(\omega_1, \omega_2, \tau) = \mathcal{B}(\omega_1, \omega_2)^{-1}(\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) - \tau\mathcal{A}) = I - \tau\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2)^{-1}\mathcal{A},$$

$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2)$ – невырожденная матрица, задающая итерационный метод, $\omega_1, \omega_2 \geq 0, \tau > 0$ – итерационные параметры, ω_1, ω_2 не равны нулю одновременно.

Введем матрицу $\mathcal{B}_C = \begin{pmatrix} B_1 & 0 \\ 0 & B_2 \end{pmatrix}$, где $B_1 \in \mathbb{R}^{p \times p}, B_2 \in \mathbb{R}^{q \times q}$ – симметричные невырожденные матрицы.

Оператор $\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2)$ определим следующим образом:

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = (\mathcal{B}_C + \omega_1\mathcal{K}_L)\mathcal{B}_C^{-1}(\mathcal{B}_C + \omega_2\mathcal{K}_U) =$$

$$\begin{pmatrix} B_1 & 0 \\ -\omega_1 E & B_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1^{-1} & 0 \\ 0 & B_2^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 & \omega_2 E^T \\ 0 & B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 & \omega_2 E^T \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 E B_1^{-1} E^T \end{pmatrix}.$$

В случае, когда $\omega_1 = \omega_2 > 0$ GSTS сводится к одной из версий двухшагового кососимметрического итерационного метода (ДКМ), изученного в [7, 8] для решения СЛАУ с диссипативной матрицей. Зададим начальные приближения $u^0 \in \mathbb{R}^p, \mu^0 \in \mathbb{R}^q$ и положительный итерационный параметр τ . Тогда приближенное решение \mathbf{z}^k для \mathbf{z} , где $k = 0, 1, 2, \dots$ системы (2) с седловой точкой можно найти с помощью следующей последовательности итераций:

$$\begin{cases} B_2 \mu^{(k+1)} = B_2 \mu^{(k)} + \tau[\omega_1 E B_1^{-1}(f - M u^{(k)} - E^T \mu^{(k)}) + E u^{(k)} - g], \\ B_1 u^{(k+1)} = B_1 u^{(k)} - \tau M u^{(k)} + E^T[(\omega_2 - \tau)\mu^{(k)} - \omega_2 \mu^{(k+1)}] + \tau f, \end{cases} \quad (7)$$

Мы используем итерационный метод GSTS (7) для решения СЛАУ (2).

IV Численные эксперименты

Для оценки эффективности итерационного метода GSTS рассматриваются две его версии GSTS(1) и GSTS(2) и классический метод GSOR [4]. Для сравнения данных методов используются модельные задачи, предложенные в [6, 9]. В качестве переобуславливателя для дополнения Шура в методе GSOR берется матрица $Q = E\widehat{M}^{-1}E^T$, где $\widehat{M} = tridiag(M)$. Во всех задачах для методов GSTS(1) и GSTS(2) мы полагаем $B_1 = M$. Все рассматриваемые методы также тестируются как переобуславливатели для метода GMRES.

Задача 1 [9]. Пусть матрица $M = M^T \in \mathbb{R}^{p \times p}$ в (2) является положительно определенной. Возьмем в качестве M матрицу, полученную в результате конечно-разностной аппроксимации двумерного оператора Лапласа на стандартном пятиточечном шаблоне. Пусть $E^T = U\Sigma V$ – сингулярное разложение матрицы E^T , где $U \in \mathbb{R}^{p \times q}$, $V \in \mathbb{R}^{q \times q}$, а матрица $\Sigma = \text{diag}(1, 2^m, \dots, q^m) \in \mathbb{R}^{q \times q}$, m – заданное положительное вещественное число. Ортогональные матрицы U, V случайно генерируются с нормальным распределением в MATLAB. Для данной задачи мы полагаем $B_2 = E\widehat{M}^{-1}E^T$, $\widehat{M} = \text{diag}(M)$ для метода GSTS(1) и $B_2 = E\widehat{M}^{-1}E^T$, $\widehat{M} = \text{tridiag}(M)$ для метода GSTS(2), соответственно.

Расчеты для $m = 1/8$ представлены в таблице 1, для $m = 3$ в таблице 2. В таблицах 3 и 4 представлены соответствующие результаты переобуславливания GMRES. Во всех таблицах символ "–" означает, что число итераций превосходит 1000.

Задача 2 [6]. Для данной тестовой задачи матрица исходной СЛАУ строится следующим образом. Матрица M есть блочно-диагональная матрица, состоящая из n пятидиагональных блоков размером 50×50 , ($n = 10k$), $k = 1 \div 8$, ненулевые элементы которых являются нормально распределенными случайными числами. Каждый пятидиагональный блок $M_i, i = 1, \dots, n$ имеет дефект, равный 1, и получается заменой $M_i \leftarrow M_i - \lambda_{\min}(M_i)I$ после заполнения. То есть, матрица M является полуопределенной и $\text{rank}(M) = 49n$. Случайная матрица E имеет размер $500 \times 500k$ и состоит из k трехдиагональных блоков размером 500×500 , объединенных вместе. Выбор параметра для расширенной лагранжевой системы осуществляется по формуле $\gamma = \|M\|_2 / \|E\|_2^2$. Весовая матрица $W = I_q$. Для данной задачи мы полагаем $B_2 = E\widehat{M}^{-1}E^T$, $\widehat{M} = \text{tridiag}(M)$ для метода GSTS(1) и $B_2 = E\widehat{M}^{-1}E^T$, $\widehat{M} = \text{tridiag}(M) + \gamma \text{diag}(E^T E)$ для метода GSTS(2), соответственно. Результаты численных тестов для итерационных методов приведены в таблице 5, результаты переобуславливания GMRES даны в таблице 6.

Во всех расчетных таблицах указано число итераций (IT), необходимое для достижения заданной точности, время счета (CPU) и норма вектора невязки (RES), где

$$RES := \sqrt{\|f - Mu^{(k)} - E^T \mu^{(k)}\|_2^2 + \|g - Eu^{(k)}\|_2^2}.$$

Здесь $(u^{(k)T}, \mu^{(k)T})^T$ – полученное приближенное решение задачи. В численных экспериментах правая часть $(f^T, g^T)^T \in \mathbb{R}^{p+q}$ выбиралась таким образом, чтобы точным решением исходной СЛАУ являлся вектор $((u^*)^T, (\mu^*)^T)^T = (1, 1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^{p+q}$. В качестве начального приближения во всех расчетах брался нулевой вектор, и итерации прекращались при выполнении условия $RES \leq 10^{-7}$. Вычисления проводились в MATLAB с машинной точностью 10^{-16} . Выбор итерационных параметров для методов GSTS(1) и GSTS(2) осуществлялся экспериментально, причем $\omega_1 = \omega_2 = \omega_{exp}$. Для

Таблица 1. IT, CPU и RES для задачи 1 ($m = 1/8$)

p		1024	1600	2304	3136	4096	5184
q		32	40	48	56	64	72
$p + q$		1056	1640	2352	3192	4160	5256
GSTS(1)	IT	24	26	28	29	32	36
	CPU	0.0089	0.0088	0.0091	0.054	0.061	0.076
	RES	9.71e-7	3.92e-7	7.72e-7	6.54e-7	5.33e-7	4.33e-7
GSTS(2)	IT	19	20	21	23	28	30
	CPU	0.0043	0.0055	0.0061	0.018	0.034	0.043
	RES	6.73e-6	5.66e-7	8.78e-7	7.71e-7	9.52e-6	2.19e-7
GSOR	IT	22	24	25	27	30	33
	CPU	0.0062	0.0069	0.0078	0.034	0.052	0.059
	RES	8.07e-7	9.73e-7	8.42e-7	8.01e-7	6.96e-7	7.68e-6

GSOR взяты теоретически оптимальные значения итерационных параметров ω_{opt}, τ_{opt} [4].

Численные тесты показали, что наиболее сложной для решения всеми методами оказалась задача 2, причем число итераций и затраченное время (CPU) увеличиваются с ростом размерности матрицы СЛАУ. Для всех задач скорость сходимости метода GSTS(1) незначительно уступает сходимости GSOR (в несколько итераций), т.е. практически равна ей. Для всех тестовых задач наилучшую скорость сходимости проявил метод GSTS(2). И по числу итераций, и по затраченному времени (CPU) он дает улучшение по сравнению со сходимостью GSOR. Таким образом, можно рекомендовать применение GSTS(2) для решения данного класса задач. Все три метода хорошо проявляют себя в качестве переобуславливателей для итерационного метода GMRES, преимущество снова остается за переобуславливателем GSTS(2). Это связано с наиболее удачным выбором матрицы B_2 для данного метода. Без использования переобуславливателей метод GMRES сходится медленно, в данных тестовых таблицах использована полная версия GMRES.

Таблица 2. IT, CPU и RES для задачи 1 ($m = 3$)

p		1024	1600	2304	3136	4096	5184
q		32	40	48	56	64	72
$p + q$		1056	1640	2352	3192	4160	5256
GSTS(1)	IT	53	56	67	76	92	108
	CPU	0.019	0.027	0.047	0.068	0.097	0.232
	RES	6.61e-7	3.12e-6	1.22e-7	1.44e-6	4.93e-7	8.31e-7
GSTS(2)	IT	48	52	61	68	87	96
	CPU	0.013	0.019	0.033	0.049	0.077	0.173
	RES	6.73e-6	5.66e-7	8.78e-7	7.71e-7	9.52e-6	2.19e-7
GSOR	IT	50	54	65	72	89	103
	CPU	0.016	0.022	0.042	0.054	0.083	0.211
	RES	8.07e-7	9.73e-7	8.42e-7	8.01e-7	6.96e-7	7.68e-6

Таблица 3. IT, CPU, RES: переобуславливание GMRES, задача 1 ($m = 1/8$)

p		1024	1600	2304	3136	4096	5184	
q		32	40	48	56	64	72	
$p + q$		1056	1640	2352	3192	4160	5256	
GMRES	IT	253	323	379	488	695	-	
	CPU	37.97	43.44	49.52	58.12	85.15	-	
	RES	2.21e-7	1.12e-6	6.02e-7	1.24e-6	3.73e-7	-	
PGMRES	GSTS(1)	IT	13	13	15	16	21	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	22
		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
	GSOR	IT	12	13	14	15	19	25
		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 4. IT, CPU, RES: переобуславливание GMRES, задача 1 ($m = 3$)

p		1024	1600	2304	3136	4096	5184	
q		32	40	48	56	64	72	
$p + q$		1056	1640	2352	3192	4160	5256	
GMRES		IT	328	542	648	868	-	-
		CPU	51.44	68.12	71.23	89.11	-	-
		RES	6.61e-7	3.12e-6	1.22e-7	1.44e-6	4.93e-7	8.31e-7
PGMRES	GSTS(1)	IT	30	32	32	35	37	39
		CPU	0.388	0.395	0.416	0.436	0.452	1.397
		RES	6.61e-7	3.12e-6	1.22e-7	1.44e-6	4.93e-7	8.31e-7
	GSTS(2)	IT	25	26	26	28	29	30
		CPU	0.351	0.364	0.387	0.413	0.436	1.181
		RES	6.73e-6	5.66e-7	8.78e-7	7.71e-7	9.52e-6	2.19e-7
	GSOR	IT	29	31	31	34	36	37
		CPU	0.379	0.386	0.397	0.429	0.441	1.261
		RES	8.07e-7	9.73e-7	8.42e-7	8.01e-7	6.96e-7	7.68e-6

Таблица 5. IT, CPU и RES для задачи 2

p	500	1000	1500	2000	2500	3000	
q	500	500	500	500	500	500	
$p + q$	1000	1500	2000	2500	3000	3500	
γ	1.98e-1	2.77e-1	1.09e-1	3.75e-1	1.75e-1	7.98e-2	
GSTS(1)	IT	79	91	132	141	156	173
	CPU	0.091	0.166	0.176	0.193	0.453	1.954
	RES	1.22e-7	3.82e-6	6.12e-7	9.44e-6	3.88e-7	6.31e-7
GSTS(2)	IT	70	83	108	129	138	147
	CPU	0.041	0.085	0.093	0.129	0.252	1.564
	RES	1.23e-6	9.06e-7	7.58e-7	4.71e-7	1.32e-6	1.19e-7
GSOR	IT	75	88	119	137	149	159
	CPU	0.072	0.152	0.163	0.175	0.386	1.873
	RES	3.57e-7	7.33e-6	2.42e-7	3.55e-7	3.96e-7	9.48e-6

Таблица 6. IT, CPU, RES: переобуславливание GMRES, задача 2

p		500	1000	1500	2000	2500	3000	
q		500	500	500	500	500	500	
$p + q$		1000	1500	2000	2500	3000	3500	
γ		1.8e-01	1.6e-01	1.1e-01	3.5e-01	2.9e-02	2.5e-02	
GMRES		IT	256	348	417	653	869	-
		CPU	49.01	58.98	77.76	104.07	137.54	-
		RES	2.86e-7	2.12e-6	8.51e-7	9.24e-6	6.23e-7	-
PGMRES	GSTS(1)	IT	38	53	56	60	74	79
		CPU	17.21	28.81	35.52	40.01	46.54	54.81
		RES	1.41e-7	8.12e-6	4.33e-7	9.44e-6	6.65e-7	4.31e-7
	GSTS(2)	IT	29	44	46	48	57	61
		CPU	12.53	18.64	28.05	34.41	38.64	43.96
		RES	4.23e-6	2.76e-7	9.78e-7	3.71e-6	4.52e-6	8.49e-6
	GSOR	IT	35	51	54	55	59	68
		CPU	17.01	22.55	31.48	37.98	44.03	48.73
		RES	3.77e-7	2.43e-7	4.12e-7	9.41e-6	5.96e-6	3.68e-6

Литература

1. *Benzi M., Golub G., Liesen J.* Numerical solution of saddle point problems // Acta Numerica. 2005. Vol. 14. P. 1–137.
2. *Быченков Ю.В., Чужонков Е.В.* Итерационные методы решения седловых задач. Москва: БИНОМ. 2010. 342 с.
3. *Krukier L.A., Krukier B.L., Ren Z.-R.* Generalized skew-hermitian triangular splitting iteration methods for saddle-point linear systems // Article first published online: 25 JAN 2013 | DOI: 10.1002 / nla.1870.
4. *Bai Z.-Z., Parlett B.N., Wang Z.-Q.* On generalized successive overrelaxation methods for augmented linear systems // Numer. Math. 2005. Vol. 102. P. 1–38.
5. *Botchev M.A., Golub G. H.* A class of nonsymmetric preconditioners for saddle point problems // SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. 2006. Vol. 27. N. 4. P. 1125–1149.
6. *Golub G.H., Greif C.* On solving block-structured indefinite linear systems // SIAM J. Sci. Comput. 2003. Vol. 24. N. 6. P. 2076–2092.
7. *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 // ЖВМиМФ. 2006. Т. 46. N. 2. С. 295–306.
8. *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.
9. *Bai Z.-Z., Golub G.H., Pan J.-Y.* Preconditioned Hermitian and skew-Hermitian splitting methods for non-Hermitian positive semidefinite linear systems // Numer. Math. 2004. Vol. 98. P. 1–32.

МНОГОСЕТОЧНЫЙ МЕТОД В ЗАДАЧАХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МЕХАНИКИ ЖИДКОСТИ И ГАЗА

Муратова Г.В., Андреева Е.М.

Южно-Российский региональный центр информатизации

Южного федерального университета"

г. Ростов-на-Дону

Введение

Способность прогнозировать и контролировать процессы движения сред и переноса имеет важное значение для многих промышленных технологий, таких как самолетостроение, нефтедобыча, работа химических реакторов, прогнозирование погодных явлений, и многие другие [1]. CFD (Computational Fluid Dynamics) является разделом механики сплошных сред, в котором рассматриваются численные методы и алгоритмы решения задач, связанных с движением потоков среды. Ранее CFD являлась синонимом вычислительной гидродинамики, но в настоящее время этот термин имеет более широкое применение. Фундаментальной основой большинства задач CFD являются уравнения Навье-Стокса, которые описывают любые однофазные (газ или жидкость) потоки. Кроме того, в данном разделе исследований широко используется уравнение конвекции-диффузии.

При моделировании задач CFD обычно требуется решение систем линейных алгебраических уравнений большой размерности. Для решения таких систем, включающих несколько миллионов степеней свободы, прямые методы не всегда удобны, а итерационные методы обычно обладают низкой скоростью сходимости. Для решения подобных систем могут быть рассмотрены как гибридные методы, как и методы декомпозиции области [2]. Эти методы разделяют решение глобальных систем на решение нескольких подсистем, каждая из которых решается самостоятельно путем обмена информацией по так называемым интерфейс-условиям между соседними подсистемами. Для выполнения определенного алгоритма эти интерфейс-условия могут быть оптимизированы [3]. К сожалению, подобные методы не всегда хорошо сходятся, а использование методов переобуславливания может привести к дополнительным вычислительным затратам.

Многосеточные методы (MGM), как известно, являются основной альтернативой вышеперечисленных методов, особенно для эллиптических задач [4]. Они являются самыми эффективными из численных методов решения краевых задач [5]. Скорость сходимости многосеточного метода всегда независима от числа неизвестных в системе, полученной в результате аппроксимации дифференциального уравнения, то есть многосеточный метод обладает

неулучшаемой оценкой сходимости. Отправной точкой многосеточных методов является, следующее “золотое правило”: объем вычислительной работы пропорционален количеству реальных физических переменных.

В данной работе представлен краткий обзор по использованию многосеточных методов для решения задач CFD.

I Многосеточный метод: основные этапы развития

Впервые многосеточный метод был предложен Р.П. Федоренко [6] для уравнения Лапласа в единичном квадрате. Н.С. Бахвалов [7] теоретически обосновал более сложный случай для переменных коэффициентов. Хотя основная идея объединения дискретизации с использованием грубых сеток в итерационной схеме представляется весьма естественной, она не была известна до середины 1970-х годов. Доклад Хакбуша [8] и статья Брандта [9] стали дальнейшим прорывом в развитии метода. Кульминационной точкой развития можно считать первую большую конференцию по многосеточным методам в 1981 году в Кельне; материалы конференции под редакцией Хакбуша и Троттенберга [10] по-прежнему являются востребованным библиографическим источником. Монография Хакбуша в 1985 году [11] завершила первый этап развития теории многосеточного метода.

Большой вклад в развитие многосеточного метода внесли российские ученые. В 2003 году Г. Астраханцеву, Н. Бахвалову, Р. Федоренко, В. Шайдурову была вручена государственная премия Российской Федерации за цикл фундаментальных работ по созданию высокоэффективных многосеточных методов для численного решения широкого класса задач математической физики.

В настоящее время многосеточные методы используются почти во всех областях, где решаются уравнения в частных производных численными методами [12], [13]. Его эффективность обусловлена тем, что многосеточный метод позволяет решить линейную систему $N \times N$ с вычислительными затратами $O(N)$.

Существует два основных типа многосеточных методов: геометрический многосеточный (GMG) и алгебраический многоуровневый (AMG) методы. Основное различие между AMG и GMG связано со способом уменьшения размерности рассматриваемой СЛАУ [14]: AMG методы не требуют знания геометрии задачи [15]. GMG методы [12] используют фиксированные иерархии сеток и, следовательно, эффективное взаимодействие между сглаживающим методом и грубо-сеточной коррекцией должно обеспечиваться за счет выбора соответствующих процедур сглаживания [12]. С другой стороны, методы AMG [14], [15] фиксируют некоторый простой сглаживающий итерационный метод и обеспечивают эффективное взаимодействие с грубо-сеточной коррекцией путем выбора подходящих грубых сеток и способа интерполяции [12]. Иерархия сеток в AMG определяется на этапе установки (который является начальным), где исследуется матрица коэффициентов, выбирается способ

интерполяции, а также операторы грубо-сеточной коррекции [15], [16]. Применение AMG метода определяется задачами, в которых использование GMG метода является трудным или даже невозможным, например: неструктурированные сетки, сложные матричные уравнения, которые, вообще говоря, получаются не из непрерывных задач, экстремальные анизотропные уравнения и др. AMG - методы используются в тех случаях, когда нет информации о геометрии задачи [16]. В таблице 1 представлено сравнение AMG и GMG методов [17].

Таблица 1. Сравнение AMG и GMG методов

Характеристика	GMG	AMG
Решаемая задача	Непрерывные задачи	Линейные системы алгебраических уравнений
Используемая информация	Геометрическая структура задачи	Только матрицы
Программа	Создание программы для каждой задачи	Только одна программа для различных задач
Эффективность	Очень хорошая	Хорошая

Обе стратегии, GMG и AMG, состоят из аналогичных этапов. На первом этапе осуществляется построение иерархии грубых сеток (уровней), которое сопровождается передачей информации между различными сетками (операторы restriction-prolongation, ограничения и продолжения). Затем происходит решение СЛАУ с помощью итерационного метода (сглаживателя), в зависимости от выбора цикла многосеточного метода (F-, V- или W-цикл) [12]. Выбор итерационного метода, используемого в качестве сглаживателя, операторов ограничения и продолжения часто требуют значительных теоретических исследований.

Согласно Троттенбергу и соавторам [12], одно изменение в алгоритме может привести к значительному снижению процессорного времени. Эффективность многосеточных методов также тесно связана с адаптацией компонент метода, которые должны быть правильно выбраны в соответствии с исходной физической задачей и вариационной формулировкой [18]. К сожалению, в литературе пока не представлены полные исследования эффективности AMG алгоритма и его оптимизации. В некоторых работах предлагаются новые алгоритмы огрубления сеток, и/или новые операторы интерполяции [19], в других работах проводится сравнение производительности AMG методов с GMG методами [18], [20]. В таких сравнениях ограничиваются процессорным временем, числом циклов и изучением эффективности многосеточного метода при использовании ускоряющих коэффициентов.

Процессорное время и его рост, в соответствии с числом неизвестных, для AMG и GMG представлены в работе [20]. Оба типа многосеточных методов

изучались также Лангером и Пучем [18], в их работах представлено сравнение числа проведенных циклов AMG и GMG, а также временные требования для генерации вспомогательных сеток. Число циклов было исследовано Ву и Элманом [21], которые использовали условие устойчивости в качестве критерия останковки: согласно результатам для задач конвекции-диффузии GMG сходится медленнее, чем AMG. Кампос и др. [22] провели сравнение производительности AMG и GMG, как при распараллеливании, так и при использовании алгоритмов предобуславливания, используемых для решения нелинейной системы дифференциальных уравнений.

Для GMG алгоритмов проведены достаточно полные исследования параметров многосеточного метода. В работах Гаспара и соавторов [23] представлены теоретические и численные результаты для GMG с треугольными сетками, исследования различных многосеточных циклов, исследование числа сглаживающих итераций и рассмотрение нового сглаживателя. Оливье-ра и соавторы [24] приводят алгоритм вычисления оптимальных значений для сглаживающих итераций и уровней для решения задач теплопереноса на структурированной квадратной сетке.

Вычислительная гидродинамика (CFD) приводит к появлению систем большой размерности, требующих эффективных методов решения. Не удивительно, что MGM нашли применение в CFD на ранней стадии своего развития. Уравнение сжимаемого потенциала было решено с помощью MGM в 1976 году, чуть позднее появились работы по использованию MGM для уравнений Навье-Стокса [25], [26].

II MGM для уравнений Навье-Стокса

Многосеточный метод является одним из широко распространенных численных методов решения уравнений Навье-Стокса [27]. Было доказано, что классический многосеточный метод чрезвычайно эффективен при решении уравнения Пуассона для давления. При численном решении уравнений Навье-Стокса для больших чисел Рейнольдса возникают проблемы сходимости. Майклом [28] решены уравнения Навье-Стокса с использованием коррекции давления многосеточным методом с предобуславливанием методом Ньютона. Пинг [15] показал, что последовательный метод регуляризации может решить уравнение Навье-Стокса с высокими числами Рейнольдса. Но, как и для метода штрафных функций, мы получаем медленную скорость сходимости при использовании последовательного метода регуляризации [15].

Для нестационарных несжимаемых уравнений Навье-Стокса был предложен гибридный многосеточный метод [29]. Этот подход представлен для несжимаемого потока с большими числами Рейнольдса, и основан на многосеточном и последовательном регулярном методе. В [29] скорости приращения давления и последовательные регулярные уравнения выводятся из уравнения Навье-Стокса. В работе обсуждается оптимальное приращение

давления для рассматриваемого алгоритма. Численные результаты закрытого квадратного потока показывают, что предложенный авторами алгоритм улучшает скорость сходимости для нестационарного течения при больших числах Рейнольдса.

Представим подробнее один из подходов решения уравнений Навье-Стокса. Рассмотрим классическую формулировку уравнения Навье-Стокса в области $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ с границей $\partial\Omega$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = f_1,$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial P}{\partial y} - \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) = f_2,$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = f_3,$$

$$\begin{aligned} u(x, y, t) &= g_1(x, y, t), & v(x, y, t) &= g_2(x, y, t) & \partial\Omega, \\ u(x, y, 0) &= u_0(x, y), & v(x, y, 0) &= v_0(x, y). \end{aligned}$$

где Re – число Рейнольдса, а $V = (u(x, y, t), v(x, y, t))$ – поле скоростей, P – давление.

Рассматривается система двумерных нестационарных уравнений Навье-Стокса для двух компонент скорости и давления для несжимаемой вязкой жидкости. Для аппроксимации производной по времени и инерционных первых производных по пространству используется метод характеристик [30]. Дискретизация по пространству проводится методом конечных элементов. Этот смешанный метод аппроксимации был предложен О. Pironneau в 1980-м году, и получил развитие в настоящее время [31]. Авторами данной работы рассматривается смешанная формулировка метода конечных элементов, когда используется сочетание простых конечных элементов – билинейных для скоростей и постоянных для давления. Такое сочетание обеспечивает устойчивость расчета давления с дополнительным применением численной фильтрации.

В результате дискретизации получаем СЛАУ с симметричной матрицей, которая имеет знакопеременный спектр. Для решения этой системы используем многосеточный метод. Для уравнения Навье-Стокса было показано, что путем сочетания метода характеристик и метода конечных элементов мы можем получить консервативные схемы противотокового типа с первым и вторым порядком точности.

Применение комбинации метода характеристик и метода конечных элементов позволяет получить эффективный алгоритм. Эти схемы численно лучше, чем обычные противотоковые схемы, поскольку они требуют численного решения симметричных систем [32]. В этом случае многосеточный метод даже с методом простой итерации в качестве сглаживателя дает эффективные результаты решения уравнения Навье-Стокса.

III MGM для задач конвекции-диффузии

В качестве базовых моделей многих процессов механики жидкости и газа выступают краевые задачи для стационарных и нестационарных уравнений конвекции-диффузии. Анализ параметров алгебраических многосеточных методов для двумерных стационарных уравнений теплопереноса был представлен в [33]. В этой работе проведено сравнение параметров алгебраических многосеточных методов (AMG) и геометрических многосеточных методов (GMG), двумерных уравнений Лапласа и Пуассона на квадратных и треугольных сетках. Анализируемыми показателями являются внутренние итерации сглаживающего метода, сетки и неизвестные. Для AMG изучены эффекты коэффициента огрубления сетки и выявлена строгая зависимость коэффициента огрубления сетки от времени решения задачи. На квадратных сетках используется метод конечных разностей, а для треугольной сетки - метод конечных объемов. Результаты получены с использованием адаптированного кода AMG1R6 Руге и Стюбена. Для AMG используются следующие компоненты: стандартное огрубление, стандартная интерполяция, коррекция схемы (CS), лексикографический метод Гаусса-Зейделя и V-цикл. Проведено сравнение процессорного времени для GMG, AMG и для решения на единственной сетке. Было показано, что оптимальное число сглаживающих итераций не зависит от многосеточного метода, однако зависит от сетки. AMG показал чувствительность к обоим изменениям коэффициента огрубления сетки и строгую зависимость от коэффициента на грубой сетке. На квадратной сетке время вычисления процессора для метода GMG составляет 20% от AMG.

Модификация алгебраического многосеточного метода для эффективного решения на основе технологии GPGPU для нестационарных задач гидродинамики была представлена в [34]. Предложенная модификация легко реализуема и показывает экономию до 50% времени вычислений относительно первоначального алгоритма.

Как уже говорилось выше, алгебраический многосеточный метод (AMG) [12] является одним из наиболее эффективных методов для решения больших разреженных неструктурированных систем уравнений, возникающих, например, при дискретизации эллиптических дифференциальных уравнений. AMG применяет идеи геометрического многосеточного метода (сглаживание и грубо-сеточную коррекцию) к решению некоторых классов алгебраических систем уравнений. Основным преимуществом AMG (помимо надежности и эффективности) является его способность решать эллиптические уравнения в частных производных на неструктурированных сетках [35]. AMG может быть использован как черный ящик для решения различных вычислительных задач, так как он не требует никакой информации о геометрии области. Этот факт делает реализацию AMG на основе технологии GPGPU чрезвычайно привлекательной [36].

Алгоритм AMG состоит из двух основных этапов: этап установки (на-

стройки) и этап решения. Этап настройки в классической формулировке AMG очень трудно распараллелить из-за его последовательной природы. И, наоборот, этап решения позволяет прямое распараллеливание.

Когда GPGPU метод применяется на этапе решения, легко достигается десятикратное ускорение скорости сходимости метода [37]. Тем не менее, в соответствии с законом Амдала, мы не можем превысить скорость ускорения в $3 \times$ раз для решения одной системы уравнений, так как около 30% вычислительной работы происходит на этапе установки. В [34] было показано, что ограничение может быть ослаблено для решения нестационарных задач с постоянными или медленно меняющимися коэффициентами.

Гибридные многосеточные методы для решения задач конвекции-диффузии представлены в [4]. Разработанный Келифи и соавторами в 2011 году [38] подход является эффективной модификацией многосеточного метода, предназначенного для решения задач конвекции-диффузии. Предложенная схема с разделением операторов допускает отдельную обработку каждого оператора: в то время как кусочно-постоянный оператор используется для конвективной части, каждый недиагональный элемент оператора диффузии на грубой сетке определяется геометрическими факторами. Численные эксперименты иллюстрируют быструю сходимость и особую надежность предлагаемого алгоритма по сравнению с другими известными методами.

Усложнение геометрии исследуемых областей и физическое моделирование делает использование геометрических многосеточных методов более сложным. Алгебраические многосеточные методы (AMG) используются при решении задач, которые не требуют никакой информации о геометрии области [35]. Построение иерархии сеток полностью автоматизировано. Уровни создаются с помощью чисто алгебраических объектов, таких как матричные элементы. Алгебраические многосеточные методы хорошо исследованы для решения симметричных положительно определенных задач с диагональным преобладанием – M-матриц, получающимся в результате дискретизации второго порядка точности скалярных эллиптических уравнений. При определенной модификации, они успешно используются в несимметричных и более общих случаях [16], [35].

Благодаря вышеизложенным подходам стало возможным решение большого класса линейных систем, связанных с дискретизацией скалярных дифференциальных уравнений в частных производных на неструктурированных сетках. Среди различных подходов AMG можно привести классический AMG [35] (часто называемый Руге-Стюбен подход), AMG_e (алгебраические многосеточные методы для конечных элементов), AMG со свободным элементом [39], адаптивные методы и методы агрегации [40]. Последние можно рассматривать как предельный случай Руге-Стюбен многосеточного метода, особенность которого заключается в специальной интерполяции в точках грубой сетки [35].

В [41] предложен другой подход, который называется "сглаженная агрегация". Он улучшает сходимость многосеточного метода, но неудобство его

использования состоит в том, что он увеличивает количество внедиагональных элементов матрицы на грубых уровнях.

В работах [38], [40], [43], [4] предложены еще несколько многосеточных алгоритмов решения задачи конвекции-диффузии.

Далее представим один из эффективных алгоритмов решения задачи конвекции-диффузии с преобладающей конвекцией.

IV MGM для задач конвекции-диффузии с преобладающей конвекцией

Рассмотрим модельную задачу в области $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^2 \left(v_k(x) \frac{\partial u(x)}{\partial x_k} + \frac{\partial(v_k(x)u(x))}{\partial x_k} \right) - \frac{1}{Pe} \sum_{k=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial u(x)}{\partial x_k} \right) &= f(x), \quad x \in \Omega \\ u(x) &= 0, \quad x \in \partial\Omega, \end{aligned} \quad (1)$$

где $x = (x_1, x_2)$. Уравнение (1) имеет малый параметр при старшей производной. Мы считаем среду несжимаемой $div V = \sum_{k=1}^2 \frac{\partial v_k}{\partial x_k} = 0$.

Для дискретизации уравнения (1) используется метод конечных разностей с центральными разностями для аппроксимации первых производных. Получаем систему линейных алгебраических уравнений с сильно несимметричной матрицей:

$$L_h u_h = f_h, \quad (2)$$

которая рассматривается на сетке

$$G_h = \left\{ (x_1, x_2) : x_k = ih, h = \frac{1}{n}, n \in \mathbb{N}, k = 1, 2, i \in \mathbb{Z} \right\},$$

где u_h и f_h сеточные функции на G_h , и L_h линейный оператор $L_h : E(G_h) \rightarrow E(G_h)$, с $E(G_h)$ – линейное пространство сеточных функций определенных на G_h .

Соответствующий оператор L_h , матрицы L является сильно несимметричным, без диагонального преобладания. Тем не менее, матрица L диссипативна, это означает, что ее симметричная часть положительно определена:

$$L = L_0 + L_1,$$

где $L_0 = \frac{1}{2}(L + L^*) = L_0^* > 0$, $L_1 = \frac{1}{2}(L - L^*) = -L_1^*$ – симметричная и кососимметричная части матрицы L . В некоторой матричной норме имеет место равенство

$$\|L_0\|_* \ll \|L_1\|_*.$$

Матрица L_1 может быть представлена как сумма

$$L_1 = K_l + K_u \quad \text{и} \quad K_u = -K_l^*,$$

где K_l и K_u являются соответственно нижне и верхнетреугольными частями кососимметричной матрицы L_1 .

Для решения линейной системы (2), мы предлагаем использовать MGM, где треугольный кососимметричный итерационный метод (ТКМ) будет использоваться в качестве сглаживателя в MGM методе [42], [43].

Рассмотрим структуру ТКМ метода. Любой итерационный метод можно записать в каноническом виде:

$$B \frac{u_{n+1} - u_n}{\tau} + Lu_n = f, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

Выбор оператора B определяет треугольный кососимметрический итерационный метод из класса ТКМ. Для стандартного ТКМ, оператор B строится следующим образом:

$$B = E + 2\tau K_l \quad \text{или} \quad B = E + 2\tau K_u. \quad (4)$$

Для ТКМ1:

$$B = \alpha E + 2K_l \quad \text{или} \quad B = \alpha E + 2K_u, \quad (5)$$

и для ТКМ2:

$$B = \alpha_i E + 2K_l \quad \text{или} \quad B = \alpha_i E + 2K_u, \quad (6)$$

где τ – скалярный параметр. Параметры предложенного метода $\alpha_i, \alpha > 0$ получаем под формулам:

$$\alpha = \|M\|, \quad \alpha_i = \sum_{j=0}^n |m_{ij}|, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

где $M = \{m_{ij}\}_0^n$ – симметричная матрица, полученная следующим образом:

$$M = A_0 + K_u - K_l,$$

n – размерность матрицы L .

Любой метод рассматриваемого класса имеет такое же поведение, что и итерационный метод Гаусса-Зейделя, т.е. быстро сглаживает высокочастотные, но не низкочастотные компоненты ошибки. Это необходимое свойство для сглаживателя многосеточного метода, поэтому мы используем эти методы в качестве сглаживателей в MGM.

Сходимость предложенных модификаций MGM с треугольными кососимметрическими сглаживателями рассмотрена в работе [43].

Для исследования свойств модификаций многосеточного метода с предложенными сглаживателями рассмотрим задачу (1) с различными полями скоростей, представленными в таблице 2.

Таблица 2. Поля скоростей для тестовых задач

Задача N	v_1	v_2
1	1	-1
2	$1 - 2x$	$2y - 1$
3	$x + y$	$x - y$
4	$\sin 2\pi x$	$-2\pi y \cos 2\pi x$

В проведенных численных экспериментах рассмотрены различные числа Пекле: $Pe = 1000, 10000, 100000$. Использовалась центрально-разностная аппроксимация на сетке 33×33 .

Задача (1) решалась многосеточным методом, с тремя видами сглаживателей: ТКМ, ТКМ1 и ТКМ2. Количество сглаживающих итераций в MGM равно 15. В таблице 3 представлены результаты сравнения предлагаемых модификаций MGM с треугольными кососимметричными методами в качестве сглаживателей с методом Гаусса-Зейделя на сетке 33×33 . Символ D означает, что на данной задаче метод не сошелся.

Численные результаты показывают, что: а) предложенные модификации многосеточного метода с треугольными итерационными сглаживателями показали свою эффективность для решения задач конвекции-диффузии с преобладающей конвекцией; б) многосеточный метод со сглаживателями ТКМ1 и ТКМ2 является более эффективным для задач, чем MGM со сглаживателем ТКМ. Наиболее эффективным методом при решении задач конвекции-диффузии с преобладающей конвекцией является MGM со сглаживателем ТКМ2, в) наибольшее влияние на поведение метода оказывает коэффициент кососимметрии $\kappa = Pe \cdot h^* |v| / 2$.

V Заключение

Многосеточные методы широко используются при решении задач вычислительной механики жидкости и газа. В данной работе представлены некоторые из алгоритмов и подходов для решения уравнений Навье-Стокса и конвекции-диффузии. В частности, для уравнений Навье-Стокса было показано, что путем комбинирования метода характеристик и метода конечных элементов мы можем получить консервативные схемы противопотокового типа с первым и вторым порядком точности, которые эффективно решаются многосеточным методом. Кроме того, в числе приведенных методов решения уравнения конвекции-диффузии более подробно рассмотрена модификация многосеточного метода для решения задач конвекции-диффузии с преобладающей конвекцией, где в качестве сглаживателей используются треугольные кососимметричные методы. Проведенные теоретические и численные исследования показывают эффективность данной модификации многосеточного метода для рассматриваемого класса задач.

