

Раздел I. Теоретические аспекты математического моделирования

УДК 519.6

А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, Ю.С. Бондаренко

ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ДИФFUЗИИ НА ОСНОВЕ СХЕМ С ВЕСАМИ

В прикладных задачах часто возникает необходимость решать уравнение диффузии. Наиболее эффективными методами решения подобного рода задач являются сеточные методы, которые, тем не менее, обладают погрешностями аппроксимации. В данной работе рассмотрено линейное уравнение диффузии с переменными коэффициентами, для которого получена оценка погрешности дискретизации. Полученная оценка погрешности аппроксимации служит для выбора шага по времени при моделировании диффузионных процессов. При моделировании прикладных задач часто возникает необходимость решать уравнение диффузии-конвекции и при этом рекомендуется учитывать полученную оценку погрешности аппроксимации по временной переменной.

Уравнение диффузии; схемы с весами; погрешность аппроксимации.

A.I. Sukhinov, A.E. Chistyakov, J.S. Bondarenko

ERROR ESTIMATION FOR THE DIFFUSION EQUATION SOLUTION BASED ON THE SCHEMES WITH WEIGHTS

In applied problems it is often necessary to solve diffusion equation. The most efficient methods for solving such types of problems are grid methods that, nevertheless, have an approximation error. In the given paper a linear diffusion equation with variable coefficients is considered, for which an estimation of approximation error is obtained. The resulting estimate of the error approximation is used to select the time step in the modeling of diffusion processes. In modeling applied problems often it is necessary to solve diffusion-convection equation and to take into account acquired estimate of the approximation error in the time variable in addition.

Diffusion equation; schemes with weights; approximation error.

Постановка задачи. Рассмотрим трехмерное уравнение диффузии [1,2]

$$c'_t = \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad}(c)) + f \quad (1)$$

с начальным условием

$$c(t, x, y, z) = \varphi(x, y, z), \text{ при } t = 0,$$

в котором источник f задан кусочно-постоянной функцией. Аппроксимируем уравнение (1) по пространственной переменной, при этом будем использовать равномерную прямоугольную сетку, в результате чего получим:

$$c'_t = (\mu c_{\bar{x}})_x + (\mu c_{\bar{y}})_y + (\mu c_{\bar{z}})_z + f,$$

где $(\mu c_{\bar{x}})_x|_{(i,j,k)} = \mu_{i+1/2,j,k} \frac{c_{i+1,j,k} - c_{i,j,k}}{h_x^2} - \mu_{i-1/2,j,k} \frac{c_{i,j,k} - c_{i-1,j,k}}{h_x^2}$ – дискретный аналог оператора диффузии.

Данное выражение можно записать в матричной форме

$$c'_i = -\Lambda c + f^n, \quad t \in [t^n, t^{n+1}], \quad (2)$$

где Λ – самосопряженный, положительно определенный оператор ($\Lambda = \Lambda^* > 0$).

Оценим погрешность для уравнения (2). Для этого разложим векторы c и f по ортонормированному базису, составленному из собственных векторов оператора Λ :

$$c = \sum_i \alpha_i X_i, \quad f^n = \sum_i \beta_i^n X_i, \quad (3)$$

где X_i – собственный вектор оператора Λ , для которого справедливы следующие выражения:

$$\Lambda X_i = \lambda_i X_i, \quad (X_i, X_j) = \delta_{i,j}, \quad \delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \quad (4)$$

С учетом (3) выражение (2) примет вид

$$\sum_i \alpha'_i X_i = -\Lambda \sum_i \alpha_i X_i + \sum_i \beta_i^n X_i. \quad (5)$$

Подставим (4) в выражение (5), в результате чего получим:

$$\sum_i \alpha'_i X_i = \sum_i (-\lambda_i \alpha_i + \beta_i^n) X_i. \quad (6)$$

Воспользуемся ортогональностью векторов X_i в выражении (6):

$$\alpha'_i = -\lambda_i \alpha_i + \beta_i^n, \quad t \in [t^n, t^{n+1}]. \quad (7)$$

Таким образом, решение исходной задачи (1) сводится к решению дифференциальных уравнений (7).

