ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ
И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ГЕОФИЗИКИ
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

МАРЧУКОВСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ – 2017

25 июня – 14 июля 2017 года

Труды

Редакционная коллегия
академик РАН Анатолий Николаевич Коновалов
академик РАН Евгений Евгеньевич Тыртышников
член-корр. РАН Юрий Викторович Василевский
член-корр. РАН Сергей Игоревич Кабанихин
член-корр. РАН Геннадий Алексеевич Михайлов
член-корр. РАН Владимир Викторович Шайдуров
д.ф.-м.н. Юрий Миронович Лаевский
д.ф.-м.н. Владимир Викторович Пененко
д.ф.-м.н. Максим Александрович Шишленин
д.ф.-м.н. Михаил Александрович Марченко

Ответственный редактор
д.ф.-м.н. Игорь Михайлович Куликов

Новосибирск
ИВМиМГ СО РАН
2017

УДК 519.6
ББК 22.19

Труды Международной конференции "МАРЧУКОВСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ – 2017". Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук. Академгородок, Новосибирск, Россия, 25 июня – 14 июля 2017 г. Новосибирск. стр.

Целью "Марчуковских научных чтений – 2017" является привлечение специалистов по численному анализу, прикладной математике и вычислительным технологиям к обсуждению актуальных вопросов математики и математического моделирования, а также вопросов практического применения современных численных методов. Основные темы конференции: численный анализ, методы прикладной математики и математическое моделирование, параллельные и распределенные вычисления, информационные и вычислительные системы.

Конференция проводится при финансовой поддержке
Федерального агентства научных организаций
и Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 17-01-20243

При поддержке
Новосибирского государственного университета,
Международного математического центра НГУ,
Сибирского отделения Российской академии наук,
Федерального агентства научных организаций,
Правительства Новосибирской области,
Мэрии города Новосибирска,
Института вычислительной математики РАН,
Института вычислительного моделирования СО РАН,
Института вычислительных технологий СО РАН,
Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН,
Института нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН,
Института систем информатики им. А.П. Ершова СО РАН и
Института цитологии и генетики СО РАН

Спонсоры
ЗАО РСК Технологии

Информационная поддержка
Пресс-служба СО РАН

Сайт конференции: http://conf.nsc.ru/msr17

© Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН, 2017

СРАВНЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ДВУХ БЫСТРЫХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ВИХРЕВОГО ВЛИЯНИЯ ПРИ РАСЧЕТЕ ДВУМЕРНЫХ НЕСЖИМАЕМЫХ ТЕЧЕНИЙ ВИХРЕВЫМИ МЕТОДАМИ

Е. Н. Авдеева, К. С. Кузьмина, И. К. Марчевский

Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана, 105005, Москва

УДК 532.5

Рассмотрены два различных быстрых метода, позволяющих приближенно решить задачу расчета вихревого влияния, возникающую при моделировании плоских течений несжимаемой среды вихревыми методами. Использование данных быстрых методов позволяет избежать расчета всех парных взаимодействий вихревых элементов и снизить вычислительную сложность задачи с $O(n^2)$ до $O(n \log n)$, где n — количество вихревых элементов. Один из методов аналогичен быстрому методу Барнса — Хата решения гравитационной задачи n тел, второй основан на возможности быстрого решения уравнения Пуассона для функции тока с помощью быстрого преобразования Фурье. Построены оценки сложности обоих методов, показавшие небольшое преимущество второго метода над первым по вычислительной сложности при больших значениях $n > 10^5$. Также второй метод предпочтительнее первого по эффективности параллельной реализации.

Ключевые слова: вихревой метод, быстрый метод, задача n тел, уравнение Пуассона, быстрое преобразование Фурье, функция тока

Введение

Для решения ряда задач вычислительной механики сплошной среды могут успешно применяться лагранжевы методы, называемые также методами частиц. Суть этих методов состоит в том, что для описания движения жидкости или деформации твердого тела мы «следим» за перемещением и состоянием отдельных частиц сплошной среды.

При моделировании двумерных течений жидкости и газа с малыми дозвуковыми скоростями, когда влиянием сжимаемости можно пренебречь, могут быть эффективными так называемые вихревые методы [1, 2, 3], предполагающие, что первичной расчетной величиной является завихренность. Распределение завихренности в области течения моделируется при помощи большого числа «элементарных носителей завихренности» — т. н. вихревых элементов, каждый из которых характеризуется радиус-вектором положения в пространстве $\vec{r}_i$ и циркуляцией Γ_i (количеством завихренности, которое в нем содержится), $i = 1, \ldots, n$.

В качестве вихревых элементов при моделировании двумерных течений обычно выбирают точечные вихри — бесконечные вихревые нити, перпендикулярные плоскости течения; в результате получаем, что распределение завихренности представимо в виде

$$\Omega(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{n} \Gamma_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i), \tag{1}$$

где $\delta(\vec{r})$ — двумерная дельта-функция Дирака. При этом под завихренностью в двумерных задачах часто понимают скалярную функцию, равную третьей компоненте ротора скорости:

$$\Omega = \vec{\Omega} \cdot \vec{k} = (\nabla \times \vec{V}) \cdot \vec{k} = \frac{\partial V_y}{\partial x} - \frac{\partial V_x}{\partial y}.$$

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента (проект МК-7431.2016.8) в рамках государственного задания вузам (проектная часть, проект 9.2422.2017/ПЧ).

Зная распределение завихренности, можно восстановить все остальные параметры течения — найти скорость среды в любой точке и давление.

Для отыскания поля скоростей $\vec{V}$ можно воспользоваться законом Био — Савара:

$$\vec{V}(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_S \frac{\vec{\Omega}(\vec{\xi})\times(\vec{r}-\vec{\xi})}{|\vec{r}-\vec{\xi}\,|^2}dS_\xi + \vec{V}_\infty = \frac{1}{2\pi}\int\limits_S \frac{\vec{k}\times(\vec{r}-\vec{\xi})}{|\vec{r}-\vec{\xi}\,|^2}\Omega(\vec{\xi})dS_\xi + \vec{V}_\infty. \tag{2}$$

С учетом заданного формулой (1) распределения завихренности $\vec{\Omega}(\vec{r})$, выражение (2) принимает вид

$$\vec{V}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{n}\frac{\Gamma_i}{2\pi}\frac{\vec{k}\times(\vec{r}-\vec{r}_i)}{|\vec{r}-\vec{r}_i|^2} + \vec{V}_\infty. \tag{3}$$

Из вида формулы (3) следует, что скорость среды в произвольной точке $\vec{r}$ области течения есть суперпозиция влияний всех вихревых элементов. При этом влияние каждого вихревого элемента убывает обратно пропорционально расстоянию до него.

Для моделирования движения вихревых элементов требуется вычислять скорости среды в точках их расположения. Заметим, что данная задача аналогична гравитационной задаче n тел, в которой необходимо рассчитывать притяжение каждого тела к каждому, и ее вычислительная сложность пропорциональна n^2.

Для обеспечения высокой точности моделирования течений, особенно в областях с большими градиентами, в частности, в пристеночных слоях, в расчетную схему требуется вводить большое число вихревых элементов — до нескольких десятков или сотен тысяч. Опыт проведения расчетов показывает, что расчет скоростей вихревых элементов является самой трудоемкой частью алгоритма, и на практике при n превышающем 10 000, ее решение «напрямую» невозможно [4]. Поэтому разработаны приближенные быстрые методы, имеющие существенно меньшую сложность (порядка $n\log^\alpha n$).

1 Метод типа Барнса — Хата

Метод Барнса — Хата [5], изначально разработанный для решения гравитационных задач и впоследствии адаптированный проф. Г. Я. Дынниковой к вихревым методам [6], основан на построении иерархической структуры прямоугольных областей — дерева. Напрямую по закону Био — Савара (3) вихревое влияние рассчитывается только от вихревых элементов, которые находятся в достаточно близких к рассматриваемой ячейках; влияние от вихревых элементов, находящихся далеко от рассматриваемой ячейки, рассчитывается приближенно по упрощенным формулам.

Используя данный подход, можно добиться значительного снижения вычислительной сложности алгоритма: при правильном выборе количества уровней дерева сложность будет пропорциональна $n\log n$. Это позволяет за разумное время решать задачи с большим количеством (десятками или даже сотнями тысяч) вихревых элементов. При решении практических задач недостаточно знать только порядок вычислительной сложности, необходима также количественная оценка, которая может помочь при выборе оптимальных параметров алгоритма. В работе [7] приведено подробное описание алгоритма метода и получена достаточно точная оценка количества операций в алгоритме:

$$Q_{tree} = \frac{24n^2}{2^k}\left(\frac{4}{\theta}\right)\left(1-\alpha\frac{\sqrt{2}^k-1}{\sqrt{n}}\right)^2\left(1-\frac{4}{\theta\sqrt{2}^k}\left(1-\alpha\frac{\sqrt{2}^k-1}{\sqrt{n}}\right)\right) + \\ + \frac{896\cdot 2^k\cdot\beta}{\theta^2}\left(4\left(\frac{1}{4+\theta}+\frac{1}{4-\sqrt{2}^k\theta}\right)+\ln\left(\frac{\sqrt{2}^k-4}{4+\theta}\right)\right)+4n. \tag{4}$$

Здесь n — количество вихревых элементов в области течения; k — количество уровней дерева; θ — параметр, определяющий точность вычисления скоростей ($0<\theta<1$). Значения коэффициентов α и β определяются эмпирически. При малых значениях параметра θ быстрый метод имеет высокую точность, но в этом случае он имеет также и высокую вычислительную сложность; бóльшие значения θ позволяют снизить сложность алгоритма, но при этом повышается погрешность решения.

В работе [4] на примере модельной задачи построена оценка погрешности вычисления скоростей вихрей с помощью описанного алгоритма. Показано, что в случае, когда допустима относительная погрешность $\varepsilon\approx 0{,}2\,\%$, можно выбрать $\theta = 0{,}4$.

Отметим, что эффективная параллельная реализация описанного метода для систем с распределенной памятью является нетривиальной задачей. Основную сложность составляет обеспечение равномерности загрузки процессоров: сложность вычисления скоростей отдельных вихрей, как следует из описанного алгоритма, существенно зависит от их положения в области течения, в отличие «прямого» расчета по закону Био — Савара, в соответствии с которым скорости всех вихрей вычисляются по единой формуле.

2 Метод, основанный на приближенном решении уравнения Пуассона с помощью быстрого преобразования Фурье

Рассмотрим другой подход к построению приближенного быстрого метода вычисления вихревого влияния, основанный на возможности быстрого перемножения матриц за счет использования свойств дискретного преобразования Фурье [8].

Плоское соленоидальное поле скоростей $\vec{V}$ можно выразить через скалярную функцию тока ψ:

$$\vec{V}(\vec{r}) = \nabla \times \big(\psi(\vec{r})\vec{k}\big), \tag{5}$$

где равенство понимается в смысле первых двух компонент. Функция тока ψ удовлетворяет двумерному уравнению Пуассона

$$\Delta\psi = -\Omega. \tag{6}$$

Идея быстрого метода [9] заключается в том, что выписанное уравнение Пуассона решается численно на сравнительно грубой сетке, что позволяет довольно точно учитывать влияние вихрей, находящихся вдали от точки наблюдения, однако вносит серьезную ошибку в расчет влияния вихрей, расположенных в ближней области. Эта ошибка затем корректируется путем расчета влияния вихрей из ближней области напрямую по закону Био — Савара (3).

Наиболее эффективным способом решения двумерного уравнения Пуассона представляется подход, описанный также в [9]. Решение двумерного уравнения Пуассона с известной правой частью выражается в виде свертки этой правой части с функцией Грина:

$$\psi = \int\limits_S G(\vec{r}-\vec{\xi})\Omega(\vec{\xi})dS_\xi, \quad G(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi}\ln\frac{1}{|\vec{r}|}.$$

Тогда для скоростей среды с учетом (5) имеем

$$\vec{V}(\vec{r}) = \nabla \times \big(\psi(\vec{r})\vec{k}\big) = \int\limits_S \big(\nabla \times G(\vec{r}-\vec{\xi})\vec{k}\big)\Omega(\vec{\xi})dS_\xi = \frac{1}{2\pi}\int\limits_S \underbrace{\frac{\vec{k}\times(\vec{r}-\vec{\xi})}{|\vec{r}-\vec{\xi}|^2}}_{\vec{K}(\vec{r}-\vec{\xi})}\Omega(\vec{\xi})dS_\xi, \tag{7}$$

В прямоугольной области, охватывающей всю имеющуюся завихренность, вводится равномерная прямоугольная сетка, содержащая $N_x \times N_y$ узлов, при этом $N_xN_y \ll n$. Интеграл в (7) можно приближенно заменить суммой по узлам сетки:

$$\vec{V}(\vec{r}) \approx \frac{1}{2\pi}\sum_{i=0}^{N_x-1}\sum_{j=0}^{N_y-1}\vec{K}(\vec{r}-\vec{r}_{i,j})\underbrace{\Omega(\vec{r}_{i,j})\Delta S}_{\Gamma_{i,j}},$$

Тогда для расчета скоростей среды в узлах сетки необходимо проделать следующие действия.

1) Рассчитать циркуляции $\Gamma_{i,j} = \Omega(\vec{r}_{i,j})\Delta S$ в узлах сетки, перераспределив на них циркуляции вихревых элементов. Для выполнения этой процедуры целесообразно использовать т. н. операторы сглаживания, например, оператор M_4', введенный в [10].

2) Выполнить двумерное дискретное преобразование Фурье [8] для найденной матрицы $\Gamma_{i,j}$ циркуляций в узлах сетки; в результате получим комплекснозначную матрицу-образ с компонентами $\hat{\Gamma}_{i,j}$.

3) Вычислить значение векторной функции $\vec{K}(\vec{r}) = \dfrac{\vec{k} \times \vec{r}}{|\vec{r}|^2}$, входящей в формулу (7), в узлах сетки. Если один из узлов совпадает с точкой (0; 0), то полагаем, что в этой точке $\vec{K}(\vec{r}) = \vec{0}$. Полученные значения объединяются в две матрицы K^x и K^y, содержащие, соответственно, горизонтальные и вертикальные компоненты векторного поля $\vec{K}$ в узлах сетки.

4) Произвести двумерное дискретное преобразование Фурье для матриц K^x и K^y; в результате получим комплекснозначные матрицы-образы с компонентами $\hat{K}^x_{i,j}$ и $\hat{K}^y_{i,j}$.