Таблица 3. Число итераций MGM и время расчета на сетке 32×32

Pe	MGM (Зейдель)	MGM (ТКМ)	MGM (ТКМ1)	MGM (ТКМ2)	$\kappa = Pe \cdot h^* v /2$
Задача 1: $v_1(\mathbf{x}) = 1$ $v_2(\mathbf{x}) = -1$					
10	13 0:00:31	35 0:00:94	30 0:00:93	30 0:00:109	0,009765
100	63 0:00:188	7 0:00:16	5 0:00:15	5 0:00:15	0,097656
1000	D	13 0:00:31	9 0:00:47	9 0:00:31	0,976562
10000	D	78 0:00:250	58 0:00:203	58 0:00:188	9,765625
Задача 2: $v_1(\mathbf{x}) = 1 - 2x_1$ $v_2(\mathbf{x}) = 2x_2 - 1$					
10	22 0:00:62	72 0:00:188	53 0:00:172	50 0:00:171	0,009765
100	18 0:00:47	24 0:00:63	19 0:00:63	14 0:00:47	0,097656
1000	D	16 0:00:47	12 0:00:31	6 0:00:15	0,976562
10000	D	59 0:00:187	51 0:00:171	32 0:00:109	9,765625
Задача 3: $v_1(\mathbf{x}) = x_1 + x_2$ $v_2(\mathbf{x}) = x_1 - x_2$					
10	16 0:00:47	43 0:00:125	35 0:00:110	34 0:00:110	0,019531
100	23 0:00:62	9 0:00:31	7 0:00:15	5 0:00:15	0,195312
1000	D	17 0:00:47	12 0:00:31	8 0:00:31	1,953125
10000	D	74 0:00:219	55 0:00:187	36 0:00:125	19,53125
Задача 4: $v_1(\mathbf{x}) = \sin 2\pi x_1$ $v_2(\mathbf{x}) = -2\pi x_2 \cos 2\pi x_1$					
10	17 0:00:47	39 0:00:109	32 0:00:110	27 0:00:94	0,061359
100	D	16 0:00:47	12 0:00:47	7 0:00:31	0,613592
1000	D	29 0:00:94	22 0:00:78	10 0:00:31	6,135923
10000	D	193 0:00:625	159 0:00:562	57 0:00:187	61,35923

Литература

1. *D. Kuzmin*, A Guide to Numerical Methods for Transport Equations, University Erlangen-Nuremberg, 2010.
2. *A. Toselli, O. Widlund*, Domain Decomposition Methods: Algorithms and Theory, Springer, 2005.
3. *M.J. Gander, L. Halpern, F. Magoulès*, An optimized Schwarz method with two-sided Robin transmission conditions for the Helmholtz equation, Internat. J. Numer. Methods in Fluids, 55:2(2007), 163-175.
4. *S. Chaabane Khelifi, N. Méchitoua, F. Hülsemann, F. Magoulès* A hybrid multigrid method for convection-diffusion problems, J. Comput. Appl. Math., (2013), in press.
5. *I. Yavneh*, Why multigrid methods are so efficient, Comput. Sci. Engrg., 8(2006), 12-22.
6. *R.P. Fedorenko*, A relaxation method for solving elliptic difference equations Russian, J. Comput. Math. Math. Phys., 1(1961), 1092-1096.
7. *N.S. Bachvalov*, On the convergence of a relaxation method with natural constraints on the elliptic operator, USSR Comput. Math, and Math. Phys. 6:5(1966), 101-135.
8. *W. Hackbusch*, Ein iteratives Verfahren zur schnellen Auflösung elliptischer Randwertprobleme, Report 76-12, Mathematisches Institut der Universität zu Köln, 1976.
9. *A. Brandt*, Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems, Math. Comput. 31(1977), 333-390.
10. *W. Hackbusch, U. Trottenberg*, Multigrid Methods. Lecture Notes in Mathematics, 960, Springer, 1982.
11. *W. Hackbusch*, Multigrid Methods and Applications, Springer, Berlin, 1985.
12. *U. Trottenberg, C. Oosterlee, A. Schuller*, Multigrid, Academic Press, 2001.
13. *A. Thekale, T. Gradl, K. Klamroth, U. Rude*, Optimizing the number of multigrid cycles in the full multigrid algorithm, Numer. Linear Algebra Appl., 17(2010), 199-210.
14. *A. Brandt*, Algebraic multigrid theory: the symmetric case, Appl. Math. Comput., 19(1986), 23-56.
15. *R.D. Falgout*, An introduction to algebraic multigrid, Comput. Sci. Eng., 8(2006), 24-33.
16. *K. Stuben*, A review of algebraic multigrid, J. Comput. Appl. Math., 128(2001), 281-309.

17. *Q. Chang, Y.S. Wong, H. Fu*, On the algebraic multigrid, *J. Comput. Phys.*, 125(1996), 279-292.
18. *U. Langer, D. Pusch*, Comparison of geometrical and algebraic multigrid preconditioners for data-sparse boundary element matrices, *Lect. Notes Comput. Sci.*, 3743(2006), 130-137.
19. *Y. Xiao, S. Shu, P. Zhang, M. Tan*, An algebraic multigrid method for isotropic linear elasticity problems on anisotropic meshes, *Int. J. Numer. Biomed. Eng.*, 26(2010), 534-553.
20. *K. Watanabe, H. Igarashi, T. Honma*, Comparison of geometric and algebraic multigrid methods in edge-based finite element analysis, *IEEE Trans.Magn.*, 41(2005), 1672-1675.
21. *C.-T. Wu, H.C. Elman*, Analysis and comparison of geometric and algebraic multigrid for convection-diffusion equations, *SIAM J. Sci. Comp.*, 28(2006), 2208-2228.
22. *F.O. Campos, R.S. Oliveira, R.W. Santos*, Performance comparison of parallel geometric and algebraic multigrid preconditioners for the bidomain equations, *Lect. Notes Comput. Sci.*, 3991(2006), 76-83.
23. *F.J. Gaspar, J.L. Gracia, F.J. Lisbona, C. Rodrigo*, Efficient geometric multigrid implementation for triangular grids, *J. Comput. Appl. Math.*, 234(2010), 1027-1035.
24. *F. Oliveira, M.A.V. Pinto, C.H. Marchi*, Effect of multigrid method roads on the CPU time for the two-dimensional Laplace equation, *Proc. XXIX Iberian-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering*, Maceiy-Brazil, 2008, 1-21
25. *P. Wesseling, P. Sonneveld*, Numerical experiments with a multiple grid and a preconditioned Lanczos type method, in *Approximation Methods for Navier-Stokes problems* R. Rautmann, ed., *Lecture Notes in Mathematics*, 771, Springer, 1980, 543-562.
26. *X.F. Wang*, *Calculation Fluid Dynamics*, ShangHai Transportation University, 1992.
27. *A. Brandt*, *Multigrid techniques:1984 guide with applications to fluid dynamics*, Weizmann Institute of Science, 1995.
28. *P. Michael*, A hybrid multigrid method for the steady state incompressible Navier-Stokes equations, *Elec. Trans. Numer. Anal.*, 10(2000), 74-91.
29. *Zh. Shesheng*, A hybrid multigrid method for the unsteady incompressible Navier-Stokes equations, *Appl. Math. Comput.*, 138(2003), 341-353.
30. *A.V. Vyatkin*, A modified method of trajectories for the one-dimensional equation of continuity, *Proceedings of the Scientific Conference "Siberian Congress of Women Mathematicians (dedicated to Sofia Kovalevskaya)"*, SibSTU, Krasnoyarsk, (2012), 26-31.

31. *O. Pironneau*, On the Transport-Diffusion Algorithm and Its Applications to the NavierStokes Equations, *Numerische Mathematik* 38(1982), 309-332.
32. *V.V. Shaidurov*, Multigrid methods for finite elements, Kluwer Academic Publishers, London, 1995.
33. *R. Suero* , *M.A.V. Pinto*, *C.H. Marchi* , *L.K. Araki*, *A.C. Alves*, Analysis of algebraic multigrid parameters for two-dimensional steady-state heat diffusion equations, *Appl. Math. Model.*, 36:7(2012), 2996-3006.
34. *D.E. Demidova*, *D.V. Shevchenkob*, Modification of algebraic multigrid for effective GPGPU-based solution of nonstationary hydrodynamics problems, *J. Comp. Science*, 3:6(2012), 460-462.
35. *K. Stuben*, Algebraic multigrid (AMG): an introduction with applications, GMD Report 70, GMD, Sankt Augustin, Germany, 1999.
36. *C. Dick*, *J. Georgii*, *R. Westermann*, A real-time multigrid finite hexahedra method for elasticity simulation using CUDA, *Simul. Model. Practice and Theory*, 19:2(2011), 801-816.
37. *D.E. Demidov*, *A.G. Egorov*, *A.N. Nuriev*, Parallel programming with NVIDIA CUDA technology for solution of hydrodynamics problems, in: *D.A. Movchan* (Ed.), *Basic CUDA Programming*, DMK, Press, Moscow, 2010, 194-205.
38. *S. Khelifi*, *N. Méhitoua*, *F. Hülseman*, *F. Magoulès*, An aggregation based algebraic multigrid method applied to convection-diffusion operators, *FVCA VI Problems & Perspectives*, in: *Springer Proceedings in Mathematics*, 4(2011), 597-604.
39. *V.E. Henson*, *P.S. Vassilevski*, Element-free AMGe: general algorithms for computing interpolation weights in AMG, *SIAM J. Sci. Comput.*, 23(2001), 629-650.
40. *P.W. Hemker*, On the order of prolongations and restrictions in multigrid procedures, *J. Comput. Appl. Math.*, 32(1990), 423-429.
41. *P. Vanek*, *J. Mandel*, *M. Brezina*, Algebraic multigrid by smoothed aggregation for 2nd order and 4th order elliptic problems, *Computing*, 56(1996), 179-196.
42. *L.A. Krukier*, Skew-symmetric iterative methods for solving stationary convection-diffusion problem with a small parameter highest derivative. *Proceedings of the higher education institutions. Mathematics*, 4(1997), 77-85.
43. *G.V. Muratova*, *E.M. Andreeva*, Multigrid method for solving convection-diffusion problems with dominant convection, *J. Comput. Appl. Math.*, 226(2009), 77-83.

О МОДЕЛИРОВАНИИ ПАССИВНОГО МАССОПЕРЕНОСА В РУСЛОВЫХ ПОТОКАХ

Надолин К.А.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

Обсуждаются особенности распространения пассивной примеси в русловых потоках и рассматриваются редуцированные трехмерные математические модели адекватной сложности.

Введение

При моделировании массопереноса в русловых потоках на основе уравнения конвекции-диффузии возникает ряд вопросов относительно математической модели, описывающей процесс. Во-первых, большое количество естественных водотоков имеют относительно малую глубину и большую протяженность области течения. С одной стороны, имеется явно выраженное преимущественное направление массопереноса вдоль потока, с другой стороны, процесс диффузии приводит к неравномерному распределению вещества поперек и по глубине потока. Возникает вопрос, какова должна быть размерность используемой математической модели? Пространственно одномерные модели в ряде случаев оказываются слишком грубыми, а моделирование на основе полных трехмерных уравнений часто оказывается неоправданно трудоемким из-за вычислительной необходимости применения для сильно вытянутых областей сеток с очень большим числом узлов. Двумерные модели (профильные, плановые и модели на сечении) представляются хорошим компромиссом, однако из дальнейшего будет видно, что использовать их надо с осторожностью.

Следующий вопрос касается задания скорости потока, которая входит в уравнение конвекции-диффузии как известная вектор-функция. Существуют три варианта решения этой проблемы. В первом случае вопрос определения скорости несущего потока выносятся за рамки исследования, задавая ее произвольным образом. Очевидно, что такой подход неприемлем при моделировании конкретных водотоков. Другой подход состоит в использовании данных о характере течения, полученных из имеющихся гидрологических наблюдений за моделируемым водотоком или аналогичным водным объектом. В этом случае адекватность модели и точность результатов моделирования будут определяться степенью совпадения фактической гидродинамики рассматриваемого потока и используемыми данными прошлых измерений. Третий подход состоит в использовании при решении уравнения конвекции-диффузии поля скорости, полученного из модели гидродинамики того же потока. Данный подход является наиболее обоснованным и позволяет получать наиболее точные результаты. Однако сложность используемой математической модели, включающей помимо уравнения конвекции-диффузии еще и уравнения

гидродинамики руслового потока, значительно возрастает. Ситуация усугубляется тем, что естественные водотоки всегда являются турбулентными, поэтому совокупная математическая модель должна учитывать турбулентность течения.

В работе [1] предложена методика построения математических моделей массопереноса в русловых потоках. В основу положено приведение уравнения конвекции-диффузии для пассивной примеси и уравнений Рейнольдса для несжимаемой жидкости, замкнутых на основе гипотезы Буссинеска, к безразмерному виду, содержащему параметры мелководности и протяженности потока. Исходя из соотношения этих параметров предложена классификация потоков.

Для моделирования массопереноса мелкими протяженными течениями предлагается использовать уравнения для старших членов асимптотического разложения неизвестных величин в ряды по параметру мелководности (или протяженности), который считается малым. В результате получаются модельные уравнения, которые описывают распространение пассивной примеси в русловых потоках как пространственно трехмерный процесс, при этом они существенно проще полных трехмерных уравнений, а в некоторых случаях – и двумерных.

I Редуцированные модельные уравнения

Редуцированная математическая модель перемешивания примеси для мелких протяженных потоков в безразмерных переменных имеет вид [1]

$$\begin{aligned} \partial_t c + u \partial_x c + v \partial_y c + w \partial_z c = \partial_z (D \partial_z c) - \lambda c, \\ c|_{t=0} = c^0, \quad \partial_x c|_{x=0} = \pi_0, \quad \partial_z c|_{z=h} = \partial_z c|_{z=\xi} = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь c – концентрация примеси; u , v и w – продольная, поперечная и вертикальная компоненты вектора скорости; D и λ – параметры турбулентной диффузии и распада вещества. Известные функции $c^0(x, y, z)$ и $\pi_0(t, y, z)$ задают начальное распределение концентрации и его приток через входное сечение рассматриваемого участка, соответственно. Русло потока описывает уравнение $z = h(x, y)$, где $h(x, y)$ – известная функция, а свободную границу – уравнение $z = \xi(t, x, y)$, где $\xi(t, x, y)$ – неизвестная функция.

Модельные уравнения для продольной компоненты скорости и давления при отсутствии поверхностных внешних сил имеют вид

$$\partial_z (\nu \partial_z u) = -GI, \quad u|_{z=h} = 0, \quad \partial_z u|_{z=\xi} = 0; \quad \partial_z p = GRe^{-1}, \quad p|_{z=\xi} = 0 \quad (2)$$

Здесь ν – турбулентная вязкость, G – гравитационный параметр, I – уклон потока, Re – число Рейнольдса.

Решение задачи (2) выражается через функцию возвышения свободной поверхности $\xi(t, x, y)$ и имеет вид

$$u = GI (J_2 - \xi J_1), \quad p = GRe^{-1} (z - \xi) \quad (3)$$

где величины $J_1(x, y, z)$ и $J_2(x, y, z)$ следует считать известными функциями, вид которых будет указан ниже. Как и следовало ожидать, давление в потоке оказывается распределено по гидростатическому закону.

Для поперечной компоненты скорости для различных типов потоков по классификации [1] получаем разные модельные уравнения.

В случае *мелкого протяженного* потока имеем

$$\partial_z (\nu \partial_z v) = Re \partial_y p, \quad v|_{z=h} = 0, \quad \partial_z v|_{z=\xi} = 0 \quad (4)$$

Решение задачи (4) также выражается через функцию возвышения свободной поверхности $\xi(t, x, y)$ аналогично решению (3)

$$v = G \partial_y \xi (J_2 - \xi J_1)$$

В случаях *очень мелкого протяженного* и *мелкого широкого* потоков ставится краевая задача

$$\partial_z (\nu \partial_z v) = 0, \quad v|_{z=h} = 0, \quad \partial_z v|_{z=\xi} = 0,$$

решение которой тривиально

$$v = 0$$

Для поперечной компоненты скорости *мелкого сильно протяженного* потока имеем модельные уравнения вида

$$\partial_z (\nu \partial_z v) = -G \partial_y \tilde{\xi}, \quad v|_{z=h} = 0, \quad \partial_z v|_{z=\xi} = 0 \quad (5)$$

где $\tilde{\xi}$ – поправка к функции возвышения свободной поверхности ξ .

Решение задачи (5) имеет вид

$$v = G \partial_y \tilde{\xi} (J_2 - \xi J_1)$$

Поперечная скорость потока определяется из уравнения неразрывности

$$\partial_z w = -(\partial_x u + \partial_y v), \quad w|_{z=h} = 0$$

и имеет вид, соответственно

– для *мелкого протяженного* потока

$$w = G (I \partial_x (J_4 - \xi J_3) + \partial_y ((J_4 - \xi J_3) \partial_y \xi))$$

– для *очень мелкого протяженного* и *мелкого широкого* потоков

$$w = GI \partial_x (J_4 - \xi J_3)$$

– для *мелкого сильно протяженного* потока

$$w = G \left(I \partial_x (J_4 - \xi J_3) + \partial_y \left((J_4 - \xi J_3) \partial_y \tilde{\xi} \right) \right)$$

В приведенных выше формулах обозначено

$$J_1 = \int_z^{h(x,y)} \frac{d\tau}{\nu}, \quad J_2 = \int_z^{h(x,y)} \frac{\tau d\tau}{\nu}, \quad J_3 = \int_z^{h(x,y)} J_1 d\tau, \quad J_4 = \int_z^{h(x,y)} J_2 d\tau. \quad (6)$$

Поскольку турбулентная вязкость ν согласно гипотезе Буссинеска должна быть задана, величины $J_i(x, y, z)$, $i = 1 \div 4$ являются известными функциями.

Таким образом, давление и компоненты скорости выражаются через функцию возвышения свободной поверхности, которая должна определяться из кинематического краевого условия соответствующей модели потока.

Для *мелкого протяженного* потока имеем

$$\partial_t \xi = G [I (\partial_x (J_4 - \xi J_3) - (J_2 - \xi J_1) \partial_x \xi) + (J_4 - \xi J_3) \partial_{yy} \xi + \partial_y \xi (\partial_y (J_4 - \xi J_3) - (J_2 - \xi J_1) \partial_y \xi)] \quad (7)$$

Для *очень мелкого протяженного* и *мелкого широкого* потоков имеем

$$\partial_t \xi = GI (\partial_x (J_4 - \xi J_3) - (J_2 - \xi J_1) \partial_x \xi) \quad (8)$$

Для *мелкого сильно протяженного* потока имеем

$$\partial_t \xi = G \left[I (\partial_x (J_4 - \xi J_3) - (J_2 - \xi J_1) \partial_x \xi) + \partial_y \left((J_4 - \xi J_3) \partial_y \tilde{\xi} \right) \right] \quad (9)$$

при дополнительном условии

$$I (\partial_x (\partial_y J_4 - \xi \partial_y J_3) - (\partial_y J_2 - \xi \partial_y J_1) \partial_x \xi) + \partial_{yy} \left((J_4 - \xi J_3) \partial_y \tilde{\xi} \right) = 0 \quad (10)$$

В формулах (7)-(10) функции J_i и их производные вычислены на свободной границе (т.е. при $z = \xi$).

II Анализ редуцированных моделей

Обсуждая особенности рассмотренных редуцированных моделей русловых потоков, отметим следующие моменты. Во-первых, хотя задача определения поля скорости не связана с задачей определения поля концентрации (т.н. "пассивная примесь"), они согласованы по точности приближения, что отражается в учете в уравнении (1) диффузии вещества лишь по вертикальному направлению.

Во-вторых, для всех типов потоков продольная скорость определяется из единой краевой задачи. Заметим, что для ответа на многие практически важные вопросы (например, определение расхода для потока или момента достижения примесью заданного сечения русла), требуется знание лишь продольной скорости. Пространственно двумерное моделирование означает выбор варианта очень мелкого протяженного или мелкого широкого потоков, при этом

поперечная координата входит в уравнения как параметр. Последнее обстоятельство позволяет применить простой способ расщепления трехмерной задачи на двумерные по продольным сечениям, что может быть удобно при использовании параллельных вычислений.

В-третьих, модельные уравнения позволяют полуэмпирически учитывать турбулентность потока, выбирая в формулах (6) функциональный параметр турбулентной вязкости $\nu(x, y, z)$ исходя из соответствия получаемой скорости имеющимся экспериментальным данным. При этом вид функции $\nu(x, y, z)$ может быть достаточно произвольным (требуется лишь близость к единице значений на поверхности потока и убывание по направлению ко дну до близких к нулю значений). Вместе с тем, при $\nu \equiv 1$ результаты должны соответствовать ламинарному течению.

Поскольку определение гидродинамических полей сводится к нахождению функции возвышения свободной поверхности (и ее возмущения), важно установить, можно ли предполагать свободную поверхность потока стационарной и плоской. Общий ответ оказывается отрицательным.

Действительно, при $\xi \equiv 0$ из (7) и (8) имеем

$$GI\partial_x J_4 = 0. \quad (11)$$

Это возможно только для определенной геометрии русла, например, при отсутствии уклона ($I = 0$), а также для течения в прямолинейном канале постоянного сечения. В этом случае в формулах (6) надо считать $h = h(y)$ и $\nu = \nu(y, z)$, откуда $\partial_x J_4|_{z=0} = 0$ и, следовательно, условие (11) будет выполнено.

Для мелкого сильно протяженного потока при $\xi \equiv 0$ из (9) имеем

$$\partial_y \left(J_4 \partial_y \tilde{\xi} \right) = -I \partial_x J_4$$

при этом условие (10) выполняется автоматически.

Таким образом, задача нахождения свободной границы является основной для определения гидродинамики потока в рамках каждой модели. Для ее решения требуется задать начальную форму свободной поверхности, а также граничное условие во входном створе $x = 0$ и на берегах потока.

В заключение отметим, что даже для мелких водотоков возвышение свободной поверхности во многих случаях существенно меньше их глубины. В таких случаях функция $\xi(x, y, t)$ будет весьма мала, и ее вкладом при вычислении скорости потока можно пренебречь.

Литература

1. *Надолин К. А.* Об одном подходе к моделированию пассивного массопереноса в русловых потоках // Математическое моделирование. 2009. Т. 21, N 2. С. 14–28.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ НАЧАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ ЭЛЕМЕНТОВ КОНСТРУКЦИИ СИСТЕМЫ АВАРИЙНОГО СПАСЕНИЯ НА ТЕМПЕРАТУРНЫЙ РЕЖИМ НА УЧАСТКЕ ВОЗВРАЩЕНИЯ

Наливайко С. И.

Ракетно-космическая корпорация «Энергия»

им. С. П. Королёва, г. Королёв

Московский физико-технический институт (государственный университет), г. Долгопрудный

Для системы аварийного спасения РН «Союз» имел место случай несанкционированного запуска двигателя системы аварийного спасения (САС) в процессе автономного полёта. Для выяснения возможных причин указанного явления проведены расчётные исследования температурного режима двигателя САС на всех участках эксплуатации по использованию данной системы.

При этом особое внимание было уделено влиянию начальной температуры на максимальную температуру рабочего тела в процессе полёта, и так же рассмотрен случай, когда теплоизоляционный слой корпуса двигателя САС был бы тоньше или был разрушен полностью, например, вследствие давления со стороны рабочего тела. Из экспериментальных данных стало известно, что имели место случаи, когда исследуемый объект не охлаждался в течение некоторого промежутка времени после старта ракеты. В связи с чем, в данной работе рассматривается, в том числе и модель такого движения. Таким образом, были проведены параметрические расчёты по исследованию влияния определяющих параметров на критическую температуру рабочего тела. Расчётное исследование температурного режима проводилось в двумерной постановке. Определены условия, при которых будет достигаться критическая температура рабочего тела (температура воспламенения ракетного топлива).

Постановка задачи:

Двигатель САС представляет собой 3х-мерное цилиндрическое тело, но поскольку продольная координата превышает поперечную, то для анализа принята двумерная модель. За основу принято, что начальная температура конструкции везде одинакова. Учитывая осевую симметрию 2-х мерной модели объекта, в качестве расчётной области выбрана 1/8 часть от круглой поверхности. Выделен фрагмент двигателя, приведенный на рисунке 1.

В силу симметрии задачи на границах расчётной области (Рис. 1) использовалось условие теплоизолированной поверхности (поток тепла через границы сегмента равен 0).

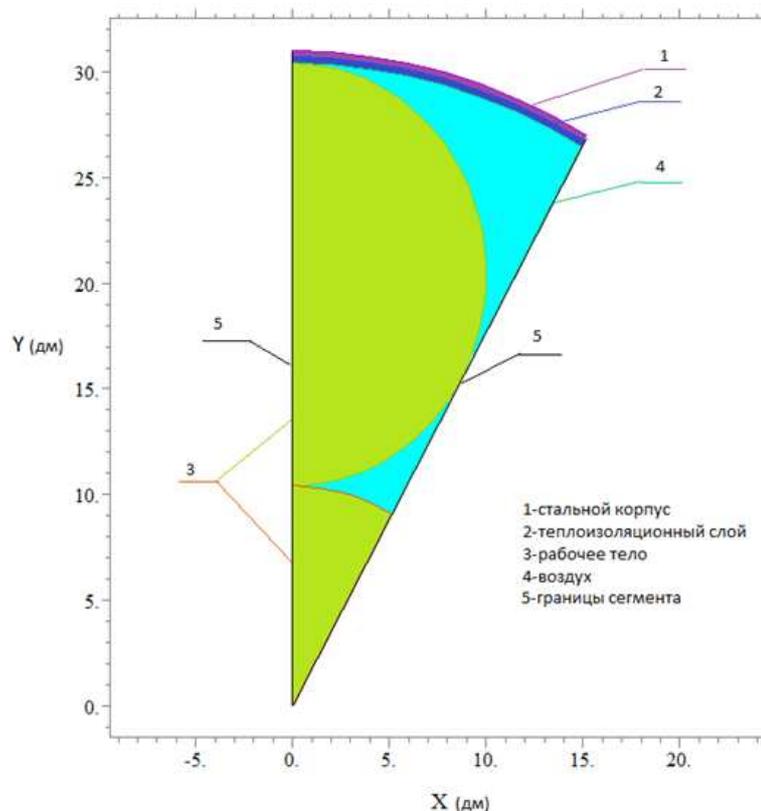


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемого объекта.

Принято что, имеет место теплообмен только с внешней средой (верхняя часть сегмента), без внутренних источников тепла. Распределение внешних потоков от угла не зависит (поток на верхнюю часть сегмента одинаков со всех сторон).

Распределение температур в расчётной области находится путем решения уравнения теплопроводности:

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} - \operatorname{div}(\lambda \cdot \operatorname{grad} T) = 0,$$

где C_p — теплоемкость, λ — коэффициент теплопроводности, ρ — плотность, T — температура.

Наружная поверхность цилиндра с диаметром D подвергается воздействию аэродинамического теплового потока $q_a = \alpha(T_0 - T_w)$. Кроме того, эта поверхность излучает тепло во внешнюю среду. Плотность потока излучения $q_r = \varepsilon \sigma T^4$, $\sigma = 5.67^8 \text{ Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К}^4)$. Тепловые потоки рассчитаны с помощью полуэмпирических формул работы [1] для коэффициента теплообмена (числа Нуссельта). Перенос тепла за счёт конвекции воздушных

потоков внутри конструкции пренебрежимо мал по сравнению с кондуктивным и радиационным переносом. В расчётах были использованы траекторные данные для α и T_0 в зависимости от времени полёта аппарата.

Система уравнений решалась численным методом, с учётом того, что давление и коэффициенты теплопроводности и теплоёмкости для воздуха являются функциями температуры. В ходе исследования варьировалась первоначальная температура конструкции от 27°C до 90°C , а так же, в методических целях, был просчитан полёт с первоначальной температурой в 150°C (физически недостижимой при нормальных условиях). Проведена серия расчётов с изменением толщины изоляционного слоя от 3 мм до 0 мм для каждой температуры. Для численного решения использовался программный комплекс FlexPDE.

Наиболее интересной зоной с позиции теплопередачи является область контакта рабочего тела с внутренней поверхностью теплозащиты корпуса (Рис. 2). В данном исследовании зона контакта принималась в качестве точки контакта.

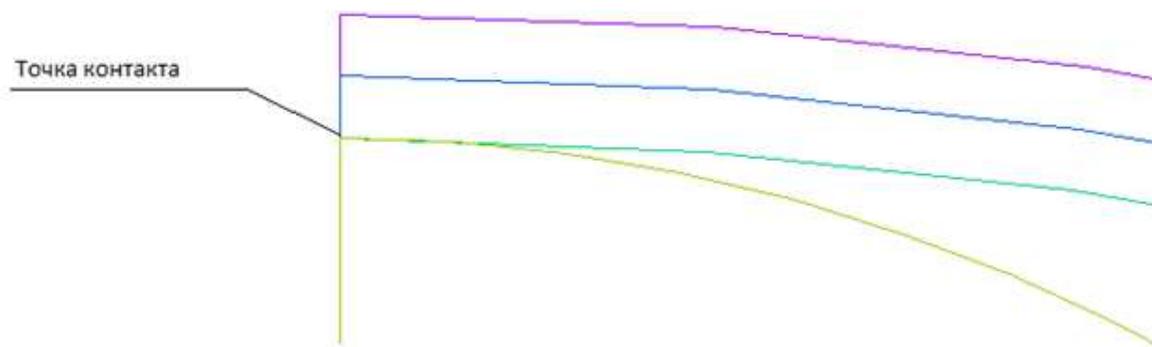


Рис. 2. Точка контакта в случае наличия изоляции (увеличенный фрагмент рисунка 1).

Были произведены две серии расчётов. А именно:

- i) Серия характеризуется стандартной атмосферой, т. е. внешние потоки тепла взаимодействуют с конструкцией непрерывно.
- ii) Серия характеризуется тем, что после старта ракеты первые 50 секунд полёта происходят без охлаждения поверхности САС посредством любых способов теплопередачи (внешние потоки тепла нулены).

При этом каждая серия расчётов разбита на 3 случая, в зависимости от толщины изоляции (3 мм, 1.5 мм и 0 мм). Для каждого случая построены графики зависимостей температур в различных точках конструкции от времени полёта (от 0 сек до 427 сек).

В рамках данной постановки задачи расчёты показали, что при изменении начальных температур конструкции от 27°C до 90°C критическая температура рабочего тела не достигается. Критическая температура может быть

достигнута при начальных температурах 92°C и выше. Таким образом, можно сделать вывод, что существуют и иные источники разогрева рабочего тела во время полёта ракеты для достижения критической температуры рабочего тела при нормальных условиях старта ракеты, которые в данной работе не учитывались.

Из всех проделанных расчётов построен следующий график:

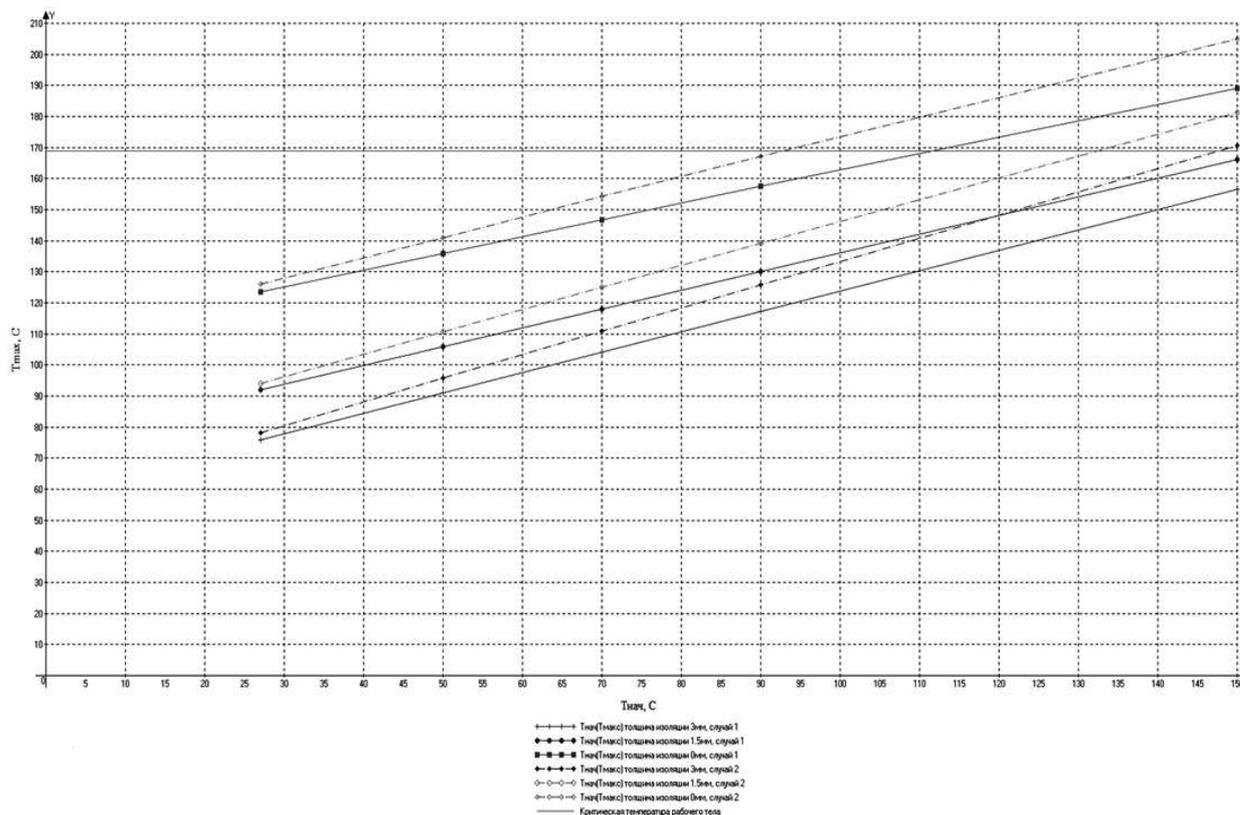


Рис. 3. График зависимости максимальных температур в зависимости от начальных температур в точках соприкосновений топливных шашек с теплоизоляцией или внешним корпусом конструкции, во всех рассмотренных случаях.

Литература

1. Основы теплопередачи в авиационной и ракетно-космической технике: Учебник для авиационных специальностей вузов / Под общ. ред. академика В. С. Авдеевского и проф. В. К. Кошкина. — М.: Машиностроение, 1992. — 528 с.
2. Полежаев Ю. В. и Юревич Ф. Б. Тепловая защита. Под ред. А. В. Лыкова. М.: «Энергия», 1976.
3. Дворецкий С. И., Ермаков А. А., Иванов О. О., Акулинин Е. И. Компьютерное моделирование процессов и аппаратов пищевой, био- и химической технологии в среде *FlexPDE*: Учеб. пособие / Тамбов: Изд-во Тамб. гос. тех. ун-та, 2006. 72 с.

STATISTICS TOOL KIT - ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ СРЕДСТВА ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ

Новаев Д.А., Липов Д.И., Колпаков С.И.

РФЯЦ-ВНИИЭФ ИТМФ, Саров

Введение

Эффективное управление и использование больших многопроцессорных ЭВМ требует наличия специализированного программного обеспечения, которое включает в себя средства мониторинга и анализа эффективности выполнения параллельных задач как во время выполнения (online), так и после завершения (offline). Для реализации данных средств необходимо измерение большого количества параметров, характеризующих эффективность использования аппаратных ресурсов параллельными задачами, таких как центральный процессор (ЦП), память и коммуникационная среда.

В РФЯЦ-ВНИИЭФ для этих целей разработаны собственные инструментальные средства исследования эффективности параллельных приложений *Statistics Tool Kit (STK)* [1]. Средства STK ориентированы на 3 группы пользователей: руководство, службы управления счетом и разработчиков параллельных программ. Руководству регулярно предоставляются данные по эффективности выполнения всех программных комплексов, запускаемых на компонентах НВК ИТМФ ВНИИЭФ. Службы управления счетом осуществляют контроль за эффективностью выполнения задач пользователей, и в случае низких показателей эффективности информируют исполнителей, а затем останавливают такие задачи для освобождения вычислительных ресурсов. Разработчики параллельных программ также имеют доступ ко всем данным STK, что позволяет определить признаки и причины падения эффективности выполнения программ, а затем улучшить их производительность.

I Основные функциональные возможности STK

Текущая версия STK обладает следующими возможностями:

- i) Сбор и представление данных по использованию параллельными приложениями проблемно-ориентированных библиотек MPI, IO, собственной разработки. Под проблемно-ориентированной библиотекой понимается некая библиотека подпрограмм или функций, которые используются программными комплексами ИТМФ при выполнении расчетов;
- ii) Анализ использования графических ускорителей (GPU) гибридных вычислительных систем;

- iii) Оценки реальной производительности параллельных программ (низкоуровневые метрики PAPI: счетчики инструкций, количество циклов на инструкцию, промахи кэшей и др.);
- iv) Оценки эффективности выполнения параллельных приложений с учетом использования интерфейсов OpenMP и POSIX threads;
- v) Единый унифицированный формат представления данных STK для сбора, хранения и представления любого количества и типа собираемых характеристик без модификации структуры БД и транспортной подсистемы STK;
- vi) Наличие STK API для разработки собственных приложений обработки данных STK;
- vii) Автосредства конфигурирования, настройки и установки на различные программные и аппаратные платформы;
- viii) Конфигуратор для автопостроения библиотек STK с требуемым набором функций-обертков вызовов проблемно-ориентированных библиотек;
- ix) Возможность сохранения данных в различные СУБД (MySQL, Oracle, PostgreSQL, собственная файловая БД и др.);
- x) Сбор данных с большого количества параллельных процессов (10000 и более);
- xi) Низкие накладные (менее 1% от суммарного времени выполнения программы);
- xii) Потокобезопасность STK - возможность безопасного использования ядра и средств разработки пользователя (API) STK в потоках (threads);
- xiii) Расширенная визуализация vSTK-2D с использованием WEB-технологий ExtJS.

На сегодняшний день STK собирает данные по использованию 4 проблемно-ориентированных библиотек. Это УРС-ОФ (единая унифицированная система расчета теплофизических свойств веществ) разработки ИТМФ и библиотеки сторонних разработчиков: MPI (реализации MVAPICH, OpenMPI и HPMPI); библиотека ввода-вывода ОС UNIX - libc; библиотеки CUDA, применяемые при расчетах на графических ускорителях NVIDIA. Возможен сбор данных по использованию любых библиотек, отвечающих ряду требований, а именно то, что они должны быть написаны на языках C/C++ или Fortran 77/90 под ОС UNIX.

II Оценки эффективности выполнения параллельных приложений

STK дает оценки эффективности выполнения параллельного приложения по следующим основным формулам:

- i) Показателем эффективности (1) является отношение сумм по каждому из процессов параллельной задачи времени арифметических вычислений или как еще можно назвать полезных вычислений к общему времени выполнения, выраженное в процентах.

$$E = \frac{\sum_{i=1}^n T_{calc_i}}{\sum_{i=1}^n T_{all_i}} 100\% \quad (1)$$

где

E - показатель эффективности выполнения параллельного приложения;

n - количество процессов распараллеливания;

T_{calc_i} - время арифметических вычислений i -го процесса;

T_{all_i} - общее календарное время выполнения i -го процесса.

- ii) Время арифметических вычислений (2) получается вычитанием от общего времени выполнения времен, затраченных на MPI и ввод-вывод, и так называемого времени простоя ЦП без учета простоя процессора при выполнении функций MPI или ввода-вывода. Последнее вычитаемое в формуле (2) учитывает использование интерфейсов OpenMP и POSIX Threads, так как использование средств синхронизации потоков (такие как взаимное исключение, критические секции и другие) приводит к простоям ЦП.

$$T_{calc} = T_{all} - T_{mpi} - T_{io} - T_{idle_cpu} \quad (2)$$

где

T_{calc} - время арифметических вычислений;

T_{all} - общее календарное время выполнения;

T_{mpi} - календарное время на MPI;

T_{io} - календарное время на ввод-вывод;

T_{idle_cpu} - время простоя ЦП без учета MPI и ввода-вывода.

Литература

1. Новаев Д.А., Бартенев Ю.Г., Липов Д.И., Колтаков С.И., Киселев А.Б., Серова Т.Н., Худякова Л.В. Программные средства STK для исследования эффективности выполнения параллельных приложений // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011 г. Вып. 4. С.72-81.

ВАРИАЦИОННОЕ УСВОЕНИЕ ДАННЫХ ДЛЯ МОДЕЛЕЙ КОНВЕКЦИИ-ДИФФУЗИИ-РЕАКЦИИ¹

Пененко А.В.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

В работе представлен численный алгоритм решения задачи усвоения данных, в которой по набору возмущённых значений функции состояния многомерной нестационарной модели конвекции-диффузии-реакции атмосферных примесей [1, 2] во внутренних точках пространственно-временной области, требуется уточнить и продолжить функцию состояния модели от имеющихся точек наблюдения. Схема усвоения данных со слабыми ограничениями строится посредством добавления в структуру априорных моделей физических процессов функций управления. Для такой расширенной модели рассматривается функционал невязки, описывающий расхождение между измеренными и вычисленными значениями. Введённые управляющие функции выступают в роли переменных для задачи минимизации функционала на фазовом пространстве модели. Таким образом, математическая модель выступает как естественный регуляризатор для некорректной задачи интерпретаций данных наблюдений.