Аналитическое решение уравнения диффузии. Найдем решение уравнения (7). Для этого вначале найдем решение однородного уравнения путем разделения переменных α_i и t

$$\frac{d(\alpha_i)}{\alpha_i} = -\lambda_i dt.$$

Проинтегрировав данное выражение, имеем:

$$\ln \alpha_i = -\lambda_i t + \ln C.$$

Таким образом, получим решение однородного уравнения:

$$\alpha_i = C e^{-\lambda_i t}.$$

Частным решением неоднородного уравнения является

$$\alpha_i = \frac{\beta_i^n}{\lambda_i}.$$

Нетрудно убедиться, что решением неоднородного уравнения (7) является

$$\alpha_i(t) = \left(\alpha_i(t^n) - \frac{\beta_i^n}{\lambda_i} \right) e^{-\lambda_i(t-t^n)} + \frac{\beta_i^n}{\lambda_i}, \quad t \in [t^n, t^{n+1}], \quad (8)$$

$$\alpha_i(t^n) = \left(\alpha_i(t^{n-1}) - \frac{\beta_i^{n-1}}{\lambda_i} \right) e^{-\lambda_i h_t} + \frac{\beta_i^{n-1}}{\lambda_i}.$$

Подставим (8) в выражение (3). В результате чего получим решение задачи (2)

$$c(t) = \sum_i \left(\left(\alpha_i(t^n) - \frac{\beta_i^n}{\lambda_i} \right) e^{-\lambda_i(t-t^n)} + \frac{\beta_i^n}{\lambda_i} \right) X_i, \quad t \in [t^n, t^{n+1}].$$

Следует отметить, что расчет собственных векторов оператора Λ более трудоемко, чем решение исходной задачи, но полученный результат может быть использован для оценки погрешности численного решения уравнения (2).

Численное решение уравнения диффузии. Для аппроксимации уравнения (2) по временной переменной будем использовать схемы с весами

$$\frac{\alpha_i^{n+1} - \alpha_i^n}{h_t} = -\lambda_i (\sigma \alpha_i^{n+1} + (1-\sigma) \alpha_i^n) + \beta_i^n. \quad (9)$$

Для оператора Λ в уравнении (2) имеют место неравенства

$$\Lambda > 0, \quad 2D - \Lambda > 0,$$

где D – диагональная часть оператора Λ . Оператор D оценим максимальным значением

$$D \leq \max_{i,j,k} \left(\frac{\mu_{i+1/2,j,k} + \mu_{i-1/2,j,k}}{h_x^2} + \frac{\mu_{i,j+1/2,k} + \mu_{i,j-1/2,k}}{h_y^2} + \frac{\mu_{i,j,k+1/2} + \mu_{i,j,k-1/2}}{h_z^2} \right) E. \quad (10)$$

В силу данных выражений можно получить оценку максимального собственного числа оператора Λ

$$\lambda_{\max} \leq 2 \max_{i,j,k} \left(\frac{\mu_{i+1/2,j,k} + \mu_{i-1/2,j,k}}{h_x^2} + \frac{\mu_{i,j+1/2,k} + \mu_{i,j-1/2,k}}{h_y^2} + \frac{\mu_{i,j,k+1/2} + \mu_{i,j,k-1/2}}{h_z^2} \right). \quad (11)$$

Введем обозначение:

$$t = \lambda_{\max} \tau. \quad (12)$$

С учетом (12) α'_i запишем

$$\alpha'_i = \alpha'_\tau \tau'_i. \quad (13)$$

Подставим (13) в уравнение (7):

$$(\alpha'_i)'_{\tau} = -\frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} \alpha'_i + \frac{\beta_i^n}{\lambda_{\max}}. \quad (14)$$