5) Из свойств преобразования Фурье известно, что образом суммы вида $\dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_y-1} K(\vec{r}-\vec{r}_{i,j})\Gamma_{i,j}$, также вычисленной в узлах сетки, является матрица, элементы которой получаются в результате поэлементного перемножения матриц-образов $\hat{K}$ и $\hat{\Gamma}$; следовательно, могут быть по-отдельности найдены образы $\hat{V}^x$ и $\hat{V}^y$ горизонтальных и вертикальных компонент скоростей в узлах сетки.

6) Выполняя обратные преобразования Фурье для матриц-образов $\hat{V}^x$ и $\hat{V}^y$ компонент скоростей в узлах сетки, можно найти сами эти скорости $\vec{V}_{i,j}$.

Скорости отдельных вихрей вычисляются двумерной интерполяцией найденных значений скоростей в узлах сетки.

Как правило, на практике пользуются быстрым преобразованием Фурье (БПФ), которое имеет вычислительную сложность, пропорциональную $Q \sim N \log N$, где N — длина преобразуемого вектора, вместо квадратичной $Q \sim N^2$. Отметим, что БПФ наиболее эффективно, когда $N = 2^m$, в этом случае для его реализации требуется выполнить $\frac{1}{2} N \log_2 N = \frac{Nm}{2}$ комплексных умножений. Если $N \neq 2^m$, его сложность оказывается несколько выше.

По постановке задачи требуется найти такое решение уравнения Пуассона, которое обеспечивает нулевые скорости на бесконечности, т. е. имеет на бесконечности нулевые частные производные. Это можно обеспечить следующим приемом [9]: область, «накрываемая» сеткой, перед началом расчета увеличивается в 4 раза путем ее двукратного расширения вправо и вверх и рассматривается новая сетка.

При этом Γ в добавленных узлах полагается равной нулю, матрицы K^x и K^y «продолжаются» симметричным и антисимметричным способом до матриц $\bar{K}^x$ и $\bar{K}^y$ по правилам:

$$\left.\begin{aligned} \bar{K}^x_{i,j} &= +K^x_{i,j} \\ \bar{K}^y_{i,j} &= +K^y_{i,j} \end{aligned}\right\} \; 0 \le i < N_x,\; 0 \le j < N_y \qquad \left.\begin{aligned} \bar{K}^x_{i,2N_y-1-j} &= -K^x_{i,j+1} \\ \bar{K}^y_{i,2N_y-1-j} &= +K^y_{i,j+1} \end{aligned}\right\} \; 0 \le i < N_x,\; 0 \le j < N_y - 1$$

$$\left.\begin{aligned} \bar{K}^x_{i,N_y} &= \bar{K}^x_{N_x,j} = 0 \\ \bar{K}^y_{i,N_y} &= \bar{K}^y_{N_x,j} = 0 \end{aligned}\right\} \; 0 \le i < 2N_x,\; 0 \le j < 2N_y \qquad \left.\begin{aligned} \bar{K}^x_{2N_x-1-i,j} &= +K^x_{i+1,j} \\ \bar{K}^y_{2N_x-1-i,j} &= -K^y_{i+1,j} \end{aligned}\right\} \; 0 \le i < N_x - 1,\; 0 \le j < N_y$$

$$\left.\begin{aligned} \bar{K}^x_{2N_x-1-i,2N_y-1-j} &= -K^x_{i+1,j+1} \\ \bar{K}^y_{2N_x-1-i,2N_y-1-j} &= -K^y_{i+1,j+1} \end{aligned}\right\} \; 0 \le i < N_x - 1,\; 0 \le j < N_y - 1$$

Дальнейшие действия выполняются по указанному выше алгоритму, но рассматриваются матрицы размером $(2N_x+1)\times(2N_y+1)$. Результаты также будут представлять собой «расширенные» матрицы скоростей, в которых физический смысл имеет только блок размером $N_x \times N_y$.

Ясно, что при перераспределении завихренности из вихревых элементов на узлы сетки вносится определенная погрешность; в результате скорость, индуцируемая исходными вихревыми элементами, отличается от скорости, индуцируемой вихрями в узлах сетки. Однако если рассмотреть скорости, индуцируемые вихрями, находящимися в конкретной ячейке, то существенная погрешность в расчете их влияния будет наблюдаться только в самой этой ячейке и нескольких соседних ячейках. Вдали от этой ячейки погрешность будет весьма незначительной.

Опыт расчетов показывает, что ошибка в вычислении скоростей вихрей по описанному алгоритму составляет порядка 20 %, что неприемлемо для практических целей. При этом данная ошибка возникает именно из-за погрешности в учете влияния ближайших вихрей.

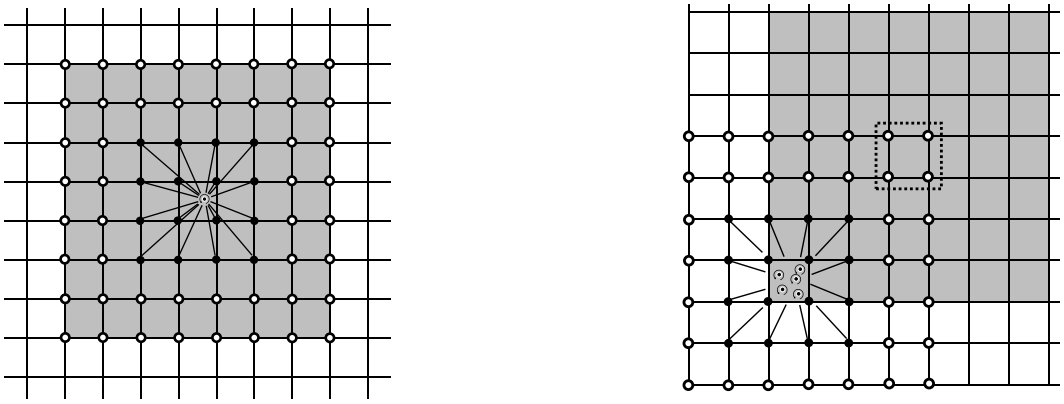
Для решения этой проблемы можно применить полуэмпирический подход [9], основанный на нахождении линейной связи между скоростями и циркуляцией.

Примем, что «ширина ближней зоны», т. е. той зоны, влияние вихрей из которой следует скорректировать, составляет 3 слоя ячеек (рис. 1, *а*). Следующий алгоритм, состоящий из 2 этапов, позволяет исключить их влияние из численного решения, найденного выше, и учесть его напрямую по закону Био — Савара.

Этап 1. Вычисление матрицы путем решения вспомогательной задачи.

1. В произвольную точку внутри центральной ячейки помещается вихрь единичной циркуляции.
2. При помощи оператора сглаживания M_4' этот вихрь распределяется по 16 ближайшим узлам сетки (черные кружки на рис. 1, *а*). Эта операция соответствует п. 1 описанного в предыдущем разделе алгоритма. В результате получаем вектор $\{\Gamma\}$ из 16 компонент.
3. В соответствии с пп. 2–5 алгоритма на основе преобразования Фурье вычисляются скорости во всех остальных узлах сетки, из которых выделяются скорости в 64 узлах, расположенных по периметру центральной ячейки и еще 3 «опоясывающих» ее слоях ячеек (белые и черные кружки на рис. 1, *а*). Поскольку скорости имеют две компоненты, результирующий вектор $\{V\}$ имеет 128 компонент.
4. Основываясь на свойстве линейности оператора дифференцирования (взятия ротора) и закона Био — Савара, полагаем, что компоненты вектора $\{V\}$ могут быть линейно выражены через компоненты вектора $\{\Gamma\}$ путем умножения последнего на некоторую матрицу: $\{V\} = [C]\{\Gamma\}$, $[C] \in M(\mathbb{R})_{128\times 16}$.

   Полученные 128 уравнений следует записать в виде системы линейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов матрицы $[C]$, количество которых составляет $128 \cdot 16 = 2048$.
5. Для составления дополнительных уравнений решаются 15 аналогичных вспомогательных задач, отличающихся лишь положением исходного вихря в центральной ячейке, которые выбираются произвольно. Решив соответствующую систему, можно найти компоненты матрицы $[C]$.



а *б*

Рис. 1: *а* — центральная ячейка, вихрь в ней, ближняя зона (заштрихована) и 64 узла, в которых вычисляются скорости (белые и черные кружки); *б* — вихри в одной из ячеек ближней зоны; узлы, в которые перераспределяются их циркуляции (черные кружки); узлы, в которых вычисляется их влияние с помощью матрицы $[C]$ (белые кружки, показаны не все); контрольная ячейка (обведена рамкой)

Этап 2. Коррекция скоростей вихрей. Процедуру коррекции рассмотрим для вихрей, находящихся внутри одной ячейки с индексом (i, j). Для остальных ячеек все действия выполняются по аналогии.

Необходимо последовательно перебрать 49 ячеек, образующих «ближнюю зону», и для каждой p-й из них ($p = 1, \ldots, 49$) выполнить следующий алгоритм действий.

1. Определить вихри, попавшие в p-ю ячейку (рис. 1, *б*). При помощи оператора сглаживания M_4' перераспределить их циркуляции на 16 соседних узлов сетки (черные кружки на рис. 1, *б*), получив в результате вектор $\{\Gamma_p\}$.
2. Вектор $\{\Gamma_p\}$ умножить на матрицу $[C]$; получится вектор $\{V_p\}$, содержащий по 2 компоненты скорости в 64 узлах сетки, опоясывающих p-ю ячейку (черные и белые кружки на рис. 1, *б*).
3. Из полученного вектора $\{V_p\}$ следует выделить те компоненты, которые соответствуют углам (i, j)-й (контрольной) ячейки, которая на рис. 1, *б* обведена рамкой.

Полученные скорости в углах (i, j)-й ячейки следует вычесть из скоростей, найденных в результате решения исходной задачи методом преобразования Фурье. Тем самым в результате будет исключено влияние вихрей, находящихся в ближней зоне, на (i, j)-ю ячейку.

Полученные (скорректированные) значения скоростей в углах (i, j)-й ячейки следует интерполировать на находящиеся в ней вихри. К скоростям всех вихрей следует прибавить скорости, индуцированные всеми вихрями ближней зоны, которые рассчитываются «напрямую» точно по закону Био — Савара

$$\vec{V}_{neigh}(\vec{r}_s) = \sum_{q \in B_{i,j}} \frac{\Gamma_q}{2\pi} \frac{\vec{k} \times (\vec{r}_s - \vec{r}_q)}{|\vec{r}_s - \vec{r}_q|^2},$$

где $B_{i,j}$ обозначает множество вихрей, попадающих в ближнюю зону к ячейке (i, j).

3 Сравнение эффективности двух быстрых методов

Расчеты показывают, что описанная реализация быстрого метода на основе быстрого преобразования Фурье с приведенными выше параметрами, главным из которых является «ширина» ближней зоны, принятая равной 3 слоям ячеек, обеспечивает после выполнения коррекции погрешность вычисления скоростей на уровне $0{,}2 \ldots 0{,}3\,\%$, что согласуется с погрешностью, обеспечиваемой методом типа Барнса — Хата при $\theta = 0{,}4$.

Опытным путем установлено, что количество ячеек грубой сетки и, соответственно, размер этих ячеек мало влияют на точность решения задачи, однако это влияние оказывается существенным, если рассматривать вычислительную сложность алгоритма. Будем считать, что число ячеек сетки по двум направлениям одинаково, $N_x = N_y = N$, и является степенью двойки (что позволяет оптимальным образом реализовать алгоритм БПФ), а вихри будем считать равномерно распределенными по ячейкам сетки.

В рамках указанных допущений можно построить приблизительную оценку для количества операций, необходимых для вычисления скоростей всех вихрей в соответствии с описанным алгоритмом:

$$Q_{FFT} \approx \frac{294n^2}{N^2} + 104n + 32\,888N^2 + 68N^2 \log_2 N. \tag{8}$$

Поскольку, как указано выше, рассмотренные быстрые методы обеспечивают соизмеримую точность вычисления скоростей вихрей, представляет интерес сравнение их сложностей. На графике на рис. 2 показаны сложности обоих методов при различных значениях числа вихрей n, вычисленные при помощи оценок (4) и (8); при этом число уровней дерева k в методе типа Барнса — Хата и число ячеек сетки N в методе, основанном на быстром преобразовании Фурье, во всех случаях были выбраны оптимальными.

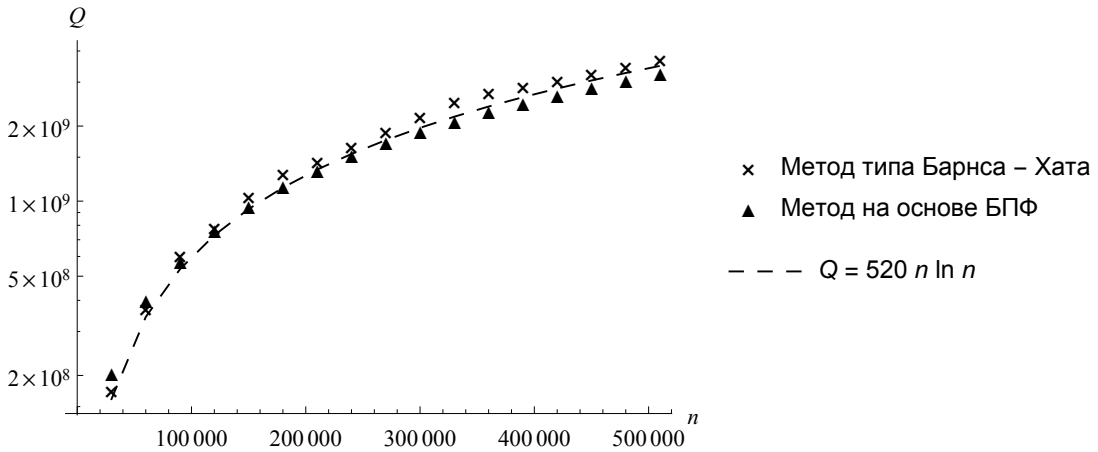


Рис. 2: Зависимости вычислительной сложности быстрого метода типа Барнса — Хата (×) и быстрого метода на основе БПФ (▲) от числа вихрей. Штриховой линией показана кривая $Q = 520n \ln n$

Заключение

Построены оценки вычислительной сложности двух быстрых методов вычисления вихревого влияния: метода типа Барнса — Хата [6], основанного на построении иерархической структуры дерева и последующем его обходе, и метода, предполагающего решение уравнения Пуассона на грубой сетке с помощью быстрого преобразования Фурье [9].

В обоих методах влияние близко расположенных вихрей рассчитывается напрямую (точно) по закону Био — Савара, а влияние вихрей, расположенных сравнительно далеко от точки наблюдения, учитывается приближенно.