Добавлением математической модели физических процессов в обобщенной постановке к целевому функционалу формируется расширенный функционал для задачи усвоения данных. Конструируются дискретные аналоги рассматриваемых агрегатов. Из условий стационарности для расширенного функционала получаются системы прямых и сопряженных уравнений, а также уравнения на введённые функции управления [3]. В общем случае полученная система может быть решена итерационно при определённых ограничениях на параметры усвоения.

Для моделей процессов конвекции-диффузии-реакции и окна усвоения длиной в один временной шаг дискретной модели, многомерная модель может быть декомпозирована с помощью методов расщепления на набор нестационарных одномерных моделей. В данной работе изучается эффективность применения аддитивно-усреднённых схем расщепления [4]. Мы предлагаем усваивать посредством прямых алгоритмов всю доступную информацию на одном модельном шаге по времени и соответствующих отдельных стадиях расщепления. Каждый такой одномерный фрагмент задачи усвоения, порождаемый расщеплением исходной модели, имеет вид трехдиагональной матричной задачи и может быть решен методом матричной прогонки [3, 5]. Такие версии алгоритмов экономичны с вычислительной точки зрения, эффективно

¹Работа поддержана Программами 4 Президиума РАН и 3 ОМН РАН, проектом РФФИ № 11-01-00187, а также Интеграционными проектами СО РАН 8 и 35.

распараллеливаются, и могут быть использованы в интегрированных моделях динамики и химии атмосферы. Учет химических трансформации осуществляется на соответствующей стадии расщепления. На этой стадии используются дискретно-аналитические численные схемы на основе локальных-сопряженных задач по времени, предложенные в [6].

Литература

1. *Пененко В.В.* Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоиздат, 1981. 352 с.
2. *Пененко В.В., Алоян А.Е.* Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Новосибирск: Наука, 1985. 256 с.
3. *Penenko V. V.* Variational methods of data assimilation and inverse problems for studying the atmosphere, ocean, and environment. Num. Anal. and Appl. 2009. Т. 2, № 4. С. 341–351.
4. *Самарский А.А., Вабичевич П.Н.* Аддитивные схемы для задач математической физики. М.: Наука, 2001. 313 с.
5. *Пененко А. В.* Некоторые теоретические и прикладные вопросы последовательного вариационного усвоения данных. Выч. тех. 2006. Т. 11, С. 35–40.
6. *Пененко В.В., Цветова Е.А.* Вариационные методы построения монотонных аппроксимаций для моделей химии атмосферы// Сибирский журнал вычислительной математики. 2013. Т.16. №3. С. 239-252.

ВАРИАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ ПОСТРОЕНИЯ ДИСКРЕТНО-АНАЛИТИЧЕСКИХ СХЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНИКИ ИНТЕГРИРУЮЩИХ МНОЖИТЕЛЕЙ¹

Пененко В.В.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

В докладе представлена новая вариационная методика построения дискретно-аналитических численных схем для задач математической физики, использующая фундаментальную идею интегрирующих множителей Л.Эйлера. Основные этапы построения численных схем прорабатываются на примерах стационарных и нестационарных задач конвекции-диффузии-реакции в рамках методов расщепления и декомпозиции. Для этих целей используется аппарат глобальных и локальных сопряженных задач, построенных при декомпозиции интегрального тождества вариационного принципа, сформулированного для обобщенного описания исходной задачи, на совокупность интегралов по конечным объемам. Для уравнений конвекции-диффузии дискретно-аналитические схемы обладают свойствами монотонности, транспортности и устойчивости. Эти аппроксимации точны в классе задач с разрывными кусочно-постоянными коэффициентами. К достоинствам этих схем относится также точный учет краевых условий первого, второго и третьего рода, а также условий периодичности. Кроме нахождения решения, алгоритм обеспечивает точное вычисление его производных на границах интервалов декомпозированной области. По этой методике монотонные дискретно-аналитические аппроксимации получаются и для вырожденного случая, когда коэффициенты диффузии обращаются в нуль. Для задач реакции (например, в приложениях для атмосферной химии и динамики аэрозолей) получается семейство монотонных устойчивых по времени численных схем второго и четвертого порядка точности.

Представим несколько замечаний по основным положениям методики.

1. К настоящему времени разработано несколько подходов к построению численных методов для решения линейных и нелинейных задач математической физики. К наиболее развитым и теоретически обоснованным можно отнести методы конечных разностей (МКР). Детальное изложение различных аспектов этих методов с анализом основных идей см., например, в монографиях Г.И.Марчука [1], А.А.Самарского [2], Вазова и Дж.Форсайта [10] и др.

Начиная с работы Р.Куранта (1943) [4], параллельно с МКР идет активный поиск вариационных, вариационно-разностных, проекционно-сеточных и других методов конечных элементов/объемов (МКЭ).

¹Работа поддержана Программами 4 Президиума РАН и 3 ОМН РАН, проектом РФФИ № 11-01-00187, а также Интеграционными проектами СО РАН 8 и 35.

Как некоторая альтернатива, а фактически очень полезное дополнение к МКР и МКЭ, начиная с семидесятых годов прошлого века, быстро и успешно развиваются методы граничных элементов (МГЭ), имеющих вариационную природу. В них органично сочетаются возможности конструктивного аппарата функций влияния, функций Грина и интегральных граничных уравнений. Подробное описание основных положений этих методов с примерами решения практических прикладных задач и обширным обзором публикаций можно найти, например, в [5].

Предлагаемая нами вариационная методика для построения дискретно-аналитических (ДА) численных схем для решения задач математической физики с использованием фундаментальной идеи интегрирующих множителей Эйлера [6], по нашему мнению, является еще одним направлением в дополнение к упомянутым выше МКР, МКЭ и МГЭ. В качестве основы для её построения мы принимаем вариационный принцип, разработанный для решения прямых и обратных задач динамики атмосферы, океана и охраны окружающей среды [7].

2. Заметим, что основные элементы в моделях природных процессов имеют структуру операторов задач конвекции-диффузии-реакции для различных функций состояния, участвующих в моделях. В современных моделях динамики и химии атмосферы обычно учитываются конвективно-диффузионные процессы переноса более ста различных примесей в газовом и аэрозольном состояниях. В механизмах их трансформации участвуют порядка 400 различных химических реакций и процессов коагуляции, нуклеации, конденсации/испарения. В результате, в моделях участвуют: порядка двухсот операторов конвекции-диффузии, около 100 нелинейных уравнений химической кинетики и около 50 интегро-дифференциальных уравнений динамики аэрозолей [8]. При реализации этих моделей значительная часть алгоритмической и вычислительной работы приходится на численное решение систем <жестких> дифференциальных уравнений, описывающих процессы химической трансформации газовых примесей и динамики аэрозольных популяций. Свойство <жесткости> соответствующих систем уравнений является следствием широкого диапазона характерных времен жизни различных субстанций, участвующих в реакциях.

3. Чтобы обеспечить согласование многомерных разномасштабных и различных по физическому содержанию процессов, вариационный функционал интегрального тождества строится так, чтобы из него, при специальном выборе пробных (сопряженных) функций, получалось уравнение баланса полной энергии системы. Предлагаемая методика алгоритмически реализуется с помощью разработанного ранее многоцелевого аппарата локальных, в пределах одного интервала, и глобальных, для системы в целом, сопряженных задач [9], построенных в рамках упомянутого выше глобального вариационного принципа. Особенно эффективен описываемый подход в многомерных случаях при реализации вариационных принципов в сочетании с методами декомпозиции и расщепления [10], [11] с параллельной организацией численных

схем и алгоритмов их реализации. По своим функциональным возможностям вариационные методы с интегрирующими множителями имеют хорошие перспективы для создания гибридных методов математического моделирования многомерных и разномасштабных процессов, объединяя лучшие качества переносимых выше трех направлений численного анализа.

4. Для построения аппроксимаций сначала осуществляется декомпозиция интегрального тождества всей системы по времени. Далее, на каждом временном интервале алгоритм решения задачи в целом состоит в решении четырех подзадач, соответствующих этапам расщепления. На первых трех из них решаются задачи конвекции-диффузии для каждой из субстанций независимо от других во всей пространственной области по трем координатным направлениям. Здесь используются дискретные по времени и аналитические по пространственным координатам численные схемы [9]. На четвертом этапе осуществляется взаимодействие всех субстанций: решается задача химической трансформации, которая рассматривается в каждой точке трехмерной сеточной области как система жестких ОДУ по времени на этом же интервале [12]. Входные параметры и начальные условия всей совокупности задач зависят от пространственных координат. В качестве приближенного решения задачи в целом для каждой из субстанций на текущий момент времени принимаются осредненные с весами значения решений всех четырех этапов расщепления [10], [11].

5. Рассмотрение блока химической трансформации на отдельном этапе в методе расщепления позволяет выполнять интегрирование уравнений химии атмосферы формально независимо для каждого конечного объема трехмерной сеточной пространственной области в пределах каждого шага по времени [8]. Известно, что явные схемы для интегрирования жестких систем ОДУ довольно затратны в вычислительном отношении для практических целей, так как в них, вследствие требований аппроксимации и устойчивости, очень сильны ограничения на величину шагов по времени. Поэтому наиболее употребительными для решения жестких систем являются многошаговые неявные методы: Рунге-Кутты в сочетании с модификациями итерационного метода Ньютона для нелинейных систем, методы Гира и Розенброка, а также комбинированные методы Рунге-Кутты и Розенброка, методы квазистационарных концентраций и др. С помощью интегрирующих множителей Эйлера, получаемых в результате решения локальных сопряженных задач, исходные системы ОДУ преобразуются в системы интегральных уравнений. Для их решения используются прямые безытерационные методы. Предлагаемая методика позволяет построить также эффективные алгоритмы для глобальных сопряженных задач, являющихся элементами решения обратных задач атмосферной химии [12].

6. В практике математического моделирования коэффициенты и источники уравнений могут сильно изменяться, что может привести к появлению разномасштабных неоднородностей, например, типа внутренних пограничных слоев в различных функциях состояния. Для адекватного воспроизведе-

дения таких ситуаций с помощью МКР, в них обычно вводятся многосеточные конструкции с использованием различных методов повышения точности приближенных решений, включая методы экстраполяции по Ричардсону. Соответственно, в МКЭ применяется многомасштабная техника типа подсеточного повышения разрешения посредством выбора подходящих базисов. В таких ситуациях предлагаемый нами метод расширяет возможности численного моделирования, поскольку аналитическая структура ДА-схем не требует многосеточных конструкций для уточнения решения.

Метод интегрирующих множителей в рамках развитого нами формализма локальных сопряженных задач более экономичен и прост по сравнению с методами суперпозиции и вариации произвольных постоянных с вычислением функций Грина. Поэтому, при одинаковых входных данных, метод ДА-аппроксимаций, по нашему мнению, находится на уровне современных требований по точности, простоте и вычислительной эффективности реализации. Действительно, для получения адекватного решения с помощью ДА-схем не требуется устремлять интервалы области к нулю, так как схемы аналитические.

Заметим, что в работе [13] было убедительно показано, что свойства монотонности, наряду со свойствами устойчивости и аппроксимации, относятся к ключевым характеристикам численных схем. С тех пор ведется целенаправленный поиск методов построения монотонных численных схем. Основное внимание в развиваемых подходах уделяется различным конструкциям процедур корректировки потоков и гибридных алгоритмов монотонизации с введением схем искусственной вязкости. В этом контексте отметим, что ДА-аппроксимации уже по способу аналитического построения наследуют свойства монотонности исходных дифференциальных операторов и не требуют дополнительных искусственных приемов, что особенно важно для задач с преобладающими эффектами конвекции со знакопеременными компонентами вектора скорости. Совокупность положительных качеств предлагаемого подхода подтверждает целесообразность развития схем этого класса.

Литература

1. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. Спб.: Лань, 2009.
2. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989
3. Вазов В. Форсайт Дж. Разностные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных. М.: ИЛ. 1963.
4. Courant R. Variational methods for the solution of problems for equilibrium and vibrations. Bull. Amer.Math. Soc. V.49. P.1-23. 1943.
5. Бенерджи П., Баттерфилд Р. Методы граничных элементов в прикладных науках. М.: Мир. 1984.

6. *Euler L.* Nova methodus innumerabiles acquations differetiales secundi gradus reducendi ad aequationes differetiales prime gradus// Comm. acad. scient. Petrop. 1728. V.3. p.124-137; Opera Omnia vol XXII. P 1-14.
7. *Пененко В.В.* Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоиздат, 1981. 352 с.
8. *Пененко В.В., Алоян А.Е.* Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Новосибирск: Наука, 1985. 256 с.
9. *Penenko V., Tsvetova E.* Discrete-analytical methods for the implementation of variational principles in environmental applications// Journal of Computational and Applied Mathematics, 2009, V. 226. P. 319-330.
10. *Бенсусан А., Ж.-Л. Лионс, Р. Темам* Методы декомпозиции, децентрализации, координации и их приложения. В кн. Методы вычислительной математики. Новосибирск: Наука 1975. С.144-274
11. *Самарский А.А., Вабищевич П.Н.* Аддитивные схемы для задач математической физики. М.: Наука, 2001. 313 с.
12. *Пененко В.В., Цветова Е.А.* Вариационные методы построения монотонных аппроксимаций для моделей химии атмосферы// Сибирский журнал вычислительной математики. 2013. Т.16. №3. С. 239-252.
13. *С.К. Годунов.* Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики. Математический сборник, 1959, 47, вып.3. С. 271-306.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНО-ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ¹

Пичугина О.А.

*Южно-Российский региональный центр информатизации
Южного федерального университета, Ростов-на-Дону*

Многие установившиеся процессы различной физической природы приводят к дифференциальным уравнениям в частных производных эллиптического типа. Достаточно указать стационарные задачи теплопроводности и диффузии, задачи о потенциальном течении жидкости, задачу о распределении тока в проводящей среде, задачи электростатики и магнитостатики, задачи теории упругости, теории фильтрации и т.д. Точные решения краевых задач для эллиптических уравнений удается получить лишь в частных случаях, приходится находить их решение приближенно.

Рассмотрим эллиптическое уравнение конвекции-диффузии второго порядка общего вида с переменными коэффициентами и смешанными производными в области Ω с границей $\partial\Omega$. На границе области заданы однородные краевые условия первого рода. Конвективные члены в уравнении записаны в «симметричном виде» [2].

$$-Pe^{-1}L_2u + L_1(u) + L_0u = f, \quad u(x, y)|_{\partial\Omega} = u_0, \quad (1)$$

$$L_2u = \sum_{\alpha, \beta=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (K_{\alpha\beta} \frac{\partial u}{\partial x_\beta}), \quad (2)$$

$$L_1u = \frac{1}{2} (K_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} + \frac{\partial K_1 u}{\partial x_1} + K_2 \frac{\partial u}{\partial x_2} + \frac{\partial K_2 u}{\partial x_2}), \quad (3)$$

$$L_0u = K_0u, \quad (4)$$

Pe - число Пекле, $K_{\alpha\beta} = K_{\alpha\beta}(x_1, x_2)$, $\alpha, \beta = 1, 2$, $K_\gamma = K_\gamma(x_1, x_2)$, $\gamma = 0, 1, 2$, $K_0(x_1, x_2) \geq 0$, $K_{12} = K_{21}$, $f = f(x_1, x_2)$, $(x_1, x_2) \in \Omega$. Предполагается, что выполнены условия эллиптичности:

$$c_1 \sum_{\alpha=1}^2 \xi_\alpha^2 \leq \sum_{\alpha, \beta=1}^2 K_{\alpha\beta}(x) \xi_\alpha \xi_\beta \leq c_2 \sum_{\alpha=1}^2 \xi_\alpha^2.$$

где $c_1 > 0$, $c_2 > 0$ – постоянные, $\xi = (\xi_1, \xi_2)$ – произвольный вектор, причем $0 < c_1 \leq K_{\alpha\alpha} \leq c_2$, $\alpha = 1, 2$.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 12-01-00022-а и № 12-01-31127-мол_а

Будем также полагать, что $DivK = 0$, $K = \{K_1, K_2\}$.

К настоящему моменту разработаны различные методы решения уравнения конвекции-диффузии, о чем свидетельствуют множество работ, посвященных этой тематике. Однако, исследователи, в основном, рассматривают случай изотропной среды, а смешанные производные в диффузионной части обобщенного эллиптического оператора опускают. Тем не менее задача, включающая в себя конвективно-диффузионный перенос в анизотропной среде имеет многочисленные практические приложения. Анизотропные среды широко распространены в природе и имеют большое значение при моделировании различных процессов и явлений.

Введем в области Ω равномерную прямоугольную сетку

$$\omega_h = \{x_{ij} = (ih_1, jh_2), \quad 0 \leq i \leq N_1, \quad 0 \leq j \leq N_2, \quad h_\alpha N_\alpha = l_\alpha, \quad \alpha = 1, 2\}.$$

Аппроксимируем на сетке ω_h краевую задачу (1).

Оператор $L_{\alpha\beta}u$ аппроксимируем согласно [3] разностным оператором

$$\Lambda_{\alpha\beta}u = \frac{1}{2}[(K_{\alpha\beta}u_{\bar{x}\beta})_{x\alpha} + (K_{\alpha\beta}u_{x\beta})_{\bar{x}\alpha}],$$

определенным при $\alpha \neq \beta$ на 7-точечном шаблоне:

$$(x_1, x_2), (x_1 \pm h_1, x_2), (x_1, x_2 \pm h_2), (x_1 - h_1, x_2 + h_2), (x_1 + h_1, x_2 - h_2).$$

Здесь $u_{\bar{x}_i} = (u(x_i) - u(x_i - h_i))/h_i$ – левая разностная производная в точке x_i , $u_{x_i} = (u(x_i + h_i) - u(x_i))/h_i$ – правая разностная производная в точке x_i .

Для аппроксимации первых производных будем использовать центральные разности:

$$u_{x_i^0} = (u(x_i + h_i) - u(x_i - h_i))/2h_i.$$

Доказано, что в этом случае получается кососимметрический разностный оператор [1] и такая форма записи конвективных членов играет существенную роль при решении полученной после дискретизации СЛАУ итерационными методами [2].

Итак, после аппроксимации уравнения конвекции-диффузии и установки порядка перебора узлов сеточной области мы получили систему линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b. \tag{5}$$

Полученная система решалась двумя методами вариационного типа: BiCG и GMRES(m). Расчеты были выполнены с помощью системы MatLAB, которая содержит набор достаточно эффективных алгоритмов для решения подобных задач.

В уравнение (1)–(4) были подставлены постоянные значения коэффициентов диффузии $K_{11} = K_{22} = 1$. $K_0 = 0$. Заметим, что для симметричности матрицы диффузионного оператора необходимо выполнение условия $K_{12} = K_{21}$.

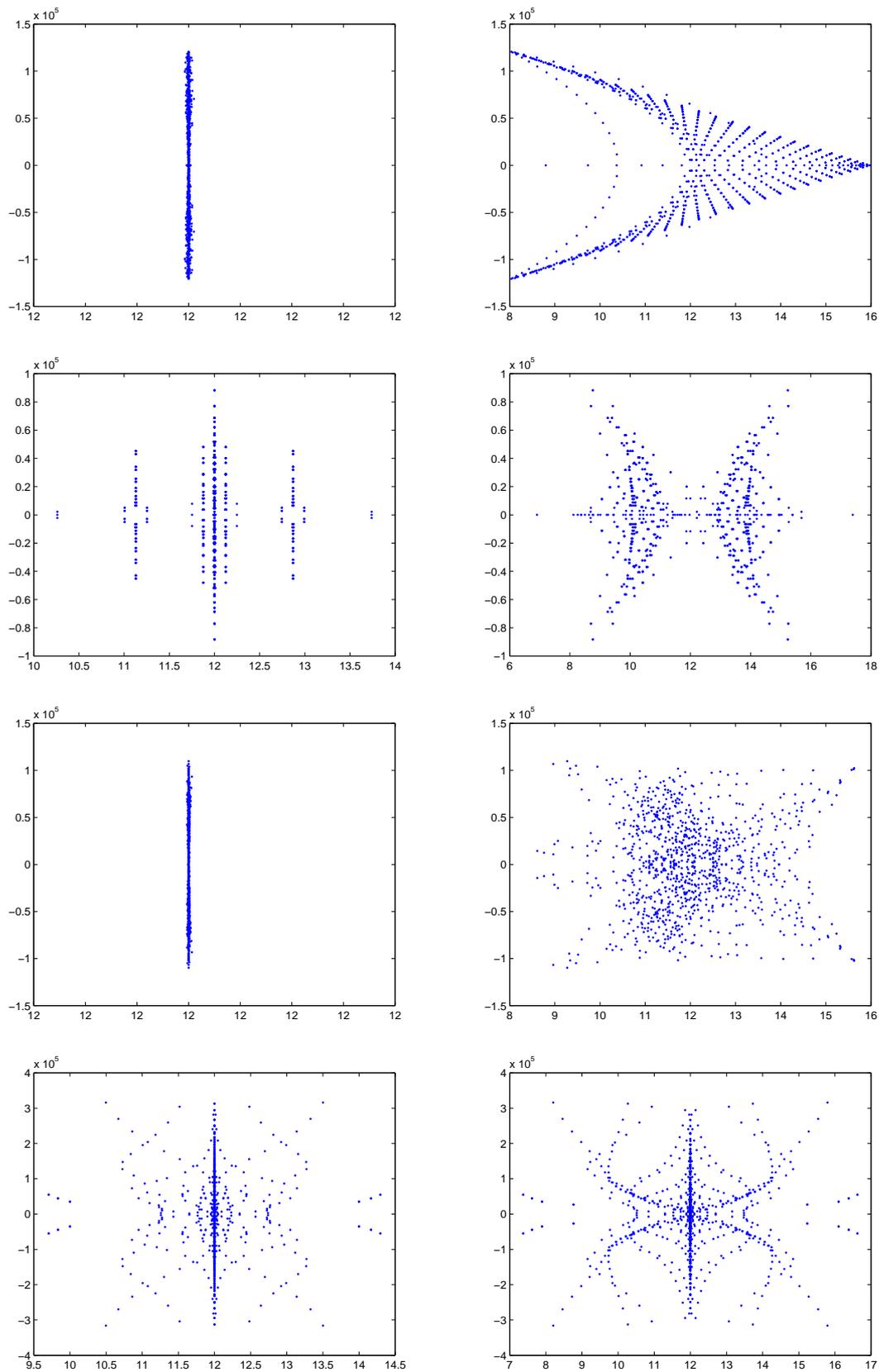


Рис. 1. Слева – распределение собственных значений для задач без смешанных производных, справа – для задач со смешанными производными, $Re = 10^6$, сетка 32×32 , Задачи 1-4 сверху вниз соответственно

Были проведены вычислительные эксперименты для четырех модельных задач с различными векторами скорости движения среды, представленными в Таблице 1. Данные тестовые задачи позволяют достаточно хорошо описать

Таблица 1. Коэффициенты вектора скорости

№ Задачи	K_1	K_2
1	1	-1
2	$1 - 2x_1$	$2x_2 - 1$
3	$x_1 + x_2$	$x_1 - x_2$
4	$\sin(2\pi x_1)$	$-2\pi x_2 \cos(2\pi x_1)$

различные классы функций, задающих поле скоростей. В первой задаче модуль и направление вектора скорости не зависят от точки плоскости. Данная задача описывается постоянными коэффициентами при конвективных членах. Вторая задача содержит разделяющиеся, а третья задача – линейные коэффициенты при конвективных членах. В четвертой задаче поле скоростей моделирует вихревое движение. Последние две задачи наиболее сложны для численного решения.

Таблица 2. Слева – количество внешних (внутренних) итераций метода GMRES(m), справа – количество итераций метода BiCG

Pe	Вариант 1	Вариант 2	Pe	Вариант 1	Вариант 2
Задача 1			Задача 1		
10	2 (1)	31 (4)	10	11	181
10^3	16 (9)	22 (2)	10^3	129	191
10^6	7497 (2)	6684 (6)	10^6	857	1346
Задача 2			Задача 2		
10	1 (10)	38 (8)	10	11	184
10^3	16 (7)	33 (3)	10^3	101	212
10^6	6526 (7)	8086 (7)	10^6	527	902
Задача 3			Задача 3		
10	1 (10)	27 (7)	10	10	203
10^3	20 (7)	37 (10)	10^3	197	364
10^6	8917 (8)	8558 (5)	10^6	2524	3100
Задача 4			Задача 4		
10	2 (3)	24 (9)	10	17	208
10^3	44 (8)	71 (8)	10^3	380	628
10^6	7423 (4)	7438 (2)	10^6	1690	1784

Правая часть уравнения и краевые условия выбирались таким образом, чтобы его аналитическим решением была функция $u(x_1, x_2) = e^{x_1 x_2} \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2)$. Аппроксимация проводилась на сетке 32×32 . Число Пекле изменялось в пределах от 10 до 10^6 , что при больших значениях

($Pe > 10^3$) приводило к системе линейных алгебраических уравнений с сильно несимметричной матрицей (т.е. кососимметричная составляющая матрицы намного больше ее симметричной составляющей в некоторой норме [1]).

Были проведены 2 группы вычислительных экспериментов.

Вариант 1. Задача без смешанных производных: $K_{12} = K_{21} = 0$. В этом случае получалась СЛАУ с пятидиагональной ленточной матрицей.

Вариант 2. Задача со смешанными производными: $K_{12} = K_{21} = 1$ приводила к семидиагональной ленточной матрице.

Результаты вычислений представлены в Таблице 2 и на Рисунке 1.

Проведенные численные эксперименты для методов GMRES(m) и BiCG продемонстрировали, что они достаточно эффективно решают систему (5) и сходятся даже в тех случаях, когда матрица системы теряет диагональное преобладание и становится сильно несимметричной. Однако, присутствие смешанных производных в уравнении сильно увеличивает общее число итераций обоих методов при небольших значениях числа Пекле и практически не влияет на количество итераций методов при больших Pe .

На основании численных тестов видно, что количество итераций, необходимых для сходимости методов GMRES(m) и BiCG зависит от числа Пекле или точнее от числа кососимметрии $k = Pe * h/4$ и от распределения собственных чисел (Рис. 1).

На Рисунке 1 видно, что при больших числах Пекле матрица является плохо обусловленной, собственные числа хоть и лежат на небольшом отрезке по вещественной оси, но по мнимой оси имеют очень большой разброс. В задаче без смешанных производных, спектр матрицы из системы (5) располагается симметрично относительно точки $(d + 0i)$, где d – соответствующий диагональный элемент матрицы A , по вещественной оси спектр лежит внутри интервала $(d - 5, d + 5)$. Присутствие смешанных производных существенно изменяет спектр матрицы, в Задачах 1 и 3 он теряет симметрию относительно точки $(d + 0i)$, однако остается симметрия относительно вещественной оси. Это значительно увеличивает количество итераций метода BiCG при больших числах Пекле.

Заметим, что для разреженных матриц объем вычислительных затрат на одной итерации метода GMRES(m) превосходит объем затрат в методе BiCG. Стоимость алгоритма GMRES(m) достаточно велика за счет хранения всех ортогональных векторов и метод BiCG выигрывает по сравнению с методом GMRES(m) благодаря простоте своего алгоритма. Однако не стоит забывать, что метод BiCG является менее стабильным по сравнению с методом GMRES(m) и, соответственно, менее предсказуемым, поэтому его нельзя рекомендовать для решения несимметричных систем всех типов.

Можно сделать общий вывод, что выбранные методы эффективны не только в условиях изотропной среды, но и в случае появления анизотропии.

Литература

1. Крукиер Л. А. Неявные разностные схемы и итерационный метод их решения для одного класса систем квазилинейных уравнений // Известия ВУЗов. Математика. 1979. № 7. С. 41–52.
2. Крукиер Л. А., Мартынова Т. С. О влиянии формы записи уравнения конвекции–диффузии на сходимость метода верхней релаксации // Вычислительная математика и математическая физика. 1999. Т. 39. № 11. С. 1821–1827.
3. Самарский А.А. Теория разностных схем. Москва: Наука, 1989. 616 с.

ЛОКАЛИЗАЦИЯ СИНГУЛЯРНОСТЕЙ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ И АДАПТАЦИЯ РАСЧЕТНОЙ СЕТКИ К ПОЛОЖЕНИЮ РАЗРЫВОВ¹

Плёнкин А.В.

ИПМ им. М.В. Келдыша, Москва

Введение

Для расчета газодинамических течений широко используются методы сквозного счета. Их универсальность находится вне конкуренции, поскольку эти методы не требуют учета информации о положении разрывов. Однако такой подход приводит к размазыванию разрывов, что может негативно сказываться на качестве расчета. Кроме того, часто именно положение ударных волн в течении представляет специальный интерес. Отсюда возникает обратная задача – локализовать и классифицировать разрывы в поле, полученном в расчете. До последнего времени эта задача решалась в "ручном" режиме после завершения расчета. Задача локализации разрывов в поле, заданном на дискретном множестве точек, в общем случае не разрешима, но, учитывая специфику рассматриваемых задач, в частности то, что разрывы функций газодинамических величин представляются в виде набора кусочно-гладких кривых (поверхностей), можно надеяться получить результат с достаточной для приложений точностью. В данной работе предполагается, что функции газодинамических величин могут быть представлены в виде разложения по базису вейвлетов. В настоящее время, возникает необходимость проводить алгоритмическую локализацию непосредственно во время расчета для построения адаптивных сеток и повышения качества расчета. Эффективность применения адаптивных сеток ярко продемонстрирована в [1]. Используемые в этих целях алгоритмы должны быть универсальны (применимы к любым расчетным данным) и не должны требовать для каждого класса течений индивидуальной настройки. В работе рассматривается алгоритм соответствующий указанным требованиям. Особенностью метода является то, что он не требует тонкой настройки (одни и те же пороги чувствительности и наборы фильтров могут применяться для множества различных задач), что позволяет использовать его в автоматическом режиме. В то же время возможность тонкой настройки также заложена в алгоритм, что позволяет получить более качественные результаты в постобработке [2]. Также был разработан набор фильтров, позволяющий избавиться от большей части артефактов [3].

¹Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ 11-01-00390-а и программы 3 ОМН РАН.

I Адаптация расчетной сетки к положению разрывов

Рассмотрим вариант применения детектора для адаптации расчета к положению разрывов на примере одномерной задачи о распаде и взаимодействии разрывов в трубе под действием импульсного вложения энергии.

В начальный момент времени заданы три области с постоянными значениями газодинамических величин:

- (1) невозмущенный неподвижный газ: $x > 2, \rho_1 = 1, u_1 = 0, p_1 = 1,$
- (2) объемная часть разряда: $0 < x < 2, \rho_2 = 1, u_2 = 0, p_2 = 12.4625,$
- (3) область за фронтом падающей волны: $x < 0, \rho_3 = 3.7629, u_3 = 2.5194, p_3 = 9.6450.$

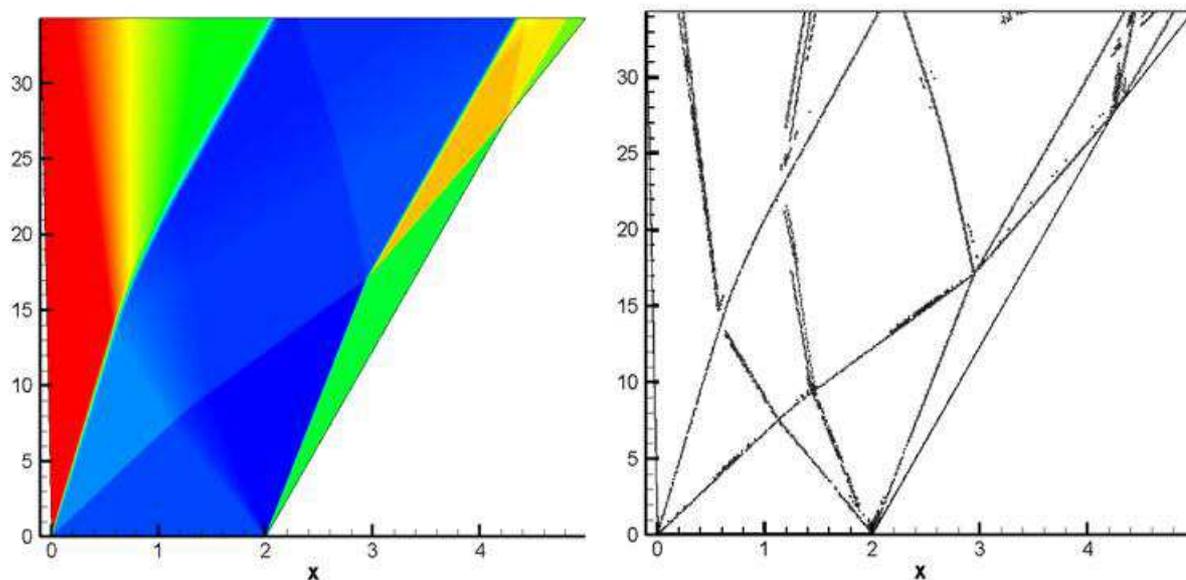


Рис. 1. Распределение плотности в расчете на равномерной подвижной сетке, содержащей 2048 ячеек (слева), и разрывы, локализованные в расчете (справа).

В результате распада разрыва в точке формируются две ударных волны и контактный разрыв между ними. Распад разрыва в точке дает идущую влево волну разрежения, идущую вправо ударную волну и контактный разрыв между ними.

Течение в последующие моменты времени рассчитывалось путем численного интегрирования нестационарных одномерных уравнений Эйлера. Использовался одномерный вариант разностной схемы Годунова 2-го порядка аппроксимации. Изначально расчеты проводились на равномерной подвижной сетке, границы которой соответствуют положению крайней левой и крайней правой ударных волн. Результаты расчета на сетке, содержащей 2048 ячеек, представлены на рисунке 1 слева. Затем в расчет был внедрен алгоритм выделения особенностей течения. Локализация разрывов проводилась на каждом шаге расчета (рисунок 1 справа).

Для проверки качества выделения разрывов, для начального интервала времени было проведено сравнение результатов локализации с точным решением. Для контактных разрывов и ударной волны получено достаточно точное совпадение, локализованные границы волны разрежения смещены внутрь волны разрежения.

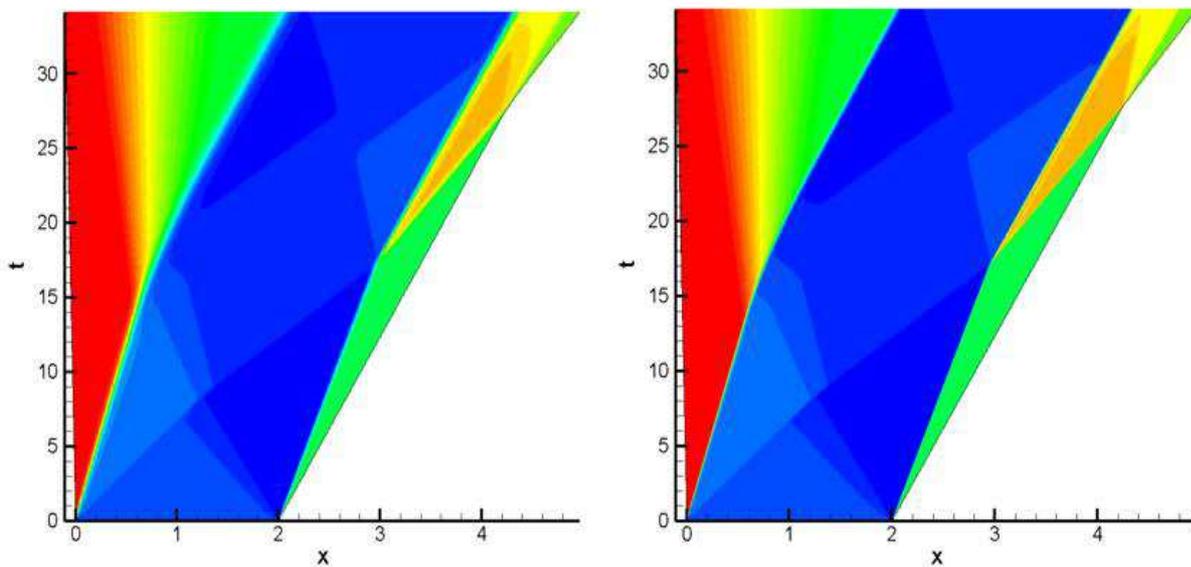


Рис. 2. Распределение плотности в расчете на равномерной подвижной сетке, содержащей 256 ячеек (слева) и в расчете, выполненном на адаптивной сетке (справа).

После этого был реализован адаптивный вариант расчета, использующий информацию о положении разрывов, полученную от детектора. На каждом шаге расчета сначала проводилась локализация разрывов в исходных данных (начальных или данных с предыдущего шага). Затем ячейки, в которых были локализованы разрывы, и две соседние с ними ячейки разбивались на восемь равных частей. Таким образом, формировалась неравномерная сетка, на которой выполнялся очередной шаг расчета.

Результаты неадаптивного расчета, проведенного на равномерной сетке, содержащей 256 ячеек, и адаптивного расчета, проведенного с использованием информации о положении разрывов на неравномерной сетке (изначально сетка состоит из 256 ячеек, но каждая может разбиваться на 8 частей), представлены на рисунке 2.

Использование адаптивного подхода позволило существенно повысить качество расчета за счет уменьшения зон размазывания разрывов (особенно контактных – рисунок 3).

Данный пример демонстрирует точность выделения сингулярностей течения и высокий потенциал использования детектора для адаптации расчета к положению разрывов. Естественно, описанный выше подход является одним из простейших. На практике могут использоваться методы, связанные не

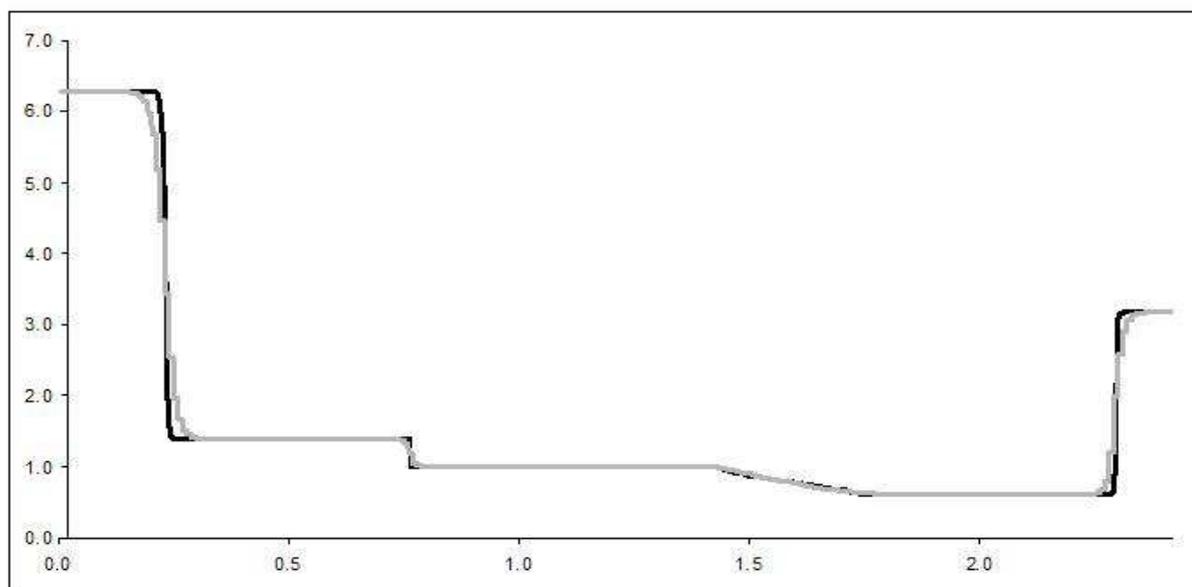


Рис. 3. Распределение плотности в момент $t = 5$ для адаптивного (черный) и неадаптивного (серый) расчетов.