Таким образом, получим, что решение уравнения (2) сводится к решению задачи (14). Запишем точное решение задачи (14) с учетом обозначений (12)

$$\alpha_i(\tau^{n+1}) = \left(\alpha_i(\tau^n) - \frac{\beta_i^n}{\lambda_i} \right) e^{-\frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} h_\tau} + \frac{\beta_i^n}{\lambda_i}, \quad (15)$$

а также аппроксимацию данного уравнения с учетом схем с весами в тех же обозначениях

$$\frac{\alpha_i^{n+1} - \alpha_i^n}{h_\tau} = -\frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} (\sigma \alpha_i^{n+1} + (1-\sigma) \alpha_i^n) + \frac{\beta_i^n}{\lambda_{\max}}. \quad (16)$$

Следует отметить, что явная схема ($\sigma = 0$) монотонна при $h_\tau < 1$, устойчива при $h_\tau < 2$.

Выражение (16) может быть записано в следующей форме:

$$\alpha_i^{n+1} - \alpha_i^n = -\frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} h_\tau \sigma \alpha_i^n - (1-\sigma) \frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} h_\tau \alpha_i^n + h_\tau \frac{\beta_i^n}{\lambda_{\max}}$$

или

$$\alpha_i^{n+1} = \left(1 - \frac{\frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} h_\tau}{1 + \frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} h_\tau \sigma} \right) \alpha_i^n + \frac{h_\tau \frac{\beta_i^n}{\lambda_{\max}}}{1 + \frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} h_\tau \sigma}, \quad (17)$$

где α_i^{n+1} – приближенное значение функции $\alpha(x)$ на текущем временном слое, α_i^n – на предыдущем.

Погрешность численного решение уравнения диффузии. Значение погрешности на n -м временном слое через точное $\alpha_i(\tau^n)$ и приближенное α_i^n значения функции поля может быть выражено функцией:

$$\psi_i^n = \alpha_i^n - \alpha_i(\tau^n). \quad (18)$$

Погрешность аппроксимации по временной переменной на n -м слое будет меньше либо равна $\max_i |\psi_i^n|$.

Введем обозначение:

$$\chi = \frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}} h_\tau. \quad (19)$$

Запишем (17) в обозначениях (19):

$$\alpha_i^n = \alpha_i^{n-1} + \frac{\chi}{(1+\chi\sigma)} \left(-\alpha_i^{n-1} + \frac{\beta_i^{n-1}}{\lambda_i} \right). \quad (20)$$

Подставим (18) в выражение (20), в результате чего получим:

$$\psi_i^n = \left(1 - \frac{\chi}{(1+\chi\sigma)} \right) \psi_i^{n-1} + \alpha_i(\tau^{n-1}) \left(1 - \frac{\chi}{(1+\chi\sigma)} \right) - \alpha_i(\tau^n) + \frac{\chi}{(1+\chi\sigma)} \left(\frac{\beta_i^{n-1}}{\lambda_i} \right). \quad (21)$$

Полученное выражение с учетом (15) примет вид

$$\psi_i^n = \left(1 - \frac{\chi}{(1+\chi\sigma)} \right) \psi_i^{n-1} + \left(\alpha_i(\tau^{n-1}) - \frac{\beta_i^{n-1}}{\lambda_i} \right) \left(1 - \frac{\chi}{(1+\chi\sigma)} - e^{-\chi} \right). \quad (22)$$