При задании параметров точности обоих методов, обеспечивающих сравнимые погрешности вычисления скоростей вихрей порядка 0,2 %, и оптимальном выборе остальных параметров, вычислительные сложности обоих методов оказываются близкими. При числе вихрей $n > 100\,000$ метод на основе быстрого преобразования Фурье несколько экономичнее метода типа Барнса — Хата (примерно на 10 %). Кроме того, его параллельная реализация может быть более эффективной в смысле обеспечения более равномерной загрузки вычислительных ядер.

Представляется также, что при решении задач моделирования пространственных течений вихревыми методами быстрый метод на основе быстрого преобразования Фурье будет значительно более эффективным по сравнению с методом типа Барнса — Хата.

Список литературы

[1] Лифанов И. К. Метод сингулярных уравнений и численный эксперимент. М.: ТОО «Янус», 1995. 520 с.

[2] Дынникова Г. Я. Вихревые методы исследования нестационарных течений вязкой несжимаемой жидкости: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 05.13.18. Москва, 2011. 269 с.

[3] Cottet G.-H., Koumoutsakos P. D. Vortex methods. Theory and practice. Cambridge University Press, 2008. 314 p.

[4] Кузьмина К. С., Марчевский И. К. Об оценках вычислительной сложности и погрешности быстрого алгоритма в методе вихревых элементов // Труды ИСП РАН. 2016. Т. 28. В. 1. С. 259–274.

[5] Barnes J., Hut P. A hierarchical $O(N \log N)$ force-calculation algorithm. Nature. 1986. Vol. 324. No. 4. Pp. 446–449.

[6] Дынникова Г. Я. Использование быстрого метода решения «задачи N тел» при вихревом моделировании течений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2009. Т. 49, № 8. С. 1458–1456.

[7] Кузьмина К. С., Марчевский И. К. Оценка трудоемкости быстрого метода расчета вихревого влияния в методе вихревых элементов // Наука и образование: электрон. науч.-техн. изд. 2013. № 10. С. 399–414.

[8] Van Loan C. Computational Frameworks for the Fast Fourier Transform. SIAM, 1992. 287 p.

[9] Morgenthal G., Walther J. H. An immersed interface method for the Vortex-In-Cell algorithm // Computers and Structures. 2007. Vol. 85. Pp. 712–726.

[10] Monaghan J. J. Extrapolating B-splines for interpolation // Journal of Computational Physics. 1985. Vol. 60, No. 2. P. 253-262.

Елена Николаевна Авдеева — студент каф. «Прикладная математика»
Московского государственного технического университета имени Н. Э. Баумана
e-mail: lena.avdeeva177@mail.ru;
Ксения Сергеевна Кузьмина — аспирант, ассистент каф. «Прикладная математика»
Московского государственного технического университета имени Н. Э. Баумана
e-mail: kuz-ksen-serg@yandex.ru;
Илья Константинович Марчевский — к.ф.-м.н., доцент каф. «Прикладная математика»
Московского государственного технического университета имени Н. Э. Баумана
e-mail: iliamarchevsky@mail.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

СТАТИСТИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ СТОХАСТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ПУАССОНОВСКОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ

Т. А. Аверина[1,2], К. А. Рыбаков[3]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[3] *Московский авиационный институт, 125993, Москва*

УДК 519.676

В работе представлен статистический алгоритм решения задачи фильтрации и прогнозирования для нелинейных стохастических дифференциальных систем с пуассоновской составляющей в уравнении объекта наблюдения. В основе разработанного алгоритма лежит моделирование траекторий специального случайного процесса с разрывами, обрывами и ветвлениями траекторий, обсуждаются упрощенные варианты предложенного статистического алгоритма.

Ключевые слова: стохастическая система, фильтрация, прогнозирование, апостериорная плотность, ветвящиеся процессы, статистический алгоритм.

Введение

В работе рассматривается задача, связанная с фильтрацией и прогнозированием сигналов в нелинейных стохастических системах с пуассоновской составляющей, т.е. в классе диффузионно-скачкообразных динамических систем. Напомним, что методы, предложенные ранее для диффузионных динамических систем [9, 12], были применены затем для диффузионно-скачкообразных динамических систем. В частности, постановка рассматриваемой задачи изложена в [3, 5], а в [4] был приведен упрощенный алгоритм решения задач фильтрации и прогнозирования с неточным моделированием пуассоновского потока, связанного в том числе и с пуассоновской составляющей в модели динамической системы, а также моделированием обрывов и ветвлений траекторий случайных процессов. Представленная работа обобщает полученные ранее результаты, ее основная цель состоит в построении алгоритма решения задач фильтрации и прогнозирования, в котором применяется точное моделирование пуассоновского потока. Разработанные алгоритмы можно включить в семейство методов частиц [14, 15].

1 Задача фильтрации и прогнозирования

Рассматриваются стохастические динамические системы, которые задаются двумя векторными уравнениями. Первое уравнение описывает модель объекта наблюдения и является стохастическим дифференциальным уравнением в смысле Ито с пуассоновской составляющей:

$$dX(t) = f\big(t, X(t)\big)dt + \sigma\big(t, X(t)\big)dW(t) + dQ(t), \quad X(t_0) = X_0. \tag{1}$$

В уравнении (1) используются следующие обозначения: $X \in \mathbb{R}^n$ — вектор состояния, $t \in [t_0, T + \Delta(T)]$ — время; $f(t,x)\colon [t_0, T+\Delta(T)] \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ — n-мерная вектор-функция, $\sigma(t,x)\colon [t_0, T+\Delta(T)] \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{n\times s}$

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 15-01-05052-а и 17-08-00530-а).

— матричная функция $n \times s$; $\Delta(t)\colon [t_0, T] \to [0, +\infty)$ — величина опережения по времени для прогнозирования, удовлетворяющая условию (это условие носит формальный характер и при необходимости может быть сформулировано иным образом)

$$\max_{t\in[t_0,T]} \big(t + \Delta(t)\big) = T + \Delta(T);$$

$W(t)$ — s-мерный стандартный винеровский процесс, не зависящий от начального вектора состояния X_0, заданного плотностью вероятности $\varphi_0(x)$; $Q(t)$ — общий пуассоновский процесс, заданный в виде

$$Q(t) = \sum_{k=1}^{P(t)} \Delta_k.$$

Для последнего соотношения $P(t)$ — неоднородный пуассоновский процесс интенсивности $\lambda(t) = \lambda(t, X(t))$, а Δ_k — независимые случайные векторы из $\mathbb{R}^n$, распределение которых задано плотностью вероятности $\psi(\tau_k, \Delta)$. Таким образом, в случайные моменты времени вектор состояния X получает приращения Δ_k и условная вероятность разрыва траектории случайного процесса $X(t)$ на промежутке $[t, t + \Delta t]$ при условии $X(t) = x$ задается равенством

$$\mathbb{P}(t, t + \Delta t) = \lambda(t, x)\Delta t + o(\Delta t).$$

Если величина приращения зависит от вектора состояния, то используется условная плотность вероятности $\psi(\tau_k, \Delta | x)$, характеризующая распределение Δ_k при условии $X(\tau_k - 0) = x$. В частном случае $\psi(\tau_k, \Delta | x) = \psi(\tau_k, \Delta)$. Наряду с $\psi(\tau_k, \Delta | x)$ введем плотность вероятности $\eta(\tau_k, x | \xi)$, характеризующую распределение $X(\tau_k)$ при условии $X(\tau_k - 0) = \xi$, т.е. $\Delta_k = X(\tau_k) - \xi$.

Второе уравнение рассматриваемой стохастической системы наблюдения задает модель измерителя, оно представляется в виде [8]:

$$Z(t) = c\big(t, X(t)\big) + \zeta(t)N(t), \tag{2}$$

где $Z \in \mathbb{R}^m$ — вектор измерений, $t \in [t_0, T]$; $c(t, x)\colon [t_0, T] \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ — m-мерная вектор-функция, $\zeta(t)\colon [t_0, T] \to \mathbb{R}^{m\times d}$ — матричная функция $m \times d$, для которой соответствующая матрица диффузии невырождена; $N(t)$ — d-мерный стандартный гауссовский белый шум, не зависящий от $W(t)$ и от начального вектора состояния X_0.

Задача прогнозирования состоит в нахождении оценки $\hat{X}(t + \Delta(t))$ по результатам измерений $Z_0^t = \{Z(\tau),\ \tau \in [t_0, t)\}$, накопленных к текущему моменту времени t.

Следуя [9], будем исходить из несмещенности оценки и минимума среднеквадратического отклонения. Тогда

$$\hat{X}\big(t + \Delta(t)\big) = \mathbb{M}\big[X\big(t + \Delta(t)\big) \,|\, Z_0^t\big] = \int_{\mathbb{R}^n} xp\big(t + \Delta(t), x \,|\, Z_0^t\big)dx,$$

где $\mathbb{M}$ означает математическое ожидание, $p(t+\Delta(t), x \,|\, Z_0^t)$ — апостериорная плотность вероятности вектора состояния X в будущий момент времени $t + \Delta(t)$.

Можно рассматривать, например, следующие варианты задачи прогнозирования:

а) прогнозирование с фиксированным упреждением, т.е. $\Delta(t) = \Delta = \text{const}$;

б) прогнозирование в фиксированный момент времени $T' \geqslant T$, т.е. $\Delta(t) = T' - t$.

При $\Delta(t) = 0$ задача нахождения оценки $\hat{X}(t)$ по результатам измерений Z_0^t — это задача фильтрации [8, 13].

2 Численный метод

Уравнения для решения задач фильтрации и прогнозирования были приведены в работах [3, 5, 11], это уравнение Дункана–Мортенсена–Закаи и уравнение Колмогорова–Феллера. Здесь их приводить не будем и перейдем сразу к построению алгоритма фильтрации и прогнозирования.

Основу алгоритма составляет моделирование ансамбля траекторий исходной стохастической системы, заданной уравнением (1), причем для этапа прогнозирования такое моделирование осуществляется непосредственно по алгоритму решения задачи анализа [2], а на этапе фильтрации моделируются траектории стохастической системы, заданной тем же уравнением (1), но с дополнительными условиями: обрывами и ветвлениями, моменты времени появления которых статистически зависят от текущих измерений [11]. По полученному ансамблю траекторий методами математической статистики можно найти и указанную выше

апостериорную плотность вероятности, и требуемые оценки вектора состояния, т.е. решение задачи прогнозирования.

Случайный процесс, траектории которого могут иметь разрывы, обрывы и ветвления, будем называть специальным, чтобы отличать его от решения уравнения (1). Наличие разрывов, а также обрывов и ветвлений траекторий специального случайного процесса $X(t)$ усложняет алгоритм их моделирования. Так, регулярную (с постоянным шагом) или нерегулярную (с переменным шагом) сетку для численного решения стохастического дифференциального уравнения без пуассоновской составляющей:

$$dX(t) = f\big(t, X(t)\big)dt + \sigma\big(t, X(t)\big)dW(t), \tag{3}$$

необходимо дополнить узлами, которые соответствуют двум пуассоновским потокам: разрывам с заданной интенсивностью $\lambda(t,x)$, а также обрывам и ветвлениям, интенсивность которых определяется функцией $\mu(t,x,z)$, записанной ниже. Эти дополнительные узлы сетки формируются отдельно для каждой траектории специального случайного процесса $X(t)$.

Чтобы упростить алгоритм моделирования, предлагается рассмотреть пуассоновский поток, включающий и разрывы, и обрывы, и ветвления траекторий. Суммарная интенсивность такого потока определяется формулой

$$\Lambda(t,x,z) = \lambda(t,x) + |\mu(t,x,z)|,$$

где

$$\mu(t,x,z) = \sum_{k=1}^{m}\sum_{r=1}^{m} c_k(t,x)q_{kr}(t)\left(z_r - \frac{1}{2}c_r(t,x)\right),$$

$$q(t) = \omega^{-1}(t), \quad \omega_{kr}(t) = \sum_{l=1}^{d}\zeta_{kl}(t)\zeta_{rl}(t), \quad k,r = 1,2,\ldots,m,$$

причем разрывы траекторий реализуются с вероятностью $\lambda(t,x)/\Lambda(t,x,z)$, а обрывы и ветвления траекторий — с вероятностью $|\mu(t,x,z)|/\Lambda(t,x,z)$. Моделирование такого пуассоновского потока проще, а результаты будут статистически эквивалентны независимому моделированию двух исходных пуассоновских потоков.

Далее в алгоритме будут использованы обозначения $\mu^-(t,x,z)$ и $\mu^+(t,x,z)$:

$$\mu^-(t,x,z) = \begin{cases} -\mu(t,x,z), & \mu(t,x,z) < 0, \\ 0, & \mu(t,x,z) \geqslant 0, \end{cases} \qquad \mu^+(t,x,z) = \begin{cases} \mu(t,x,z), & \mu(t,x,z) > 0, \\ 0, & \mu(t,x,z) \leqslant 0, \end{cases}$$

т.е.

$$\mu(t,x,z) = -\mu^-(t,x,z) + \mu^+(t,x,z).$$

Для определения оптимальной оценки $\hat{X}(t+\Delta(t))$ предлагается статистический алгоритм моделирования траекторий специального случайного процесса $X(t)$ с учетом разрывов, обрывов и ветвлений с последующим усреднением. При этом можно применять различные методы численного решения стохастических дифференциальных уравнений и методы моделирования неоднородных пуассоновских потоков.

Например, можно использовать простой в реализации стохастический метод Эйлера, именно он применяется далее в алгоритмах для моделирования «фрагментов» траекторий на промежутках времени между двумя последовательными разрывами, обрывами или ветвлениями, т.е. траекторий стохастической системы диффузионного типа, модель которой задается уравнением (3). Для получения большей точности требуется применять численные методы более высокого порядка.

Для моделирования пуассоновского потока разрывов, обрывов и ветвлений траекторий специального случайного процесса $X(t)$ используется метод «максимального сечения» [7]. Формулы для моделирования времени, через которое происходят эти события, здесь не приводятся, их можно найти в [2, 6, 7] и далее в алгоритме.

На основе результатов моделирования траекторий специального случайного процесса $X(t)$ с разрывами, обрывами и ветвлениями в каждый момент времени можно оценить апостериорные плотность вероятности и функцию распределения. Также можно найти оценку вектора состояния как для текущего (фильтрация), так и для будущего момента времени (прогнозирование), усредняя по ансамблю траекторий с учетом того, что на этапе прогнозирования обрывы и ветвления не происходят.