только с построением адаптивных сеток, но и с модификацией в окрестности разрывов самого разностного алгоритма.

Локализация разрывов в трехмерных расчетах

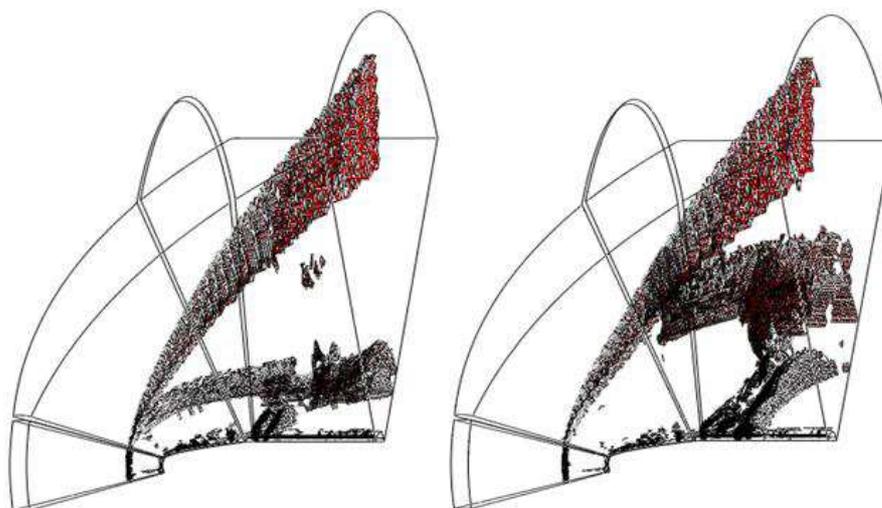


Рис. 4. Результаты локализации ударных волн на шаге 176000 (слева) и 239200 (справа).

Для анализа была выбрана задача о сверхзвуковом обтекании тела под углом атаки шесть градусов. Расчет выполнялся методом установления по

модели Навье - Стокса на сетке, состоящей из 25 блоков. На рисунке 4 представлены результаты локализации ударных волн в трех блоках расчетной сетки для двух моментов времени. Четко локализуются структуры, соответствующие головной ударной волне и уплотнению, возникающему за волной разрежения при обтекании цилиндрических тел.

В течении также наблюдается нестационарный процесс. За головной ударной волной был выделен разрыв слабой интенсивности (рис. 4 слева). Этот скачок постепенно удаляется от тела (рис. 4 справа) и при дальнейшем установлении течения должен покинуть расчетную область. Указанный факт свидетельствует о том, что течение еще не установилось и требуется продолжение расчета.

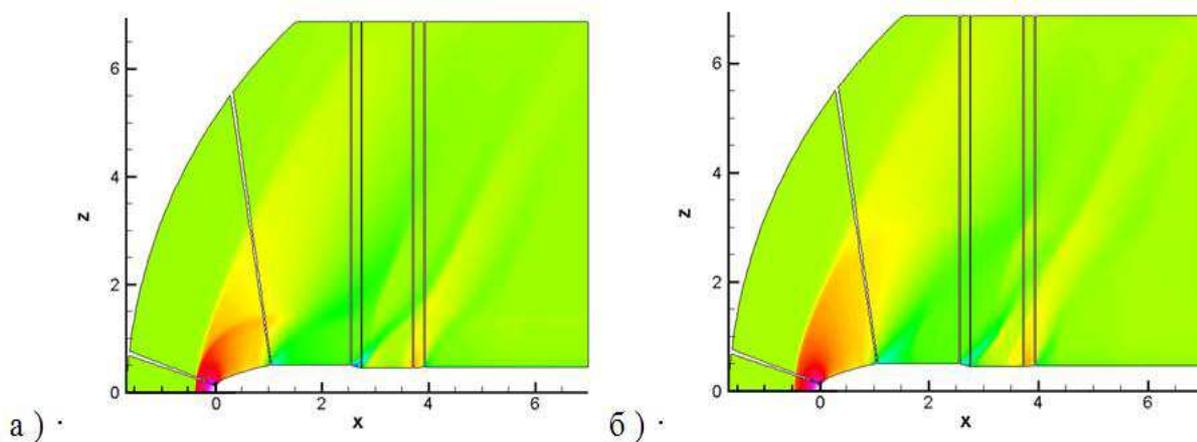


Рис. 5. Распределение плотности в плоскости на шаге 176000 (а) и шаге 239200 (б).

В силу слабой интенсивности обнаружить указанный нестационарный разрыв стандартными средствами может быть достаточно трудоемко. Так, на шаге 176000 его наличие может быть визуально установлено по распределению поля плотности (рис. 5(а)). Однако на шаге 239200 визуально установить наличие разрыва уже невозможно (рис. 5(б)). В то же время разработанный нами метод позволяет обнаружить и локализовать этот разрыв, что позволяет использовать детектор для анализа качества расчетов.

Заключение

Разработанный алгоритм локализации особенностей позволяет эффективно обрабатывать расчеты в областях со сложной геометрией и подавлять значительную часть артефактов. Кроме того детектор может быть успешно использован для повышения качества расчета, за счет его адаптации к положению разрывов.

Литература

1. *В. И. Мажужин, А.А. Самарский, О. Кастельянос, А.В. Шапранов* Метод динамической адаптации для нестационарных задач с большими градиентами, Математическое Моделирование, 1993, т. 5, №4, с.32-56.
2. *А.Л. Афендиков, А.Е. Луцкий, А.В. Плёнкин* Многомасштабный анализ особенностей газодинамических полей, Препринт Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН №98, 2008г.
3. *А.Л. Афендиков, А.Е. Луцкий, А.В. Плёнкин* Вейвлетный анализ локализованных структур в идеальной и вязкой моделях, Математическое Моделирование 2011г, том 23, №1, страницы 41-50.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТМОСФЕРНОГО ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ В БАЙКАЛЬСКОМ РЕГИОНЕ¹

Пьянова Э.А.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Введение

Работа посвящена моделированию атмосферного переноса примеси в Байкальском регионе для летнего периода. Основными локальными особенностями, влияющими на режим атмосферных циркуляций Байкальского региона Восточной Сибири, а соответственно, и на перенос примесей, являются значительные перепады высот рельефа и наличие такого большого водного объекта, как озеро Байкал, термодинамические характеристики которого существенно отличаются от соответствующих характеристик прилегающих участков суши. Термическая и орографическая неоднородности подстилающей поверхности рассматриваемой территории приводят к формированию горно-долинных и бризовых циркуляций, которые, в свою очередь, вступают во взаимодействие с крупномасштабными фоновыми атмосферными циркуляциями.

На основе сценарного подхода рассматриваются процессы трансформации внешнего (по отношению к выделенной области) ветрового потока (фоновый ветер) при его прохождении над изучаемой территорией Байкальского региона. Ниже представлены некоторые результаты серии численных экспериментов по изучению процессов переноса пассивной примеси при различных направлениях фонового ветра.

I Постановка задачи и метод решения

Для описания гидротермодинамических режимов атмосферы и переноса примеси над выделенной территорией использовалась мезомасштабная негидростатическая модель [1], включающая в себя уравнения движения, уравнения переноса тепла и трех компонент влаги, уравнение конвекции-диффузии пассивной примеси и др.

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div} \rho u \vec{u} = -\frac{\partial p'}{\partial x} + l \rho v + \Delta_u u, \quad \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \operatorname{div} \rho v \vec{u} = -\frac{\partial p'}{\partial y} - l \rho u + \Delta_v v,$$

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 11-01-00187-а, Программ фундаментальных исследований №4 Президиума РАН и №3 Отделения математических наук, Интеграционными проектами СО РАН №8, №35.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \operatorname{div} \rho w \vec{u} &= -\frac{\partial p'}{\partial z} + \lambda \rho \vartheta' + \Delta_w w, & \frac{\partial \rho \vartheta'}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vartheta' \vec{u} &= -S \rho w - \rho \frac{L_w}{c_p} \Phi_v + \Delta_\vartheta \vartheta', \\
\frac{\partial \rho q'}{\partial t} + \operatorname{div} \rho q' \vec{u} &= \rho \Phi_v - \rho w \frac{\partial Q}{\partial z} + \Delta_q q', & \frac{\partial \rho q_c}{\partial t} + \operatorname{div} \rho q_c \vec{u} &= \rho \Phi_c + \Delta_q q_c, \\
\frac{\partial \rho q_r}{\partial t} + \operatorname{div} \rho q_r \vec{u} &= \rho \Phi_r - \frac{\partial \rho W_r q_r}{\partial z} + \Delta_q q_r, & \frac{\partial \rho c}{\partial t} + u \frac{\partial \rho c}{\partial x} + v \frac{\partial \rho c}{\partial y} + (w - w_c) \frac{\partial \rho c}{\partial z} &= \Delta_c c + f, \\
\operatorname{div} \rho \vec{u} &= 0, & p &= \rho R T (1 + 0.608 q), & \vartheta &= T (1000/p)^{(c_p - c_v)/c_p}. \quad (1)
\end{aligned}$$

Здесь t – время, x, y, z – декартовы координаты, u, v, w – компоненты вектора скорости ветра \vec{u} в направлениях x, y, z соответственно, ϑ – потенциальная температура, T – абсолютная температура, θ – фоновое значение потенциальной температуры, q – массовая доля водяного пара, Q – фоновое значение массовой доли пара, p – давление, $\rho = \rho(z)$ – плотность, ϑ', q', p' – отклонения потенциальной температуры, массовой доли пара, давления от их фоновых значений, q_c, q_r – облачная и дождевая влага, l – параметр Кориолиса, $S = \partial \theta / \partial z$ – параметр стратификации, $\lambda = g / \theta$ – параметр плавучести, Φ_v, Φ_c, Φ_r – скорости фазовых переходов влаги, W_r – скорость осаждения дождевой влаги, L_w – скрытая теплота конденсации, R – удельная газовая постоянная сухого воздуха, c_p – удельная теплоемкость воздуха при постоянном давлении, c_v – теплоемкость воздуха при постоянном объеме, c – концентрация примеси, w_c – скорость оседания примеси, f – функция источников примеси.

Фоновые поля, описывающие крупномасштабные атмосферные движения, предполагаются заданными. Уравнения в отклонениях описывают эволюцию возмущений, вызванных факторами локального характера: рельефом местности и неоднородностями температуры подстилающей поверхности.

Оператор $\Delta_\alpha (\alpha = u, v, w, \theta, q, c)$ имеет вид $\Delta_\alpha = \frac{\partial}{\partial x} \mu_{\alpha x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu_{\alpha y} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \mu_{\alpha z} \frac{\partial}{\partial z}$, где $\mu_{\alpha x}, \mu_{\alpha y}, \mu_{\alpha z}$ – коэффициенты турбулентного обмена для соответствующих функций состояния в направлениях координат x, y, z , соответственно.

Уравнения (1) интегрируются в области $D_t = D \times [0, \bar{t}]$, где $D = \{0 \leq x \leq X, 0 \leq y \leq Y, \delta(x, y) + h \leq z \leq H\}$, а $0 \leq t \leq \bar{t}$ – интервал времени, h – высота приземного слоя, функция $\delta(x, y)$ описывает рельеф местности. Нижняя граница расчетной области находится на высоте h над подстилающей поверхностью и совпадает с верхней границей приземного слоя, толщина которого в модели предполагается постоянной.

Задача (1) в общем виде замыкается краевыми условиями на границе Ω области D :

$$\mu_{\alpha s} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial s} = (\beta_{\alpha s} \varphi_\alpha + \psi_{\alpha s}), \quad \vec{x} \in \Omega, \quad s = x, y, z, \quad \varphi_\alpha = u, v, w, \vartheta', q', q_c, q_r, c, \quad (2)$$

где $\mu_{\alpha s}, \beta_{\alpha s}, \psi_{\alpha s}$ – функции заданного вида. Для выполнения сценарных расчетов в качестве начальных условий для (1) принимались нулевые значения для отклонений всех метеоэлементов.

Построение численного алгоритма для модели динамики атмосферы и переноса пассивной примеси осуществлялось с помощью аппроксимации интегрального тождества вариационной формулировки модели [1]. Для этого системе (1) с начальными и граничными условиями (2) сопоставлялся вариационный функционал (интегральное тождество) специальной структуры. Выбор подходящих аппроксимаций для интегралов и подынтегральных выражений позволил расщепить задачу по физическим процессам и координатным направлениям и получить энергетически сбалансированные разностные схемы. Для аппроксимации конвективно-диффузионных операторов задачи (1) использовались монотонные дискретно-аналитические схемы [2]. Построенные схемы для задачи (1)–(2) аппроксимируют исходные дифференциальные уравнения со вторым порядком точности по пространству.

Для учета орографии в модели использован вариационный способ организации метода "фиктивных" областей [1, 3], который обеспечил точный учет краевых условий на физической нижней границе воздушных масс.

Численная реализация мезомасштабной модели динамики атмосферы и переноса примесей осуществлялась на основе комплекса программ, апробированного ранее в работах [4–6], с дополнительной модификацией одного из блоков. Комплекс состоит из следующих основных модулей: динамического и переноса примесей. Динамический блок включает в себя модули и подпрограммы, в которых рассчитывается температура подстилающей поверхности с учетом неравномерного поступления солнечной радиации; реализуется модель параметризации приземного слоя; находятся коэффициенты турбулентного обмена; реализуется метод трехдиагональной прогонки для нахождения компонент скорости ветра, потенциальной температуры и массовой доли пара на первом этапе расщепления; восстанавливается поле отклонения давления из разностного аналога уравнения Пуассона, решаемого методом сопряженных градиентов; по полю давления находятся компоненты скорости и потенциальная температура на этапе согласования метеополей; учитываются фазовые переходы влаги. В модуле переноса примеси в качестве входной информации о несущей среде используются рассчитанные в динамическом блоке поля метеорологических величин.

Численные расчеты, результаты которых представлены ниже, проведены с помощью программного комплекса, модифицированного в части, отвечающей за решение уравнения Пуассона. Вариант подпрограммы, реализующей метод сопряженных градиентов для разреженных матриц в CSR-формате (Compressed Sparse Row) разработан А.В. Петуховым (ИВМиМГ СО РАН). Применение CSR-формата для хранения разреженных матриц позволило значительно сократить время счета. Сэкономленное время зависит от размера расчетной сетки. Работа по получению таких оценок еще ведется. Также планируется предобусловить алгоритм сопряженных градиентов методом симметричной верхней релаксации (SSOR) в модификации Айзенштата.

II Результаты экспериментов

Для моделирования атмосферных циркуляций над Байкалом и прилегающими территориями была выбрана область 1340 км на 1290 км, включающая в себя части территорий Иркутской области, Республики Бурятия, Забайкальского края и Монголии. При реализации летних сценарных расчетов моделировался суточный ход метеорологических параметров и рассеивание примеси от точечных источников выбросов, расположенных в основных промышленных районах региона. Здесь для иллюстрации были выбраны Ангарск, Байкальск, Северобайкальск и Братск.

Расчеты проводились на сетке $134 \times 129 \times 50$ узлов с шагами сетки по горизонтали $\Delta x = \Delta y = 10$ км, по вертикали – $\Delta z = 100 - 200$ м.

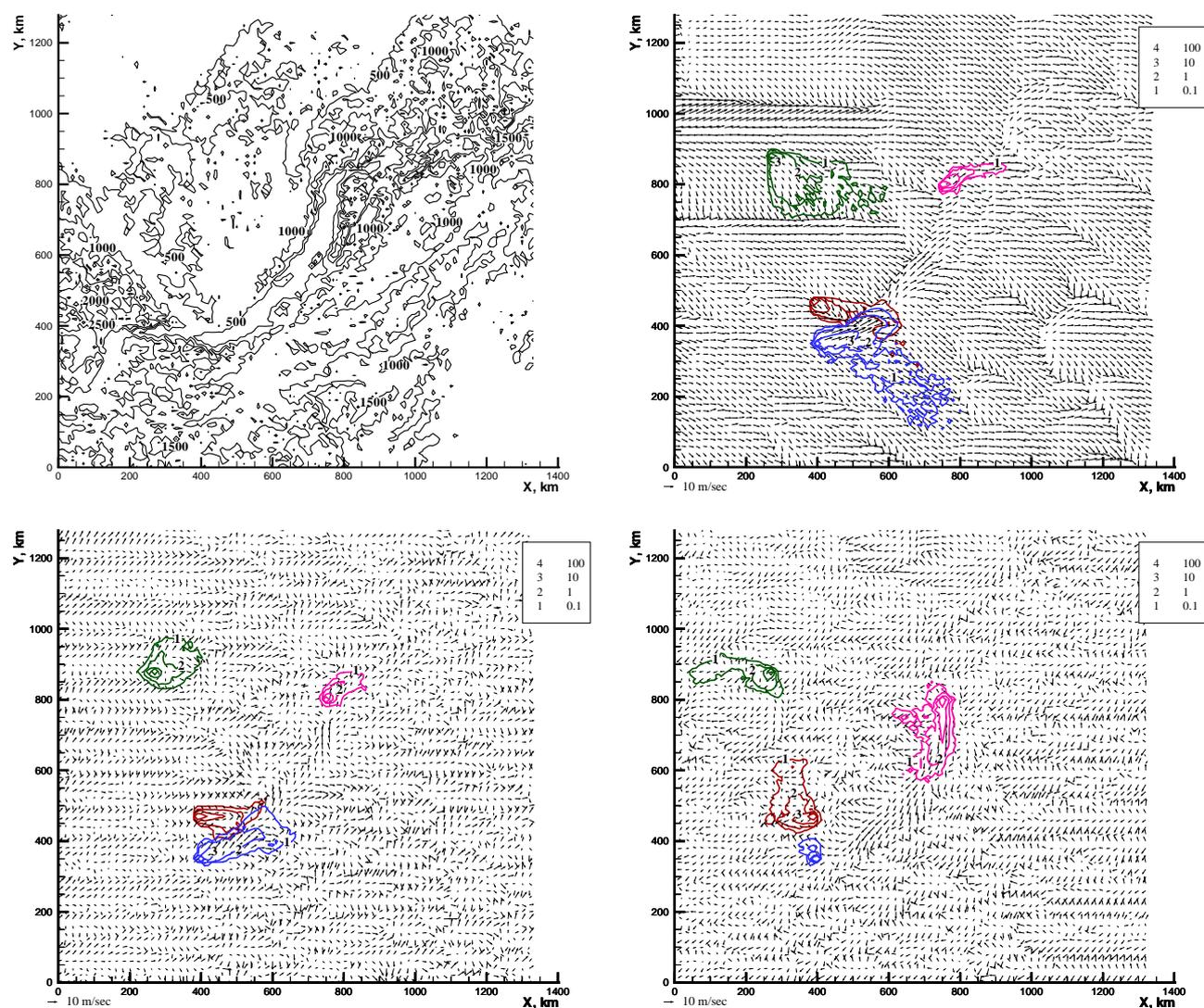


Рис. 1. а - изолинии функции рельефа, м; б, с, д - поля скорости ветра и изолинии концентрации примеси на высоте 100 м над поверхностью для 12 ч местного времени; б - северо-западный фоновый ветер, с - западный и д - восточный.

На рисунке 1а представлены изолинии функции рельефа. Максимальное значение высоты рельефа для данной сеточной области составляет 2867 м над уровнем моря, минимальное – 113 м.

В ходе моделирования были рассмотрены характерные для данного региона варианты набегания фонового ветрового потока. Так на рисунках 1b, c, d представлены результаты численных экспериментов, соответствующие трем вариантам задания фонового потока на верхней границе расчетной области: северо-западного, западного и восточного. Предварительный анализ результатов расчетов показал, что северо-западный и западный потоки ветра трансформируются над озером Байкал в ветра юго-западного направления, тормозясь Приморским хребтом и проникая с юга через долину реки Ангары. Такие направления ветра могут способствовать проникновению загрязняющих выбросов на территорию Байкала из промышленных районов Ангарска, Иркутска, Шелехова, Байкальска. При восточном фоновом ветре в численных экспериментах над Байкалом формировался северный и северо-восточный потоки, что, в свою очередь, сказалось и на поведении шлейфа примеси, выбрасываемого источником в Северобайкальске.

Здесь были представлены только предварительные результаты расчетов для Байкальского региона. Для более детального и подробного изучения влияния бризовых эффектов на трансформацию фонового ветра и перенос примеси начаты численные эксперименты на более подробной расчетной сетке с горизонтальными шагами 5 км.

Литература

1. Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. - Новосибирск: Наука, 1985.
2. Пененко В.В. Численные схемы для адвективно-диффузионных уравнений с использованием локальных сопряженных задач. Новосибирск, 1993 (Препр. РАН. Сиб. отд-ние. ВЦ. № 984).
3. Алоян А.Е., Фалейчик А.А., Фалейчик Л.М. Алгоритм численного решения метеорологических задач в случае криволинейной области // Математические методы рационального природопользования. Новосибирск: Наука, Сиб.отд-е, 1989. С. 14–35.
4. Пьянова Э.А. Исследование трансформации воздушного потока над термически и орографически неоднородной подстилающей поверхностью // Выч. технологии. 2005. Том 30. Ч. 2. Спец.вып. С. 106–111.
5. Пьянова Э.А. Численное исследование влияния водоема на перенос примеси от точечного источника // Выч. технологии. 2008. Том 13. Спец.вып. № 3. С. 57-63.
6. Пьянова Э.А., Фалейчик Л.М. Информационно-вычислительная технология для сценарных оценок динамики и качества атмосферы // Выч. технологии. 2012. Том 17. № 1. С. 109–119.

ОБ ОДНОЗНАЧНОЙ РАЗРЕШИМОСТИ R_ν -ОБОБЩЁННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ С ВЫРОЖДЕНИЕМ НА ГРАНИЦЕ

Рукавишников Е.И.

Вычислительный центр ДВО РАН, Хабаровск

Введение

Математические модели некоторых естественных процессов, например, в физике плазмы и газового разряда, электродинамике, ядерной физике, нелинейной оптике и других областях физики, приводят к краевым задачам, в которых сингулярность решения вызвана вырождением исходных данных (коэффициентов дифференциального уравнения, его правой части и граничных условий). Особенностью таких задач является то, что для них не всегда можно определить обобщённое (слабое) решение или оно не обладает необходимой регулярностью. В связи с этим в работе [1] было предложено определить решение краевой задачи как R_ν -обобщённое. Такое определение позволяет исследовать его существование и единственность, коэрцитивные и дифференциальные свойства в весовых пространствах С.Л. Соболева и выделить два класса краевых задач: с согласованным и несогласованным вырождением исходных данных (обзор результатов в [2]), создать эффективные численные методы для его нахождения ([3]- [11]).

В настоящей работе рассматривается задача Дирихле для эллиптического уравнения второго порядка с согласованным вырождением исходных данных на всей криволинейной границе двумерной области Ω . Для этой задачи формулируются теоремы о существовании и единственности R_ν -обобщённого решения, его единственности в пространствах $H_{2,\nu+\beta/2}^1(\Omega)$ при всех значениях параметра ν из определённой шкалы.

I Основные обозначения

Пусть R^2 – двумерное евклидово пространство с $x = (x_1, x_2)$, $dx = dx_1 dx_2$; $\Omega \subset R^2$ – ограниченная область с достаточно гладкой границей $\partial\Omega$, $\bar{\Omega}$ – замыкание области, т.е. $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$.

Пусть $\rho(x)$ – весовая функция, совпадающая в некоторой приграничной полосе $\Omega' \subset \Omega$ с расстоянием любой точки x до границы $\partial\Omega$ и равная δ для $x \in \bar{\Omega} \setminus \Omega'$. Кроме того, предположим, что

$$\left| \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right| \leq \delta', \quad i = 1, 2. \quad (1)$$

Введём весовое пространство Соболева $H_{2,\alpha}^k(\Omega)$ с нормой:

$$\|u\|_{H_{2,\alpha}^k(\Omega)} = \left(\sum_{|\lambda| \leq k} \int_{\Omega} \rho^{2(\alpha+|\lambda|-k)} |D^\lambda u|^2 dx \right)^{1/2},$$

где $D^\lambda = \frac{\partial^{|\lambda|}}{\partial x_1^{\lambda_1} \partial x_2^{\lambda_2}}$, $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2)$, $|\lambda| = \lambda_1 + \lambda_2$; λ_1, λ_2 – целые неотрицательные числа, α – некоторое действительное число, k – целое неотрицательное число. При $k = 0$ пространства $H_{2,\alpha}^0(\Omega)$ и $L_{2,\alpha}(\Omega)$ совпадают.

Пусть $\overset{\circ}{H}_{2,\alpha}^k(\Omega) = \{u \mid u \in H_{2,\alpha}^k(\Omega), u = 0, x \in \partial\Omega\}$. Норма в $\overset{\circ}{H}_{2,\alpha}^k(\Omega)$ имеет тот же вид, что и в $H_{2,\alpha}^k(\Omega)$. Через $H_{\infty,-\alpha}^k(\Omega, C_1)$ обозначим множество функций, норма в котором удовлетворяет неравенству

$$\|u\|_{H_{\infty,-\alpha}^k(\Omega, C_1)} = \max_{|\lambda| \leq k} \operatorname{vrai} \max_{\forall x \in \Omega} |\rho^{-\alpha+|\lambda|} D^{|\lambda|} u| \leq C_1$$

с положительной постоянной C_1 , не зависящей от u .

II Постановка задачи

В области Ω рассмотрим дифференциальное уравнение

$$-\sum_{k,l=1}^2 a_{kl}(x) \frac{\partial^2 u}{\partial x_k \partial x_l} + \sum_{k=1}^2 a_k(x) \frac{\partial u}{\partial x_k} + a(x)u(x) = f(x), \quad x \in \Omega, \quad (2)$$

с граничным условием

$$u = 0, \quad x \in \partial\Omega. \quad (3)$$

Предположим, что правая часть уравнения (2)

$$f \in L_{2,\mu}(\Omega), \quad \mu \geq 0. \quad (4)$$

Определение 1. Краевую задачу (2),(3) будем называть задачей Дирихле с согласованным вырождением на всей границе области, если имеет место (4), коэффициенты $a_{kl}(x) = a_{lk}(x)$ ($k, l = 1, 2$) и для некоторого действительного числа β выполнены условия:

$$a_{kl} \in H_{\infty,-\beta}^1(\Omega, C_2), \quad a_k \in L_{\infty,-(\beta-1)}(\Omega, C_3) \quad (k, l = 1, 2), \\ a \in L_{\infty,-(\beta-2)}(\Omega, C_4), \quad (5)$$

$$\sum_{k,l=1}^2 a_{kl}(x) \xi_k \xi_l \geq C_5 \rho^\beta(x) \sum_{l=1}^2 \xi_l^2, \quad (6)$$

$$a(x) \geq C_6 \rho^{\beta-2}(x) \text{ почти всюду на } \Omega, \quad (7)$$

где C_i ($i = 2, \dots, 6$) – положительные постоянные, не зависящие от x , ξ_1, ξ_2 – любые действительные параметры.

Обозначим через

$$a(u, v) = \sum_{k,l=1}^2 \int_{\Omega} \left[a_{kl}(x) \rho^{2\nu} \frac{\partial u}{\partial x_k} \frac{\partial u}{\partial x_l} + a_{kl}(x) \frac{\partial \rho^{2\nu}}{\partial x_k} \frac{\partial u}{\partial x_l} v + \frac{\partial a_{kl}}{\partial x_k} \rho^{2\nu} \frac{\partial u}{\partial x_l} v \right] dx +$$

$$+ \sum_{k=1}^2 \int_{\Omega} a_k(x) \rho^{2\nu} \frac{\partial u}{\partial x_k} v dx + \int_{\Omega} a(x) \rho^{2\nu} uv dx,$$

$$(f, v) = \int_{\Omega} \rho^{2\nu} f v dx$$

соответственно билинейную и линейную формы.

Определение 2. Функция u_ν из пространства $\mathring{H}_{2,\nu+\beta/2}^1(\Omega)$ называется R_ν -обобщённым решением задачи Дирихле с согласованным вырождением на всей границе области, если для всех v из $\mathring{H}_{2,\nu+\beta/2}^1(\Omega)$ справедливо тождество $a(u_\nu, v) = (f, v)$ при любом, но фиксированном ν , удовлетворяющем неравенству

$$\nu \geq \mu + \frac{\beta}{2} - 1. \quad (8)$$

III Существование и единственность R_ν -обобщённого решения.

Сформулируем основные результаты.

Теорема 1. Пусть выполняются условия (1), (4)–(8), а также неравенство

$$2(C_2(2\delta'|\nu| + 1) + C_3/2)^2 < C_5C_6.$$

Тогда существует единственное R_ν -обобщённое решение u_ν краевой задачи (2), (3) из пространства $\mathring{H}_{2,\nu+\beta/2}^1(\Omega)$ и справедлива оценка

$$\|u_\nu\|_{\mathring{H}_{2,\nu+\beta/2}^1(\Omega)} < C_7 \|f\|_{L_{2,\mu}(\Omega)},$$

где C_7 – положительная постоянная, не зависящая от функций u_ν и f .

Теорема 2. Если выполнены условия теоремы 1, то для всех ν из полуинтервала $[\nu_1, \nu_2)$ R_ν -обобщённое решение задачи (2), (3) единственно. Здесь обозначено

$$\nu_1 = \max \left\{ \mu + \frac{\beta}{2} - 1, \frac{1}{\delta'} \left(1 - \frac{(C_5C_6)^{1/2} - C_3/2}{C_2} \right) + \varepsilon \right\},$$

$$\nu_2 = \frac{1}{\delta'} \left(\frac{(C_5C_6)^{1/2} - C_3/2}{C_2} - 1 \right),$$

где ε – фиксированное и достаточно малое положительное число.

Литература

1. *Рукавишников В.А.* О дифференциальных свойствах R_ν -обобщённого решения задачи Дирихле // Докл. АН СССР. – 1989. – Т. 309, №6. – С. 1318–1320.
2. *Rukavishnikov V.A.* Methods of numerical analysis for boundary value problems with strong singularity // Rus. J. Numer. Anal. Math. Model. – 2009. – V. 24, №6. – P. 565–590.
3. *Rukavishnikov V.A., Kuznetsova E.V.* A finite element method scheme for boundary value problems with noncoordinated degeneration of input data // Numerical Analysis and Applications. – 2009. – V. 2, № 3. – P. 250–259.
4. *Rukavishnikov V.A., Rukavishnikova H.I.* The finite element method for a boundary value problem with strong singularity // Journal of Computational and Applied Mathematics. – 2010. – V. 234, № 9. – P. 2870–2882.
5. *Rukavishnikov V.A.* On differential properties r-generalized solution of the Dirichlet problem with coordinated degeneration of the input data // ISRN Mathematical Analysis. – 2011. – V. 2011.
6. *Rukavishnikov V.A., Mosolapov A.O.* New approach for solving Maxwell equations with strong singularity // Journal of Physics: Conference Series. – 2012. – V. 346, № 1. – P. 012018.
7. *Rukavishnikov V.A., Mosolapov A.O.* New numerical method for solving time-harmonic Maxwell equations with strong singularity // Journal of Computational Physics. – 2012. – V. 231. № 6. – P. 2438-2448.
8. *Рукавишников В.А., Мосолапов А.О.* Весовой векторный метод конечных элементов для одной задачи электромагнетизма с сильной сингулярностью // Доклады Академии наук. – 2013. – Т. 449, № 2. – С. 144.
9. *V. A. Rukavishnikov, H. I. Rukavishnikova* On the Error Estimation of the Finite Element Method for the Boundary Value Problems with Singularity in the Lebesgue Weighted Space // Numerical Functional Analysis and Optimization. – 2013. – 18p. – DOI:10.1080/01630563.2013.809582
10. *Viktor A. Rukavishnikov and Elena I. Rukavishnikova.* The Finite Element Method for Boundary Value Problems with Strong Singularity and Double Singularity // LNCS. – 2013 – V. 8236 (2013). – P. 110–121.
11. *Рукавишников В.А., Николаев С.Г.* Весовой метод конечных элементов для задачи теории упругости с сингулярностью // Доклады Академии наук. – 2013. – Т. 453, № 4.

РАЗРАБОТКА И РЕАЛИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ СРЕДЫ ¹

Свободина К.С.

Институт вычислительного моделирования, Красноярск

Введение

Рассматриваем упрощенную математическую модель деформирования, при котором упругим изменением формы частиц можно пренебречь, т.к. оно незначительно мало по сравнению с пластическим формоизменением. Уравнение состояния среды для давления p , плотности ρ и удельной внутренней энергии U описывает упругую деформацию объема. Вариационные неравенства, основанные на принципе максимума мощности диссипации энергии формулируют определяющие соотношения пластического деформирования [2].

$$\begin{aligned} \rho \dot{v}_k &= -p_{,k} + \tau_{kj,j}, \quad \dot{\rho} + \rho v_{k,k} = 0, \quad p = p(\rho, U), \\ \rho \dot{U} &= \frac{p \dot{\rho}}{\rho} + \tau_{kj} e_{kj}, \quad e_{kj} = \frac{1}{2} (v_{k,j} + v_{j,k}) + \frac{\dot{\rho}}{3\rho} \delta_{kj}, \\ (\tilde{\tau}_{kj} - \tau_{kj}) &\leq 0, \quad f(\tau_{kj}, \rho, U) \leq 0, \quad f(\tilde{\tau}_{kj}, \rho, U) \leq 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь v_k – проекции вектора скорости, τ_{kj} и e_{kj} – компоненты девиатора тензора напряжений и тензора пластической деформации, δ_{kj} – символ Кронекера, f – функция текучести материала, характеризующая переход из упругого состояния в пластическое состояние. Через $\tilde{\tau}_{kj}$ обозначены произвольные допустимые вариации напряжений. Нижний индекс после запятой означает частную производную по соответствующей пространственной переменной. Точкой над символом обозначается полная производная по времени.

В отличие от более общей модели Уилкинса [1], учитывающей упругопластическое формоизменение, в которой не существует упругого потенциала деформирования, эта модель полностью удовлетворяет постулатам необратимой термодинамики. Она в случае классических условий пластичности Мизеса и Треска – Сен-Венана корректно описывает классы разрывных решений с ударными волнами – движущимися поверхностями разрыва скоростей и напряжений [2] [3]. Рассматриваемая модель может быть использована для описания ограниченного класса процессов, сопровождающихся большими пластическими деформациями, по сравнению с которыми упругими деформациями можно пренебречь. При постановке краевых задач к системе (1)

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 11-01-00053).

должны быть добавлены начальные данные для искомым величин: v_k , ρ , p , и граничные условия в терминах скоростей или напряжений.

В данной работе предложен экономичный алгоритм численной реализации геометрически линейного приближения модели, который в дальнейшем планируется развить на общий случай. При решении двумерных и трехмерных задач применяется метод расщепления по пространственным переменным. Одномерные системы после вязкоупругой регуляризации решаются методом расщепления по физическим процессам. Сначала на каждом шаге по времени строится решение системы уравнений вязкой сжимаемой жидкости с большим коэффициентом вязкости, описывающей напряженно-деформированное состояние среды до наступления пластичности, затем решение корректируется с помощью специального алгоритма, полученного в результате аппроксимации вариационного неравенства. Разностная схема для уравнений вязкой сжимаемой жидкости разработана на основе метода Иванова [4] построения диссипативных схем с контролируемой искусственной диссипацией энергии. Она является схемой типа предиктор-корректор, неявной на шаге предиктор и явной на шаге корректор. На первом шаге применяется метод трехдиагональной прогонки, на втором вычисления ведутся на основе интегральных законов сохранения. Для такой схемы алгоритм корректировки решения не требует итераций и реализуется путем применения процедуры, аналогичной процедуре корректировки напряжений Уилкинса.

Алгоритм численной реализации модели

Более детально, для упрощенного варианта геометрически линейной модели соотношения (1) в силу симметрии тензора напряжений принимают вид:

$$\begin{aligned} \rho v_{k,t} &= -p_{,k} + \tau_{kj,j}, & p_{,t} &= -\rho c^2 v_{i,i}, \\ (\tilde{\tau}_{kj} - \tau_{kj}) v_{k,j} &\leq 0, & f(\tau_{kj}) &\leq 0, & f(\tilde{\tau}_{kj}) &\leq 0. \end{aligned} \quad (2)$$

где c – скорость упругих волн, f – выпуклая функция текучести, зависящая только от компонент девиатора. Вязкая регуляризация уравнений упругого деформирования приводит к системе (η – коэффициент вязкости):

$$\begin{aligned} \rho v_{k,t} &= -p_{,k} + \tau_{kj,j}, \\ p_{,t} &= -\rho c^2 v_{k,k}, \\ \tau_{kj} &= \eta (v_{k,j} + v_{j,k} - 2/3 v_{i,i} \delta_{kj}). \end{aligned} \quad (3)$$

Метод расщепления по физическим процессам предполагает численное решение этой системы на первом этапе. На втором этапе, на каждом шаге по времени решается вариационное неравенство

$$(\tilde{\tau}_{kj} - \tau_{kj}) (\tau_{kj} - \eta v_{k,j}) \geq 0, \quad f(\tau_{kj}) \leq 0, \quad f(\tilde{\tau}_{kj}) \leq 0. \quad (4)$$

в котором градиенты скорости v_{kj} берутся с первого этапа. Теоретической основой такого подхода служит тот факт, что при $\eta \rightarrow \infty$ неравенство (4) аппроксимирует вариационное неравенство, входящее в систему (2). Решение неравенства (4) определяется как проекция тензора упругих напряжений, вычисленного по формуле (3) на выпуклое множество в девиаторном пространстве, задаваемое неравенством $f(\tau_{kj}) \leq 0$. Так выглядит процедура корректировки напряжений, реализующая определяющие соотношения необратимого деформирования.

Для решения системы (3) применяется метод расщепления по пространственным переменным, который сводится к численной реализации одномерных систем типа:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau}{\partial x}, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\rho c^2 \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \tau = \eta \frac{\partial v}{\partial x}. \quad (5)$$

При построении численных решений краевых задач для системы (5) в соответствии с методом Иванова рассматривается расширенная система уравнений:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial p'}{\partial x} + \frac{\partial \tau'}{\partial x}, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\rho c^2 \frac{\partial v'}{\partial x}, \quad \tau = \eta \frac{\partial v'}{\partial x}. \quad (6)$$

в которой v' , p' и τ' – вспомогательные функции, не равные, вообще говоря, v , p и τ . Умножая первое уравнение (6) на v , второе – на p , третье – на τ , и суммируя результаты, получим уравнение баланса энергии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho v^2}{2} + \frac{p^2}{2\rho c^2} \right) + \frac{\tau^2}{\eta} = & \frac{\partial(-p' + \tau')v'}{\partial x} - (v' - v) \frac{\partial(-p + \tau)}{\partial x} + \\ & + (p' - p) \frac{\partial v'}{\partial x} - (\tau' - \tau) \frac{\partial v'}{\partial x}. \end{aligned} \quad (7)$$

Замыкающую систему уравнений записываем в следующей форме:

$$\begin{pmatrix} v' - v \\ p' - p \\ \tau' - \tau \end{pmatrix} = D \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} -p' + \tau \\ -v' \\ -v' \end{pmatrix}$$

Здесь D – неотрицательно определенная 3×3 – матрица с малыми коэффициентами. В силу неотрицательной определенности из уравнения (7) вытекает неравенство, гарантирующее диссипативность расширенной системы:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho v^2}{2} + \frac{p^2}{2\rho c^2} \right) + \frac{\tau^2}{\eta} \leq \frac{\partial(-p' + \tau')v'}{\partial x}. \quad (8)$$

При стремлении матрицы D к нулю система (6) преобразуется в исходную систему (5), а из уравнения получается закон сохранения энергии для этой системы.