Погрешность на n -й итерации примет вид

$$\begin{aligned} \psi_i^n &= \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right) \psi_i^{n-1} + \left(\alpha_i(\tau^{n-1}) - \frac{\beta_i^{n-1}}{\lambda_i}\right) \left(1 - \frac{\chi}{(1 + \chi\sigma)} - e^{-\chi}\right) = \\ &= \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right) \left(\left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right) \psi_i^{n-2} + \left(\alpha_i(\tau^{n-2}) - \frac{\beta_i^{n-2}}{\lambda_i}\right) \left(1 - \frac{\chi}{(1 + \chi\sigma)} - e^{-\chi}\right) \right) + \\ &+ \left(\alpha_i(\tau^{n-1}) - \frac{\beta_i^{n-1}}{\lambda_i}\right) \left(1 - \frac{\chi}{(1 + \chi\sigma)} - e^{-\chi}\right) = \dots = \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right)^{n-1} \left(\alpha_i(0) - \frac{\beta_i^0}{\lambda_i}\right) + \\ &+ \dots + \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right) \left(\alpha_i(\tau^{n-2}) - \frac{\beta_i^{n-2}}{\lambda_i}\right) + \left(\alpha_i(\tau^{n-1}) - \frac{\beta_i^{n-1}}{\lambda_i}\right) \left(1 - \frac{\chi}{(1 + \chi\sigma)} - e^{-\chi}\right). \end{aligned}$$

Получим оценку погрешности численного решения исходной задачи:

$$\begin{aligned} |\psi^n| &\leq \max_{k=0, n-1} \left| \alpha_i(\tau^k) - \frac{\beta_i^k}{\lambda_i} \right| \max_{\chi \in [0, h_\tau]} \left| \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right) - e^{-\chi} \right| \sum_{k=0}^{n-1} \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right)^k \leq \\ &\leq \max_{k=0, n-1} \left| \alpha_i(\tau^k) - \frac{\beta_i^k}{\lambda_i} \right| \max_{\chi \in [0, h_\tau]} \left| \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right) - e^{-\chi} \right| \sum_{k=0}^{\infty} \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right)^k = \\ &= \max_{k=0, n-1} \left| \alpha_i(\tau^k) - \frac{\beta_i^k}{\lambda_i} \right| \max_{\chi \in [0, h_\tau]} \left| \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right) - e^{-\chi} \right| \frac{1 + \chi\sigma}{\chi}. \end{aligned}$$

Вернемся к переменной h_τ . Относительно данной переменной погрешность может быть записана так:

$$|\psi| \leq \max_{k=0, n-1} \left| \alpha_i(\tau^k) - \frac{\beta_i^k}{\lambda_i} \right| \max_{\chi \in [0, h_\tau]} \left| \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right) - e^{-\chi} \right| \frac{1 + \chi\sigma}{\chi}.$$

Нетрудно убедиться, что полученная оценка погрешности аппроксимации достигается.

Найдем значение относительной погрешности

$$\phi = \frac{|\psi|}{\max_{k=0, n-1} \left| \alpha_i(\tau^k) - \frac{\beta_i^k}{\lambda_i} \right|} = \max_{\chi \in [0, h_\tau]} \left| \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma}\right) - e^{-\chi} \right| \frac{1 + \chi\sigma}{\chi} \quad (23)$$

и оценим порядок погрешности аппроксимации

$$\begin{aligned} \phi &= \max_{\chi \in [0, h_\tau]} \left| \left(1 - \frac{\chi}{1 + \chi\sigma} - 1 + \chi - \frac{\chi^2}{2} + \frac{\chi^3}{6} + O(\chi^4)\right) \frac{1 + \chi\sigma}{\chi} \right| = \\ &= \max_{\chi \in [0, h_\tau]} \left| -1 + \left(1 - \frac{\chi}{2} + \frac{\chi^2}{6}\right) (1 + \chi\sigma) \right| + O(\chi^3) = \\ &= \max_{\chi \in [0, h_\tau]} \left| \chi(\sigma - 0.5) + \frac{\chi^2(1 - 3\sigma)}{6} \right| + O(\chi^3). \end{aligned}$$

Таким образом, получили ожидаемый результат: в случае $\sigma = 0,5$ схемы с весами имеют второй порядок погрешности аппроксимации, а в остальных случаях первый.

На рис. 1 представлены функции зависимости относительной погрешности аппроксимации ϕ от шага h_τ в случаях $\sigma = \{0; 0,5; 1\}$. Из рис. 1 видно, что кривая, соответствующая весу $\sigma = 0,5$, проходит существенно ниже остальных двух кривых.