Алгоритм совместного моделирования системы наблюдения, фильтрации и прогнозирования

Ш а г 1. Задать M — число моделируемых траекторий специального случайного процесса $X(t)$; h — шаг численного интегрирования; величины λ^* и Λ^* — мажоранты для интенсивностей $\lambda(t,x)$ и $\Lambda(t,x,z)$ соответственно. Предполагается, что для интенсивности $\lambda(t,x)$ мажоранту можно найти точно:

$$\lambda^* = \max_{(t,x)\in[t_0,\,T+\Delta(T)]\times\mathbb{R}^n} \lambda(t,x),$$

для интенсивности $\Lambda(t,x,z)$ это можно сделать, например, по результатам пробного моделирования траекторий системы наблюдения, заданной уравнениями (1) и (2), применяя статистический алгоритм анализа [2]:

$$\Lambda^* = \max_{t_k\in[t_0,\,T],\,i=1,2,\ldots,M} \Lambda(t_k, X_k^i, Z_k^i),$$

где максимум берется по всем значениям вектора состояния X_k^i и соответствующего ему вектора измерений Z_k^i в узлах сетки $\{t_k = t_0 + kh\}$ по M смоделированным траекториям.

Получить реализации начальных векторов X_0 и X_0^i согласно заданной плотности вероятности $\varphi_0(x)$ (X_0 — начальный вектор состояния для основной траектории, для которой проводятся измерение и оценивание, X_0^i — для траекторий специального случайного процесса, по которым приближенно вычисляется оптимальная оценка); получить реализацию промежутка времени $\hat\xi$, через который может произойти разрыв основной траектории: $\hat\xi = -\ln\beta/\lambda^*$, и промежутков времени ξ^i, через которые могут произойти разрывы, обрывы или ветвления вспомогательных траекторий: $\xi^i = -\ln\beta/\Lambda^*$, $i = 1,2,\ldots,M$. Здесь и далее β — различные реализации (для всех i) случайной величины, имеющей равномерное распределение на интервале $(0,1)$.

Положить $k = 0$, $\hat t_* = t_0$, $t_*^i = t_0$, $I_0^i = 1$ (траектория с номером i в начальный момент времени не оборвана), $i = 1,2,\ldots,M$.

Ш а г 2. Положить $\kappa = k$, $\tau_*^i = t_*^i$, $\xi_*^i = \xi^i$ (запомнить текущее время и параметры), $i = 1,2,\ldots,M$. Далее положить $i = 1$, $j = 0$ (j — количество новых ветвей на шаге k), $\Xi = 1$ (прогнозирование).

Ш а г 3. Проверить условие $t_\kappa + \Delta(t_\kappa) - t_k > 0$. Если оно выполнено, то перейти к шагу 4. Иначе положить

$$M_\kappa = \sum_{i=1}^{M} I_\kappa^i \quad (M_0 = M)$$

и найти прогноз $\hat X_k$ как выборочное среднее реализаций $\mathbb{X}_k = \{X_k^i\}_{i=1,2,\ldots,M;\,I_\kappa^i=1}$:

$$\hat X_\kappa = \frac{1}{M_\kappa} \sum_{i=1,2,\ldots,M;\ I_\kappa^i=1} X_k^i.$$

Проверить условие $T - t_\kappa = 0$. Если оно выполнено, то завершить процесс, иначе положить $k = \kappa$, $t_*^i = \tau_*^i$, $\xi^i = \xi_*^i$ (восстановить текущее время и параметры), $i = 1,2,\ldots,M$, затем положить $i = 1$, $\Xi = 0$ (фильтрация).

Проверить условие $\hat t_* + \hat\xi \geqslant t_k + h$, если оно выполнено, то получить реализацию оцениваемого вектора состояния в следующем узле сетки $\{t_k\}$:

$$X_{k+1} = X_k + hf(t_k, X_k) + \sqrt{h}\sigma(t_k, X_k)\Delta W,$$

и получить вектор измерений:

$$Z_k = c(t_k, X_k) + \frac{\zeta(t_k)}{\sqrt{h}}\Delta V.$$

В этих формулах и далее ΔW и ΔV — различные для всех k и i (а также для промежуточных расчетов) реализации s-мерного и d-мерного случайных векторов соответственно, координаты которых независимы и имеют стандартное нормальное распределение.

Если условие $\hat t_* + \hat\xi \geqslant t_k + h$ не выполнено, то положить $\hat X = X_k$, $\hat\tau = t_k$ и $l = 1$.

Последовательно найти реализации оцениваемого вектора состояния и векторы измерений в дополнительных узлах сетки:

$$Z_k^{(l)} = c(\hat\tau, \hat X) + \frac{\zeta(\hat\tau)}{\sqrt{\hat h}}\Delta V, \quad \hat X = \hat X + \hat h f(\hat\tau, \hat X) + \sqrt{\hat h}\sigma(\hat\tau, \hat X)\Delta W, \quad \hat h = \hat t_* + \hat\xi - \hat\tau.$$

Для каждого дополнительного узла сетки необходимо выполнять следующие действия: положить $\hat{\tau} = \hat{\tau} + \hat{h}$ и получить реализацию α случайной величины, имеющей равномерное распределение на интервале $(0,1)$; проверить условие $\alpha \leqslant \lambda(\hat{\tau})/\lambda^*$, $\lambda(\hat{\tau}) = \lambda(\hat{\tau}, \hat{X})$, и если оно выполнено, то получить реализацию случайного вектора Δ, распределенного с плотностью вероятности $\psi(\hat{\tau}, \Delta|\hat{X})$, и положить $\hat{X} = \hat{X} + \Delta$ или сразу получить новую реализацию случайного вектора $\hat{X}$, распределенного с плотностью вероятности $\eta(\hat{\tau}, x|\hat{X})$; положить $l = l + 1$, $\hat{t}_* = \hat{t}_* + \hat{\xi}$ и $\hat{\xi} = -\ln\beta/\lambda^*$. Эти вычисления проводятся до тех пор пока $\hat{t}_* + \hat{\xi} < t_k + h$.

Далее получить реализацию оцениваемого вектора состояния и векторы измерений в следующем узле сетки $\{t_k\}$:

$$X_{k+1} = \hat{X} + \hat{h} f(\hat{\tau}, \hat{X}) + \sqrt{\hat{h}}\sigma(\hat{\tau}, \hat{X})\Delta W, \quad \hat{h} = t_k + h - \hat{\tau}.$$

$$Z_k^{(l)} = c(\hat{\tau}, \hat{X}) + \frac{\zeta(\hat{\tau})}{\sqrt{\hat{h}}}\Delta V.$$

Фактически здесь формируется кусочно-постоянная функция $Z_k(t)$, $t \in [t_k, t_k + h)$, принимающая постоянное значение Z_k, если на полуинтервале нет разрывов основной траектории, или последовательно принимающая значения $Z_k^{(1)}$, $Z_k^{(2)}$, ..., если разрывы есть.

Ш а г 4. Проверить условие $I_\kappa^i = 0$ (траектория с номером i оборвана). Если оно выполнено, то перейти к последнему шагу, иначе: при $t_*^i + \xi^i \geqslant t_k + h$ перейти к шагу 5, а при $t_*^i + \xi^i < t_k + h$ положить $\tilde{X}^i = X_k^i$, $\tau^i = t_k$ и перейти к шагу 6.

Ш а г 5. Получить реализацию вектора состояния в следующем узле сетки $\{t_k\}$:

$$X_{k+1}^i = X_k^i + h f(t_k, X_k^i) + \sqrt{h}\sigma(t_k, X_k^i)\Delta W.$$

Положить $I_{k+1}^i = 1$ (если $\Xi = 0$) и перейти к последнему шагу.

Ш а г 6. Получить реализацию вектора состояния в дополнительном узле сетки:

$$\tilde{X}^i = \tilde{X}^i + h^i f(\tau^i, \tilde{X}^i) + \sqrt{h^i}\sigma(\tau^i, \tilde{X}^i)\Delta W, \quad h^i = t_*^i + \xi^i - \tau^i.$$

Положить $\tau^i = \tau^i + h^i$ и получить реализацию α случайной величины, имеющей равномерное распределение на интервале $(0,1)$. Проверить условие $\alpha \leqslant \Lambda(\tau^i)/\Lambda^*$, $\Lambda(\tau^i) = \Lambda(\tau^i, \tilde{X}^i, Z_k)$, и если оно выполнено, то перейти к шагу 7, иначе — к шагу 8.

Здесь и на следующих шагах Z_k — это вектор измерений, причем при условии, что на полуинтервале $[t_k, t_k{+}h)$ произошел хотя бы один разрыв основной траектории, $Z_k = Z_k^{(l)}$, где верхний индекс l соответствует моменту времени τ^i.

Ш а г 7. Получить реализацию γ случайной величины, имеющей равномерное распределение на интервале $(0,1)$, и проверить условия:

а) если $\lambda(\tau^i)/\Lambda(\tau^i) \leqslant \gamma$ ($\lambda(\tau^i) = \lambda(\tau^i, \tilde{X}^i)$, разрыв траектории), то получить реализацию случайного вектора Δ, распределенного с плотностью вероятности $\psi(\tau^i, \Delta|\tilde{X}^i)$, и положить $\tilde{X}^i = \tilde{X}^i + \Delta$ или сразу получить новую реализацию случайного вектора $\tilde{X}^i$, распределенного с плотностью вероятности $\eta(\tau^i, x|\tilde{X}^i)$;

б) если $\Xi = 0$, $\lambda(\tau^i)/\Lambda(\tau^i) > \gamma$ и $\mu^-(\tau^i, \tilde{X}^i, Z_k) > 0$ (обрыв траектории), то положить $I_{k+1}^i = 0$ (траектория далее не моделируется: $I_r^i = 0$, $r > k$) и перейти к последнему шагу;

в) если $\Xi = 0$, $\lambda(\tau^i)/\Lambda(\tau^i) > \gamma$ и $\mu^+(\tau^i, \tilde{X}^i, Z_k) > 0$ (ветвление траектории), то положить $j = j + 1$, $I_{k+1}^{M+j} = 1$ ($I_r^{M+j} = 0$, $r \leqslant k$), $t_*^{M+j} = t_*^i + \xi^i$, $\tilde{X}^{M+j} = \tilde{X}^i$, $\tau^{M+j} = \tau^i$ и получить реализацию для промежутка времени, через который может произойти разрыв, обрыв или ветвление новой траектории с номером $M + j$: $\xi^{M+j} = -\ln\beta/\Lambda^*$.

Ш а г 8. Положить $t_*^i = t_*^i + \xi^i$ и получить новую реализацию для промежутка времени, через который может произойти разрыв, обрыв или ветвление траектории с номером i: $\xi^i = -\ln\beta/\Lambda^*$.

Проверить условие $t_*^i + \xi^i < t_k + h$. Если оно выполнено, то перейти к шагу 6.

Ш а г 9. Получить реализацию вектора состояния в следующем узле сетки $\{t_k\}$:

$$X_{k+1}^i = \tilde{X}^i + h^i f(\tau^i, \tilde{X}^i) + \sqrt{h^i}\sigma(\tau^i, \tilde{X}^i)\Delta W, \quad h^i = t_k + h - \tau^i.$$

Положить $I_{k+1}^i = 1$.

Ш а г 10. Проверить условия:

а) если $i = M + j$, то положить $M = M + j$, $t_{k+1} = t_k + h$, $k = k + 1$ и перейти к шагу 3 при $\Xi = 1$ или к шагу 2 при $\Xi = 0$;

б) если $i < M$, то положить $i = i + 1$ и перейти к шагу 4;

в) если $M \leqslant i < M + j$ (новые ветви), то положить $i = i + 1$ и перейти к шагу 6.

Замечания.

1. Предполагается, что конечный момент времени T для построения текущей оценки и конечный момент времени $t_\kappa + \Delta(t_\kappa)$ для нахождения прогноза согласованы с шагом численного интегрирования, т.е. найдутся такие целые числа K_1 и K_2^κ, что $t_0 + K_1 h = T$ и $t_0 + K_2^\kappa h = t_\kappa + \Delta(t_\kappa)$, иначе при нахождении вектора состояния в эти моменты времени потребуется скорректировать шаг численного интегрирования.

2. На шаге 3 можно получить ковариационную матрицу ошибки прогнозирования:

$$\hat{\Gamma}_\kappa = \frac{1}{M_\kappa - 1} \sum_{i=1,2,\ldots,M;\ I_\kappa^i = 1} (X_k^i - \hat{X}_k)(X_k^i - \hat{X}_k)^{\mathrm{T}}.$$

Индекс κ в обозначении $\hat{X}_\kappa$ и $\hat{\Gamma}_\kappa$ указывает на то, что эти характеристики соответствуют прогнозу в момент времени $t_\kappa + \Delta(t_\kappa)$ при текущем времени $\theta = t_\kappa$.

На этом же шаге по выборке $\mathbb{X}_k$ можно найти оценки апостериорных плотности вероятности $p(t_\kappa + \Delta(t_\kappa), x | Z_0^{t_\kappa})$ и соответствующей функции распределения. Это дает возможность использовать не только критерий минимума среднеквадратической ошибки прогнозирования, но и другие критерии [8, 12].

3. На этапе прогнозирования ($\Xi = 1$) обрывы и ветвления траекторий специального случайного процесса $X(t)$ не происходят, однако согласно приведенным алгоритмам интервалы времени между двумя последовательными моментами, в которых проверяется реализация разрыва траектории, моделируются по показательному закону распределения с параметром Λ^*, а не λ^*, хотя, как правило, $\Lambda^* \gg \lambda^*$. Это, вообще говоря, допустимо и не сказывается на точности моделирования пуассоновского потока разрывов траекторий, но увеличивает время моделирования, в частности за счет получения «лишних» реализаций случайных величин, снижая таким образом конструктивную размерность алгоритма, связанную с многомерной равномерностью используемых псевдослучайных чисел.

Чтобы этого избежать, можно модифицировать приведенный алгоритм. На шаге 2 дополнительно требуется положить $t_*^i = t_k$ и $\xi^i = -\ln\beta/\lambda^*$, $i = 1, 2, \ldots, M$. При $\Xi = 1$ на шаге 6 достаточно проверить условие $\alpha \leqslant \lambda(\tau_i)/\lambda^*$, где $\lambda(\tau_i) = \lambda(\tau_i, \tilde{X}^i)$, и если оно выполнено, то на шаге 7 смоделировать разрыв траектории с номером i (получение реализации γ случайной величины, имеющей равномерное распределение на интервале $(0, 1)$, и проверка условия $\lambda(\tau_i)/\Lambda(\tau_i) \leqslant \gamma$ не требуется). На шаге 8 получить новую реализацию для промежутка времени, через который может произойти разрыв траектории с номером i: $\xi^i = -\ln\beta/\lambda^*$.