В действительности, при построении разностной схемы проведенные рассуждения повторяются на дискретном уровне. Исходная система записывается в виде разностных уравнений, где t и h – шаги равномерной сетки по времени и по пространственной переменной соответственно:

$$\begin{aligned} \rho \frac{v^j - v_j}{\Delta t} &= -\frac{p_{j+1/2} - p_{j-1/2}}{h} + \frac{\tau_{j+1/2} - \tau_{j-1/2}}{h}, \\ \frac{p^j - p_j}{\Delta t} &= -\rho c^2 \frac{v_{j+1/2} - v_{j-1/2}}{h}, \quad \tau_j = \eta \frac{v_{j+1/2} - v_{j-1/2}}{h}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь величины с целыми индексами $j = 1, \dots, n$, аппроксимирующие основные функции, относятся к нижней и верхней граням пространственно-временной ячейки сетки, а величины с дробными индексами, аппроксимирующие вспомогательные функции, относятся к ее боковым граням. К системе (9) добавляем дискретный аналог замыкающих уравнений.

В итоге получается разностная схема, при реализации которой на шаге предиктор применяется метод трехдиагональной прогонки, а шаг корректор выполняется по формулам явного пересчета решения в ячейке, аппроксимирующим интегральные законы сохранения для системы (6).

Литература

1. Уилкинс М. Л. Расчет упругопластических течений // Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967. С. 212–263.
2. Садовский В. М. К теории ударных волн в сжимаемых пластических средах // Известия РАН: Механика твердого тела, 2001 № 5. С. 87–95
3. Садовский В. М. Разрывные решения в задачах динамики упругопластических сред. М.: Наука, 1997. 208 с.
4. Иванов Г. В. Волчков Ю. М. Богульский И. О. Анисимов С. А. Кургузов В. Д. Численное решение динамических задач упругопластического деформирования твердых тел. Новосибирск: Сиб. унив. изд-во. 2002. 352 с.

ОБОСНОВАНИЕ СХОДИМОСТИ ДИСКРЕТНЫХ АНАЛОГОВ СОПРЯЖЕННО-ОПЕРАТОРНЫХ МОДЕЛЕЙ¹

Сорокин С.Б.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск

Введение

В работе на примере задачи

$$R^*w \equiv \frac{dw}{dx} = f, \quad x \in (a, b), \quad w = k(x)q, \quad q = Ru \equiv -\frac{du}{dx}, \quad (1)$$

$$u(a) = u(b) = 0,$$

исходя из сопряженно-операторной структуры модели, строится ее дискретный аналог и обосновывается сходимость полученной разностной схемы. Принципиальным является то, что исследование проводится для сопряженно-операторной дискретной модели, а не для ее следствий. Одномерная задача выбрана исключительно для краткости изложения. Все результаты и схема доказательства сходимости справедливы и для случая большей размерности. Не имея возможности сколь-либо подробно обсудить результаты, полученные другими авторами, укажем лишь краткий список работ, посвященных рассматриваемой проблеме [1-4].

I Построение дискретного аналога

Введем сетки

$$\bar{\omega} = \{x_i, i = \overline{0, N+1}, x_i = x_{i-1} + h_i\}, \quad \omega_{\frac{1}{2}} = \{x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}, x_i \in \bar{\omega}, i = \overline{0, N}\}.$$

Пусть H_h означает пространство сеточных функций $y^h = (y_i^h)$, заданных на множестве узлов $\bar{\omega}$, так что $y_i^h = y^h(x_i), x_i \in \bar{\omega}$ и равных нулю когда $x_i = x_0$ или $x_i = x_{N+1}$, а H_h^* — пространство сеточных функций $w = (w_{i+\frac{1}{2}})$, заданных на множестве узлов, принадлежащих $\omega_{\frac{1}{2}}$, так что $w_{i+\frac{1}{2}}^h = w^h(x_{i+\frac{1}{2}}), x_{i+\frac{1}{2}} \in \omega_{\frac{1}{2}}$.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке программы № 1.3 Фундаментальные исследования ОМН РАН Современные вычислительные и информационные технологии решения больших задач, программы президиума РАН Интеллектуальные информационные технологии, математическое моделирование, системный анализ и автоматизация, ФЦП Научные и научно-педагогические кадры инновационной России.

Зададим скалярные произведения в H_h и H_h^* :

$$(u^h, v^h)_{H_h} = \sum_{i=1}^N u_i^h v_i^h \left(\frac{h_i}{2} + \frac{h_{i+1}}{2} \right), \quad \forall u^h, v^h \in H_h,$$

$$(w^h, q^h)_{H_h^*} = \sum_{i=0}^{N-1} w_{i+\frac{1}{2}}^h q_{i+\frac{1}{2}}^h h_{i+1}, \quad \forall w^h, q^h \in H_h^*.$$

В качестве аппроксимации оператора R выберем оператор $R_h : H_h \rightarrow H_h^*$, действующий по правилу:

$$(R_h u^h)(x_{i+\frac{1}{2}}) = \begin{cases} \frac{-u_1^h}{h_1}, & i = 0, \\ \frac{u_i^h - u_{i+1}^h}{h_{i+1}}, & 1 \leq i \leq N-1, \\ \frac{u_N^h}{h_{N+1}}, & i = N. \end{cases}$$

За аппроксимацию оператора R^* берем сопряженный к R_h :

$$R_h^* = (R_h)^* : H_h^* \rightarrow H_h, \quad (R_h u^h, w^h)_{H_h^*} = (u^h, R_h^* w^h)_{H_h}.$$

Непосредственные вычисления дают

$$(R_h^* w^h)(x_i) = \frac{w_{i+\frac{1}{2}}^h - w_{i-\frac{1}{2}}^h}{\frac{h_i}{2} + \frac{h_{i+1}}{2}}, \quad 1 \leq i \leq N.$$

Наконец, соотношение $w = k(x)q$ аппроксимируем следующим образом:

$$w^h = K_h q^h,$$

$$(K_h q^h)_{i+\frac{1}{2}} = a_i q_{i+\frac{1}{2}}^h, \quad a_i = k(x_{i+\frac{1}{2}}), \quad 0 \leq i \leq N.$$

В результате построена сопряженно-операторная дискретная модель

$$R_h^* w^h = f^h, \quad w^h = K_h q^h, \quad q^h = R_h u^h.$$

Используя второе соотношение в третьем, запишем ее в виде:

$$\mathbf{A}_h \mathbf{Y}^h \equiv \begin{bmatrix} -K_h^{-1} & R_h \\ R_h^* & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w^h \\ u^h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ f^h \end{bmatrix} \equiv \mathbf{F}^h = \begin{bmatrix} F_1^h \\ F_2^h \end{bmatrix}. \quad (2)$$

II Устойчивость

Введем пространство $\mathbf{H}_h = H_h^* \times H_h$ со скалярным произведением

$$\left(\begin{bmatrix} w^h \\ u^h \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} q^h \\ v^h \end{bmatrix} \right)_{\mathbf{H}_h} = (w^h, q^h)_{H_h^*} + (u^h, v^h)_{H_h}, \quad \forall \begin{bmatrix} w^h \\ u^h \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} q^h \\ v^h \end{bmatrix} \in \mathbf{H}_h.$$

Теорема. Для решения задачи (2) справедливо неравенство $\|\mathbf{Y}^h\|_{\mathbf{H}_h} \leq \gamma \|\mathbf{F}^h\|_{\mathbf{H}_h}$ с константой γ , независимой от шага сетки.

III Аппроксимация

Выпишем уравнение для погрешности $\mathbf{A}_h \mathbf{Z}^h = \Psi^h \equiv \mathbf{F}^h - \mathbf{A}_h \mathbf{Y}$. Здесь $\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} w \\ u \end{bmatrix}$, $\mathbf{Y}^h = \begin{bmatrix} w^h \\ u^h \end{bmatrix}$ решения задач (1) и (2), соответственно,

$$\mathbf{Z}^h = \mathbf{Y}^h - \mathbf{Y}, \quad \Psi^h = \begin{bmatrix} \Psi_1^h \\ \Psi_2^h \end{bmatrix}, \quad \Psi_1^h = K_h^{-1}w - R_h u, \quad \Psi_2^h = f^h - R_h^* w.$$

Используя разложение в ряд Тейлора, легко установить, что

$$\|\Psi_1^h\|_{H_h^*} = O(h^2).$$

Аппроксимационные свойства **только** оператора R_h и оценка точности для формулы центральных прямоугольников гарантируют справедливость результата:

$$\Psi_2^h = R_h^* \eta, \quad \eta = \{\eta_{j-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{24} h_j^2 w''(x_{j-\frac{1}{2}})\}_{j=1, N+1}.$$

Действительно. Вычислим $(\Psi_2^h, e_j)_{H_h}$, выбирая в качестве базиса в H_h функции $e_i(x_j) = \begin{cases} 0, & j \neq i, \\ 1, & j = i, \end{cases} \quad j = 1, 2, \dots, N,$

$$(R_h^* w, e_j)_{H_h} = (w, R_h e_j)_{H_h^*} = w_{j-\frac{1}{2}} [R_h e_j]_{j-\frac{1}{2}} h_j + w_{j+\frac{1}{2}} [R_h e_j]_{j+\frac{1}{2}} h_{j+1}.$$

Для функции $\tilde{e}_j(x)$, $j = 1, 2, \dots, N$ линейной на каждом интервале $[x_j, x_{j+1}]$, $j = 0, 2, \dots, N$, равной 1 в x_j и нулю в остальных узлах верны равенства $[R_h e_j]_{j \pm \frac{1}{2}} = [R \tilde{e}_j](x_{j \pm \frac{1}{2}})$. Поэтому

$$(R_h^* w, e_j)_{H_h} = w_{j-\frac{1}{2}} [R \tilde{e}_j]_{j-\frac{1}{2}} h_j + w_{j+\frac{1}{2}} [R \tilde{e}_j]_{j+\frac{1}{2}} h_{j+1} =$$

а, используя формулу центральных прямоугольников:

$$= \int_{x_{j-1}}^{x_j} w [R \tilde{e}_j] dx + \frac{(w [R \tilde{e}_j])''(x_{j-\frac{1}{2}})}{24} h_j^3 + \int_{x_j}^{x_{j+1}} w [R \tilde{e}_j] dx + \frac{(w [R \tilde{e}_j])''(x_{j+\frac{1}{2}})}{24} h_{j+1}^3 + O(h^4).$$

Или, поскольку $(w(x) [R \tilde{e}_j(x)])''|_{x=x_{j \pm \frac{1}{2}}} = w''(x) [R \tilde{e}_j(x)]|_{x=x_{j \pm \frac{1}{2}}}$,

$$(R_h^* w, e_j)_{H_h} = \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} w [R \tilde{e}_j] dx + \frac{w''(x_{j-\frac{1}{2}}) [R \tilde{e}_j(x_{j-\frac{1}{2}})]}{24} h_j^3 + \frac{w''(x_{j+\frac{1}{2}}) [R \tilde{e}_j(x_{j+\frac{1}{2}})]}{24} h_{j+1}^3 + O(h^4).$$

Опять используя $[R_h e_j]_{j \pm \frac{1}{2}} = [R \tilde{e}_j(x_{j \pm \frac{1}{2}})]$ и финитность $\tilde{e}_j(x)$, получаем

$$(R_h^* w, e_j)_{H_h} = \int_a^b w [R \tilde{e}_j] dx + \frac{h_j^2 w''(x_{j-\frac{1}{2}}) [R_h e_j]_{j-\frac{1}{2}}}{24} h_j + \frac{h_{j+1}^2 w''(x_{j+\frac{1}{2}}) [R_h e_j]_{j+\frac{1}{2}}}{24} h_{j+1} + O(h^4) =$$

а значит для $\eta = \{\eta_{j-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{24}h_j^2 w''(x_{j-\frac{1}{2}})\}_{j=\overline{1, N+1}}$

$$= (w, R\tilde{e}_j)_H - (\eta, R_h e_j)_{H_h^*} = (R^* w, \tilde{e}_j)_H - (R_h^* \eta, e_j)_{H_h^*}.$$

Выберем в качестве $f^h : (f^h)_j = \frac{1}{\frac{h_j}{2} + \frac{h_{j+1}}{2}} \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} f(x) \tilde{e}_j(x) dx$. Тогда

$$(f^h, e_j)_{H_h} = \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} f(x) \tilde{e}_j(x) dx = \int_a^b f(x) \tilde{e}_j(x) dx = (f, \tilde{e}_j)_H$$

и поэтому

$$(\Psi_2^h, e_j)_{H_h} = (f^h - R_h^* w, e_j)_{H_h} = \overbrace{(f, \tilde{e}_j)_H - (R_h^* w, \tilde{e}_j)_H}^0 + (R_h^* \eta, e_j)_{H_h^*} = (R_h^* \eta, e_j)_{H_h^*},$$

что означает $\Psi_2^h = R_h^* \eta$.

IV СХОДИМОСТЬ

Рассмотрим две задачи:

1. $\mathbf{A}_h \bar{\mathbf{Z}}^h = \bar{\Psi}^h, \quad \bar{\Psi}^h = \begin{bmatrix} \Psi_1^h \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \|\Psi_1^h\|_{H_h^*} = O(h^2),$
2. $\mathbf{A}_h \bar{\bar{\mathbf{Z}}}^h = \bar{\bar{\Psi}}^h, \quad \bar{\bar{\Psi}}^h = \begin{bmatrix} 0 \\ \Psi_2^h \end{bmatrix}, \quad \Psi_2^h(x_j) = R_h^* \eta(x_j), \quad j = \overline{1, N+1}.$

Ясно, что $\mathbf{Z}^h = \bar{\mathbf{Z}}^h + \bar{\bar{\mathbf{Z}}}^h$. Для $\bar{\mathbf{Z}}^h$ справедлива оценка (Теорема)

$$\|\bar{\mathbf{Z}}^h\|_{\mathbf{H}_h} \leq \gamma \|\bar{\Psi}^h\|_{\mathbf{H}_h} = \gamma \|\Psi_1^h\|_{H_h^*} = O(h^2). \tag{3}$$

Получим оценку для $\bar{\bar{\mathbf{Z}}}^h$.

Для этого умножим первую строку уравнения $\mathbf{A}_h \bar{\bar{\mathbf{Z}}}^h = \bar{\bar{\Psi}}^h$ на (-1):

$$\begin{bmatrix} K_h^{-1} & -R_h \\ R_h^* & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\bar{Z}}_1^h \\ \bar{\bar{Z}}_2^h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0 \\ \Psi_2^h \end{bmatrix}. \tag{4}$$

Далее, скалярно умножим обе части на $\bar{\bar{\mathbf{Z}}}^h = \begin{bmatrix} \bar{\bar{Z}}_1^h \\ \bar{\bar{Z}}_2^h \end{bmatrix}$. Получим:

$$(K_h^{-1} \bar{\bar{Z}}_1^h, \bar{\bar{Z}}_1^h)_{H_h^*} = (\Psi_2^h, \bar{\bar{Z}}_2^h)_{H_h}.$$

Правая часть с помощью первого из уравнений (4): $R_h \bar{\bar{Z}}_2^h = K_h^{-1} \bar{\bar{Z}}_1^h$ преобразуется следующим образом

$$(\Psi_2^h, \bar{\bar{Z}}_2^h)_{H_h} = (R_h^* \eta, \bar{\bar{Z}}_2^h)_{H_h} = (\eta, R_h \bar{\bar{Z}}_2^h)_{H_h^*} = (\eta, K_h^{-1} \bar{\bar{Z}}_1^h)_{H_h^*}.$$

Таким образом

$$(K_h^{-1} \bar{\bar{Z}}_1^h, \bar{\bar{Z}}_1^h)_{H_h^*} = (\eta, K_h^{-1} \bar{\bar{Z}}_1^h)_{H_h^*}.$$

А значит

$$\lambda_{\min}(\bar{\bar{Z}}_1^h, \bar{\bar{Z}}_1^h)_{H_h^*} \leq |(K_h^{-1} \bar{\bar{Z}}_1^h, \bar{\bar{Z}}_1^h)_{H_h^*}| = |(\eta, K_h^{-1} \bar{\bar{Z}}_1^h)_{H_h^*}| \leq \|\eta\|_{H_h^*} \lambda_{\max} \|\bar{\bar{Z}}_1^h\|_{H_h^*}.$$

И, следовательно

$$\|\bar{\bar{Z}}_1^h\|_{H_h^*} \leq \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \|\eta\|_{H_h^*} = O(h^2). \quad (5)$$

Здесь λ_{\min} и λ_{\max} минимальное и максимальное собственные числа K_h^{-1} .

Из сеточного неравенства Фридрикса, первого из уравнений (4) и (5) имем

$$c_1 \|\bar{\bar{Z}}_2^h\|_{H_h} \leq \|R_h \bar{\bar{Z}}_2^h\|_{H_h^*} = \|K_h^{-1} \bar{\bar{Z}}_1^h\|_{H_h^*} \leq \|K_h^{-1}\|_{H_h^*} \|\bar{\bar{Z}}_1^h\|_{H_h^*} = O(h^2). \quad (6)$$

Из (5) и (6) заключаем

$$\|\bar{\bar{Z}}^h\|_{\mathbf{H}_h} = \sqrt{\|\bar{\bar{Z}}_1^h\|_{H_h^*}^2 + \|\bar{\bar{Z}}_2^h\|_{H_h}^2} \leq \|\bar{\bar{Z}}_1^h\|_{H_h^*} + \|\bar{\bar{Z}}_2^h\|_{H_h} = O(h^2).$$

Окончательно

$$\|\mathbf{Z}^h\|_{\mathbf{H}_h} = \|\bar{\bar{Z}}^h + \bar{\bar{Z}}^h\|_{\mathbf{H}_h} \leq \|\bar{\bar{Z}}^h\|_{\mathbf{H}_h} + \|\bar{\bar{Z}}^h\|_{\mathbf{H}_h} = O(h^2).$$

Литература

1. *Лебедев В.И.* Разностные аналоги ортогональных разложений основных дифференциальных операторов и некоторых краевых задач математической физики. I.- Журнал вычислительной математики и математической физики, 1964, т. 4, № 3, стр. 449-465.
2. *Самарский А.А., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П., Шашков М.Ю.* Использование метода опорных операторов для построения разностных аналогов операций тензорного анализа. Дифференциальные уравнения. 1982, т. 18, № 7. стр. 1251-1256.
3. *Коновалов А.Н., Сорокин С.Б.* Структура уравнений теории упругости. Статика. Новосибирск. Препринт ВЦ СО АН СССР, 1986. № 665, 26 стр.
4. *Y.Kuznetsov, K.Lipnikov, M. Shashkov* The mimetic finite difference method on polygonal meshes for diffusion-type problems. Computational Geosciences(2004) 8: 301-324.

RANS МОДЕЛЬ АТМОСФЕРНОЙ ДИСПЕРСИИ ДЛЯ ОЦЕНКИ РАДИАЦИОННОЙ ОБСТАНОВКИ В УСЛОВИЯХ СЛОЖНОЙ ТРЕХМЕРНОЙ ГЕОМЕТРИИ ОБЪЕКТА. НЕКОТОРЫЕ ДРУГИЕ МОДЕЛИ И ПРОГРАММНЫЕ КОМПЛЕКСЫ В ЗАДАЧАХ РАДИОЭКОЛОГИИ

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

*Институт проблем безопасного развития атомной
энергетики, Москва*

Введение

Направление математического моделирования, посвященное решению задач распространения радиоактивной примеси в условиях сложной трехмерной геометрии объекта (промышленной площадки, условиях города и т.д.) бурно развивалось с 90-х годов прошлого столетия. Среди причин – опасность ядерного терроризма в городе, анализ доз облучения на персонал при аварийных выбросах на объектах атомной энергетики. Очевидно, что методики решения таких задач должны опираться на достаточно точные расчеты трехмерной гидродинамики в стратифицированных средах, учитывающие конфигурацию зданий. На основе результатов этих расчетов должны производиться расчеты распространения радиоактивной примеси, и, в конечном счете, на основе последних, расчеты доз облучения человека с учетом сложной геометрии взаимодействия облучаемого объекта с поверхностным и объемным распределением радиоактивной примеси.

Многие годы в основе таких моделей лежало решение разных классических вариантов осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS модели) с использованием пристеночных функций, а так же сгущением расчетной сетки вблизи поверхности трехмерных объектов. Применение при решении таких задач классических версий LES моделей [1-3] (Ливермор, Лос-Аламос), даже для простейших постановок задач довольно затруднено, не оперативно и, по-видимому, не совсем оправдано. Это связано с тем, что сам трехмерный объект невозможно воспроизвести абсолютно точно, в отличие от многих инженерных задач. Поэтому сама поверхность здания, подстилающая поверхность часто является упрощенной моделью реальности.

Поэтому к 2005-2010 годам возникло понимание того, что необходимо создание специализированных моделей для рассматриваемого круга задач. И такие модели стали появляться (Los Alamos). Нами тоже разработана специализированная модель типа RANS, позволяющая:

1) моделировать распространение, осаждение радионуклидов в условиях сложной 3-мерной геометрии объекта (в городской застройке, промышленной площадке, и т.д.) с приемлемой точности, исходя из специфики задачи, на довольно грубых расчетных сетках без сгущения к поверхностям;

2) моделировать облучение персонала и населения по разным путям и в условиях геометрии произвольной сложности: от облака произвольной формы, от загрязненной радионуклидами поверхности зданий, ингаляции с вдыхаемым воздухом;

3) решать рассматриваемый класс задач без обращения к исходному коду программы и/или перекомпиляции программных модулей, то есть на уровне обычного пользователя на стандартном персональном компьютере.

I Краткое описание математической модели

Для рассматриваемого круга задач число маха много меньше единицы, и хорошим приближением является условие несжимаемости [4]:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} + \frac{\partial u_j u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right]}{\partial x_i} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_j} + g_j \quad (2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial \theta u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \left[\frac{\mu + \mu_t}{Pr} \frac{\partial \theta}{\partial x_i} \right]}{\partial x_i} + \frac{Q_\theta}{\rho} \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \left[\frac{\mu + \mu_t}{Pr} \frac{\partial C}{\partial x_i} \right]}{\partial x_i} + Q_C \quad (4)$$

В этих уравнениях: ρ – плотность; u – скорость; μ и μ_t – молекулярная и турбулентная кинематическая вязкость; P – давление; g – ускорение свободного падения; θ – потенциальная температура; Q_θ , Q_C – источник тепла и загрязнения соответственно; Pr – число Прандтля.

Пользуемся приближением Буссинеска для учета вариации плотности (плавучести).

В основе используемой гибридной модели турбулентности лежит классическая модель κ - ε для развитой турбулентности с поправками, основанными на эмпирических зависимостях для атмосферы:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial k u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \left[\frac{\mu + \mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right]}{\partial x_i} + S + G - \varepsilon \quad (5)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \left[\frac{\mu + \mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right]}{\partial x_i} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} S + C_{\varepsilon 3} G) \quad (6)$$

$$S = \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (7)$$

$$G = -\frac{\mu_T}{\sigma_t} \beta |\vec{g}| \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (8)$$

$$\mu_{t,k-e} = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (9)$$

Проблема κ - ε модели состоит в том, что она не справедлива вблизи поверхностей.

Существуют разные методы преодоления данной проблемы. Один из них заключается в сгущении расчетной сетки к поверхности обтекаемого объекта и введении пристеночных функций, которые нейтрализуют особенность вблизи стенки. Применительно к нашим задачам такой подход подходит плохо. Необходимо с приемлемой точностью проводить расчет на грубых сетках.

Как правило, любые модели RANS опираются на те, или иные эмпирические закономерности. Атмосфера – слабо стратифицированная среда, где накоплено много материала. В первой (приповерхностной) расчётной ячейке, размеры которой, как правило, несколько метров, будем использовать эти закономерности. Выше – модели турбулентности с учетом результатов модели с весами.

Основные используемые нами приближения описаны далее.

Согласно эмпирическим зависимостям для атмосферы, где перепады температур незначительны, скорость ветра имеет практически логарифмическую зависимости от расстояния до стенки (при любой ориентации стенки) и напряжённость трения у поверхности определяется соотношением:

$$u^* = \frac{\kappa \cdot u}{\ln \left(\frac{\Delta}{r} \right)} \quad (10)$$

u^* – динамическая скорость (м/с); $\kappa = 0.41$ – постоянная Кармана; u – тангенциальная к поверхности препятствия составляющая гидродинамической скорости (м/с); Δ – расстояние до плоскости, в которой лежит поверхность стенки (м); r – параметр шероховатости поверхности стенки (м).

Корректировка модели турбулентности в приповерхностных расчетных ячейках:

$$k = \frac{(u^*)^2}{\sqrt{C_\mu}} \quad (11)$$

$$\varepsilon = \frac{(u^*)^3}{\kappa \cdot \Delta} \quad (12)$$

Гибридная модель турбулентности в остальных расчётных ячейках:

$$\mu_{t,pr} = \frac{\kappa u^* \Delta}{\varphi(\Delta, L)} \quad (13)$$

$$\mu_t = \lambda(\Delta) \mu_{t,pr} + (1 - \lambda(\Delta)) \mu_{t,k-\varepsilon} \quad (14)$$

$$\lambda_\Delta = \frac{e^{-\frac{2\Delta}{h}}}{e^{-\frac{2\Delta}{h}} + \left(1 - e^{-\frac{\Delta}{h}}\right)^2} \quad (15)$$

Здесь φ – функция-поправка на стратификацию, зависящая от расстояния до поверхности Δ и масштаба Монино-Обухова L . В гибридной модели турбулентности осуществляется плавный переход от модели Прандтля к модели κ - ε .

Была проведена верификация разработанной модели на 2 разных натуральных экспериментах.

Первый эксперимент – стендовый лабораторный эксперимент по фронтальному обтеканию кубического препятствия с постоянным источником в зоне аэрологической тени. Было произведено сравнение результатов натурального эксперимента и численного расчёта, полученных в ведущих научных центрах США и численного расчёта по нашей модели. Концентрация пассивной примеси измерялась вдоль 3 линий, параллельных, соответственно, осям координат, как показано на рисунке 1. На рисунках 2-4 показаны сравнения профилей отмасштабированной концентраций.

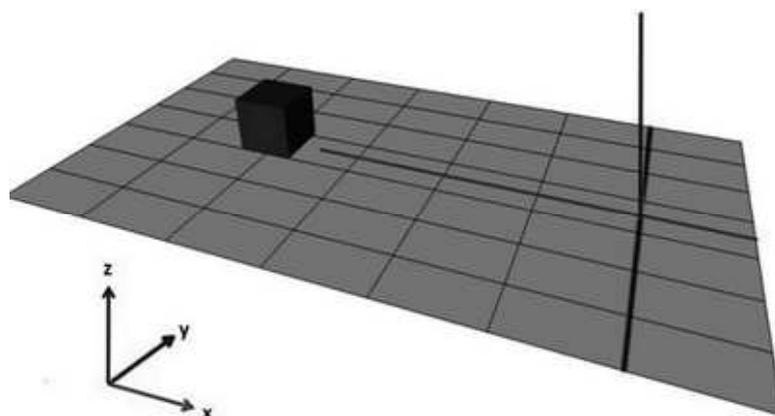


Рис. 1. Линии измерения концентраций примеси в стендовом эксперименте

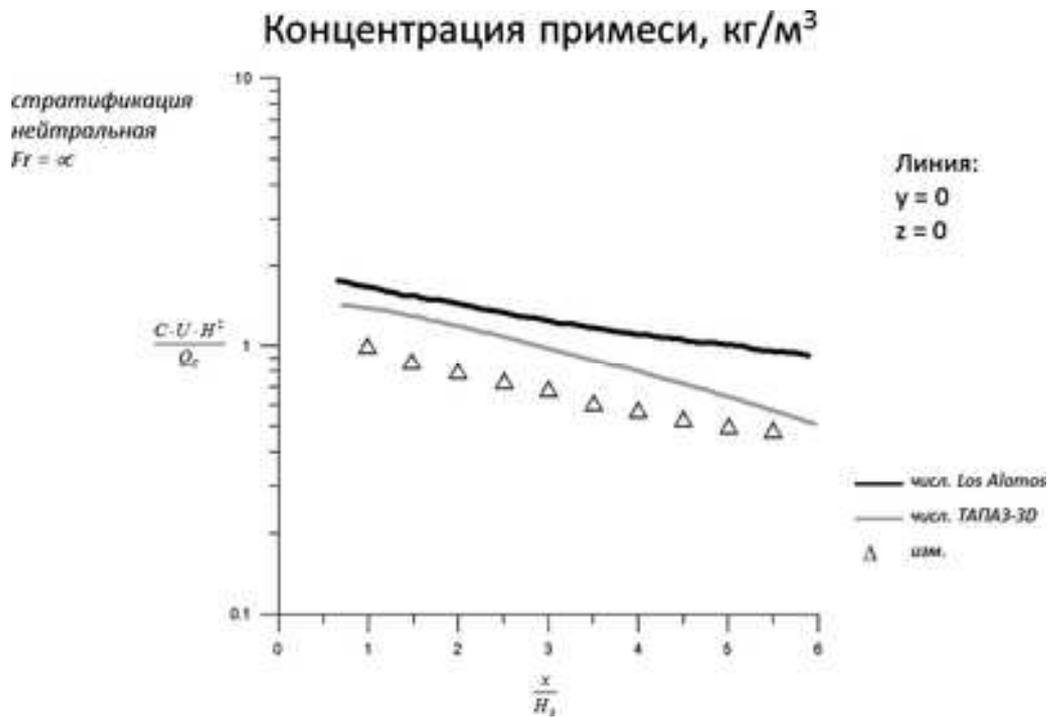


Рис. 2. Сравнение продольных профилей концентрации примеси при нейтральной стратификации

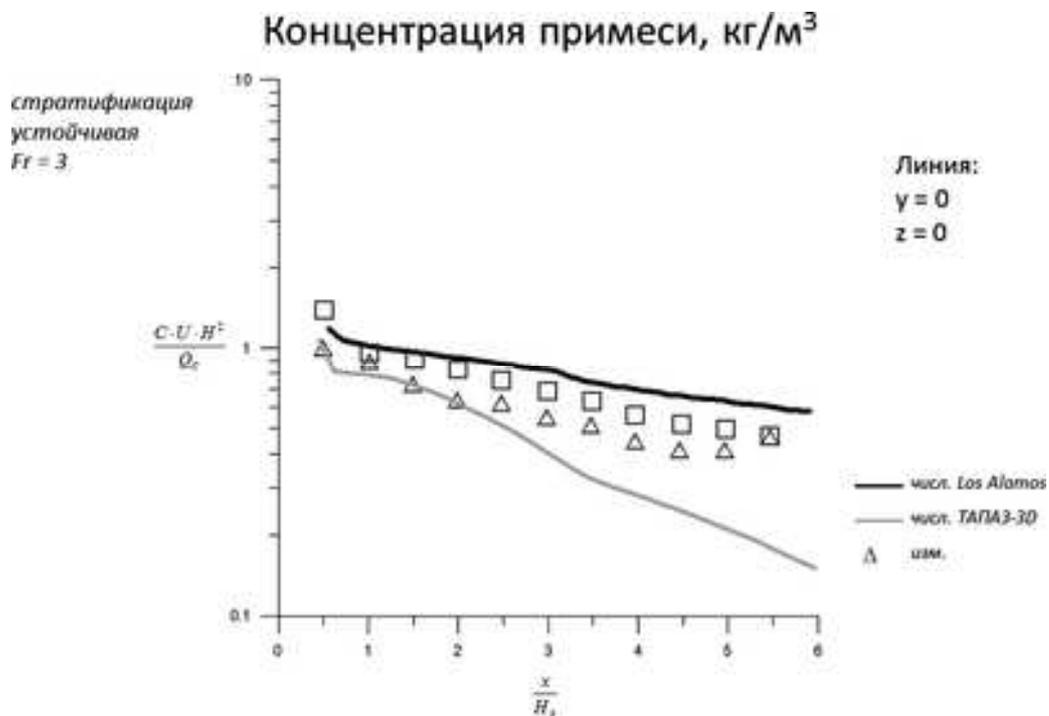


Рис. 3. Сравнение продольных профилей концентрации примеси при устойчивой стратификации



Рис. 4. Сравнение поперечных профилей концентрации примеси при нейтральной стратификации

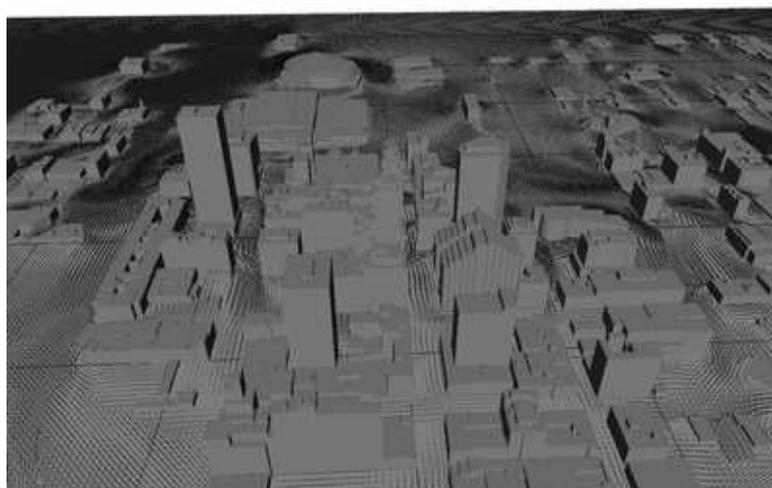


Рис. 5. Рассчётное приземное поле ветра на фоне оцифрованной геометрии центра города Оклахома

Второй – масштабный эксперимент по распространению пассивного трассера SF_6 в городе Оклахома [7, 8].

На рисунке 5 представлено приземное поле ветра на фоне трехмерной модели центра города Оклахом (расчёт по нашей RANS модели); на рисунке 6 приведено 3-мерное поле установившейся концентрации трассера (со стороны источника); на рисунке 7 приведены концентрации трассера в точках индикации по результатам натурных измерений и результатам расчёта).

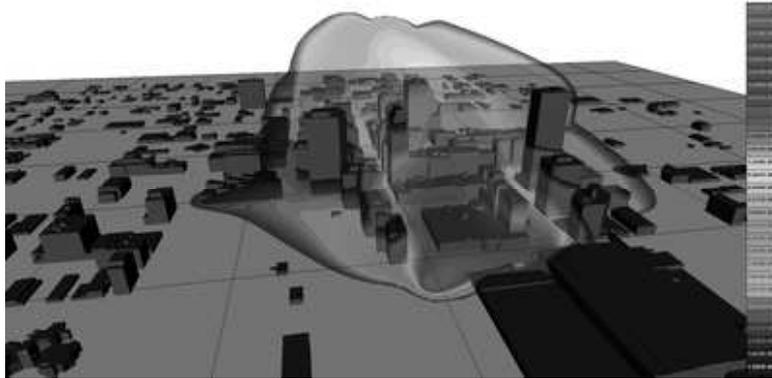


Рис. 6. Расчётное установившееся 3-мерное поле концентрации примеси на фоне оцифрованной геометрии центра города Оклахома

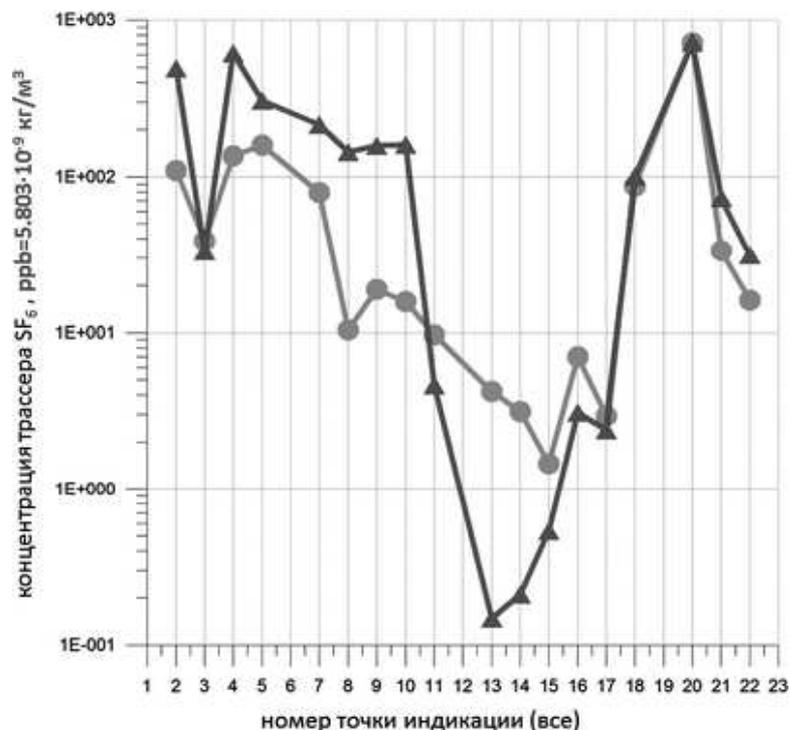


Рис. 7. Концентрация трассера в точках индикации Ливерморской лаборатории, включая высотные

Кроме того, авторы принимали участие в разработке используемых на практике некоторых других моделей и программных комплексов в задачах радиоэкологии. А именно, при прогнозе последствий аварии на АЭС

Фукусима-1 были использованы следующие программные системы [5, 6]:

1) НОСТРАДАМУС – предназначен для расчёта атмосферного переноса радиоактивной примеси посредством лагранжевой стохастической модели и прогноза радиационной обстановки.

2) ПАРРАД – своего рода расширение системы НОСТРАДАМУС возможностью использования 3-мерного ветра, диффузии, осадков, полученных с помощью открытой модели прогноза погоды WRF.

3) НЕПТУН – предназначен для прогноза распространения радиоактивной примеси в верхнем квазиоднородном слое океана.

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. *Julia E. Flaherty, Brian Lamb et al.* Vertical tracer concentration profiles measured during the joint Urban 2003 dispersion study. J. of applied meteorology and climatology V.46, 2007, p 2147-2064.
3. *Donald A., Burrows Eric A. Hendricks* Modeling turbulent flow in an Urban Central Business district J. of applied meteorology and climatology V.46, 2007, p 2010-2037.
4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: Учебное пособие. В 10 т. Т. VI. Гидродинамика. - 3-е изд., перераб. - М.: Наука.
5. *Труды ИБРАЭ РАН / под общ. ред. Чл.-кор. РАН Л. А. Большова* Ин-т проблем безопасного развития атомной энергетики РАН. – М. : Наука, 2007 – Вып. 9 : Моделирование распространения радионуклидов в окружающей среде / науч. Ред. Р. В. Арутюнян. – 2008. – 229 с. :ил. – ISBN 978-5-02-036954-2 (в пер.).
6. *Под редакцией Большова Л.А., Арутюняна Р.В.* Фукусима. Опыт реагирования и уроки. Наука 2013, 214 стр.
7. *Allwine, K.J., M.J. Leach, L.W. Stockham, J.S.Shinn, R.P. Hosker, J.F. Bowers, and J.C. Pace* 2004: Overview of Joint Urban 2003 – An Atmospheric Dispersion Study in OklahomaCity. Preprints. Symposium on Planning, Nowcasting, and Forecasting in the UrbanZone, Seattle, WA, Amer. Meteor. Soc., J7.1.
8. *Urban, J.T., S. Warner, N. Platt, and J.F. Heagy* 2007: Assessment of HPAC Urban Modelling Capabilities Using Joint Urban 2003 Field Trial Data. Proceedings of the 11th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, 26-30.

МОДЕЛИ ТЕРМОДИФФУЗИОННОЙ КОНВЕКЦИИ: СИММЕТРИИ И ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ¹

Степанова И.В.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт вычислительного моделирования Сибирского
отделения Российской академии наук, г.Красноярск*

Введение

Классические результаты использования группового анализа в исследовании моделей механики сплошных сред показали его эффективность при построении новых точных решений и нахождении аналитических зависимостей произвольных параметров, входящих в модель.