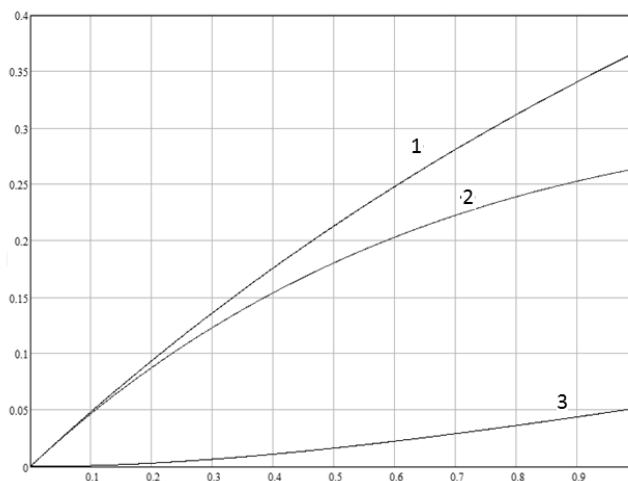


Рис. 1. Функция зависимости относительной погрешности аппроксимации от h_τ в случаях: 1 – $\sigma = 0$; 2 – $\sigma = 1$; 3 – $\sigma = 0,5$

На рис. 2 представлена функция зависимости относительной погрешности аппроксимации ϕ от шага h_τ в случае $\sigma = 0,5$.

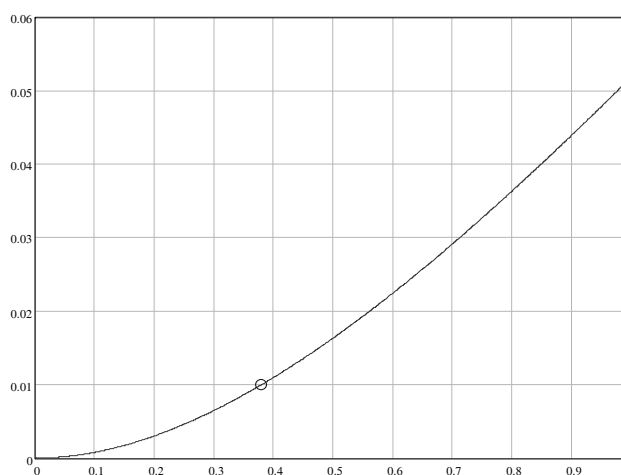


Рис. 2. Функция зависимости относительной погрешности аппроксимации от h_τ в случае $\sigma = 0,5$

Из рис. 2. видно, что погрешность составляет менее 1 % в случае, если шаг h_τ меньше 0,38.

Выводы. Полученная оценка погрешности аппроксимации служит для выбора шага по времени при моделировании диффузионных процессов. При моделировании прикладных задач, например транспорта веществ [3], гидродинамики мелководных водоемов [4–5], аэродинамики [6], волновых гидродинамических процессов [7], акустики [8] и т.д., часто возникает необходимость решать уравнение диффузии-конвекции, и при этом рекомендуется учитывать полученную оценку погрешности аппроксимации по временной переменной.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1983.
2. Сухинов А.И. Двумерные схемы расщепления и некоторые их приложения. – М.: МАКС Пресс, 2005. – 408 с.
3. Чистяков А.Е. Трехмерная модель движения водной среды в Азовском море с учетом транспорта солей и тепла // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2009. – № 8 (97). – С. 75-82.
4. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Алексеенко Е.В. Численная реализация трехмерной модели гидродинамики для мелководных водоемов на супервычислительной системе // Математическое моделирование. – 2011. – Т. 23, № 3. – С. 3-21.
5. Алексеенко Е.В., Сидоренко Б.В., Колгунова О.В., Чистяков А.Е. Сравнительный анализ классических и неклассических моделей гидродинамики водоемов с турбулентным обменом // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2009. – № 8 (97). – С. 6-18.
6. Гадельшин В.К., Любимищенко Д.С., Сухинов А.И. Математическое моделирование поля ветровых течений и распространения загрязняющих примесей в условиях городского рельефа местности с учетом к-ε-модели турбулентности // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2010. – № 6 (107). – С. 49-65.
7. Тимофеева Е.Ф. Математическая модель движения волн для водоема с нелинейной функцией рельефа дна // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2010. – № 6 (107). – С. 95-102.
8. Савицкий О. А., Чистякова Т.А. Математическая модель распространения ультразвуковых пучков высокой интенсивности // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2010. – № 6 (107). – С. 168-174.