При интенсивности разрывов траекторий, не зависящей от вектора состояния, т.е. $\lambda(t, x) = \lambda(t)$, и тем более при постоянной интенсивности $\lambda(t, x) = \lambda = \mathrm{const}$ алгоритмы можно упростить, в частности, моделировать моменты времени разрывов на этапе прогнозирования заранее. Если $\lambda(t, x) = \lambda = \mathrm{const}$, то получение реализации α случайной величины, имеющей равномерное распределение на интервале $(0, 1)$, и проверка условия $\alpha \leqslant \lambda(\tau_i)/\lambda^*$ не требуется.

4. Трудоемкость построенного алгоритма можно уменьшить, если использовать модифицированный метод «максимального сечения» с использованием моделирования последовательности исключений по одному случайному числу [1].

5. Можно предложить метод моделирования пуассоновского потока, для которого моменты времени разрывов, обрывов и ветвлений совпадают с узлами регулярной сетки для численного решения стохастического дифференциального уравнения. Решение задач фильтрации и прогнозирования для систем диффузионного типа с помощью такого метода рассматривалось в [10], соответствующая модификация алгоритма совместного моделирования системы наблюдения, фильтрации и прогнозирования будет содержать меньшее количество шагов.

Список литературы

[1] Аверина Т. А. Новые алгоритмы статистического моделирования неоднородных пуассоновских ансамблей // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2010. Т. 50. № 1. С. 16–23.

[2] Аверина Т. А. Построение алгоритмов статистического моделирования систем со случайной структурой. Новосибирск: РИЦ НГУ, 2015.

[3] Аверина Т. А., Рыбаков К. А. О прогнозировании состояний стохастических дифференциальных систем с пуассоновской составляющей // Проблемы оптимизации сложных систем. XI Международная Азиатская школа-семинар, Чолпон-Ата, 27 июля – 7 августа 2015 г.: Тр. конф. Ч. 1. 2015. С. 16–24.

[4] Аверина Т. А., Рыбаков К. А. Практическая реализация алгоритма прогнозирования в стохастических системах с пуассоновской составляющей // Проблемы оптимизации сложных систем. XII Международная Азиатская школа-семинар, Новосибирск, 12–16 декабря 2016 г.: Тр. конф. Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2016. С. 2–11.

[5] Аверина Т. А., Рыбаков К. А. Приближенное решение задачи прогнозирования для стохастических систем диффузионно-скачкообразного типа // Сибирский журнал вычислительной математики. 2017. Т. 20. № 1. С. 1–13.

[6] Ермаков С. М., Михайлов Г. А. Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.

[7] Михайлов Г. А., Аверина Т. А. Алгоритм «максимального сечения» в методе Монте-Карло // Доклады АН. 2009. Т. 428. № 2. С. 163–165.

[8] Пантелеев А. В., Руденко Е. А., Бортаковский А. С. Нелинейные системы управления: описание, анализ и синтез. М.: Вузовская книга, 2008.

[9] Рыбаков К. А. Алгоритмы прогнозирования состояний в стохастических дифференциальных системах на основе моделирования специального ветвящегося процесса // Дифференциальные уравнения и процессы управления. 2015. № 1. С. 25–38.

[10] Рыбаков К. А. Модифицированные статистические алгоритмы фильтрации и прогнозирования в непрерывных стохастических системах // Известия Института математики и информатики УдГУ. 2015. № 2 (46). С. 155–162.

[11] Рыбаков К. А. Статистические алгоритмы оптимальной фильтрации сигналов в нелинейных диффузионно-скачкообразных стохастических системах // Вестник УГАТУ. 2016. Т. 20. № 4 (74). С. 107–113.

[12] Рыбаков К. А. Статистические методы анализа и фильтрации в непрерывных стохастических системах. М.: Изд-во МАИ, 2017.

[13] Синицын И. Н. Фильтры Калмана и Пугачева. М.: Логос, 2007.

[14] Bain A., Crisan D. Fundamentals of Stochastic Filtering. Springer, 2009.

[15] Del Moral P. Feynman–Kac Formulae: Genealogical and Interacting Particle Systems with Applications. Springer, 2004.

Татьяна Александровна Аверина — к.ф.-м.н.,
ст. науч.сотр. Института вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН;
доцент Новосибирского государственного университета;
e-mail: ata@osmf.sscc.ru;
Константин Александрович Рыбаков — к.ф.-м.н.,
доцент Московского авиационного института;
e-mail: rkoffice@mail.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ АЛГОРИТМОВ И МЕТОДОВ БАЛАНСИРОВКИ НАГРУЗКИ И ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ СЕТЕЙ МАССОВОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ

К. А. Айдаров[1], Г. Т. Балакаева[1]

[1] *Казахский Национальный университет им. аль-Фараби, 050043, Алматы, Казахстан*

УДК 519.872

Данная работа описывает алгоритмы балансировки для внешних сервисов с неспециализированными клиентами, используемых в настоящих промышленных центрах обработки данных. Простейший пример такого сервиса и клиента — это веб-сервер и браузер. Исследован алгоритм балансировки нагрузки через приоритетное планирование. По результатам реализации модели для кластерной системы получены оценки уменьшения эффекта осцилляции между ее перегруженным и нормальными состояниями.

Ключевые слова: балансировка нагрузки, дискретно-событийное моделирование, модельно-ориентированное проектирование

Введение

При планировании многоядерного ресурса, такого как микроконтроллер встроенной системы, желаемым преимуществом является эффективное использование ресурсов, а также контроль над управлением, вкупе со строгими ограничениями по времени для достижения желаемого уровня производительности. Чтобы оптимизировать весь проект системы, во-многих случая необходим анализ компромиссов, который может быть сделан на основе предположения, что функциональность планирования на совместных используемых ресурсах может быть удовлетворена с целью повышения производительности управления.

Работа основана на использовании набора инструментов модельно-ориентированного проектирования, который основывается на фреймворке Simulink [1] от компании Mathworks. Суть модельно-ориентированного подхода описана в [2]. Интеграция данных инструментов позволяет проводить непосредственный анализ влияния параметров планировщика на производительность управления в рамках системы управления целиком. Данный анализ включает прямую оценку соответствия производительности системным требованиям. Кроме того, при необходимости, лучшая производительность управления может быть достигнута, изменением управляющей функциональности или проектированием системы в оригинальном представлении.

Решение основывается на вышеупомянутой среде моделирования дискретных событий с соответствующим механизмом исполнения для динамического планирования событий. Работа, представленная здесь иллюстрирует поддерживаемые методы анализа производительности для различных стратегий управления, которые могут быть реализованы по-разному.

Предыдущие решения в этой области на основе модельно-ориентированного проектирования и Simulink включают TRES [3] и TrueTime [4]. Оба обеспечивают функциональность, достаточную для моделирования многозадачного планирования и сетей во встроенных системах управления.

TRES является модульным фреймворком который добавляет задачи реального времени и сетевые модели к существующим моделям Simulink. Это налагает дополнительные трудности при моделировании отказоустойчивых и производительных решений. Кроме того, для существующей модели Simulink, где контроллеры определены как графические блоки с выполнением и расчетами спецификации, этот подход требует существенного перепроектирования и часто не практичен.

В TrueTime блок Kernel моделирует одноядерный компьютерный узел с универсальным ядром в реальном времени, A/D и цифро-аналоговые преобразователи, внешние вводы и сетевые интерфейсы. Ограничением TrueTime является моделирование задачи управления, так как в режиме реального времени основные блоки

должны быть записаны на языках MATLAB или C++. В итоге это приводит к ограниченному доступу к набору блоков Simulink.

1 Модель

Платформа в среде Simulink предложена для графического моделирования многоядерного планировщика с ресурсами. Платформа реализована при помощи блока планировщика, являющейся частью модуля SimEvents для Simulink с дискретно-событийной семантикой [5]. Данная платформа включает моделирование планирования эффектов (например, задержки, время ожидания), и исследуют пространство исполнения задач, через анализ влияния планирования выбора на производительность управления. Платформа наложена на алгоритм управления и позволяет плавно перейти к реализации алгоритма через автоматические технологии генерации кода.

Рисунок 1а показывает модель Simulink, использующую эту платформу, состоящую из блока Scheduler (Планировщик) и связанный Контроллер алгоритмических компоненты (Controller1 и Controller2). Здесь, Controller1 имеет простой пропорциональный алгоритм управления формы, однако он реализован в как три функции: t1_read, t1_run, и t1_write. Это разложение помогает моделировать неявное чтение датчика и запись привода, которая присутствовала бы в фактическом контроллере реализации.

Сам планировщик моделирует гомогенную многоядерную систему и определена следующими свойствами, которые являются представленный как простые параметры блока как показано на рисунке 1б, такие как количество ядер, планирование политики, взаимоисключающие ресурсы. Блок планировщика SimEvents позволяет пользователям определять задачи как блочные параметры также как показано в рисунке 1б.

Данные параметры определяют гомогенную многоядерную систему с двумя ядрами. Планировщик настроен на выполнение политики на основе приоритетов. У системы есть две задачи управления:

Задача 1 для блока Controller1 сконфигурирована с периодом 0,5 секунд, приоритет 200 и 3 сегментов, чьи функции и продолжительности выполнения (t1_read, t1_run, t1_write) и (0.1, 0.2, 0.1) второй соответственно.

Задача 2 для блока Controller2 сконфигурирована с периодом 0,5 секунды, приоритет 50, 2 сегмента, чьи функции и продолжительности выполнения (t2_run, t2_write) и (0.25, 0.1) второй соответственно.

2 Результаты

На рис. 1 представлены результаты моделирования.

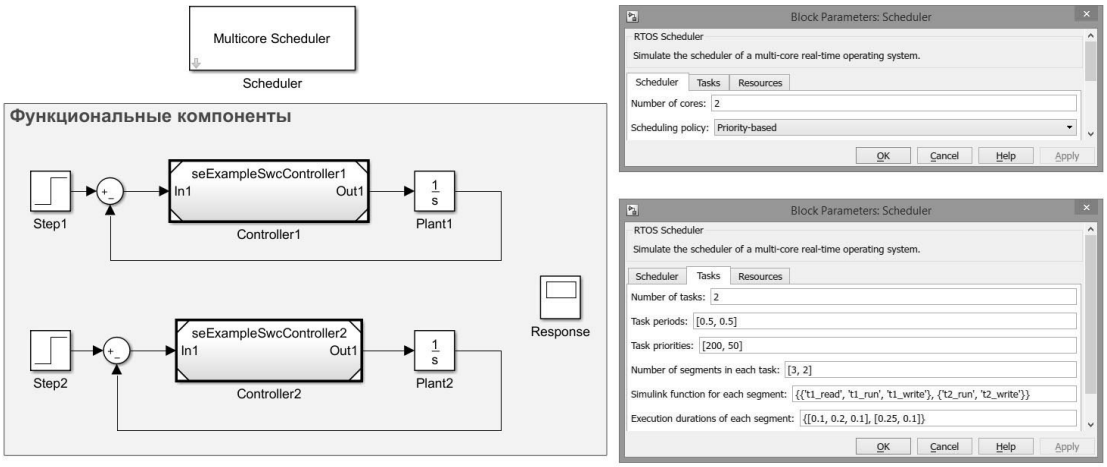


Рис. 1: Simulink модель многоядерной системы: (а) блок планировщика (б) конфигурация параметров планировщика

Реализация блока планировщика основывается на высокоуровневом дискретном событийно-ориентированном языке, который поддерживается Simulink и включает реализацию дополнительного планирования функци-

ональности (например, различные политики). Платформа моделирования более универсальна и не имеет строгой привязки к использованию этого блока планировщика.

Блок планировщика позволяет присваивать произвольный номер из ядер и показывает их влияние на системную производительность. В первом сценарии двум ядра были назначены две задачи управления. Рисунок 1б иллюстрирует параметры блока планировщика для этой конфигурации.

Обе системы управления с обратной связью работают достаточно эффективно, когда точка установления (setpoint) изменяется в диапазоне [0;1) (см. рисунок 2). Каждый из рисунков 2–6 включает диаграмму ответа обработчика (на левой стороне) и временную диаграмму (на правой стороне). Диаграмма ответа обработчика показывает ответ от двух блоков, Controller1 в главном графике, и блока Controller2 в нижнем графике. Временная диаграмма показывает использование ядер и ресурсов. Черно-белый столбик показывает выполнение сегмента задачи. Позиция панели на горизонтальной оси указывает время запуска и завершения сегмента. Позиция панели на вертикальной оси указывает нормализованное завершение задачи перед и после выполнения сегмента.

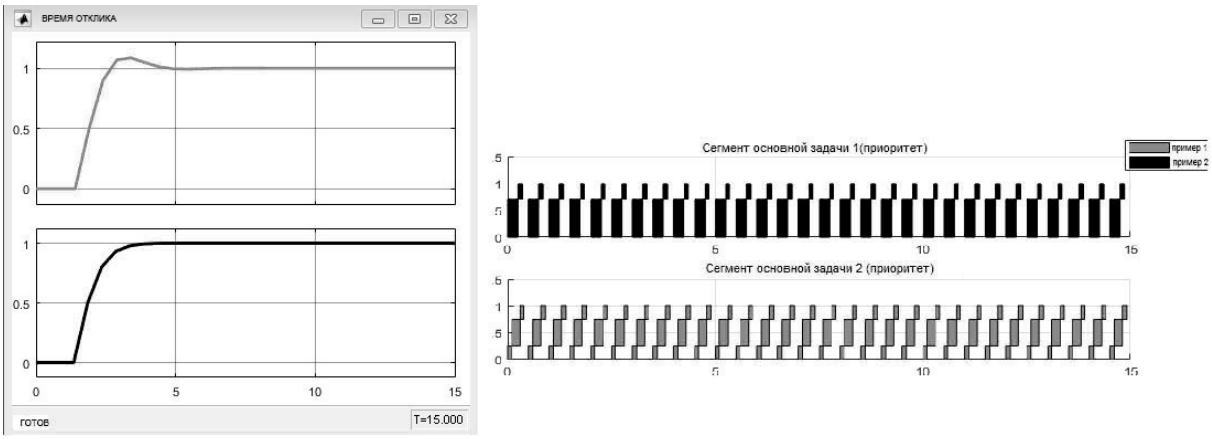


Рис. 2: Последовательность выполнения задач и производительность контроллера (два ядра, основанное на приоритетном планировании)

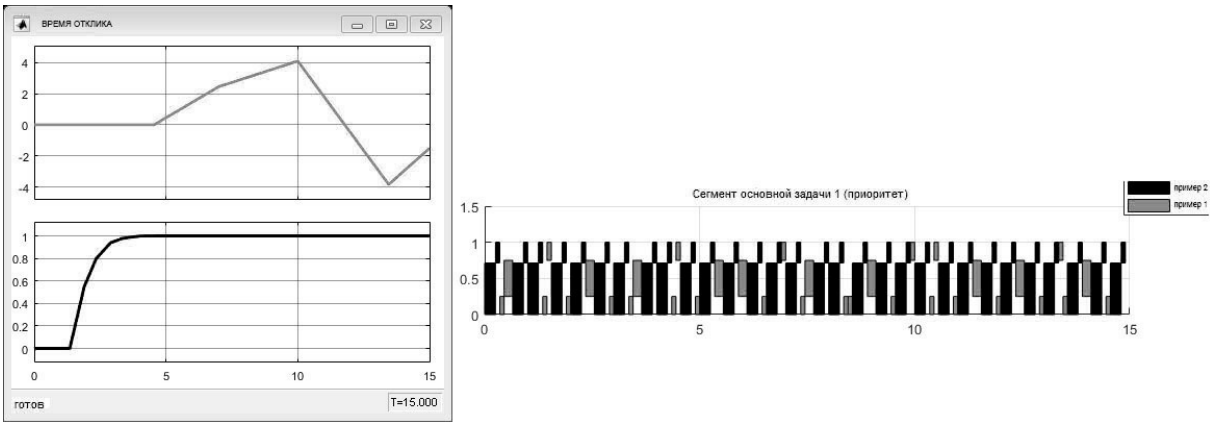


Рис. 3: Последовательность выполнения задач и производительность контроллера (одно базовое, приоритетное планирование)

Временная диаграмма рисунка 6 указывает, что задачи, обработанные одновременно двумя ядрами и имели среднюю и сбалансированную нагрузку использования. Здесь Task2 присвоен Core1 потому что имеет более высокий приоритет и, поэтому, запущен перед Task1.