В работе приводится краткий обзор исследований по симметриям дифференциальных уравнений и их применению в изучении математических моделей, описывающих конвективные движения бинарных смесей. Данный подход используется для решения задачи групповой классификации относительно произвольных физических параметров смеси, входящих в уравнения движения. Задача групповой классификации состоит в нахождении произвольных параметров, входящих в систему в виде функций или постоянных, а также групп преобразований переменных, допускаемых системой при каждой конкретной конфигурации параметров. Показаны примеры построения точных решений исходных систем с использованием преобразований, полученных в результате решения задачи групповой классификации.

I Симметрия в дифференциальных уравнениях

Симметрия относится к фундаментальными свойствам, заложенным в природе объекта и влияющим на его поведение. Многообразие форм симметрии дает возможность применять ее принципы в различных отраслях науки и объединять общим подходом казалось бы совершенно разные направления научных исследований [1].

Симметрию могут иметь не только геометрические фигуры, биологические виды и музыкальные последовательности, но и дифференциальные уравнения. Симметрия уравнения определяется группой преобразований, которые оставляют это уравнение инвариантным, т.е. не меняют его формы. Результаты по исследованию симметрии дифференциальных уравнений норвежского математика С. Ли унифицировали и расширили имеющиеся методы

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Интеграционного проекта СО РАН №44

интегрирования, в частности, вопрос о разрешимости обыкновенных дифференциальных уравнений в квадратурах был решен самим С. Ли. С тех пор теория симметрий успешно применяется к дифференциальным уравнениям самой различной природы независимо от их свойств при наличии нетривиальной группы симметрий. На самом деле, это требование не является искусственным – в большинстве математических моделей симметрия заложена в изначальную формулировку в виде свойств однородности и изотропности пространства, предположений о галилеевой или лоренцевой инвариантности процессов [2].

В работах академика Л.В. Овсянникова и его учеников показано, что описание свойств дифференциальных уравнений при помощи допускаемых групп обнаруживает свою силу не только в вопросах о полной разрешимости, но и при построении отдельных классов точных решений, а также качественном исследовании дифференциальных уравнений механики и математической физики [3–5].

Расширение области применений требует существенного углубления симметричных методов, разработки новых понятий и алгоритмов. Возникшие в связи с этим проблемы и перспективы развития стимулируют большое число исследований для уточнения интуитивного понимания симметрии, вооружения конструктивными методами ее использования, стремления к правильной постановке задач, поиска возможных путей их решения.

II О термодиффузионной конвекции

Изучению конвективных течений вязких теплопроводных жидкостей всегда уделялось много внимания в связи с важностью этих процессов для приложений. Как известно, конвекцией принято называть вид теплопередачи, при котором энергия передается потоками вещества. Различают свободную конвекцию, вызванную неоднородностями среды и вынужденную, вызванную внешним механическим воздействием на среду [6].

Математическая модель для описания конвективных течений включает в себя уравнения Навье-Стокса, переноса тепла и баланса концентрации [7]. Плотность считается функцией температуры и концентрации. Основным моментом при выводе уравнений в этом приближении является предположение о том, что отклонения плотности от некоторого среднего значения, обусловленные эффектами теплового и/или солевого расширения будут настолько малы, что ими можно пренебречь во всех уравнениях, кроме уравнения импульса, где учесть их только в членах, отвечающих подъемной силе.

При выводе уравнений движения часто предполагается, что диффузионный поток массы зависит только от градиентов концентрации. Однако, диффузия обусловлена и градиентами температуры, давления и массовых сил, причем в ряде приложений градиенты температуры вызывают появление заметного диффузионного потока массы. Это явление, именуемое термо-

диффузией или эффектом Соре, существенно используется при разделении смесей на компоненты [8].

III Основные уравнения. Задача групповой классификации

Уравнения термодиффузионной конвекции при произвольной зависимости плотности жидкости и коэффициентов переноса от температуры и концентрации достаточно сложны и в двумерном пространстве имеют вид:

$$\begin{aligned} \rho_0 \frac{d\mathbf{u}}{dt} &= \operatorname{div} \Pi + \rho_0 F \mathbf{g}, \quad \operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \\ \frac{dT}{dt} &= \operatorname{div}(\chi \nabla T), \quad \frac{dC}{dt} = \operatorname{div}(D \nabla C + D^T \nabla T), \end{aligned} \quad (1)$$

где $\Pi = -pE + 2\rho_0\nu\mathfrak{D}(\mathbf{u})$, E – единичный тензор, $\mathfrak{D}_{ij} = \partial u_i/\partial x_j + \partial u_j/\partial x_i$ – тензор скоростей деформации, $i, j = 1, 2$, $d/dt = \partial/\partial t + u_j\partial/\partial x_j$ означает полную производную по t , по индексу j предполагается суммирование, $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ – вектор скорости, $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ – вектор координат, $\mathbf{g} = (0, g)$ – вектор ускорения свободного падения, p – давление, $\nu(T, C)$, $\chi(T, C)$ и $D(T, C)$ положительные функции, соответствующие коэффициентам кинематической вязкости, температуропроводности и диффузии. Функция $D^T(T, C)$ – коэффициент термодиффузии. Случай $D^T < 0$ соответствует положительному эффекту термодиффузии, когда более легкий компонент движется в более нагретую область. В случае отрицательного эффекта термодиффузии ($D^T > 0$) наблюдается противоположная ситуация.

Для системы (1) автором была решена задача групповой классификации относительно функций $F(T, C)$, $\nu(T, C)$, $\chi(T, C)$, $D(T, C)$ и $D^T(T, C)$ [9]. Отдельно рассмотрен случай, когда $F = 0$, т.е. жидкость находится в невесомости. Для обеих моделей система (1) допускает бесконечномерные алгебры дифференциальных операторов, значит, группы преобразований зависимых и независимых переменных зависят от произвольных гладких функций. С одной стороны это увеличивает возможности построения новых точных решений, с другой осложняет процедуру их классификации, т.е. поиска преобразований, переводящих одни решения в другие. Для коэффициентов из системы (1) были найдены степенные, экспоненциальные и логарифмические зависимости от параметров состояния. Кроме этого были вычислены преобразования эквивалентности, действующие только на произвольные элементы и не меняющие дифференциальную структуру исходных уравнений.

Исследование системы (1) в трехмерном пространстве для постоянных коэффициентов переноса было проведено в работе [10] при линейной зависимости плотности от температуры и концентрации, случай нелинейной зависимости рассмотрен автором в [11]. В отличие от системы с учетом переменных

коэффициентов переноса, для данной модели удается найти преобразование, позволяющее привести уравнения на температуру и концентрацию к одинаковой дифференциальной структуре и, тем самым, упростить решение задачи групповой классификации. Такое преобразование возможно только при различных друг от друга коэффициентах температуропроводности и диффузии, что для жидких смесей обычно выполняется.

IV О точных решениях

В работах [9–11] также представлены примеры построения точных решений описанных систем. Для модели с постоянными коэффициентами переноса показано, что для однонаправленных стационарных течений жидкостей существует замена переменных, позволяющая свести систему к уравнениям параболического типа, для которых известны точные решения краевых задач. Для модели с переменными коэффициентами переноса найдены точные решения, описывающие состояние механического равновесия бинарной смеси. При этом рассмотрена экспоненциальная и степенная зависимость коэффициентов от температуры и концентрации.

Для физической интерпретации полученных решений были рассмотрены течения бинарной смеси в вертикальном слое, ширина которого много меньше его высоты. Именно так моделируется термодиффузионная колонна – устройство для разделения смесей на компоненты под действием эффекта Соре. Полученные точные решения описывают стационарные течения в вертикальном слое под действием вертикального градиента концентрации. Следует отметить различия профилей скорости в случае учета нелинейности силы плавучести по сравнению с линейной зависимостью.

V Заключение

Результаты исследования могут быть использованы для пополнения банка новых точных решений моделей термодиффузионного течения бинарных смесей, планирования экспериментов для определения коэффициентов переноса, а также для тестирования численных методов расчета конвективных течений.

Литература

1. *Шубников А.В., Копцик В.А.* Симметрии в науке и искусстве. М.:Наука. 1972. 349 с.
2. *Олвер П.* Приложения групп Ли к дифференциальным уравнениям. М.:Мир. 1989. 639 с.

3. *Овсянников Л.В.* Групповой анализ дифференциальных уравнений. М.:Наука. 1978. 400 с.
4. *Андреев В.К., Капцов О.В., Родионов А.А., Пухначев В.В.* Применение теоретико-групповых методов в гидродинамике. Новосибирск:Наука. 1994. 319 с.
5. *Ибрагимов Н.Х.* Группы преобразований в математической физике. М.:Наука. 1983. 280 с.
6. *Геххарт Б., Джалурия Й., Махаджан Р., Саммакия Б.* Свободноконвективные течения, тепло- и массообмен. М.:Мир. 1991. 678 с.
7. *Андреев В.К., Гапоненко Ю.А., Гончарова О.Н., Пухначев В.В.* Современные математические модели конвекции. М.:Физматлит. 2008. 368 с.
8. *Рабинович Г.Д.* Разделение изотопов и других смесей термодиффузией. М.:Атомиздат. 1981. 144 с.
9. *Stepanova I.V.* Group classification for equations of thermodiffusion in binary mixture // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 2013. N 18. P. 1343–1346.
10. *Ryzhkov I.I.* Symmetry analysis of equations for convection in binary mixture// J. Siber. Fed. Univ.: Math and Phys. 2008. N 1. P. 410–431.
11. *Андреев В.К., Степанова И.В.* Симметрии уравнений термодиффузии при нелинейной зависимости силы плавучести от температуры и концентрации. // Выч. технологии. 2010. Т. 15. N. 4. С. 47–56.

ПРИМЕНЕНИЕ ОБЛАЧНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТЕХНОГЕННЫХ И КЛИМАТИЧЕСКИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ГРУНТ, РАСПОЛОЖЕННЫЙ В ЗОНЕ ВЕЧНОЙ МЕРЗЛОТЫ¹

Филимонов М.Ю.¹, Ваганова Н.А.¹, Игумнов А.С.¹,
Берсенев А.Ю.¹, Васев П.А.¹, Гусарова В.В.²,
Халтурина Т.Ю.²

¹ ИММ УрО РАН, Екатеринбург

² УрФУ, Екатеринбург

Введение

Вечная мерзлота, или многолетнемерзлые породы (ММП), занимают около 25% всей суши земного шара (имеется только один континент – Австралия, на котором полностью отсутствуют ММП). Например, на Аляске эти территории занимают 80% общей площади, в России – 65% (10 млн. км²), в Канаде – 50%. Высокогорные районы также могут находиться в зоне вечной мерзлоты (в Китае эти районы составляют 11% всей территории). В России запасы подземных льдов криолитозоны составляют около 19000 км³, что дает право называть вечную мерзлоту подземным оледенением. Оттаивание насыщенных льдом пород из-за потепления климата, или различных техногенных воздействий, будет сопровождаться просадками земной поверхности и развитием опасных мерзлотных геологических процессов, называемым термокарстом.

В России территории, занятые ММП, чрезвычайно важны для экономики, так как здесь добывается около 93% российского природного газа и 75% нефти. Проектирование и строительство рабочих площадок с добывающими скважинами на этих территориях имеют свою специфику. Например, по российским строительным стандартам считается, что две скважины не могут быть пробурены на расстоянии друг от друга меньшим, чем два радиуса растепления (т.е. расстояния от скважины, на котором будет находиться нулевая изотерма, за 25 лет эксплуатации одиночной скважины).

В данной работе для описания нестационарных тепловых полей, действующих на ММП, от различных технических систем, имеющих на северных нефтегазовых месторождениях, рассматривается математическая модель распространения тепла в вечномерзлых грунтах с учетом различных

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума УрО РАН “Арктика” (проект 12-1-4-005), междисциплинарных и межведомственных фундаментальных исследований (проект 12-С-1001) и проектом РФФИ №13-01-00800.

климатических и физических факторов, предложенная в работах [1]– [7]. К первой группе относятся климатические факторы: солнечное излучение, сезонное изменение температуры воздуха, приводящее к периодическому протаиванию (промерзанию) грунта, и возможный снежный покров. Ко второй группе относятся техногенные и физические факторы, учтенные также в предлагаемой модели: неоднородность грунта (не обязательно по горизонтальным слоям), наличие рядом со сваями, или фундаментом сооружений, сезоннодействующих охлаждающих устройств (СОУ), представляющих собой парожидкостные устройства, работающие только за счет законов физики без внешних источников энергии, а также и других технических систем, например, горизонтальные факельные системы (ГФУ) для сжигания при добычи нефти попутного газа.

Учет перечисленных факторов приводит к решению для трехмерного квазилинейного уравнения теплопроводности (квазилинейность уравнения обусловлена зависимостью теплофизических параметров от температуры) задачи Стефана в прямоугольном параллелепипеде, но уже с нелинейным краевым условием на поверхности грунта, связанным с солнечным излучением. Предполагается, что боковые грани расчетной области теплоизолированы и выбраны достаточно далеко от места расположения инженерных конструкций, учет которых приводит к необходимости построения расчетной сетки большой размерности, сгущающейся к источникам тепла (холода) по определенным законам.

В основу численной методики был заложен алгоритм, хорошо зарекомендовавший себя для нахождения тепловых полей от подземных трубопроводов [8, 9], но с учетом специфики, связанной с возможными фазовыми переходами в грунте. В ходе численных расчетов были выявлены некоторые закономерности по увеличению скорости распространения радиусов растепления по ММП от двух скважин на встречу друг друга в зависимости от различных параметров, что послужило основанием для корректировки строительных стандартов. Точность численных расчетов была проверена в 2012 году для российского нефтяного месторождения “Русское”, для которого полученные численные результаты отличались от экспериментальных менее 5% через 3 года после начала эксплуатации месторождения.

Отличительной особенностью пакета Wellfros от всех других является его адаптация к выбираемому конкретному географическому месту, в котором требуется нахождение тепловых полей в грунте. Для этой цели разработан оригинальный алгоритм, который позволяет опосредовано учесть и меняющуюся толщину снега, и число солнечных дней в году, и особенность верхнего слоя грунта и т.п.

В статье приводятся результаты численных расчетов, полученных на основе созданного комплекса программ Wellfrost, который был использован при проведении проектных работах для восьми нефтегазовых месторождений России, расположенных в зоне вечной мерзлоты. На разработанный комплекс программ Wellfrost получено свидетельство о государственной ре-

гистрации программы для ЭВМ № 2012660988 от 4 декабря 2012 г. (авторы — Ваганова Н.А., Филимонов М.Ю.), и в настоящее время для этого комплекса создана облачная среда, чтобы специалисты смогли проводить удаленные численные расчеты на многопроцессорных вычислительных комплексах.

I Постановка задачи. Основные уравнения

Обустройство и эксплуатация нефтегазовых месторождений в районах распространения вечной мерзлоты имеет ряд особенностей. В частности, для более длительного срока эксплуатации скважин, расположенных на специально оборудованных кустовых площадках, необходимо минимизировать распространение тепла в окружающий грунт от различных работающих инженерных систем.

Рассматривается задача о распространении тепла в грунте от нагретой и теплоизолированной скважины (трубы) с учетом фазового перехода. Расчетная область представляет собой трехмерный параллелепипед, из которого удалена вертикальная цилиндрическая скважина. Грунт может иметь неоднородную структуру, а также включать в себя различные элементы, например, линзы льда, имеющие отличные от окружающего грунта теплофизические параметры, различные слои отсыпки поверхности грунта и слои инженерных теплоизолирующих конструкций, окружающие скважину.

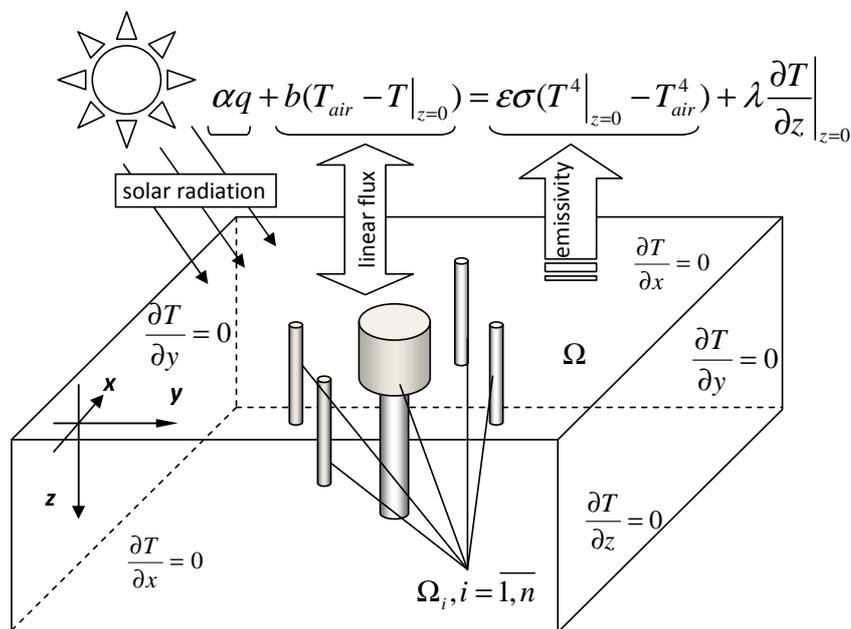


Рис. 1. Основные тепловые потоки.

Пусть в начальный момент времени $t_0 = 0$ грунт занимает заданный параллелепипед Ω и имеет температуру $T_0(x, y, z)$. Оси x и y расположены параллельно поверхности кустовой площадки, а ось z направлена вниз. Будем считать, что размер расчетной области Ω определяется положительными

числами L_x, L_y, L_z : $-L_x \leq x \leq L_x, -L_y \leq y \leq L_y, -L_z \leq z \leq 0$. Для моделирования распространения тепла была предложена следующая математическая модель.

Пусть $T = T(t, x, y, z)$ — температура грунта в точке (x, y, z) в момент времени t . Область Ω может включать в себя различные инженерные сооружения (например, искусственные слои отсыпки на поверхности грунта, сваи, скважины и т.д.). Предположим, что в области Ω могут одновременно находиться n объектов, являющихся источниками тепла (фундаменты, добывающие и нагнетательные теплоизолированные скважины, трубопроводы и т.п.), а также источники холода, например, СОУ, или тепла — ГФУ. Обозначим поверхности этих объектов через $\Omega_i = \Omega_i(x, y, z), i = 1, \dots, n$. Основные тепловые потоки изображены на рис. 1.

В качестве математической модели для учета излучения от каждого i -го объекта используется уравнение контактной (диффузионной) теплопроводности с неоднородными коэффициентами, включающее локализованную теплоемкость фазового перехода — подход, позволяющий решать задачу типа Стефана, без явного выделения границы фазового перехода [10, 11]. При этом теплота фазового превращения вводится с применением δ -функции Дирака как сосредоточенная теплоемкость фазового перехода в коэффициент теплоемкости. Получаемая таким образом разрывная функция затем “распределяется” по температуре, и не зависит от числа измерений и фаз. В итоге для получения тепловых полей в грунте требуется решить в области Ω квазилинейное уравнение теплопроводности

$$\rho(c_\nu(T) + k\delta(T - T^*)) \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\lambda(T)\text{grad}T), \quad (1)$$

где ρ — плотность [кг/м³], T^* — температура фазового перехода [K],

$$c_\nu(T) = \begin{cases} c_1(x, y, z), & T < T^*, \\ c_2(x, y, z), & T > T^*, \end{cases} \text{ удельная теплоемкость [Дж/кг K],}$$

$$\lambda(T) = \begin{cases} \lambda_1(x, y, z), & T < T^*, \\ \lambda_2(x, y, z), & T > T^*, \end{cases} -$$

коэффициент теплопроводности [Вт/м K], $k = k(x, y, z)$ — теплота фазового перехода. Для уравнения (1) в расчетной области Ω задаются начальные

$$T(0, x, y, z) = T_0(x, y, z), \quad (2)$$

и граничные условия

$$\alpha q + b(T_{air} - T_{z=0}) = \varepsilon\sigma(T_{z=0}^4 - T_{air}^4) + \lambda \frac{\partial T}{\partial z}, \quad (3)$$

$$T \Big|_{\Omega_i} = T_i(t), i = 1, \dots, n, \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=\pm L_x} = \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=\pm L_y} = \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=\pm L_z} = 0, \quad (5)$$

где T_{air} — температура воздуха, $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$ [Вт/(м²К⁴)] — постоянная Стефана-Больцмана, $b = b(t, x, y)$ — коэффициент теплообмена, $\varepsilon = \varepsilon(t, x, y)$ — коэффициент "серости", $q(t)$ — суммарная солнечная радиация, $\alpha = \alpha(t, x, y)$ — доля энергии, ушедшая на нагрев грунта, которая в общем случае зависит от состояния атмосферы, угла падения солнечных лучей, т.е. широты местности и времени суток.

Для решения задачи (1)–(5) применяется метод конечных разностей с расщеплением по пространственным переменным, строится ортогональная сетка, равномерная или сгущающаяся по определенному закону вблизи поверхности грунта, либо к поверхностям Ω_i . Исходное уравнение по каждому из пространственных направлений аппроксимируется неявной центрально-разностной трехточечной схемой и методом прогонки решается система разностных линейных алгебраических уравнений, имеющая трехдиагональный вид. На поверхности $z = 0$ из условия (3) возникает алгебраическое уравнение 4-ой степени, для решения которого используется метод Ньютона. Разрешимость разностных уравнений для линейного уравнения теплопроводности с нелинейным краевым условием на поверхности $z = 0$ доказана в работе [8]. Нелинейное граничное условие, как правило, аппроксимируется на решении,

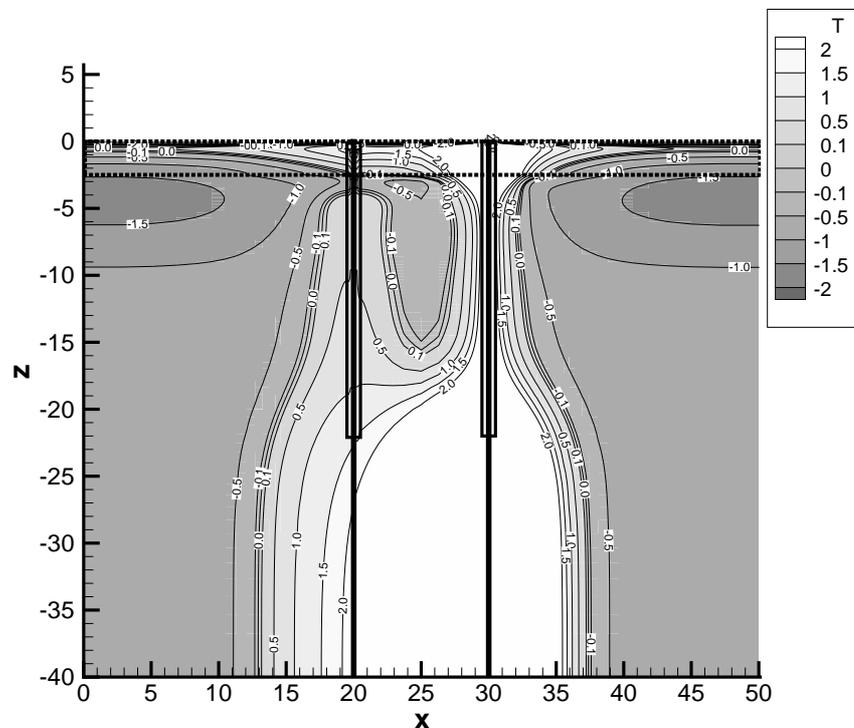


Рис. 2. Тепловые поля в грунте от двух скважин.

полученном либо из линейной модели, либо вычисленном на предыдущем шаге итерационного процесса. Например, в работах [12, 13] одно из граничных условий для уравнения теплопереноса включает в себя нелинейный радиационный коэффициент теплоотдачи, значение которого аппроксимируется на решении, вычисленном на предыдущей итерации. Авторам не известны работы по прямому численному моделированию задач о распространении тепла с нелинейными граничными условиями с помощью неявных разностных схем, приводящих к решению нелинейной задачи.

II Результаты численных расчетов

Продемонстрируем некоторые возможности программы Wellfrost. Вначале рассмотрим такую ситуацию: на кустовой площадке, отсыпка которой состоит из пеноплекса толщиной 200 мм., песка толщиной 1.7 м. и бетонных плит толщиной 30 см. работают две, находящиеся рядом, теплоизолированные скважины. Температура добываемой нефти 45°C , начальная температура ММП составляет -0.7°C . Через 6 лет работы одну скважину отключают (на рис. 2 это левая скважина), в то время как вторая скважина продолжала работать еще 1.5 года и на рис.2 приведены получившиеся тепловые поля.

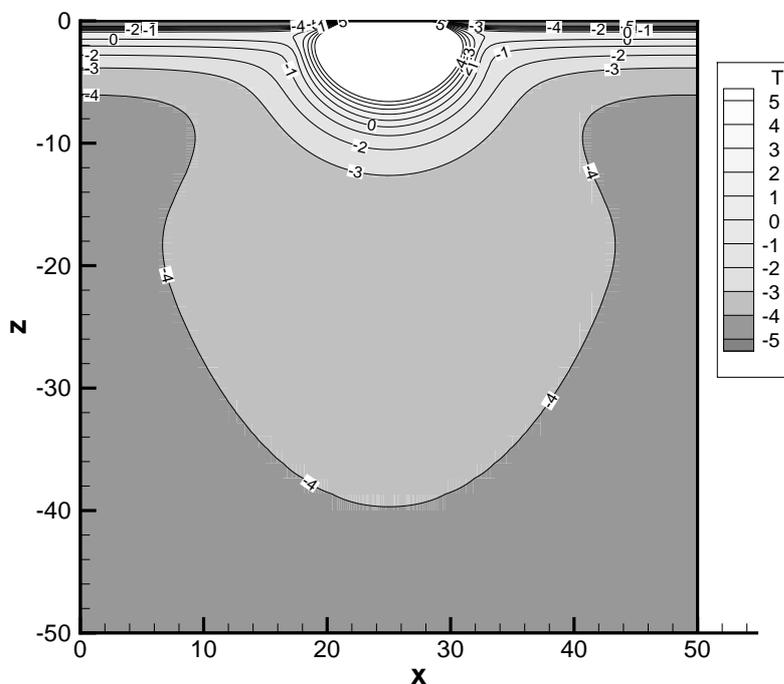


Рис. 3. Тепловые поля в грунте от ГФУ.

На рис. 3 приведены тепловые поля, полученные в результате работы ГФУ

(температура факела равна 800°C). Расчеты показали, что через 15 лет работы установки происходит стабилизация границы растепления ММП, что позволяет сделать выводы об оптимальном расположении ГФУ на кустовой площадке и выборе теплоизоляции грунта от воздействия теплового излучения факельной установки.

Для термостабилизации грунта часто используют СОУ. На рис. 4 показаны тепловые поля от цилиндрического объекта радиуса 5 метров с толщиной бетонных стенок 10 см., заглубленного на 5 метров в мерзлый грунт. Температура внутри объекта полагалась равной 10°C . Моделирование эффективности работы СОУ показано на рисунках 5–6.

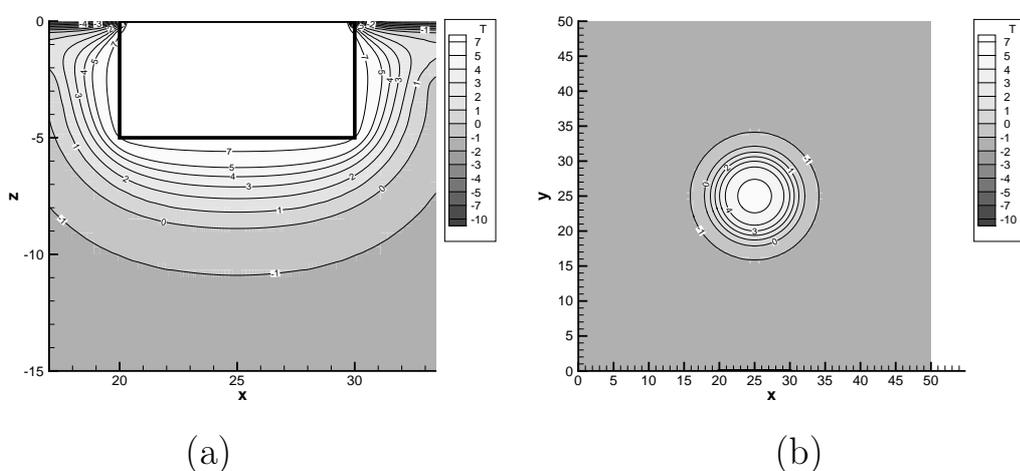


Рис. 4. (а) — тепловые поля в грунте в плоскости (x, z) ; (б) — изотермы на глубине 6 метров в сентябре в плоскости (x, y) .

III Облачная система Wellfrost

Созданный программный продукт Wellfrost, на основе математической модели (1)–(5) позволяет проводить численные расчеты и делать долгосрочные прогнозы о границах растепления от работающих технических систем. При этом пакет Wellfrost был апробирован на 8 различных северных нефтегазовых месторождениях и при сравнении с реальными экспериментальными данными с месторождения “Русское” показал точность около 5%. При проведении проектных работ по обустройству кустовых площадок для нефтегазовых месторождений очень часто бывает можно обойтись вычислением радиуса растепления от используемых скважин при их работе в течении длительного времени (20–30 лет). На рис. 6 приведены графики положений нулевых изотерм для правой скважины с рис. 2.

Поскольку для решения этих конкретных задач требуются большие ресурсы оперативной памяти и машинного времени, то важной задачей является

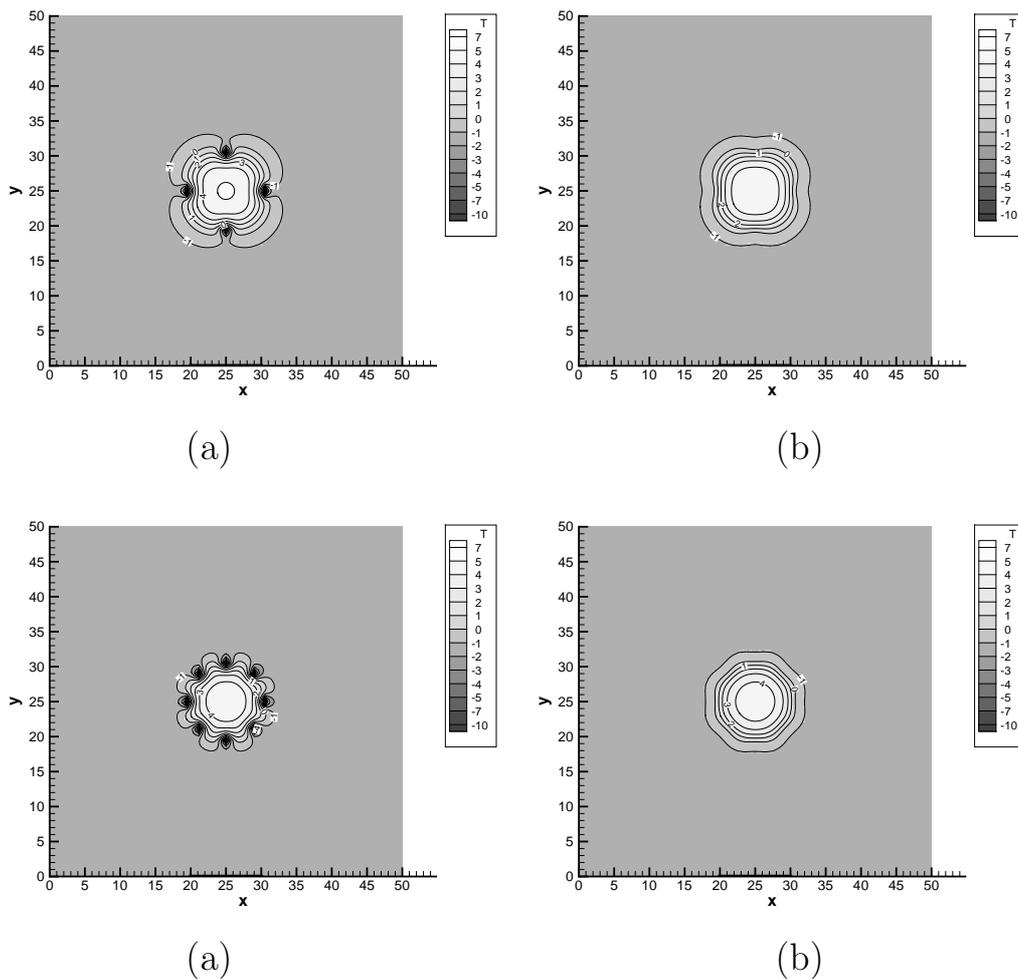


Рис. 5. Температура на глубине $z = 6m$. с 4 СОУ в марте (а) и в сентябре (б).

разработка и реализация параллельных расчетных алгоритмов для многопроцессорных ЭВМ, ориентированных на облачные технологии, чтобы результатами расчета по программе Wellfrost могли воспользоваться не только авторы, но и другие потенциальные пользователи, для которых разработан и отлаживается дружественный интерфейс, поскольку среди пользователей могут быть не только математики–вычислители, но и инженеры, строители и климатологи, для которых будет предоставлена возможность удаленно проводить на суперЭВМ необходимые расчеты, вводя на своем компьютере (смартфоне) необходимые начальные значения параметров (около 10–15 значений).

Авторы благодарят ЗАО “Нордэко Евразия” за полезное обсуждение результатов, проведение мониторинга по растеплению ММП на нефтегазовом месторождении “Русское” и сравнение данных мониторинга с численными результатами, полученными по программе Wellfrost.

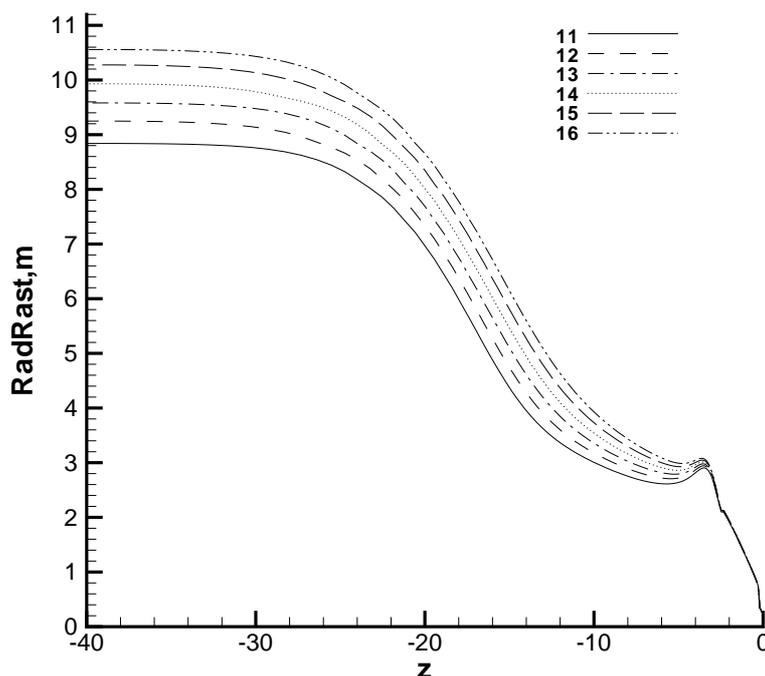


Рис. 6. Радиусы растепления в грунте от скважины.

Литература

1. *Filimonov M.Yu., Vaganova N.A.* Simulation of Thermal Fields in Permafrost around Engineering Constructions in Presence of Seasonal Cooling Units // Proceedings of XXXX Summer School-Conference "Advanced Problems Mechanics" 2–8 July, 2012. St. Petersburg. APM 2012. P. 108–116.
2. *Mikhail Yu. Filimonov, Nataliia A. Vaganova.* Simulation of Thermal Fields in the Permafrost With Seasonal Cooling Devices // Proc. ASME. 45158, Vol. 4: Pipelining in Northern and Offshore Environments; Strain-Based Design; Risk and Reliability; Standards and Regulations 133 (September 24, 2012). P. 133–141. doi: 10.1115/IPC2012-90287.
3. *Filimonov M.Yu., Vaganova N.A.* Long-term forecasting of changes in permafrost near wells and different technical systems // Proceedings of XLI International Summer School-Conference APM 2013 "Advanced Problems in Mechanics." 1–6 July, 2013. St. Petersburg. P. 192–197.
4. *Filimonov M.Yu., Vaganova N.A.* Simulation of thermal stabilization of soil around the wells in permafrost // Abstracts of International Conference "Numerical Analysis and Scientific Computation with Applications". NASCA13, Calais, France, June 24–26, 2013. P. 41.

5. *Filimonov M.Yu., Vaganova N.A.* Simulation of unsteady temperature fields in permafrost from two wells // Abstracts of International Conference “Numerical Analysis and Scientific Computation with Applications”. NASCA13, Calais, France, June 24–26, 2013. P. 85.
6. *Ваганова Н.А., Филимонов М.Ю.* Растепление многолетнемерзлых пород от нескольких добывающих скважин // Труды Международного научно–практического семинара, посвященного XX–летию создания НПО “ФундаментСтройАркас” “Стратегия развития инженерного мерзлотоведения”. 8–10 ноября 2011 г., Россия, г. Тюмень. С. 410–413.
7. *Filimonov M.Yu., Kravets A.G., Vaganova N.A.* Of thermal interaction in a zone of extractive well in permafrost // Proceedings of XXXVIII Summer School-Conference “Advanced Problems in Mechanics”. July 1–Julie 5, 2010. St. Petersburg (Repino). APM 2010. P. 220–224.
8. *Ваганова Н.А.* Существование решения разностной начально-краевой задачи для линейного уравнения теплопроводности с нелинейным краевым условием // Труды института математики и механики. 2008. Т. 14, N 1. С. 11–21.
9. *Башуров Вл.В., Ваганова Н.А., Филимонов М.Ю.* Численное моделирование процессов теплообмена в грунте с учетом фильтрации жидкости // Вычислительные технологии. 2011. Т. 16. N 4. С. 3–18.
10. *Самарский А.А., Моисеенко Б.Д.* Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // ЖВМиМФ. 1965. Т. 5, № 5. С. 816–827.
11. *Samarsky A.A., Vabishchevich P.N.* Computational Heat Transfer, Volume 2, The Finite Difference Methodology. N. Y.: Chichester, Wiley. 1995.
12. *Черепанов А.Н., Шанеев В.П., Фомин В.М., Семин Л.Г.* Численное моделирование теплофизических процессов при лазерно-лучевой сварке с образованием парового канала // Прикл. механика и техн. физика. 2006. Т. 47, № 5. С. 88–96.
13. *Шанеев В.П., Черепанов А.Н.* Конечно-разностный алгоритм для численного моделирования процессов лазерной сварки металлических пластин // Вычисл. технологии. 2006. Т. 11, № 4. С. 102–117.

ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА В СХЕМЕ КАБАРЕ В ОБЛАСТИ С ОБРАТНОЙ СТУПЕНЬКОЙ

Финогенов С.А., Рязанов А.М.

*Институт проблем безопасного развития атомной энергетики
Российской академии наук, Москва*

Введение

В настоящее время математическое моделирование активно входит в практику инженерных исследований и промышленного конструирования. Применение математического моделирования в газо- и гидродинамике играет важную роль во многих научных приложениях. Таким образом, численное решение систем дифференциальных уравнений, описывающих процессы из данных областей, можно считать одной из фундаментальных проблем вычислительной математики.

В ИБРАЭ РАН активно ведется разработка методики "CABARET" (Compact Accurately Boundary Adjustinghigh-Resolution Technique) [1–3]. Данная схема обладает вторым порядком точности по времени и пространству и обладает хорошими диссипативными свойствами. К отличительным особенностям предложенного алгоритма также можно отнести отсутствие настроечных параметров и максимально компактный разностный шаблон.