Статью рекомендовал к опубликованию д. ф.-м. н., профессор Г.В. Куповых.

Сухинов Александр Иванович

Технологический институт федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южный федеральный университет» в г. Таганроге.

E-mail: sukhinov@gmail.ru.

347928, г. Таганрог, пер. Некрасовский, 44.

Тел.: 88634310599.

Руководитель ТТИ ЮФУ; д.ф.-м.н.; профессор.

Чистяков Александр Евгеньевич

E-mail: cheese_05@mail.ru.

Тел.: 88634371606.

Кафедра высшей математики; ассистент.

Бондаренко Юлиана Сергеевна

E-mail: juliana_bond@mail.ru.

Аспирант.

Sukhinov Alexander Ivanovich

Taganrog Institute of Technology – Federal State-Owned Autonomy Educational Establishment of Higher Vocational Education “Southern Federal University”.

E-mail: sukhinov@gmail.ru

44, Nekrasovskiy, Taganrog, 347928, Russia.

Phone: +78634310599.

The Head of TIT SFedU; Dr. of Phis.-Math. Sc.; Professor.

Chistyakov Alexander Evgenjevich

E-mail: cheese_05@mail.ru.

Phone: +78634371606.

The Department of Higher Mathematics; Assistant.

Bondarenko Juliana Sergeevna

E-mail: juliana_bond@mail.ru.

Phone: +78634371606.

Postgraduate Student.

УДК 519.86

А.И. Сухинов, В.К. Гадельшин, Д.С. Любомищенко

**ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ПРАКТИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ
ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИЙ МЕТОДА СТОУНА**

В работе приведены теоретические и практические оценки эффективности параллельной версии алгоритма неполного LU-разложения Стоуна (SIP) для суперпроизводительной вычислительной системы. В качестве базового подхода распараллеливания используется метод декомпозиции области моделирования на подобласти (domain decomposition). В рамках данного подхода рассматриваются: двумерная декомпозиция по данным без учета общего волнового фронта; двумерная декомпозиция по данным с учетом общего волнового фронта; одномерная декомпозиция по данным с учетом общего волнового фронта и пакетной организацией обменов.

Показано, что для задачи приземной аэродинамики наилучшие результаты из трех оцениваемых параллельных версий дает алгоритм одномерной декомпозиции с учетом общего волнового фронта. Приведены оценки оптимального размера пакета передачи.

Метод Стоуна; оценки эффективности для системы с массовым параллелизмом.

A.I. Sukhinov, V.K. Gadelshin, D.S. Lyubomishchenko

**THEORETICAL AND PRACTICAL EFFICIENCY ASSESSMENT OF PARALLEL
VERSION OF STONE METHOD**

In the paper there are theoretical and practical efficiency assessments of parallel method of incomplete factorization of Stone (SIP) for supercomputer. Domain decomposition is used as background parallel method. 2D data decomposition without wave front, 2D decomposition with wave front and 1D data decomposition with wave front and pocket data exchange are considered. The best results among three algorithm versions of parallel realization are achieved for wave front algorithm and 1D domain decomposition. The assessment of optimal package size is given.

Stone Implicit Procedure (SIP); efficiency assessment for MPP system.

Для решения задач атмосферного моделирования очень важным аспектом является выбор параллельного алгоритма. Процесс построения параллельной программы не всегда может быть ограничен простой переделкой последовательных линейных конструкций в параллельное представление. Такой подход может дать параллельный аналог алгоритма, который при масштабировании на большое коли-