В рисунке 3, когда только одно ядро доступно, производительность Controller1 (отображенный на низкоприоритетной задаче) ухудшается из-за переполнений задачи. Для примера, были запланированы 10 экземпляров. Первый экземпляр Task1 не завершается через 1,45 сек, потому что его выполнение было вытеснено в

двумя экземплярами первоочередной задачи (Task2). Причиной переполнения является 3 экземпляра Task1, чтобы завершить выполнение между временем 0 и 5. При этом, производительность задачи 2 управления остается неизменной. Это вызвано тем, что планировщик применяет политику на приоритетах, где все мощности отдаются высокоприоритетным задачам.

Если планировщик переключается, чтобы использовать алгоритм Round Robin, то система управления выполняется по-другому (см. рисунок 4). По сравнению с предыдущим случаем, где скорость обработки остается одинаковой и управление Plant1 поддерживается стабильным, за счет ухудшения производительности управления Plant2. Это происходит, потому что алгоритм Round Robin политики равномерно распределяет ресурсы среди всех задачи.

Если добавить ресурс, который должен быть совместно использован задачами взаимоисключающим способом, такими как дескриптор файлов (см. рисунок 5), то, как обозначено временной диаграммой, несмотря на то, что параллельное выполнение можно выполнить двумя ядрами, задачи были обработаны последовательным способом. Только одно ядро было задействовано. Это вызвано тем, что задача должна ожидать требуемый ресурс, прежде чем он сможет начать обработку.

Такая ситуация может быть устранена, добавлением большего количества ресурсов. Таким образом планировщик сконфигурирован, так, чтобы использовать 2 ресурса и каждой задаче позволяется иметь свой ресурс (см. рисунок 6). С каждой задачей, имеющей его собственный ресурс, задачи теперь могут быть обработаны одновременно.

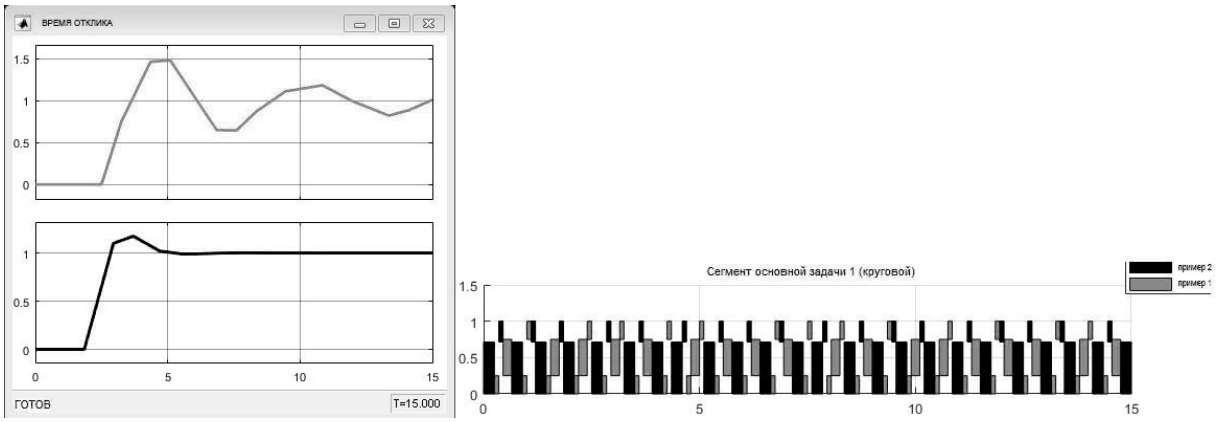


Рис. 4: Последовательность выполнения задач и производительность контроллера (одно ядро, циклическое планирование)

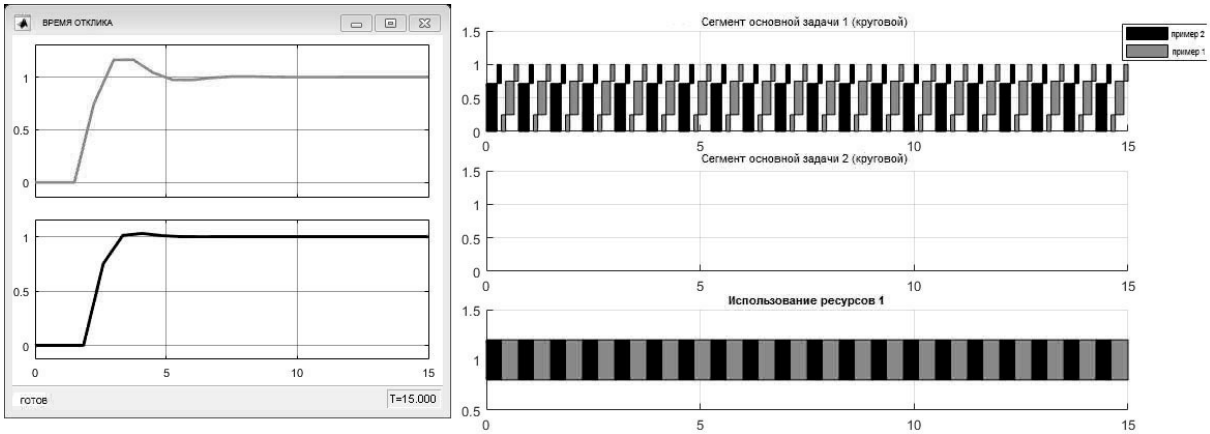


Рис. 5: Последовательность выполнения задач и производительность контроллера (два ядра, задачи совместно используют ресурс, приоритетное планирование)

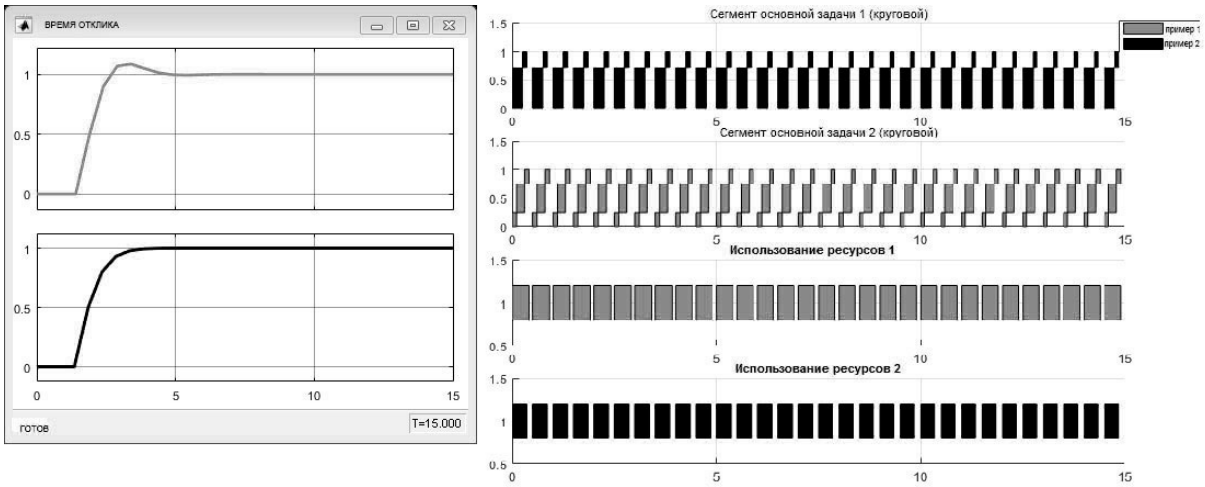


Рис. 6: Последовательность выполнения задач и производительность контроллера (два ядра, без разделения ресурсов, приоритетное планирование)

Заключение

Эта работа описывает использование методологии модельно-ориентированного проектирования для моделирования архитектурных компонентов многоядерных систем управления в реальном времени на основе среды моделирования Mathworks Simulink, включающие в себя планировщик ресурсов для моделирования задач планирования (например, задержка, переполнение ресурсов и другие непредвиденные обстоятельства) для компонентов многоядерных систем управления. Был применен подход к задаче распределения программных задач на ядра многоядерной системы на основе итеративного модельно-ориентированного подхода. Данный подход хорошо подходит для программных встроенных систем реального времени с множеством обрабатывающих узлов и позволяет моделировать с применением собственных реализации известных алгоритмов для распределения ресурсов, при этом показывая приближенную к реальности производительность данных алгоритмов. На нескольких конфигурациях проиллюстрированы подходы к распределению ресурсов с акцентом на два параметра производительности таких систем, а именно, временные показатели и эффективность распределения вычислительной нагрузки по доступным ядрам многоядерной системы.

Список литературы

[1] Simulink MathWorks, Simulink User's Guide. MathWorks, Natick, MA. March, 2016.

[2] Aarenstrup, R. Managing Model-Based Design. 1st edition. CreateSpace Independent Publishing Platform. 2015. — 100 p.

[3] Cremona, F., Morelli, M., and Natale, M.D. TRES: A Modular Representation of Schedulers, Tasks, and Messages to Control Simulations in Simulink // In Proceedings of the 30th Annual ACM Symposium on Applied Computing, ACM Press. 2015. — P. 1940–1947.

[4] Cervin, A., Arzen, K.E. TrueTime // Model-Based Design for Embedded Systems Computational Analysis, Synthesis, & Design Dynamic Systems. 2009. — P. 145–76.

[5] MathWorks, SimEvents User's Guide, MathWorks, Natick, MA, March, 2016.

Айдаров Канат Алхожаевич — ст. преподаватель кафедры информатики механико-математического факультета Казахского Национального университета им. аль-Фараби;
e-mail: kanat.aydarov@kaznu.kz;
Балакаева Гульнар Тултаевна — д.ф.-м.н., профессор кафедры информатики механико-математического факультета Казахского Национального университета им. аль-Фараби;
e-mail: gulnardtsa@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ЭЛЕКТРОДИНАМИКА ЕСТЕСТВЕННОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ И ЕЁ ПРИЛОЖЕНИЯ

В. В. Аксёнов

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 550.37

В статье находят объяснение эффекты в электромагнитном поле, зафиксированном в атмосфере Земли и некоторые эффекты из лабораторной практики, фиксирующие необычное поведение квантовых частиц в поле бесконечно длинного соленоида (эффект Ааронова-Бома), а также эффекты, фиксирующие взрывную неустойчивость плазмы в «бублике» токамака.

Ключевые слова: эффекты в ЭМП Земли, эффекты в экспериментах.

Введение

Обработка авторами [2, 13] результатов измерения на местности электромагнитных полей (ЭМП), наблюденных во время двух международных геофизических годов 1933 и 1957/58 гг. и во время всемирной магнитной съемки 1964/65 гг. и ранее в [1], выявила эффекты, которые не укладываются в стандартные уравнения Максвелла. Эти эффекты противоречат первому уравнению Максвелла $\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j}$, где $\mathbf{H}$ — напряженность магнитного поля, $\mathbf{j}$ — плотность тока. Согласно этому уравнению в области, где нет электрического тока, магнитное поле должно быть потенциальным ($\nabla \times \mathbf{H} = 0$). Однако обработка экспериментальных данных показала результат:

$$\mathbf{j} = 0, \quad \nabla \times \mathbf{H} \neq 0. \tag{1}$$

Чтобы снять противоречие с первым уравнением Максвелла, экспериментальный результат (1) должен быть обоснован теоретически.

Аналогичный по физическому смыслу результат опубликован в [3], и зафиксирован он в экспериментах с короткопериодическими вариациями ЭМП Земли. Д.Н. Четаев, измеряя электрическое поле короткопериодических вариаций, получил следующий эффект в атмосфере Земли [3].

$$j_z = 0, \quad \sigma' \neq 0, \quad E_z \neq 0. \tag{2}$$

При этом напряженность вертикальной к поверхности Земли компоненты электрического поля E_z оказалась очень высокой в связи с малой проводимостью атмосферы $\sigma' \ll 1$. Этот эффект также требует теоретического обоснования.

Физические предпосылки решения выше перечисленных проблем заложены работами [4 стр.96, 5-8, 10, 11, 13]. В этих работах доказано, что в ядре Земли и в ионосфере имеют место тороидальные электрические токи, которые генерируют одновременно тороидальные и полоидальные электромагнитные поля. Математическое доказательство выше изложенного физического факта восходит к следующим уравнениям $\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$, $\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}$. В связи с произвольностью векторного поля $\mathbf{A}$ (для любого поля $\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{A} = 0$) можно ввести в *математику* тороидальное, ортогональное разложение векторного потенциала $\mathbf{A}$ вне источника следующим образом [6]:

$$\mathbf{A} = (Q\mathbf{r}) + \nabla \times (Q\mathbf{r}). \tag{3}$$

Здесь Q — скалярная функция трех или четырех переменных, если включить в функцию Q временную зависимость, $\mathbf{r}$ — радиус вектор, $\mathbf{A}$, $Q \in C^\infty$.