Вместе с тем интегрирование уравнения Пуассона для определения давления (в переменных "скорость-давление") или функции тока (в переменных "функция тока-завихренность") является одним из наиболее трудоемких этапов численного решения системы уравнений гидродинамики сеточными методами. В большинстве случаев (практически во всех современных методах решения уравнений гидродинамики) этот этап является доминирующим.

Схема КАБАРЕ не является исключением. В отличие от стандартного 5-точечного в двумерном и 7-точечного в трехмерном случае шаблона "крест", схема дискретизации алгоритма КАБАРЕ использует так называемый "косой крест", являющийся 9-точечным в двумерном случае и 27-точечным в трехмерном. Помимо большего количества точек, входящих в шаблон "косой крест", данная схема дискретизации приводит к формированию вырожденной матрицы, имеющей большое ядро, что также осложняет процесс нахождения решения.

Поэтому, эффективное решение уравнения Пуассона при помощи масштабируемого алгоритма на многопроцессорных системах является одной из ключевых проблем моделирования (особенно для несжимаемых жидкостей).

I Математическая постановка задачи

Рассмотрим методику решения задачи

$$\Delta u = f \tag{1}$$

для шаблона "косой крест" для заданной области Ω с граничными условиями Неймана.

Метод фиктивных областей.

Пусть $\Omega \subset \Pi$, где Π – прямоугольник (двумерный случай) или параллелепипед (трехмерный случай). Рассмотрим в Π прямоугольную сетку (вообще говоря, неравномерную) такую, что границы ступеньки совпадают с линиями сетки. Для таких задач часто применяют методы фиктивных областей, или как частный случай, методы фиктивных компонент, изложенные, например, в [7] и [8]. Пусть система линейных уравнений

$$Au = f \tag{2}$$

разностный аналог (1), где A положительно полуопределенная матрица, u, f векторы, компоненты которых соответствуют узлам (внутренним и граничным) Ω . Метод фиктивных областей заключается в следующем. Наряду с матрицей A рассмотрим матрицу $\tilde{A} = \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ нулевые строки которой соответствуют узлам сетки, лежащим в области $\Pi \setminus \Omega$. Вместо решения задачи (2) будем решать задачу

$$\tilde{A}\tilde{u} = \tilde{f}, \tag{3}$$

где $\tilde{u} = \begin{bmatrix} u \\ u^0 \end{bmatrix}$, $\tilde{f} = \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix}$. Очевидно, что любое решение (3) есть решение исходной задачи. Пусть B – разностный аналог уравнения Пуассона в расширенной области Π также с условиями Неймана, то есть между узлами сетки, строками матрицы \tilde{A} и B полное взаимно однозначное соответствие. Для решения задачи (3) применим обобщенный метод сопряженных градиентов [5] вида

$$\begin{aligned} \tilde{u}^{k+1} &= \tilde{u}^k - \frac{1}{q_k} [B^{-1}\xi^k - e_k (\tilde{u}^k - \tilde{u}^{k-1})], e_{-1} = 0, \\ q_k &= \|B^{-1}\xi^k\|_A^2 / \|\xi^k\|_{B^{-1}}^2 - e_{k-1}, e_k = q_k \|\xi^{k+1}\|_{B^{-1}}^2 / \|\xi^k\|_{B^{-1}}^2 \end{aligned} \tag{4}$$

где ξ^k – невязка на k -ой итерации, q_k, e_k – итерационные параметры.

Известно, что в данной постановке метод (4) сходится со скоростью геометрической прогрессии с показателем, не зависящим от шага сетки. Основным вычислительным блоком при реализации (4) является блок вычисления вектора $w = B^{-1}\xi^k$, то есть численное решение уравнения Пуассона

$$\Delta w = \xi^k \tag{5}$$

Поскольку в исходной задаче допустимо разделение переменных, то свойства (10) будут непосредственно зависеть от одномерных задач вида

$$A_x \varphi = \alpha_x B_x \varphi, \quad (11)$$

$$A_y \psi = \alpha_y B_y \psi, \quad (12)$$

$$A_z \vartheta = \alpha_z B_z \vartheta. \quad (13)$$

Однако, в таком виде решение задач (11)-(13) не существует, поскольку положительно полуопределенные матрицы B_x, B_y, B_z вырождены. В связи с этим, будем искать решение видоизмененных задач

$$\lambda_i^x A_x \varphi_i = \mu_i^x B_x \varphi_i, i = 0, \dots, n_x \quad (14)$$

$$\lambda_j^y A_y \psi_j = \mu_j^y B_y \psi_j, j = 0, \dots, n_y \quad (15)$$

$$\lambda_k^z A_z \vartheta_k = \mu_k^z B_z \vartheta_k, k = 0, \dots, n_z. \quad (16)$$

Легко видеть, что векторы

$$\varphi_0 = (1, 1, \dots, 1), \psi_0 = (1, 1, \dots, 1), \vartheta_0 = (1, 1, \dots, 1), \quad (17)$$

и

$$\varphi_{n_x} = (1, -1, \dots, -1^{n_x}), \psi_{n_y} = (1, -1, \dots, -1^{n_y}), \vartheta_{n_z} = (1, -1, \dots, -1^{n_z}), \quad (18)$$

удовлетворяют (14) - (16). Для векторов (17) справедливы равенства

$$\lambda_0^x = 0, \lambda_0^y = 0, \lambda_0^z = 0, \quad (19)$$

а для векторов (18)

$$\mu_{n_x}^x = 0, \mu_{n_y}^y = 0, \mu_{n_z}^z = 0. \quad (20)$$

Поскольку

$$\nu_{ijk} = \lambda_i^x \mu_j^y \mu_k^z + \mu_i^x \lambda_j^y \mu_k^z + \mu_i^x \mu_j^y \lambda_k^z, \quad (21)$$

$$i = 0, \dots, n_x, j = 0, \dots, n_y, k = 0, \dots, n_z,$$

то ядро B состоит из $O\left(N^{\frac{2}{3}}\right)$ векторов, где N число узлов в Π . Заметим, что в случае прямого креста, ядро B состоит из одного собственного вектора, константы.

Быстрый прямой метод

Для решения системы уравнений с переобуславливателем предложим быстрый прямой метод [7] (FastDirectMethod – FDM). Для простоты рассмотрим двумерный случай. Алгоритм данного метода основан на решении частичных задач, которые определим следующим образом.

Пусть правая часть отлична от нуля на некоторых линиях сетки, а решение требуется найти также на некоторых сеточных линиях, возможно, на тех же самых. Такие задачи будем называть частичными. Решение нашей задачи, вообще говоря, отлично от нуля во всех узлах. Очевидно, что алгоритм, использующий быстрое преобразование Фурье (БПФ) [5], с оценкой числа действий можно применить для решения частичных задач. Однако, его можно преобразовать так, чтобы, во-первых, сократить число арифметических действий, а во-вторых, расширить область его применения на случай неравномерной сетки по обоим направлениям.

Предлагаемый метод также можно применять для решения уравнения Пуассона на произвольной прямоугольной сетке. Он дает такую же асимптотику числа арифметических действий, что и метод с БПФ. Алгоритм метода основан на принципе дихотомии. Пусть прямоугольник Π разбит вертикальными линиями сетки на p непересекающихся подобластей Π_k . Пусть для простоты $p = 2$. Нахождение полного решения задачи

$$Bu = g \quad (22)$$

сводится к следующим процедурам:

- i) Решение двух задач в подобластях Π_1 и Π_2 с однородными условиями Дирихле на общей границе (на линии разреза). Причем требуется найти не все решение u , а только его значение на сеточных линиях с номерами $s - 1$ и $s + 1$. Это необходимо для определения невязки r_s на линии s .
- ii) Решение частичной задачи $Bw_s = r_s$.
- iii) Решение двух задач в подобластях Π_1 и Π_2 с неоднородными условиями Дирихле на общей границе ($u = w_s$ на линии s).

Примечание. При решении частичных задач мы делаем преобразование Фурье по оси x , а прогонки – по оси y .

Если ширина подобластей Π_1 и Π_2 еще достаточно велика, то эту процедуру можно рекурсивно применить для задач 1. и 3. в подобластях Π_1 и Π_2 , завершив, таким образом, логическое построение метода решения всей задачи.

Описанный алгоритм легко распространяется на трехмерные области. В этом случае параллелепипед разрезается на несколько подобластей плоскостями, а при решении трехмерных частичных задач используется двумерный аналог данного метода.

II Параллельная реализация и эксперимент

Алгоритм FDM был усовершенствован авторами и реализован для многопроцессорных вычислительных систем с распределенной памятью с использованием технологии MPI. В программном комплексе распределение памяти между процессами проводилась по геометрическому принципу, то есть сначала разбивался параллелепипед на равные (по числу узлов) подобласти плоскостями, параллельными осям соответственно. Все трехмерные массивы распределялись по процессам в соответствии с этим разбиением. В программе применяется коммуникатор с декартовой топологией. В процессе работы программы общий объем передаваемой информации между процессорами $O(p_x, p_y, N^{\frac{1}{2}} \ln(N))$ в двумерном случае и $O(p_x, p_y, p_z, N^{\frac{2}{3}} \ln(N))$ в трехмерном, где p_x, p_y, p_z число процессоров по осям x, y, z .

В качестве инструмента для реализации эталонного солвера была выбрана библиотека подпрограмм для научных вычислений PETSc [4] и входящие в ее состав процедуры для работы с векторами и матрицами, распределенными по процессорам, операторами линейной алгебры, а также набор итерационных методов и предобуславливателей для решения систем линейных алгебраических уравнений с разреженными матрицами.

Среди многообразия предоставляемых библиотекой PETSc предобуславливателей и солверов, был выбран за эталон аддитивный метод Шварца и метод сопряженных невязок, показавшие наилучшие результаты на исследуемой задаче. В месте с блочным предобуславливателем Шварца использовался предобуславливатель ILU на подобластях. Подробное описание используемых методов можно найти в монографиях [5] и [6]. Сравнительные расчеты проводились на сетках размерностей 64x64x64, 128x128x128 и 256x256x256 узлов. Рассматривались как равномерные сетки, так и "сгущающиеся" к середине и границам.

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносов [9].

Результаты представлены в таблицах 1, 2 и 3. На пересечении столбца с количеством задействованных ядер и типом сетки и строки с указанием использованного метода указывается время в секундах, затраченное на одно обращение матрицы.

Приводятся данные о времени, затраченном на вычисления 64, 128, 256 и 512 процессорными ядрами, что позволяет сделать выводы о масштабируемости реализованных программ.

Из таблицы видно, что оба алгоритма испытывают провал в эффективности при использовании большого количества ядер для решения задач малой размерности, что является стандартной проблемой. На задаче размером в 256 расчетных узлов по каждому из трёх направлений алгоритм, построенный на базе стандартных методов библиотеки PETSc, показывает хорошую масштабируемость, уменьшая время, затрачиваемое на одно обращение матрицы, примерно в 1,8 раза при удвоении количества задействованных ядер.

Алгоритм FDM не выдерживает конкуренции с кодом PETSc по показателю масштабируемости, однако его худший результат в 3,67 секунды при решении задачи $256 \times 256 \times 256$ узлов 64-мя ядрами почти вдвое лучше результата PETSc в 6,15 секунды на той же задаче, но с привлечением 512 ядер. В среднем алгоритм FDM на один порядок превосходит алгоритм PETSc по показателю затрачиваемого времени. Стоит также отметить, что реализованный алгоритм FDM, в отличие от PETSc, не хранит целиком матрицу задачи, позволяя экономить ресурсы памяти. Это обусловило возможность успешного решения систем с использованием алгоритма FDM для задач размерности 512 и 1024 узлов по каждому направлению, в то время как PETSc потребовались критические объёмы памяти для хранения матриц столь больших размерностей.

Если сравнивать работу программ на различных типах сетки, то видно, что независимо от размерности задачи и количества используемых ядер, на обращение матрицы для сетки с неравномерным шагом требуется всегда больше времени, нежели в случае с равномерной сеткой, что является ожидаемым результатом. Следует также отметить, что использование сильно неравномерных сеток, приводящее к появлению существенно вытянутых ячеек, может значительно сказываться на производительности солвера.

Таблица 1. $64 \times 64 \times 64$

	64 ядра		128 ядер		256 ядер		512 ядер	
	равн	неравн	равн	неравн	равн	неравн	равн	неравн
PETSc	0,56	0,60	0,33	0,37	0,97	1,08	1,23	1,37
FDM	0,07	0,08	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05

Таблица 2. $128 \times 128 \times 128$

	64 ядра		128 ядер		256 ядер		512 ядер	
	равн	неравн	равн	неравн	равн	неравн	равн	неравн
PETSc	4,82	4,91	3,04	3,23	1,81	1,82	1,71	1,78
FDM	0,42	0,45	0,27	0,26	0,21	0,22	0,18	0,19

Таблица 3. $256 \times 256 \times 256$

	64 ядра		128 ядер		256 ядер		512 ядер	
	равн	неравн	равн	неравн	равн	неравн	равн	неравн
PETSc	36,16	36,59	19,83	20,16	10,86	11,09	5,86	6,15
FDM	3,17	3,67	2,01	2,15	1,29	1,36	0,89	0,91

Заключение

С помощью библиотеки PETSc был реализован и протестирован итерационный программный решатель уравнения Пуассона для трехмерных областей на прямоугольных сетках для вычислительных систем с массивно параллельной архитектурой. Кроме того, для такой архитектуры ЭВМ был разработан программный комплекс, основанный на использовании метода фиктивных областей с алгоритмом FDM. При дискретизации оператора Лапласа использовался шаблон "косой крест" (27-точечный), характерный для схемы КАБАРЕ. В сравнение вошел метод фиктивных областей и набор методов из библиотеки PETSc. Полученный программный комплекс прошел отладку и тестирование на суперкомпьютере МГУ "Ломоносов". В ходе тестирования была продемонстрирована высокая степень масштабируемости запрограммированных алгоритмов и проведен сравнительный анализ трудозатрат на интегрирование уравнение Пуассона на разных алгоритмах.

Литература

1. Головизнин В.М., Самарский А.А. Некоторые свойства разностной схемы Кабаре // Математическое моделирование. 1988. **10**, №1. 101-116.
2. 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.
3. Головизнин В.М., Карабасов С.А. Нелинейная коррекция схемы Кабаре // Математическое моделирование. 1998. **10**, №12. 107-123.
4. PETSc Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation <http://www.mcs.anl.gov/petsc/petsc-as/>
5. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. Москва: Наука, 1978. 592 с.
6. Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems. SIAM, 2003. 528 p.
7. Кузнецов Ю.А. Численные методы в подпространстве. В: Вычислительные процессы и системы, т. 2, Наука, М., 1985, сс. 265-350.
8. Finogenov S.A. and Kuznetsov Yu.A. Two-stage fictitious components method for solving the Dirichlet boundary value problem // Sov. J. Numer. Anal.Math.Modelling. **3**, №4. 301-323(1988)
9. Воеводин Вл.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин Вад.В. Практика суперкомпьютера "Ломоносов" // Открытые системы. - Москва: Издательский дом "Открытые системы 2012. - 7

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ КОЛЬЦЕВЫХ СТРУКТУР В ОЗЕРЕ БАЙКАЛ¹

Цветова Е.А.

ИВМиМГ СО РАН, г. Новосибирск

I Введение

В работе представлены некоторые результаты математического моделирования одной из кольцевых структур, обнаруженных на льду озера Байкал. Появление таких колец – не единичное явление на Байкале. В апреле 2009 г. на космических снимках озера были обнаружены сразу две кольцевые структуры на льду, одна из них, с диаметром более 4 км, – в западной оконечности Южного Байкала и другая – вблизи полуострова Святой Нос (рис.1). Анализ архивных спутниковых данных показал, что аналогичные структуры неоднократно появлялись и в предыдущие годы в разных районах озера.

Экспедиционные исследования этого явления были выполнены сотрудниками Лимнологического института СО РАН [1]. Измерения показали, что толщина льда уменьшалась от 74 см в центре структуры до 43 см на расстоянии 2 км от него. За пределами кольца толщина льда вновь увеличивалась и была более 70 см. Подледная вода в центральной части оказалась теплее на 0,5°С, чем на периферии. Максимальные скорости подледных течений (3-4 см/с), измеренные по данным перемещения трассеров, наблюдались на расстоянии 2-3 км от центра структуры, где толщина льда была минимальной.

Математическое моделирование явления было выполнено на нескольких разномасштабных моделях. Это было вызвано большой разницей в характерных пространственных масштабах изменения толщины льда (см) и размером кольцевой структуры (км). В настоящей работе представлена только <крупномасштабная> модель, представляющая размеры Южной оконечности озера.

II Негидростатическая модель

<Крупномасштабные> процессы были воспроизведены с помощью трехмерной нестационарной негидростатической модели в области, включающей район кольцевой структуры и имеющей реальные очертания и рельеф дна Южной оконечности Байкала [2]. С помощью этой модели решалась задача <усвоения> данных наблюдений, целью которой было получение согласованного представления всех полей функции состояния (температуры, трех

¹Работа поддержана Программами фундаментальных исследований №4 и 23 Президиума РАН и №3 ОМН РАН; проектом РФФИ №11-01-00187-а; интеграционными проектами №№ 8 и 35 СО РАН.

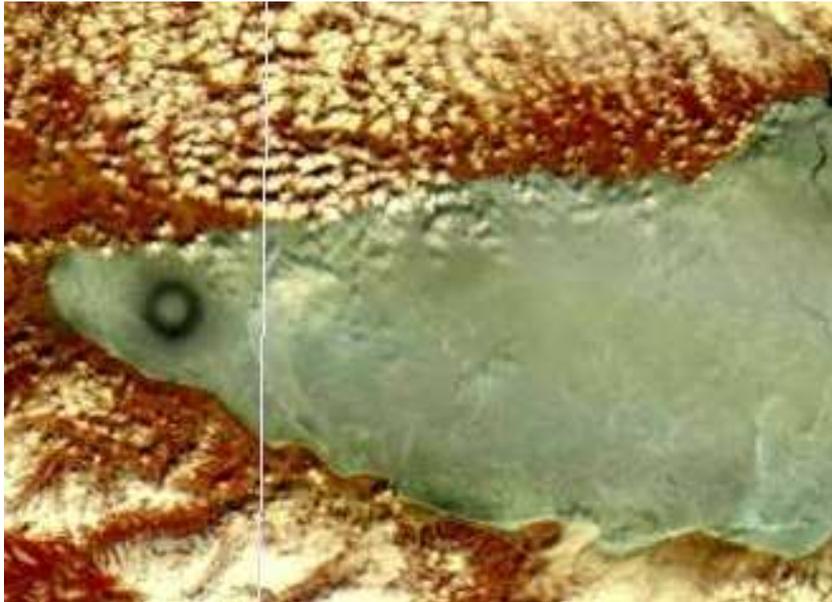


Рис. 1. Снимок из космоса. Кольцевая структура на льду Южного Байкала

компонент вектора скорости, плотности и давления) во всей области моделирования при условии, что рассчитываемые поля температуры близки к измеренным в районе наблюдений.

Для моделирования использовалась математическая модель гидродинамики озера в негидростатическом приближении

$$\begin{aligned} & \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial uu}{\partial x} + \frac{\partial vu}{\partial y} + \frac{\partial wu}{\partial z} + 2\Omega_y w - 2\Omega_z v \\ &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x} + \left(\frac{\partial}{\partial x} \mu_x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu_y \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial}{\partial z} \right) u, \\ & \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial vv}{\partial y} + \frac{\partial wv}{\partial z} - 2\Omega_x w + 2\Omega_z u \\ &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial y} + \left(\frac{\partial}{\partial x} \mu_x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu_y \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial}{\partial z} \right) v, \\ & \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial uw}{\partial x} + \frac{\partial vw}{\partial y} + \frac{\partial ww}{\partial z} + 2\Omega_x v - 2\Omega_y u \\ &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{g\rho}{\rho_0} + \left(\frac{\partial}{\partial x} \mu_x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \mu_y \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial}{\partial z} \right) w \\ & \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial uT}{\partial x} + \frac{\partial vT}{\partial y} + \frac{\partial wT}{\partial z} + Q_s \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial x} \hat{\mu}_x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{\mu}_y \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \nu_T \frac{\partial}{\partial z} \right) T, \\ & \rho = f(p, T, S), \\ & \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \end{aligned}$$

Здесь u, v, w – компоненты вектора скорости течений в направлениях координат x, y, z , соответственно, ось X направлена на восток, Y – на север, Z – положительна вверх. Все остальные обозначения общеприняты и

понятны из контекста. Плотность воды рассчитывалась по нелинейному уравнению состояния, принятому UNESCO: учитывалось изменение плотности в зависимости от температуры и давления при постоянной средней солености. Рассматривались зимние условия, когда поверхность озера покрыта льдом, поэтому краевые условия по вертикали имели вид: при $z = 0$:

$$v \frac{\partial u}{\partial z} = 0; \quad v \frac{\partial v}{\partial z} = 0; \quad \nu_T \frac{\partial T}{\partial z} = 0;$$

$$w = 0, \quad p = p_a;$$

и на дне при $z = -H(x, y)$:

$$u = 0, v = 0, w = 0, \frac{\partial T}{\partial N} = 0.$$

На твердых боковых границах задавались условия прилипания для скоростей и нормальные производные для температуры.

Восстановление полей течений и температуры выполнялось по методике усвоения, известной в литературе как "nudjung"[3]. Она представляет собой разновидность Ньютоновской релаксации и реализует процедуру приближения функций состояния модели к заданным значениям в некотором окне усвоения. По этой методике релаксационные выражения добавляются в уравнения модели по следующему правилу:

$$\frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = F(\varphi, \mathbf{x}, t) + k_{nud} \sum_{i(obs)} W_i(\mathbf{x}, t) (\varphi_i^{obs} - \varphi(\mathbf{x}_i, t))$$

Здесь $F(\varphi, \mathbf{x}, t)$ описывает часть модели процессов без производных по времени, φ_i^{obs} – данные i -того наблюдения в точке \mathbf{x}_i , k_{nud} – константа усвоения, $0 \leq W_i(\mathbf{x}, t) \leq 1$ – некоторые веса, зависящие от состава и локализации наблюдений.

В данном случае наблюдения выполнялись со льда на нескольких вертикалях до глубины 90 м на различных расстояниях от центра структуры. Глубина озера в этом районе – более 1200 м. Построенное по данным наблюдений поле температуры имело специфический вид. В центре структуры подо льдом находилось <ядро> – линза теплой воды. Измеренные значения температуры в ядре и были теми данными, к которым приспособлялись все функции состояния в области моделирования.

III Результаты расчетов

Результаты расчетов показали, что модель воспроизвела в районе наблюдений локальную антициклоническую циркуляцию со сложной

пространственно-временной структурой, в которой скорости горизонтальных течений вблизи поверхности возрастали до максимальных значений (5-7 см/с) на расстоянии около 2-3 км от центра, а затем убывали (рис.2)

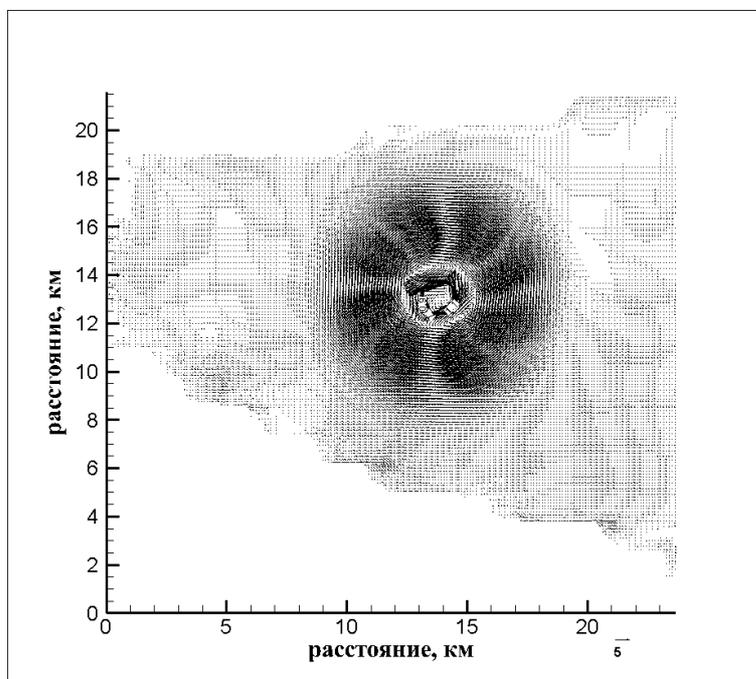


Рис. 2. Поле течений подо льдом вблизи поверхности

Вертикальное распределение температуры ($^{\circ}C$) представлено на рис. 3. В центре – ядро теплой воды. Ниже ядра зона термоклина смещена и сжата. Справа и слева от центральной части образуются компенсирующие потоки, опускающие изолинии температуры вниз. Получившаяся схема расположения изолиний наталкивает на мысль, что эта локальная структура связана с подъемом глубинных вод.

Результаты расчетов по крупномасштабной модели были использованы для моделирования изменений толщины ледового покрова в районе кольцевой структуры [4]. Удалось количественно воспроизвести такую особенность явления, как различную толщину льда в районе кольца и за его пределами, а также оценить время, необходимое для формирования этой разницы. По результатам многофакторных численных экспериментов оно составило от 25 до 35 дней.

Из-за того, что кольцевые структуры имеют большие диаметры, их невозможно увидеть с поверхности Земли. Их можно наблюдать только из космоса. Тут возникает еще один интересный вопрос: почему они появляются на поверхности льда внезапно? Дело в том, что они становятся видимыми незадолго до разрушения ледового покрова [1]. Процесс разрушения льда начинается с образования в начале апреля мелких иглообразных кристаллов в верхнем слое [5]. С появлением воды на льду быстро наступает распад по всей толще, вода уходит вниз через капилляры, и ледовый покров пропитывается водой,

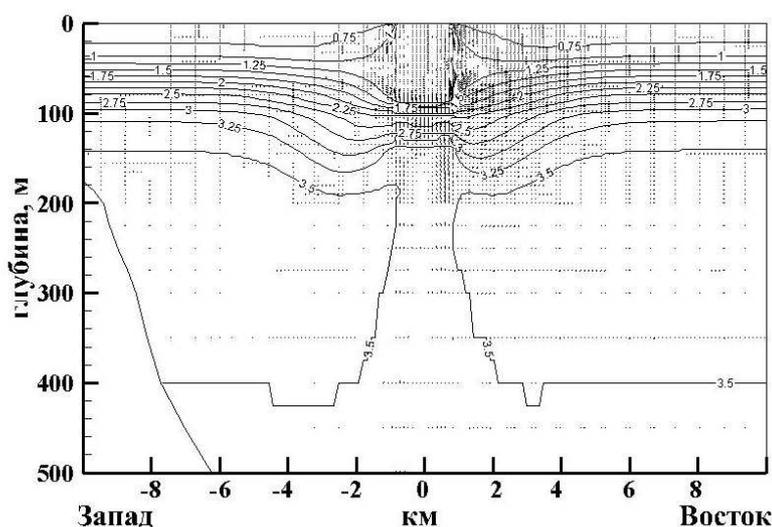


Рис. 3. Изолинии температуры и скорости течений. Фрагмент сечения области через середину структуры

как губка [5]. В это время на космических снимках появляется <темная> область, в которой толщина льда меньше по сравнению с окружением, а уровень воды в микротрещинах находится ближе к поверхности ледового покрова.

Литература

1. *Гранин Н.Г.* Гигантские кольца на льду Байкала. Объяснение ученых// Наука из первых рук. 2009. (3): с. 22-23.
2. *Цветова Е.А.* Моделирование локальных явлений на фоне крупномасштабных процессов в озере Байкал// В сб. материалов XI конференции < Математическое моделирование в проблемах рационального природопользования>. Ростов-на-Дону: Изд-во Южного федерального университета, 2012. С 198–202
3. *Anthes R.A.* Data assimilation and initialization of hurricane prediction models// J. Atmos. Sci. V. 31, P. 702–719.
4. *Козлов В.В.* Комплексные исследования кольцевых структур на льду озера Байкал с применением технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента // Материалы конференции: <Ляпуновские чтения>. – Иркутск. ИДСТУ СО РАН, 26-28 ноября 2012, с. 23.
5. *Верболов В.И., Сокольников В.М., Шимараев М.Н.* Гидрометеорологический режим и тепловой баланс озера Байкал. 1965, Наука, Москва, Ленинград, 374 с.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭКСТРЕМАЛЬНОГО НАВОДНЕНИЯ В ДЕЛЬТЕ ДОНА 23.03.13 – 24.03.13

Чикин А.Л.* , Чикина Л.Г.**

* *Институт аридных зон Южного научного центра РАН,
Ростов-на-Дону*

** *Южно-Российский региональный центр информатизации ,
Ростов-на-Дону*

В конце марта 2013 г. в результате сильного штормового нагона значительная территория в дельте Дона чрезвычайно быстро была затоплена водой, в 20 населенных пунктах более 2,4 тыс. домовладений и свыше 5,3 тыс. человек оказались пострадавшими от наводнения. Материальные потери для населения и экономики региона оцениваются суммой более 500 млн. руб. Значительный ущерб был нанесен и научно-экспедиционной базе Южного научного центра РАН (ЮНЦ РАН), расположенной на берегу гирла Свиное.

Ветровая ситуация в период с 20 марта по 26 марта 2013 года сложилась таким образом, что первую половину 23 марта дул ветер восточных направлений 3–11 м/с, к 19 часам направление ветров разворачивается на юг, усиливаясь до 5–12 м/с, после полуночи 24 марта ветра приняли западное направление со скоростью до 15 м. К 14–17 часам 24 марта порывы ветра достигали 20–22 м/с (рис. 1), что привело к очень быстрому затоплению прибрежных территорий, строений и объектов в населенных пунктах. Уровень воды поднимался со скоростью 11–12 см/час. К 18 часам 24 марта наблюдался максимальный уровень воды (280 см) по данным самописца, установленном на посту в п. Донской (рис. 2).

Ситуацию с затоплением усугубил повышенный (до 400 м³/с) попуск воды через гидроузел Цимлянского водохранилища в период с 21 по 25 марта (рис. 2), при этом дошедшая до низовьев Дона за двое суток волна половодья могла быть причиной дополнительного подпора вод, поступающих из Таганрогского залива.

По метеорологическим наблюдениям, полученным с береговой научно-экспедиционной базы Южного научного центра РАН на период с 20 марта по 26 марта 2013 года было промоделировано развитие нагонного явления в дельте Дона. Для этого использовалась двухслойная математическая модель гидродинамики водоема, достаточно адекватно описывающая ветровые течения в Азовском море в целом [1], и в Таганрогском заливе в частности [2]. На рис. 2 показано изменение уровня воды, полученное расчетным путем, а также наблюдаемые данные с метеопоста базы ЮНЦ РАН. Расчет проводился с шагом по времени минут, и данные снимались через каждые 3 часа. Видно, что модель достаточно хорошо описывает развитие гидрологической ситуации в данном районе.

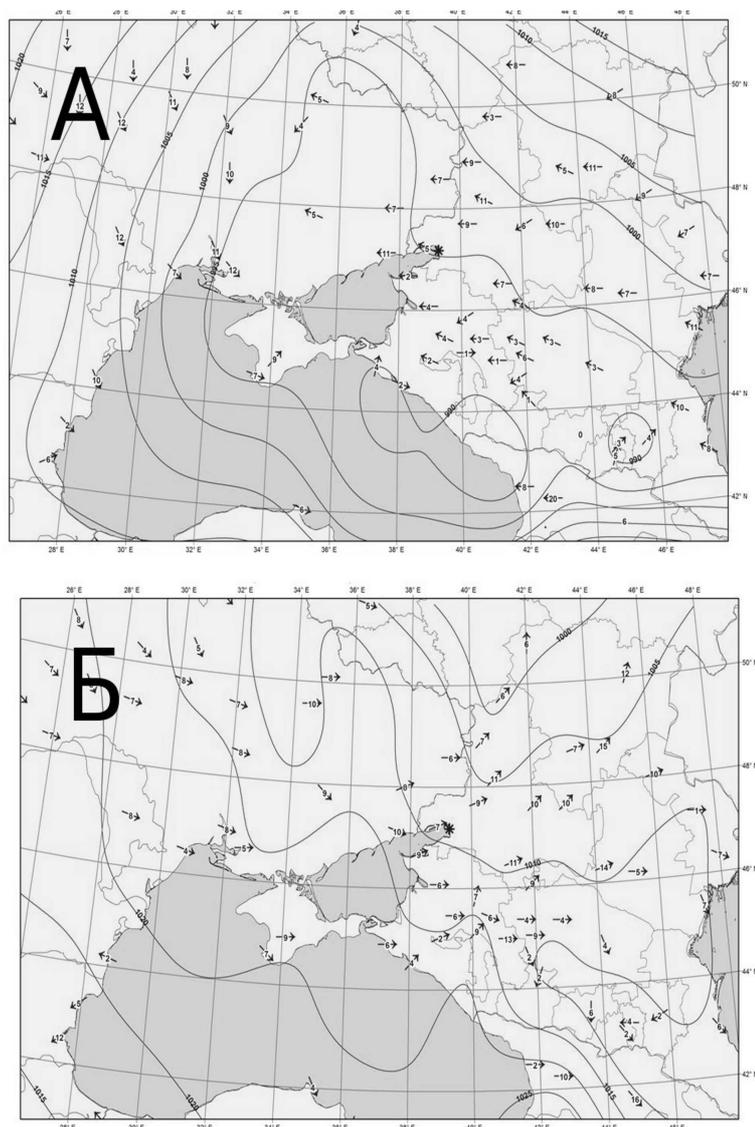


Рис. 1. Изменение направления ветра над Таганрогским заливом с 10:00 23.03.13 (А) к 16:00 24.03.13 г. (Б)

С помощью моделирования установлено, что резкая смена сгонного эффекта на нагонный увеличивает скорость поступления воды и, следовательно, степень затопления дельты. Сравнивались две ситуации: а) начало нагона при юго-западном ветре после штилевой погоды и б) начало нагона после сгонного явления, то есть действия восточного ветра. Сгон моделировался при скорости восточного ветра 9 м/с, который затем изменялся на ветер юго-западного направления скоростью 15 м/с.

В случае предварительного сгона значительно увеличивается скорость нагонного течения, а соответственно, и объем поступающей в дельту воды. Хотя в обоих случаях затопление дельты длился 22–23 часа, что соответствует динамике повышения уровня 23–24 марта, изменения уровня воды существенно различаются. Если нагон начинается при штилевой погоде, то уровень воды поднимается от нулевой отметки, соответствующей естественной глубине

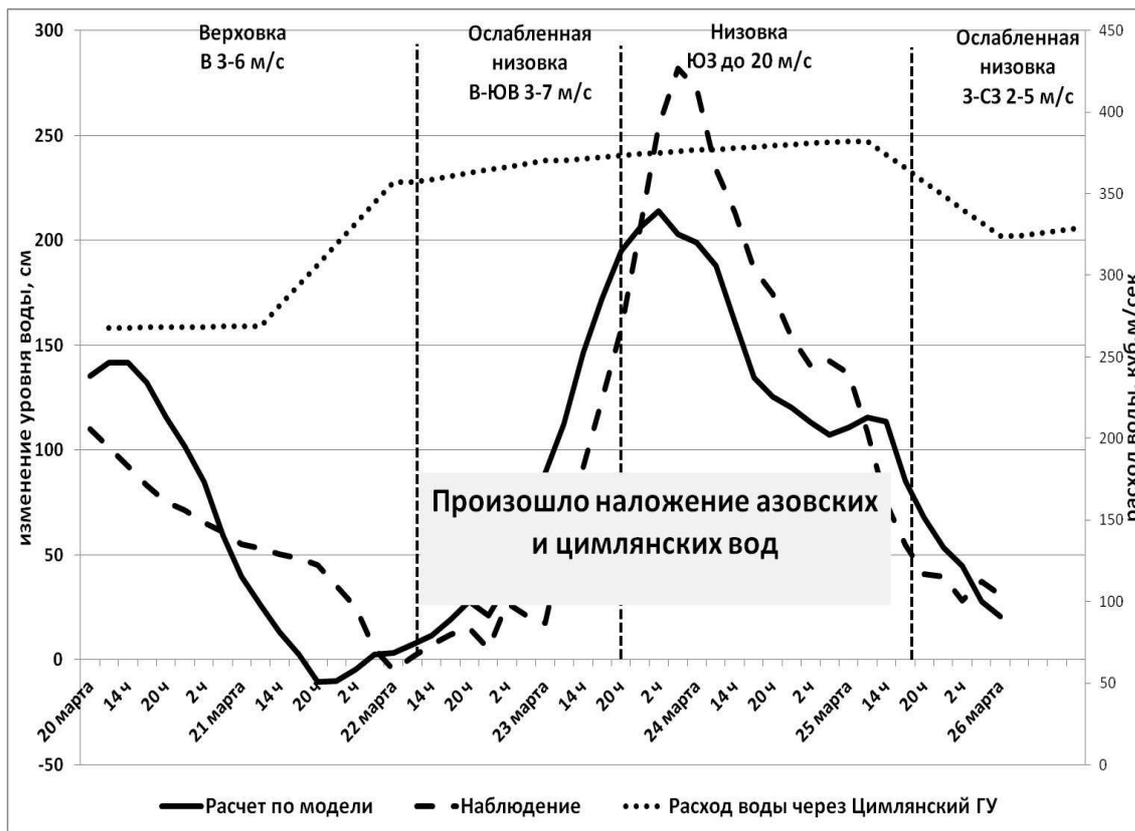


Рис. 2. Изменение относительного уровня воды на период с 20 по 26 марта 2013 года на посту "Кагальник"

водоема, и дальше монотонно возрастает по мере поступления излишков воды (рис. 3). Если перед нагоном наблюдался сгон воды, то сначала уровень отрицателен (что характерно для сгонного явления), но затем быстро увеличивается и, в конце концов, становится выше нагона после штиля. Этот результат показывает, что при резкой смене восточного ветра на западный затопление происходит быстрее и оно сильнее по масштабу, чем при постоянно действующим западном ветре.