Тороидальное разложение (3) позволяет получить два типа магнитных полей [6, 8].

$$\mathbf{H} = \nabla \times (Q\mathbf{r}) + \nabla \times \nabla \times (Q\mathbf{r}). \tag{4}$$

В (4) $\mathbf{H}_T = \nabla\times(Q\mathbf{r})$ — называется тороидальным магнитным полем, $\mathbf{H}_P = \nabla\times\nabla\times(Q\mathbf{r})$ — полоидальным магнитным полем. Свойства полей, соответствие размерностей, а также основные теоремы Гельмгольца, Гаусса, Шмидта, Кауллинга, обобщенные для этих полей, изложены в [6-8].

Вихри наблюдаемого в атмосфере Земли суммарного магнитного поля порождают магнитные поля:

$$\nabla\times\mathbf{H} = \nabla\times\nabla\times(Q\mathbf{r}) + \nabla\times\nabla\times\nabla\times(Q\mathbf{r}). \tag{5}$$

Из (5) вытекает следующее [7, 8]:

$$\nabla\times\mathbf{H}_T = \mathbf{H}_P, \quad \nabla\times\mathbf{H}_P = \chi\mathbf{H}_T. \tag{6}$$

Здесь $\chi[1/\text{м}] = \sigma\mu\gamma$ при $t = 0$ и $\chi = (i\omega\mu\sigma)^{1/2}$ при $t > 0$. Уравнение (6) задают электродинамику тороидальных токов:

$$\nabla\times\mathbf{H}_P = \chi\mathbf{H}_T = \sigma(\gamma\mu\mathbf{H}_T) = \sigma\mathbf{E}_T = \mathbf{j}_T, \quad \nabla\times\mathbf{H}_T = \mathbf{H}_P, \quad \nabla\cdot\mathbf{H}_{P,T} = 0. \tag{7}$$

В [7] доказано, что тороидальные токи создают одновременно тороидальные и полоидальные электромагнитные поля. Тогда наблюдаемое в атмосфере Земли магнитное поле может состоять из того и другого. В [13] доказано, что это так и есть. Поэтому можно записать:

$$\nabla\times\mathbf{H} = \nabla\times(\mathbf{H}_T + \mathbf{H}_P) = \nabla\times\mathbf{H}_T + \chi\mathbf{H}_T, \quad \nabla\times\mathbf{H} = \sigma\mathbf{E}_T + \nabla\times\mathbf{H}_T. \tag{8}$$

Пусть в атмосфере $\sigma = 0$, тогда:

$$\nabla\times\mathbf{H} = \nabla\times\mathbf{H}_T = \mathbf{H}_P. \tag{9}$$

Соотношение (9) показывает, что вихри суммарного магнитного поля в атмосфере Земли при нулевой удельной проводимости $\sigma = 0$ могут возбудить только полоидальное поле за счет $\nabla\times\mathbf{H}_T = \mathbf{H}_P$. Полоидальному магнитному полю для существования в непроводящей атмосфере электрические токи через атмосферу не нужны. Плотность тока в атмосфере может равняться нулю. При этом суммарное магнитное поле не потенциально ($\nabla\times\mathbf{H} \neq 0$) за счет присутствия в атмосфере всюду не потенциального тороидального магнитного поля $\mathbf{H}_T$ (6). Скорректированные уравнения Максвелла для магнитного поля в атмосфере Земли примут вид:

$$\nabla\times\mathbf{H}_P = \chi\mathbf{H}_T = \mathbf{j}_T, \quad \nabla\times\mathbf{H}_T = \mathbf{H}_P, \quad \nabla\cdot\mathbf{H}_{P,T} = 0. \tag{10}$$

Эффект, выраженный формулой (1), вполне закономерен из-за существования в атмосфере всюду не потенциального, тороидального магнитного поля, создаваемого тороидальным током в источнике, согласно первому уравнению в (10).

Эффект, зафиксированный формулой (2), также поддается физико-математическому обоснованию с точки зрения выше введенных тороидальных и полоидальных электромагнитных полей.

Рассмотрим периодические во времени электромагнитные поля, а именно электрические поля вариаций естественного ЭМП. В [8 стр. 32] приведены формулы для тороидальных и полоидальных электромагнитных полей в атмосфере Земли и граничные условия для них на поверхности Земли. Электрические поля можно вычислить по формулам:

$$\mathbf{E}_T = -i\omega\mu\nabla\times(Q\mathbf{r}), \quad \mathbf{E}_P = \frac{1}{\sigma'}\nabla\nabla\cdot(Q\mathbf{r}). \tag{11}$$

Граничные условия для них имеют вид:

$$(\mathbf{E}_T^1 - \mathbf{E}_T^2)\big|_{r=R_0} = 0, \quad E_{Tn}^1\big|_{r=R_0} = 0, \quad E_{Pn}^1\big|_{r=R_0} = \frac{\sigma}{\sigma'}E_{Pn}^2. \tag{12}$$

Здесь σ — проводимость Земли, σ' — проводимость атмосферы, 1 — атмосфера, 2 — Земля. Формулы (12) показывают, что вертикальная к поверхности Земли тороидальная компонента электрического поля равна нулю по определению в (11). В [5] она названа индукционной частью электрического поля. Тогда как полоидальная потенциальная компонента в атмосфере Земли нулю не равна ($E_{Pn}^1|_{r=R_0} \neq 0$) (12). Более того, если проводимость атмосферы мала $\sigma' \ll \sigma$, то эта компонента может быть значительной по напряженности. Это и показал эксперимент Д.Н. Четаева [3].

Таким образом, эффекты (1) и (2) в электромагнитном поле Земли вполне закономерны. Они обоснованы теоретически с помощью введения в теорию тороидальных и полоидальных электромагнитных полей и экспериментально по данным двух МГГ 1933 и 1957/58 гг., всемирной магнитной съемки 1964/65 гг., а также экспериментом с короткопериодическими колебаниями земного ЭМП [1-3, 5-8, 10, 11, 13].

1 О взаимной генерации и несиловых ЭМП

Результат, полученный в (6), вскрывает основное свойство тороидальных и полоидальных магнитных полей, а именно их взаимную генерацию ввиду $\nabla\times\mathbf{H}_T=\mathbf{H}_P$, $\nabla\times\mathbf{H}_P=\chi\mathbf{H}_T$. Этим свойством обладают постоянные и переменные ЭМП. Это свойство позволяет обосновать результаты некоторых лабораторных экспериментов, а также позволяет оценить, при какой напряженности этих полей возможна их взаимная генерация. Для земных условий взаимная генерация магнитных полей (динамо возбуждение) возможна при напряженности тороидального поля $\mathbf{H}_T>100$ Гс [13].

Еще одним фундаментальным свойством обладает ЭМП Земли, а именно наличием силовой по Лоренцу и не силовой по Моффату составляющими ЭМП в источнике [8, 13]. Силовая составляющая:

$$\mathbf{F}_L=[\sigma\mathbf{E}_T\times\mu\mathbf{H}_P]\neq 0,\quad \text{э.д.с.}=-\mu\int\limits_V\left(\frac{\partial\mathbf{H}_P}{\partial t}\cdot ds\right)\neq 0. \tag{13}$$

Не силовая составляющая:

$$\mathbf{F}_L=[\chi\mathbf{H}_T\times\mu\mathbf{H}_T]=0,\quad \text{э.д.с.}=\int\limits_V(\nabla\times\mathbf{E}_P\cdot ds)=0 \tag{14}$$

Не силовое магнитное поле $\mathbf{H}_T$ обладает замечательным свойством не вызывать скин-эффект при распространении в проводящей среде из-за $\nabla\times\mathbf{H}_T=\mathbf{H}_P$. Поэтому тороидальное магнитное поле проникает в Землю почти в три раза глубже полоидального магнитного поля [14]. Полоидальные магнитные поля в проводящей среде возбуждают электрический ток, магнитное поле которого противоположно первичному полю, поэтому ослабляет его (скин-эффект) [14]. Отсутствие скин-эффекта в тороидальном магнитном поле земных вариаций можно использовать для сверхглубинного зондирования Земли. Для этого его необходимо выделить из наблюдаемого по методике, опубликованной в [13], и использовать разработанные в [13] формулы для зондирования Земли тороидальным магнитным и электрическим полями. Кроме того, в [13, 15] разработано и опробовано двумодальное зондирование Земли полем медленных солнечно-суточных вариаций земного поля. Двумодальное зондирование обладает значительно более устойчивыми результатами, чем обычное зондирование по Тихонову-Каньяру [15].

Не силовое электрическое поле обладает не менее замечательным свойством, сохранять зависимость от тензора напряжений трещиноватой среды очага землетрясений [8]. Это свойство становится краткосрочным предвестником как слабых, так и сильных землетрясений. Теория краткосрочных предвестников, возникающих в физических полях, подробно разработана в [8] и нескольких других публикаций автора. Краткая характеристика этого эффекта состоит в следующем. Во все времена в сейсмологии являлись актуальными работы по выявлению краткосрочных предвестников землетрясений, в том числе проявляющих себя в физических полях [12, 13]. Автором в свое время было предложено решать эту проблему на основе системы уравнений электромагнитоупругости, записанной в упругих параметрах Работнова-Ломакина для трещиноватой среды очага [8]. По существу, эта система уравнений есть система уравнений очага землетрясений, нормированная на объем очага в предположении его фрактального характера. Краткосрочный предвестник выявляется в вертикальном полоидальном электрическом поле, которое непосредственно и линейно связано с тензором напряжений в очаге [8]. Это поле многократно усиливается плохо проводящей атмосферой. Микротрещиноватость в очаге развивается перед землетрясением. Электрические заряды концентрируются на бортах возникающих трещин. Развитие трещиноватости имеет предел в виде концентрации ее в разрыв, что фиксируется в электрическом поле, в том числе в E_z. Максимум в E_z достигается за 2-3 часа до землетрясения (турецкие эксперименты [12]). Организовав мониторинг упомянутой компоненты полоидального электрического поля в сейсмоопасных районах, можно получить краткосрочный предвестник землетрясений любой интенсивности.

2 Об уравнениях Максвелла естественного ЭМП в атмосфере земли

Исходя из выше изложенного, первое уравнение Максвелла для естественного электромагнитного поля Земли необходимо записать, согласно формулам (5) и (6), в следующем виде:

$$\nabla\times\mathbf{H}_P=\chi\mathbf{H}_T=\mathbf{j}_T,\quad \nabla\times\mathbf{H}_T=\mathbf{H}_P. \tag{15}$$

Второе уравнение в названных полях будет таким:

$$\nabla \times \mathbf{E}_T = -\frac{\partial \mathbf{B}_P}{\partial t}. \tag{16}$$

Остальные уравнения остаются практически без изменений.

$$\nabla \cdot (\mathbf{H_{P,T}}, \mathbf{B_{P,T}}) = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E}_T = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E}_P{=}\rho, \quad \mathbf{B}_{P,T} = \mu \mathbf{H}_{P,T}, \quad \mathbf{D}_{P,T} = \varepsilon \mathbf{E}_{P,T}. \tag{17}$$

Уравнения (15) – (17) записаны для постоянного поля и его низкочастотных вариаций, когда в атмосфере нет токов смещения и сторонних токов.

3 О пределах применимости электродинамик

В 1919 г. Лармор в [9] ввел во второе уравнение Максвелла, так называемое, динамо-слагаемое $[\mathbf{V} \times \mathbf{B}]$, где $\mathbf{V}$ — скорость течения проводящей жидкости или плазмы в магнитном поле $\mathbf{B}$.

$$\nabla \times (\mathbf{E} + [\mathbf{V} \times \mathbf{B}]) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \tag{18}$$

Объединяя уравнение (18) с первым стандартным уравнением Максвелла $\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j}$ получим уравнение индукции с динамо-слагаемым:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times [\mathbf{V} \times \mathbf{B}] - \frac{1}{\sigma\mu}\Delta \mathbf{B}. \tag{19}$$

Уравнение (19) имеет три физически различных варианта.

Первый вариант возникает при наличии больших магнитных чисел Рейнольдса $R_m > 10^{17}$. В этом случае можно пренебречь вторым слагаемым в (19).

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times [\mathbf{V} \times \mathbf{B}]. \tag{20}$$

Уравнение (20) есть основное уравнение космической электродинамики, где из-за больших магнитных чисел Рейнольдса, обусловленных большими размерами объектов, основную роль играют динамо-эффекты.

Второй вариант реализуется в лабораторных условиях. В них магнитное число Рейнольдса мало $R_m \leq 1$ из-за малых размеров лабораторных пространств. В лабораториях реализуется второе слагаемое из (19).

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu\sigma}\Delta \mathbf{B}. \tag{21}$$

Поэтому в технической физике практически не занимаются уравнением (20).

Третий вариант реализуется в земной электродинамике. В ней магнитное число Рейнольдса занимает промежуточное положение $R_m \sim 10^4 \div 10^5$ [13]. Поэтому для земных условий характерно уравнение (19). Такое положение обусловлено размерами источников тороидального тока, обтекающего твердое ядро в виде тороида с поперечным размером порядка 3 км [5, 8]. В этом случае в (19) проявляется его неразрешимость, которая заключается в том, что при известном $\mathbf{B}$ нельзя найти $\mathbf{V}$, и наоборот, при известной скорости $\mathbf{V}$ нельзя определить индукцию $\mathbf{B}$. Поэтому в [8] и более ранних работах автора для преодоления неразрешимости (19) предложено к уравнению индукции добавить уравнение Навье-Стокса для несжимаемой жидкости, сделать проверку разрешимости и провести оценки $\mathbf{V}$ и $\mathbf{B}$ по паре уравнений. Система из [8]

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times [\mathbf{V} \times \mathbf{B}] - \dfrac{1}{\mu\sigma}\Delta \mathbf{B}, \\ \rho\left[\dfrac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla)\,\mathbf{V} + 2\,[\omega \times \mathbf{V}]\right] = \nu\rho\Delta \mathbf{V} + \nabla P' + [\mathbf{j} \times \mathbf{B}] + f \end{cases} \tag{22}$$

оказалась разрешимой и по скорости $\mathbf{V}$, и по индукции $\mathbf{B}$. Уравнения (22) нормированы на объем среды. Система (22) исследована в [8] применительно к условиям жидкого ядра Земли. Главный результат состоит в том, что система тороидальный электрический ток (поток со скоростью $\mathbf{V}$) — магнитное поле устойчива в виду:

$$V_\phi = \pm\left[(\frac{P}{\rho} - gh)\frac{H_\phi}{|\mathbf{H}|}\right]^{1/2} \mp 2L\omega_\phi. \tag{23}$$

Результат (23) указывает на устойчивость потока по отношению к воздействию на им вызываемое магнитное поле $|\mathbf{H}|$. Тороидальный ток (в потоке), возбуждается реактивно, вследствие большого магнитного числа Рейнольдса 10^5 и малой «затравки» порядка 10^{-3} Гс. Уравнение (23) решает следующие важные проблемы:

— реактивный разгон электрического тока (рост V_ϕ) «тормозится» магнитным полем $|\mathbf{H}|$,

— конструкция (23) такова, что является устойчивой к воздействию на магнитное поле $|\mathbf{H}|$ или к воздействию на скорость потока V_ϕ. Равномерное вращение Земли (в первом приближении), за которым «следит» скорость V_ϕ выравнивает систему ток–магнитное поле. Поэтому в природе главного геомагнитного поля реализуется устойчивая к переполюсовкам (смене полярности) конструкция [13]. О смене полярности много пишут и говорят геологи, что физически нереально. С одной стороны, тороидальные токи, возбуждающие ЭМП, устойчивы, а с другой — вектор остаточной намагниченности горных пород, по которому выявляют переполюсовки, принимает самопроизвольное направление [16].