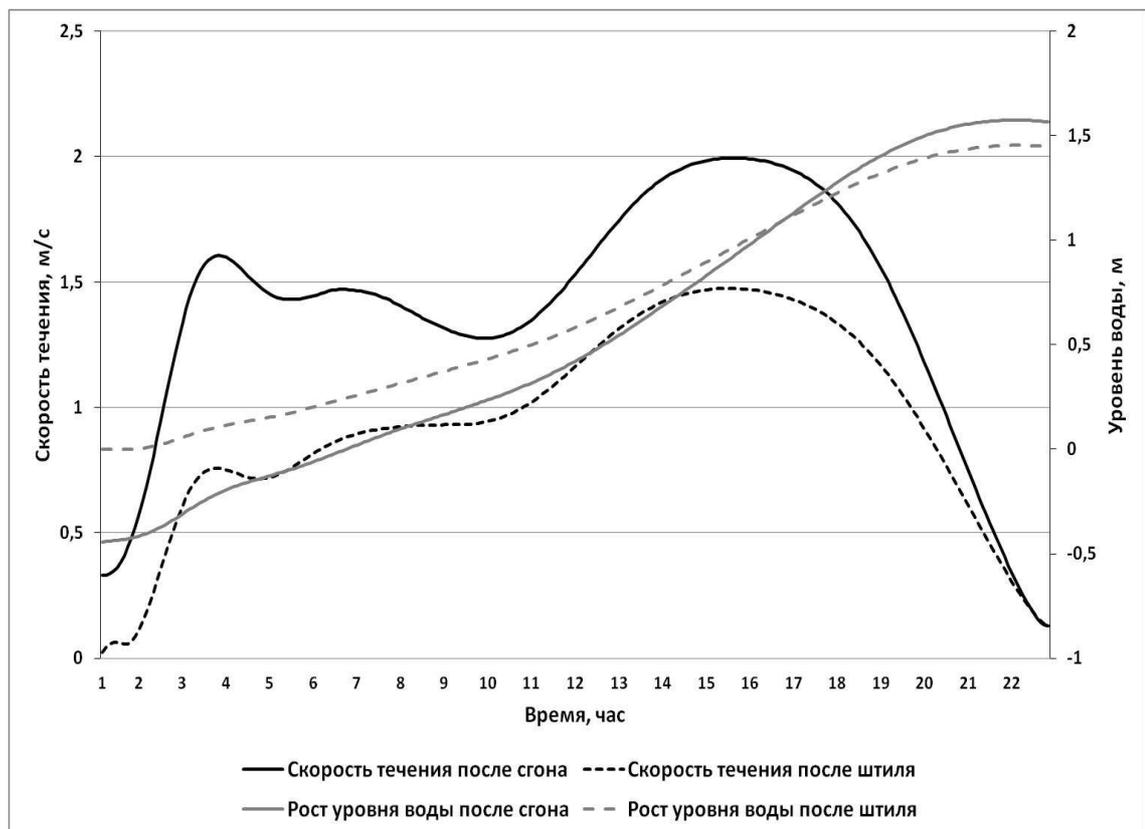


Рис. 3. Поведение скорости течения и уровня воды при различных начальных условиях нагона

Литература

1. Моделирование гидрофизических процессов в водоемах с обширными районами мелководья. / Крукиер Л.А., Чикин А.Л., Чикина Л.Г., Шабас И.Н. Ростов-на-Дону: Изд-во ЮФУ, 2009. 244 с.
2. Моделирование процесса переноса и оседания ила в подходных судоходных каналах (на примере Таганрогского залива). // Вестник Южного научного центра РАН, Т.7, №2, 2011, с.45-48.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСТЕКАНИЯ И ДРЕЙФА НЕФТЯНЫХ ЗАГРЯЗНЕНИЙ ВОДОЕМОВ

Шабас И.Н.

*Южно-Российский региональный центр информатизации
ЮФУ, Ростов-на-Дону*

Введение

Рассматривается процесс распространения нефтяного загрязнения, попавшего на поверхность водоема. Нефть, попадая в природный водоем, оказывает негативное влияние на все процессы (физические, химические и биологические), протекающие в нем. Вероятность аварийных разливов нефти достаточно велика при ее транспортировке от мест добычи к местам переработки, в связи с этим, возникает необходимость прогнозирования поведения нефти, попавшей в акваторию водоема по той или иной причине. Математическое моделирование процессов распространения нефтяных загрязнений на поверхности водоема, а также в его толще и на его границах, может стать одним из путей подобного прогнозирования.

I Постановка задачи

Распространение нефти в водоеме представляет собой сложный процесс, при моделировании которого необходимо учитывать большое количество разнообразных факторов. На поведение попавшей в водоем нефти оказывает влияние и собственные физико-химические свойства нефти (температура кипения фракций, их плотность, вязкость), и внешние условия окружающей среды (ветровая ситуация, температура воздуха и температура вод водоема, наличие в водоеме нефтеокисляющих бактерий, солености водоема, солнечной радиации и т.п.). Вначале процесса распространения нефти преобладают процессы растекания нефтяного пятна. Параллельно с этими процессами под воздействием внешних природных факторов происходит неизбежная деструкция нефти. К процессу деструкции нефти отнесут испарение легких нефтяных фракций, их растворение в водах водоема, а также эмульсификация и биodeградация нефти. Эти процессы оказывают влияние на исходную плотность и вязкость нефти – они увеличиваются, а суммарное поверхностное натяжение на границе раздела вода – нефть – воздух убывает. В дальнейшем, остающиеся тяжелые фракции нефти могут оказаться плотнее воды и осесть на дно водоема.

Начальный радиус пятна нефти будем вычислять по формуле (при $h = 10\text{мм}$):

$$R_0 = \sqrt{\frac{V_0}{\pi h}},$$

здесь V_0 – начальный объем вылившейся нефти.

Как было показано в [1, 2], на этапе растекания нефти по поверхности водоема наблюдаются три режима: инерционный, гравитационно-вязкий и режим поверхностного натяжения. В модели Фейя [1, 2] в инерционном режиме радиус нефтяного пятна вычисляется:

$$R = K_i \sqrt[4]{\Delta \cdot g \cdot V \cdot t^2}. \quad (1)$$

В гравитационно-вязком режиме радиус нефтяного пятна можно вычислять по формуле:

$$R = K_v \sqrt[6]{\frac{\Delta \cdot g \cdot V^2 \cdot \sqrt[3]{t^2}}{\sqrt{\nu_B}}}. \quad (2)$$

В режиме поверхностного натяжения вычисление радиуса нефтяного пятна производится в соответствии со следующей формулой:

$$R = K_t \sqrt[4]{\left(\frac{\sigma^2 \cdot t^3}{\rho_B^2 \cdot \nu_B}\right)}. \quad (3)$$

Здесь V – объем разлитой нефти, t – время с момента пролива нефти, $\Delta = \frac{\rho_B - \rho_H}{\rho_B}$ – относительная плотность воды, ρ_B – плотность воды; ρ_H – плотность нефти; $\sigma = \sigma_{B/B} - \sigma_{H/B} - \sigma_{B/H}$ – суммарное поверхностное натяжение; $\sigma_{B/B}$ – поверхностное натяжение на границе вода-воздух; $\sigma_{H/B}$ – поверхностное натяжение на границе нефть-воздух; $\sigma_{B/H}$ – межфазное натяжение на границе вода-нефть; g – ускорение свободного падения; ν_B – кинематическая вязкость воды.

Безразмерные коэффициенты, определены опытным путем [1, 2]: $K_i = 1,14$; $K_v = 1,45$; $K_t = 2,30$.

Формулы (1-3) согласно [5] можно представить в следующем виде:

$$R_1^2 - R_0^2 = K_i t \sqrt{\Delta \cdot g \cdot V},$$

$$R_2^6 - R_2^5 \cdot R_1 = K_v \left(\frac{\Delta \cdot g \cdot V^2 \cdot \sqrt[3]{t^2}}{\sqrt{\nu_B}} \right),$$

$$R_3^2 - R_2 R_3 = K_t \left(\frac{\sigma \cdot t^{3/2}}{\rho_B \sqrt{\nu_B}} \right).$$

Переход от инерционного к гравитационно-вязкому режиму происходит тогда, когда толщина пленки h становится достаточно малой, а толщина вязкого пограничного слоя δ достаточно большой, так что выполняется равенство

$$\delta = \sqrt{\nu \cdot t}.$$

Сила поверхностного натяжения становится существенной, когда она по порядку величины сравнима с градиентом давления. Такое условие наступает, когда толщина слоя нефти h в процессе растекания пятна достигает величины [4]

$$h = \sqrt{\frac{\sigma}{g(\rho_{\text{В}} - \rho_{\text{Н}})}}.$$

После того, как поверхностное натяжение меняет знак, растекание прекращается.

Помимо распространения пятна нефти относительно его центра тяжести, важным является вопрос о дрейфе пятна нефти.

Дальнейшее поведение пятна нефти на поверхности водоема будем описывать уравнением конвекции-диффузии [3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} + \overline{\nabla}(h\bar{v}) - \overline{\nabla}(D\overline{\nabla}h) &= R_h, \\ \bar{v} &= \left(u_x + \frac{\tau_x^w}{C_f}, u_y + \frac{\tau_y^w}{C_f} \right), \\ D &= \frac{g \cdot h^2(\rho_w - \rho_{oil})}{\rho_w C_f}, \end{aligned} \quad (4)$$

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, $\overline{\nabla} = (\partial/\partial x, \partial/\partial y)$.

Уравнения (4) замыкается граничными и начальными условиями.

$h|_{t=0} = h_0(x, y, z)$ – начальное распределение загрязнения в области Ω .

На твердой непроницаемой боковой границе Γ_0 ставятся граничные условия непротекания:

$$\left. \frac{\partial h}{\partial n} \right|_{\Gamma_0} = 0.$$

Полученная система уравнений решается 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, так как эксперименты показали неприменимость центрально-разностных

схем аппроксимации конвективных членов уравнения. В результате конечно-разностной аппроксимации получается система линейных уравнений с пятидиагональной матрицей.

Предполагается, что поле скоростей известно на каждом временном шаге.

II Вычислительный эксперимент

Для проверки работоспособности задачи проводились численные эксперименты с изменением координат залповых источников выбросов нефти, с изменением количества нефти, попавшей в водоем в результате залпового выброса(1). Расчеты проводились при различных ветровых ситуациях.

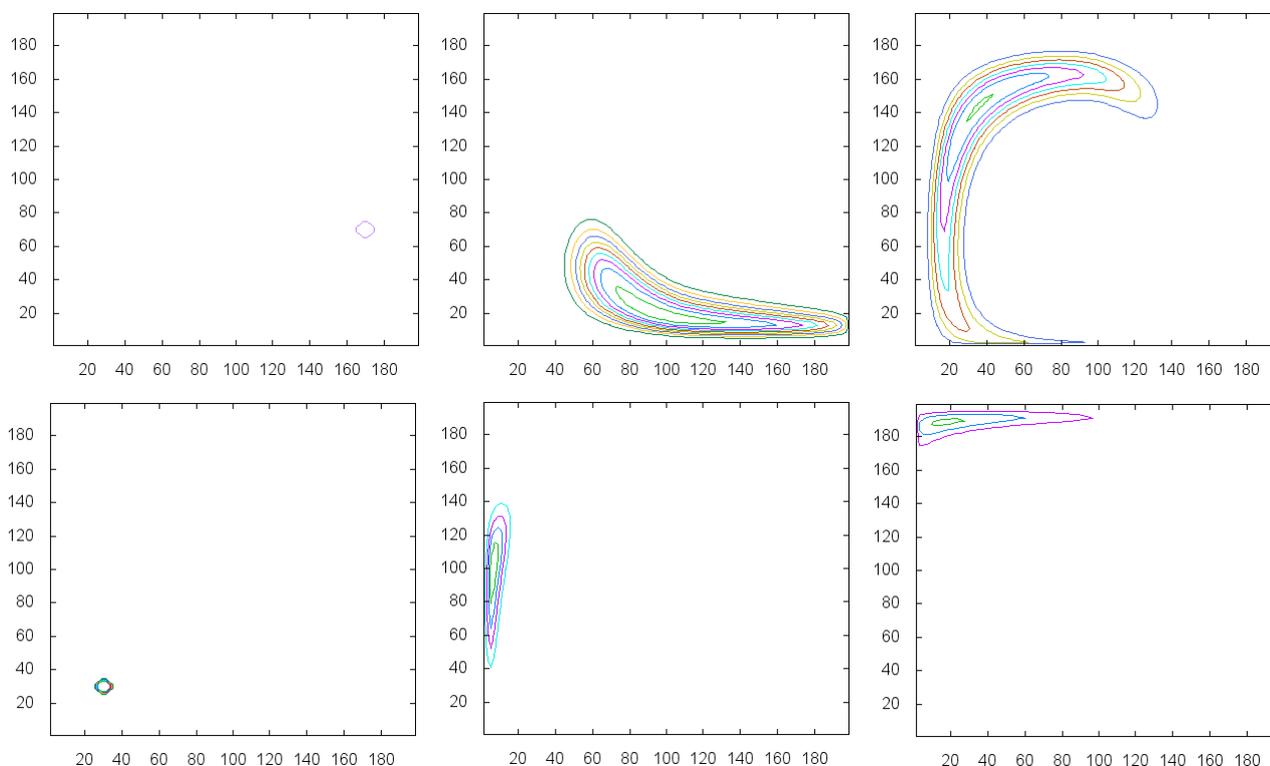


Рис. 1. Результаты моделирования дрейфа нефтяного пятна после растекания с различными координатами залпового выброса и различным начальным объемом нефти.

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 h- o 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. *Карабалин У.С.* Методы ликвидации и предупреждения аварийных ситуаций при освоении месторождений углеводородного сырья. Монография. Алматы, 2008, 185с.
5. *Ф.Т. Сериков, Б.Б. Оразбаев, Ш.К. Коданова* Математическое моделирование аварийных нефтяных загрязнений на акватории моря. <http://vestnik.kazntu.kz/?q=ru/node/400>

О ВЫЧИСЛЕНИИ СОЦИАЛЬНЫХ КОНСТАНТ НА ТРАЕКТОРИЯХ ЭВОЛЮЦИИ СОЦИУМА

Шведовский В.А.

МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва

Для макроописания образа жизни различных общностей социума использован набор самых высоко агрегированных понятий: присвоение, труд, обмен, распределение, потребление. В качестве предмета рассмотрения выбрана первобытная семейная община эпохи мезолита, находящаяся в соседских отношениях "мы-они" с аналогичной общиной. В качестве моделей этих отношений были определены группы перестановок на 4-х и 6-ти вершинном графах. При этом транспозиция – перестановка для горизонтальных дуг, например, (3-4, 4-3) означает из приведённого ряда агрегированных понятий – обмен, или цикл длины 2, в то время как одна такая дуга описывает *распределение*, одна вертикальная дуга, например, (3-1) отражает *трудовые усилия* общины, обозначенной символом "3" над предметным полем биоценоза "1", а дуга с обратным направлением (1-3) воплощает *присвоение* предметов труда, в частности, сбор урожая (орехов, ягод, кореньев, мёда, зёрен и т.п.) см. Рис.1, где представлена перестановка T12 с циклами длины 3 и 1 – петлёй (эта перестановка – элемент группы симметрий тетраэдра – S_4):

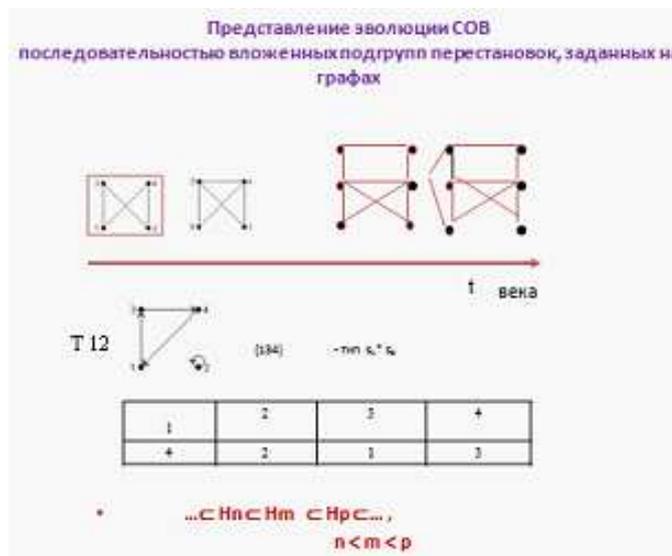


Рис. 1. Отображение усложняющихся систем образов жизни в виде 4-х и 6-ти вершинных графов на оси времени с описанием воспроизводственных циклов (ВЦ) перестановками и последовательности вложенных подгрупп H_m из них как модели эволюции социума

В таком случае эволюция архаичного социума моделируется последовательностью вложенных подгрупп, для которой выведен закон перемен, регулирующий усложнение социума за счёт массового освоения и внедрения в общественное производство его представителями открытий и изобретений –

в этом смысл закона перемен В.М.Бехтерева, происходящих в обществе, будь оно первобытное – из охотников и собирателей или современное, основанное на освоенных высоких технологиях.

**Последовательность вложенных подгрупп как
код цепи усложняющихся образов жизни**

$$H_2 \subset H_4 \subset H_8 \subset H_{24}$$

- $H_2 = \{T_0, T_1\}$
- $H_4 = \{T_0, T_1, T_3, T_5\}$
- $H_8 = \{T_0, T_1, T_2, T_3, T_4, T_5, T_6, T_7\}$

Рис. 2. Начальный фрагмент последовательности вложенных подгрупп перестановок (H_2, H_4, H_8 – подгруппы группы симметрий тетраэдра – S_4)

Каждой группе перестановок S_n (S_4 – полная группа симметрий тетраэдра, S_6 – группа симметрий октаэдра, в которую вкладывается группа тетраэдра) сопоставляется энтропийная оценка сложности $H(n)$:

$$|S_n| = n! \quad H(n) = \ln n!$$
 (1)

После использования формулы Стирлинга и неравенства Чебышёва из выражений (1) получаем:

$$\begin{aligned} \ln L(n) + (n-1) * \ln n - \ln \ln(n-1) - n &\leq H(n) \leq \\ &\leq \ln L(n+1) + n * \ln n - \ln \ln n - n - 1 \end{aligned}$$
 (2)

Для оценочных расчётов использовалось выражение (3):

$$H(n) \approx \ln L(n) + (n-1) * \ln n - \ln \ln(n-1) - n,$$
 (3)

где n – степень группы S_n для СОВ, означающее число ЯВ – ядер воспроизводства, при этом $n!$ – максимально возможное число воспроизводственных циклов, и $L = \text{const}$; $H(n)$ – уровень сложности системы ВЦ. Размер таблицы умножения группы – $n!*n!$.

Приведённая оценка сложности СОВ – $H(n)$, наречённая количественной формулировкой закона перемен (Бехтерева В.М.), является мажорирующей, ибо рассчитывается для группы ВЦ на полном графе. Однако многие социумы отображаются группами перестановок для ВЦ на неполных графах.

Отсюда необходимость в более детальных оценках, которые рассчитываются для траекторий на групповых решётках.

Переход к ним позволил рассчитывать эволюционные траектории с учётом оптимизационных критериев, в частности, минимума суммарной энтропии (одна из социологических гипотез).

Ниже на Рис.3. показана одна из простейших таких решёток и результат применения выше названного оптимизационного критерия: две расчётные эволюционные траектории.



Рис. 3. Отбор эволюционных траекторий как результат применения оптимизационного критерия

Как видно из выше изложенного при сопоставлении археологических, социально-антропологических и исторических маркеров реальной эволюции конкретного социума с её модельным представлением с необходимостью встаёт задача определения ранее введённых социальных констант $\ln L(n)$.

В качестве одного из названных маркеров выбирается время, в которое на основании изменения стиля погребений устанавливается возвышение старейшин – в нашей модели они – распорядители запасов и "накопители" информации о степени родства вступающих в брак. В соответствии с историческими и археологическими данными такое время t_0 наступило около 35 тысяч лет назад.

На основании подхода, изложенного в работе [1], получаем:

$$r \times t_0 \times H(n) \geq H(n) - H(n - 1), \quad (4)$$

где r – коэффициент воспроизводства древнего населения, а остальные символы введены выше.

Подставляя (3) в (4), получаем формулу (5):

$$\ln L(4) \geq (3 \ln 4 - \ln \ln 3 - 2 \ln 3 + \ln \ln 2/r \times t_0) - (3 \ln 4 - \ln \ln 3 - 4). \quad (5)$$

Подставляя в формулу (5) найденные $r = 1.5 \cdot 10^{-4}$ и $t_0 = 35000$, получаем $L(4) = 1.545$ или $H(4) = 0.5$. Аналогично вычисляются $H(5) = 6.25$, $H(6) = 10.42$

Выводы и заключение

- i) Ряду усложняющихся графов сопоставлено теоретико-групповое описание спектров воспроизводственных макроциклов, на основе которого построена последовательность вложенных подгрупп, для которой выведена формула оценки сложности эволюционирующего социума .
- ii) Поставлена и решена задача определения социальных констант, входящих в формулу оценки сложности эволюционирующего архаичного социума .
- iii) Получен ряд социальных констант, позволяющих рассчитывать оценку сложности эволюционирующего архаичного социума, опирающегося на собирательную протоэкономику, начиная с раннего палеолита.
- iv) В пределах архаичного социума каменного века обеспечена методическая возможность определять $H(n+1)$, зная $H(n)$.
- v) Поставлена задача определения законов (коэффициентов) связи оценок сложности "рабочих мест" на основе спектра воспроизводственных макроциклов и оценок сложности "рабочих мест" иными средствами, например, спектром операций и их структурой, необходимых для получения продукта.
- vi) Сформулирована проблема динамики степени симметрии социума по мере его эволюции от древнейших времён до современности и далее.
- vii) В конце каменного века при переходе от мезолита к неолиту линейная зависимость роста численности популяции первобытных людей утрачивается и приобретает нелинейный характер, что требует коррекции разработанной методики.

Литература

1. Шведовский В.А. О вычислении социальных констант в моделировании эволюции архаичного социума // Пространство и человек, М.: вып.4. 2013.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛООВОГО ПОТОКА К ПОВЕРХНОСТИ РАЗГОННОГО БЛОКА С ПОМОЩЬЮ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Шестакова Е. С.

Московский физико-технический институт (государственный университет), г. Долгопрудный

Основная задача данной работы — определить конвективный аэродинамический поток по данным измерений на элементах конструкции, а также попытаться описать и построить физическую модель процесса реламинаризации (процесса перехода турбулентного режима течения в ламинарный), что представляет интерес как с практической, так и с научной точек зрения. Идея работы заключается в том, чтобы на основании этих экспериментальных (лётных) данных рассчитать тепловые потоки. Практика показывает, что при помощи одномерной модели баланса тепла получить достаточно гладкую зависимость для потоков оказывается довольно проблематичным, поэтому было предложено решать данную задачу в двумерной постановке.

Для определения тепловых потоков по известной зависимости температуры от времени необходимо решить обратную задачу теплопроводности. Расчет опирается на известное решение прямой начально-краевой задачи для некоторого произвольного теплового потока, служащего начальным приближением, и при этом применяется метод наискорейшего спуска.

Для того чтобы получить градиент невязки (разность между расчетной и измеренной температурами), решается сопряженная задача, близкая по типу и затратам ресурсов к основной. Мы решаем уравнение типа теплопроводности с отрицательной теплопроводностью двигаясь по времени в обратном направлении. В результате, сопряженная задача эквивалентна уравнению теплопроводности и вполне устойчива. Таким образом, для расчета градиента невязки нам необходимо решить прямую задачу (уравнение теплопроводности) и сопряженную задачу (аналог уравнения теплопроводности).

Для решения как прямой, так и сопряженной задач был использован конечно-разностный алгоритм второго порядка точности по времени и координате (интегроинтерполяционный метод).

На рисунке приведены полученные результаты для миссии Telstar 11N.

В области соответствующей интервалу времени 70–150 секунд происходит процесс реламинаризации, именно этот переходный участок представляет особый интерес для исследований. Реламинаризация играет важную роль

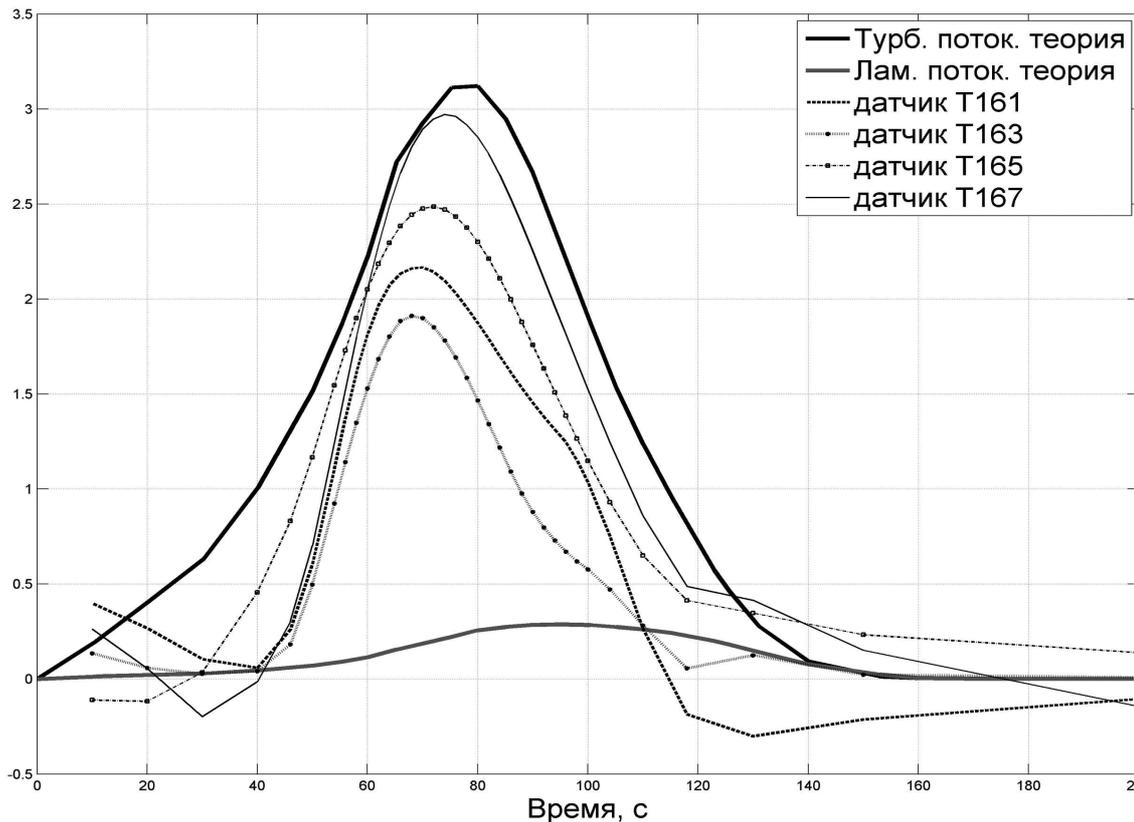


Рис. 1. Результаты расчёта тепловых потоков для миссии Telstar 11N

в теплообмене на поверхности разгонного блока, однако момент ее начала по времени определить точно не удастся.

В выделенной области, по предварительным оценкам, наблюдаемые тепловые потоки могут быть объяснены наличием перемежаемости турбулентного и ламинарного режимов. Для более наглядного рассмотрения данной теории был введён коэффициент турбулентности α . Суммарный тепловой поток в рассматриваемом диапазоне времён рассчитывается по формуле

$$Q = \alpha Q_{turb} + (1 - \alpha) Q_{lam}.$$

Таблица 1. Таблица коэффициентов турбулентности для всех миссий

	T161	T162	T163	T164	T165	T166	T167
amos	0,79	0,68	0,49	0,775	0,825	0,91	0,94
telstar	0,645	0,585	0,555	0,735	0,75	0,885	0,92
measat	0,69	1,04	1,00	0,69	0,9	1,05	1,00
intelsat-15	0,565	0,58	0,365	0,555	0,8	0,8	0,73
intelsat-18	0,61	0,55	0,51	0,77	0,81	0,89	0,93
среднее значение	0,660	0,687	0,584	0,705	0,817	0,907	0,904

По полученным результатам можно сделать предположение, что тепловой

поток состоит из турбулентного и ламинарного. Действительно, при $\alpha < 1$ наблюдается режим перемежаемости.

Литература

1. *Алифанов О. М.* Обратные задачи теплообмена. М.: Машиностроение, 1988. — 279 с.
2. *Алексеев А. К.* Об использовании сопряженных уравнений первого и второго порядка при оценке погрешности решения уравнения теплопроводности // ИФЖ, 2002, т. 75, № 2, с. 143–147.
3. *Narashima R., Sreenivasan K. R.* Relaminarization of fluid flows, in *Advances in Applied Mechanics*. Academic Press. Burlington, MA. 1979. P. 221–309.
4. *Авдеевский В. С. ред.* Основы теплопередачи в авиационной и ракетно-космической технике. М.: Машиностроение, 1975.

СПЕКТРАЛЬНАЯ ПРОЗРАЧНОСТЬ АТМОСФЕРЫ КАК ИНСТРУМЕНТ АТМОСФЕРНОЙ КОРРЕКЦИИ ПРИ ИНТЕРПРЕТАЦИИ КОСМИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ

Шляхова Л.А., Боева И.Н.

*Ростовский государственный университет путей сообщения,
Южный региональный информационно-аналитический центр,
Ростов-на-Дону*

Значительная изменчивость оптических свойств атмосферы в пространстве и во времени диктует необходимость проведения наземных измерений спектральной прозрачности атмосферы в целях корректной интерпретации изменчивости биофизических параметров поверхностных покровов Земли по данным спутниковых измерений. В настоящей работе в развитие предложенного ранее подхода [1] решается обратная задача атмосферной оптики по восстановлению функции распределения аэрозоля по размерам на основе данных измерений спектральной прозрачности атмосферы в период подспутникового эксперимента.

Исходные данные – результаты измерений фотометром прямой, диффузной и общей солнечной радиации в области 300 – 1030 нм (спектральное разрешение 2 нм при 300 нм и 10 нм в ИК области спектра) **прибором ИСПА** с последующим определением спектральной прозрачности атмосферы. Измерения выполнены в 8-ми спектральных каналах **прибором ИСПА** [1]. Применение известного закона Бугера составило основу для оптических измерений во всех восьми каналах аппаратуры за исключением полосы 940 нм молекулярного поглощения водяным паром. В настоящей работе в состав исходных данных включены измерения американского восьмиканального **фотометра SXM-2** [2], включающего полосу поглощения водой при 940 нм.

Моделирование оптического состояния атмосферы как рассеивающей и поглощающей природной среды сводится к моделированию оптических свойств ее диспергированного элемента. В модель расчета оптической толщины атмосферы по измерениям прозрачности атмосферы включены все три вида ослабления света: молекулярное рассеяние или рассеяние Релея, рассеяние и поглощение аэрозолями и поглощение газами и водой. Для расчетов использован Модифицированный Метод Ланглейя (MLM) [3]: напряжение, измеренное фотометром, соответствующее солнечной радиации на поверхности земли может быть представлено,

$$V = \frac{V_0}{r^2} \cdot e^{(-m\tau)_R - (-m\tau)_{OZ} - (-m\tau)_{aer}} \cdot T_w, \quad (1)$$

где V_0 – калибровочный коэффициент, соответствующий солнечной радиации при расстоянии Земля-Солнце в одну Астрономическую единицу. Воздушная масса m зависит от релеевского рассеяния (R), поглощения озоном (oz), аэрозольного рассеяния и поглощения (aer). Влияние этих компонентов суммируется и описывается законом Бугера во всем спектральном интервале фотометра за исключением полосы поглощения водой при 940 нм. Трансмиссия для этой полосы может быть записана как,

$$T_w = e^{-aP^b m^b}, \quad (2)$$

где P – осажденная вода, заполняющая вертикальный столб в типичных единицах измерения(см), m – воздушная масса, a и b постоянные, независимо определенные при использовании алгоритма переноса излучения. Подставив 2 в 1 и прологарифмировав, получим (3)

$$\ln(V) + (m\tau)_R + (m\tau)_{OZ} + (m\tau)_{aer} = \ln(V_0/r^2) - aP^b m^b, \quad (3)$$

Коэффициент V , может быть получен при калибровке фотометра. Постоянные a и b в идеале могут быть вычислены из атмосферных характеристик в период калибровки.

Как результат решения обратной задачи, показан дневной ход аэрозольной составляющей оптической толщины атмосферы, рассчитанный по измерениям в одном из каналов **фотометра SXM-2** (441 нм) (рис 1).

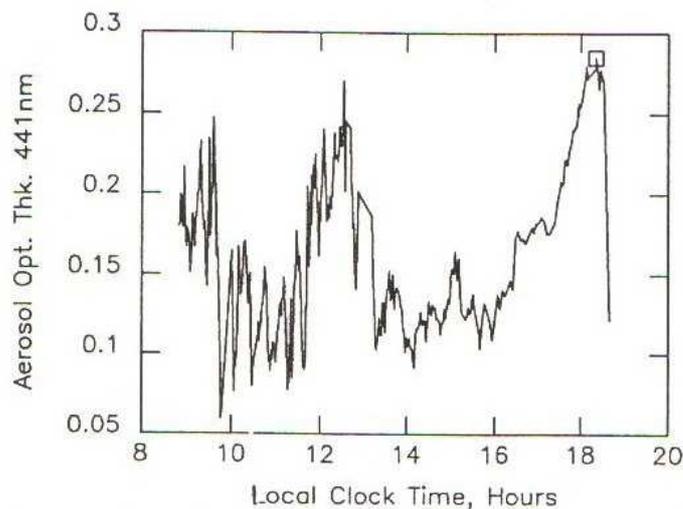


Рис. 1. Дневной ход аэрозольной составляющей оптической толщины атмосферы, рассчитанный по формулам (1) - (3) с использованием данных измерений прозрачности атмосферы в канале 441 нм фотометра SXM-2

В дополнение к спектральной зависимости и дневному ходу аэрозольной оптической составляющей [1], используя данные **фотометра ИСПА**, в рамках решения поставленной задачи целесообразно продолжить исследования

и получить две характеристики: ангстрем экспоненту и функцию распределения частиц по размерам.

Ангстрем экспонента является индикатором типа воздушных масс, присутствующей во время измерений, и характеризует наклон кривой **логарифмической зависимости** аэрозольной составляющей оптической толщины от длины волны (рис.2). Высокие значения величин в экспоненте свидетельствуют о чистых континентальных воздушных массах, включающих мелкие частицы, а величины близкие к нулю являются причиной присутствия крупных частиц таких, которые характерны для исследований окружающей среды в пустыне или для исследований в увлажненных и урбанистических областях (рис.2).

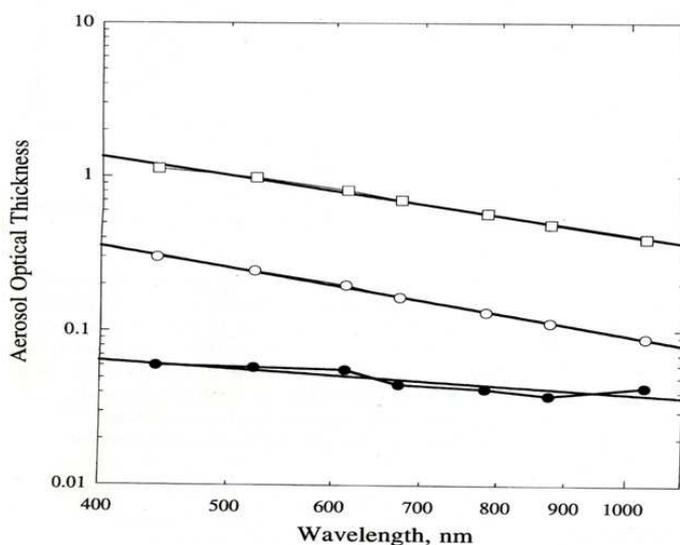


Рис. 2. Спектральные зависимости Ангстрем составляющей оптической толщины атмосферы для контрастных дней с различным уровнем мутности атмосферы: низким (черные точки), средним (кружки) и высоким (квадратики)

При решении обратной задачи **восстановления функции распределения частиц по размерам** (dN/dr) использовано как и ранее в работе [1] выражение спектральной зависимости аэрозольной составляющей оптической толщины $\tau(\lambda)$ в приближении метода Twitty [4]

$$\tau(\lambda) = \int Q_{ext}(r, \lambda, \mu) \pi r^2 (dN/dr) dr, \quad (4)$$

где Q_{ext} – фактор эффективности взаимодействия излучения с частицей радиуса r ($2\pi r/\lambda$ – дифракционный параметр, μ – параметр, характеризующий полуширину функции распределения частиц), вычислен с использованием формул теории Ми.

Процедура обращения была проведена для функции $\tau = a\lambda^{-b}$ в приближении распределения частиц по размерам $dN/dr = cr^{-\nu}$, $\nu = b + 3$.

Функция распределения частиц по размерам, полученная при решении обратной задачи методом Twitty, показана на рис.3, где сохранены обозначения рис.2

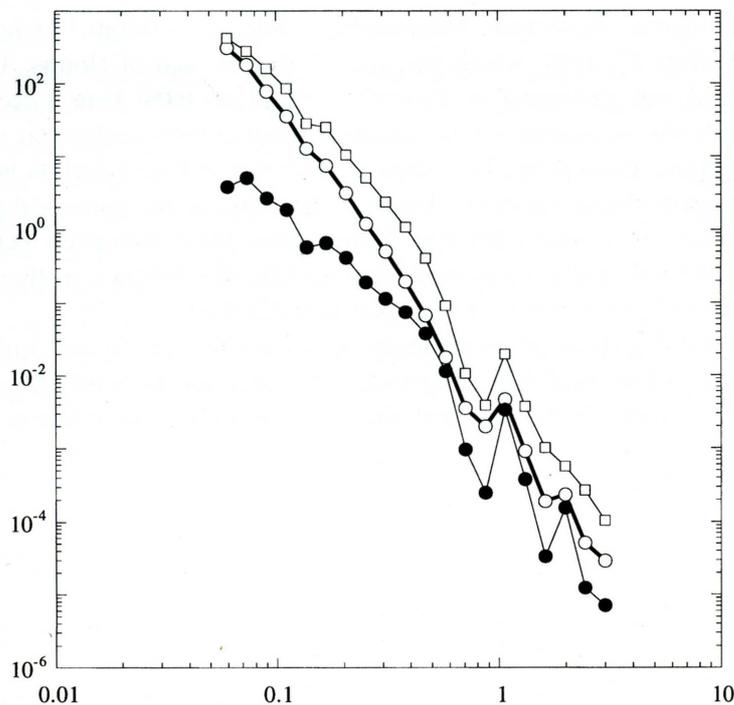


Рис. 3. Функции распределения частиц по размерам для дней с различным уровнем мутности атмосферы, восстановленные по методу Twitty по данным рис 2

Полученные результаты решения обратной задачи можно рассматривать как базовый материал для последующего использования в моделях атмосферной коррекции при интерпретации изображений с действующих в настоящее время спутников.

Литература

1. Шляхова Л.А. Возможность использования данных измерений спектральной прозрачности атмосферы в решении обратных задач обработки спутниковых изображений. Сборник научных статей конференции "Современные проблемы математического моделирования ЮГИНФО, Ростов-на-Дону, 2011, с. 392-395
2. Halthore R.N. "Optical thickness measurements during satellites experiments". Proceedings of the AMS meeting, Anaheim, CA, 1990.
3. Reagan J.A. "Water vapor measurements in the 0,94 micron absorption band: measurements and data applications". Proceedings of IGARSS, Ann Arbor, 18-21, May,2001.
4. Twitty J.T. "The inversion of Aureole Measurements to Derive Aerosol Size Distributions. J. Atm.Sci., 32, 1974, p. 564-571".

РЕШЕНИЕ

XV ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ-ШКОЛЫ МОЛОДЫХ
ИССЛЕДОВАТЕЛЕЙ
"СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ"

С 16 по 21 сентября 2013 состоялась XV Всероссийская конференция-школа молодых исследователей "СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ".

В работе Конференции-школы приняли участие 101 ученых из 15 городов России, представлявшие 25 научных центров. Из них 26 докторов наук, 27 кандидатов наук, 18 аспирантов, 3 магистранта и 3 студента. Было прочитано 16 лекций ведущими российскими учеными в области математического моделирования, сделаны 37 докладов исследователями различных научных центров, из которых 26 докладов были сделаны молодыми учеными. Был проведен круглый стол: "МОЛОДЕЖЬ В СОВРЕМЕННОЙ НАУКЕ: ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ", сопредседатели – Амосов А.А., Василевский Ю.В. и Муратова Г.В.

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 Василевскому Ю.В., Пененко В.В. и Сорокиной 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 б/о "Моряк" за помощь в проведении Конференции-школы;

- опубликовать Труды Конференции-школы до 31 октября 2013 года;
- выставить презентации лекций на сайте Конференции-школы;
- наметить проведение XVI Всероссийской конференции-школы "СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ" на 2015 год.

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Сборник трудов XV Всероссийской конференции-школы молодых исследователей.

Ответственные редакторы: Четверушкин Б.Н., Крукиер Л. А.

Технический редактор: Шабас И. Н.

Подписано к печати 29.10.2013 г.

Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 17. Заказ № 13. Тираж 500 экз.

Южно-Российский региональный центр информатизации ЮФУ,
пр. Стачки 200/1, корп.2, Ростов-на-Дону, 344090, Россия
<http://uginfo.sfedu.ru>