Реконструкция и расчет параметров тороидального электрического тока, вызывающего ГГП, приведена в [8, 11]. Тороидальный ток расположен в зоне F жидкого ядра, обтекает твердое ядро. Поперечное сечение тороида с током 3 км. Сила тока в источнике порядка 10^9 ампер, напряженности полей в районе источника $H_P \sim 60$Гс, $H_T \sim 4$Гс. Глубина до источника 4934 км, радиус тора с электрическим током 1437 км.

4 Об эффекте Ааронова-Бома и неустойчивости плазмы в токамаках

Лабораторные эксперименты, такие как эксперимент, приведший к необъяснимому эффекту Ааронова-Бома и неуспешные эксперименты по термоядерному синтезу, известны уже очень давно. Они так и не нашли своего убедительного объяснения. Однако, эти эксперименты могут быть объяснены, если обратить внимание на природу векторного потенциала. Главный вопрос, который обсуждается достаточно длительное время, является ли векторный потенциал из (3) математическим объектом или в нем содержится физическая сущность. Одни считают его произвольным векторным полем, порожденным операторами $\nabla \cdot \nabla \times$. И это так и есть. Фейнман же считает, что в эффекте Ааронова-Бома векторный потенциал проявляет себя как физический объект [8]. В связи с разложением (3) можно констатировать, что векторный потенциал дуален. Второе слагаемое в (3) есть тороидальное магнитное поле, согласно определению (4). Когда тороидальное поле имеет место, как например, в эксперименте Ааронова-Бома [8], то с ним и взаимодействует элементарная частица при включенном токе в соленоиде эксперимента Ааронова-Бома. Когда же тороидального поля нет, то векторный потенциал есть математическая функция, отображенная в первом слагаемом (3).

Лабораторный эксперимент, состоящий в попытке получить термоядерную реакцию в токамаке, терпит неудачи (а их уже более 200) в связи с возникновением неуправляемой неустойчивости плазменного шнура в «бублике» токамака [17]. Это происходит, с нашей точки зрения, в связи с взаимной генерацией сильного тороидального поля внутри токамака (порядка 5 Тл) со слабым полоидальным полем центрального проводника по формулам (6). Взаимная генерация этих полей приводит к нарушению тороидальной симметрии магнитного поля в токамаке. Это приводит к хаотизации частиц плазмы. Они устремляются к стенкам и токамак сгорает.

Таким образом, введение в физическую теорию тороидальных и полоидальных электромагнитных полей с помощью (4) (в физике эти поля известны давно) позволило найти объяснение ряду эффектов, возникающих в естественном электромагнитном поле Земли и некоторых лабораторных экспериментах. Дальнейшие работы в этой области, с нашей точки зрения, могут выявить и другие эффекты, не упомянутые в данной статье.

Список литературы

[1] Van Vleuten Over de dagelijsche variatie van het Ardmagnetisme // Koninklijk Ned. Meteor. Instit.-Utrecht, 1917.— № 102. — P. 25–30.

[2] Бенькова Н.П. Спокойные солнечно-суточные вариации земного магнетизма. М.-Л.: Гидрометеоиздат, 1941. — 79 с.

[3] Четаев Д.Н. О структуре поля короткопериодической геомагнитной вариации и магнитотеллурическом зондировании// Физика Земли, 1970, № 2, с. 52–55.

[4] Трухин В.И. Общая и экологическая геофизика. М.: Физматлит, 2005. 569 с.

[5] Аксенов В.В. Тороидальное поле в атмосфере Земли. Изд-во СО РАН, ИВМиМГ, 1997. 133 с.

[6] Аксенов В.В. О некоторых соленоидальных векторных полях в сферических областях // Дифференциальные уравнения, 2012, Т.48, № 7, с. 1056–1059.

[7] Аксенов В.В. Моделирование тороидальных и полоидальных электромагнитных полей // Математическое моделирование, 2014, т.26, № 5, с. 3–24;

[8] Аксенов В.В. Электродинамика тороидальных электромагнитных полей в приложениях. Новосибирск: Изд. ИВМиМГ ФАНО СО РАН, 2014, 152 с;

[9] J. Larmor How could a rotating body Such as the Sun become a magnet, Rep. Brit. Assoc. Sci., 1919, с. 60–159.

[10] Аксенов В.В. Физико-математическое моделирование главного геомагнитного поля, наблюдаемого мировой сетью геомагнитных станций. Часть 1. // Изв. ВУЗов Геология и разведка, 2012, № 4. С. 61–68.

[11] Аксенов В.В. Об источнике главного геомагнитного поля. Часть 2 // Изв. ВУЗов Геология и разведка, 2012, № 5. С. 54–60.

[12] Ustundag B., Ozerden S. Earthquake prediction using a new monopolar electric field probe // European Seismological Congress (ESC2002). — Genoa, September 2002.

[13] Аксенов В.В. Электромагнитное поле Земли. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2010. 266 с.

[14] Аксенов В.В. О глубинности исследования земной коры переменным электромагнитным полем // Изв. Вузов Сер: Геология и разведка, 2009, № 2. С. 39–41.

[15] Аксенов В.В. Тороидальные электрические токи спокойных солнечно-суточных вариаций, применяемых в глубинной электроразведке // Изв. Вузов Сер: Геология и разведка. 2014, № 2. С. 45–54.

[16] Трухин В.И., Безаева Н.С., Матвеева Т.В., Рошетт П. Физическая и компьютерная модели явления самообращения намагниченности горных пород // Физика Земли, 2006, № 2. — С. 50–63.

[17] Азизов Э.А. Токамаки от А.Д. Сахорова до наших дней (60 лет токамакам). — М.: Успехи физических наук, 2012, Том 182, № 2. — С. 202–215.

Валентин Васильевич Аксёнов — д.ф.-м.н., гл. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: aksenov@omzg.sscc.ru.
Дата поступления — 24 апреля 2017 г.

ЧИСЛЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ В ЗАДАЧЕ ГЕОЭЛЕКТРИКИ ЛИНИЕЙ С ПОТЕРЯМИ

Ю. В. Анищенко, А. Дж. Сатыбаев

Ошский технологический университет имени академика М. М. Адышева, 723503, Кыргызстан

УДК 517.962

Рассмотрена задача геоэлектрики и определена скорость распространения волн. Доказана теорема о сходимости приближенного решения, построенной конечно-разностным методом, к точному решению обратной задачи геоэлектрики и получена оценка сходимости.

Ключевые слова: задача геоэлектрики, обратная задача, линия с потерями, конечно-разностное решение, сходимость, оценка сходимости.

Введение

Многочисленные задачи интерпретации геофизических данных приводятся к задачам определения формы и глубины залегания источника поля (электрического, магнитного, гравитационного, теплового и др.).
Многие задачи прикладных проблем приводятся к задачам геоэлектрики:

- система уравнений Максвелла в случае макроскопической электродинамики;
- при исследовании геоэлектрических и геодинамических строений Земли;
- при исследовании сейсмоэлектрических состояний Земли и т.д.

Таким образом, построение устойчивых вычислительных методов, алгоритмов и компьютерных программ уравнения геоэлектрики является одной из актуальных задач современности [5, 1].
Прямая задача геоэлектрики заключается в нахождении электромагнитного поля, возбуждаемого заданной системой источников в заданной геоэлектрической среде.
Обратная задача электроразведки (геоэлектрики) заключается в определении физических параметров уравнения при задании дополнительной информации о решении задачи на поверхности среды и источников [2].

1 Постановка задачи

Уравнение геоэлектрики описывает электромагнитное поле в изотропных проводящих средах, когда индуктивный ток мал в сравнении с током проводимости. Рассмотрим вектор потенции в проницаемости поля, тогда имеем математическую модель в виде уравнений геоэлектрики:

$$H_{tt}^{''}(z,t) = \frac{\bar{c}^2(z)}{\varepsilon(z)\mu(z)} H_{zz}^{''}(z,t) + \frac{\bar{c}^2(z)}{\varepsilon(z)\mu(z)} \cdot \frac{\mu^{'}(z)}{\mu(z)} H_{z}^{'}(z,t) - \frac{4\pi\lambda(z)}{\varepsilon(z)}[H_{z}^{'}(z,t) + H_{t}^{'}(z,t)],$$

где $H(z,t)$ — напряженность магнитного поля, $\bar{c}(z)$ — скорость распространения волн, $\varepsilon(z), \mu(z)$ — электрическая и магнитная проницаемости, $\lambda(z)$ — электропроводимость. Пусть магнитная проницаемость $\mu(z) = 1$, тогда второе выражение правой части будет равно нулю. Задача

$$H_{tt}^{''}(z,t) = \frac{\bar{c}^2(z)}{\varepsilon(z)} H_{zz}^{''}(z,t) - \frac{4\pi\lambda(z)}{\varepsilon(z)}[H_z(z,t) + H_t(z,t)], \quad z \in R_+, \quad t \in R_+, \tag{1}$$

$$H(z,t)|_{t<0} \equiv 0, H_z^{'}(z,t)|_{z=0} = -\frac{1}{2} r_0 \delta(t), \tag{2}$$

$$H(z,t)|_{z=0} = f(t), \quad t \in [0,T]. \tag{3}$$

Здесь $\delta(t)$ — дельта-функция Дирака, r_0 — некоторое постоянное число. Отметим, что если функция $\lambda(z)$ относительно большая, а функция $\varepsilon(z)$ относительно малая, то получим задачу линию с потерями.

2 Обратная задача

Определить из задачи (1)–(3) функцию $\bar{c}(z)$ — скорость распространения волны при известных функциях $\varepsilon(z), \quad \lambda(z)$, постоянного r_0 и дополнительной информации $f(t)$. Пусть относительно коэффициентов и неизвестной скорости распространения волн выполнено условие:

$$\{\bar{c}(z), \quad \lambda(z), \quad \varepsilon(z)\} \in \wedge_0, \tag{4}$$

где

$$\wedge_0 = \left\{\varepsilon(z) \in C^6(R_+), \quad \varepsilon^{'}(+0) = 0, \quad 0 < M_1 \le \varepsilon(z) \le M_2, \quad \|\varepsilon\|_{C^2} \le M_3\right\},$$

где M_1, M_2, M_3 — положительные постоянные.

Приведение к обратной задаче с данными на характеристиках.

Введем новую переменную x:

$$x = \int_0^z \frac{\sqrt{\varepsilon(\lambda)}}{\bar{c}(\lambda)} d\lambda.$$

Для того, чтобы, замена была невырожденной, пусть выполняется условие:

$$x_z > 0, \quad \lim_{z\to\infty} x(z) = 0.$$

Введем теперь новые функции:

$$c(x(z)) = \bar{c}(z), \quad a(x(z)) = \varepsilon(z), \quad d(x(z)) = \lambda(z), \quad u(x(z),t) = H(z,t).$$

Тогда, продолжая решать все входящие функции в уравнения четным образом по x на $R_- = x \in R, \quad x < 0$, получим

$$\left.\begin{array}{c} u_{tt}(x,t) = u_{xx}(x,t) - \frac{(\sqrt{a(x)})_x^{'}\cdot c(x) - \sqrt{a(x)}\cdot c_x^{'}(x)}{\sqrt{a(x)}\cdot c(x)} u_x - \frac{4\pi d(x)}{a(x)}(u_t + u_x), \quad x \in R, \quad t \in R, \\ u(x,t)|_{t<0} \equiv 0, \quad u_x(x,t)|_{x=0} = -\frac{1}{2}\cdot\frac{c(0)\cdot r_0}{\sqrt{a(0)}}\delta(t), \\ u(x,t)|_{x=0} = f(t), \quad t \in [0,T], \end{array}\right\} \tag{5}$$

где искомой функцией является функция $c(x)$. В силу условия (4) и принципа конечной зависимости области решения гиперболического уравнения от области определения его коэффициентов и от области данных можно ограничиться рассмотрением задачи (5) в области

$$\triangle(T) = \{(x,t) \in R \times R_+, x \in (0, T/2), |x| < t < T - |x|\}.$$

Предоставляя теперь решение прямой задачи (4) в суперпозиции сингулярных и регулярных частей:

$$u(x,t) = \tilde{u}(x,t) + S(x)\Theta(t - |x|), \quad (x,t) \in \triangle(T),$$

где $\tilde{u}(x,t)$ — гладкая непрерывная функция, $\Theta(t-|x|)$ — тета-функция Хевисайда. Проводим следующие вычисления:

$$u(x,t)=\tilde{u}(x,t)+S(x)\theta(t-|x|),$$
$$u_t(x,t)=\tilde{u}_t(x,t)+S(x)\delta(t-|x|),$$
$$u_{tt}(x,t)=\tilde{u}_{tt}(x,t)+S(x)\delta^{'}(t-|x|),$$
$$u^{'}_x(x,t)=\tilde{u}_x(x,t)+S^{'}_x\theta(t-|x|)-S(x)\delta(t-|x|),$$
$$u_{xx}=\tilde{u}_{xx}+S^{''}_{xx}\theta(t-|x|)-2S^{'}_x(x)\delta(t-|x|)+S(x)\delta^{'}(t-|x|),$$

$$\tilde{u}_{tt}+S(x)\delta^{'}(t-|x|)=\tilde{u}_{xx}+S^{''}_{xx}\theta(t-|x|)-2S^{'}_x(x)\delta(t-|x|)+S(x)\delta^{'}(t-|x|)-\left(\frac{c(x)}{\sqrt{a(x)}}\right)\left(\frac{\sqrt{a(x)}}{c(x)}\right)^{'}_x[\tilde{u}_x+$$
$$+S^{'}_x(x)\theta(t-|x|)-S(x)\delta(t-|x|)]-\frac{4\pi d(x)}{a(x)}[\tilde{u}_t(x,t)+S(x)\delta(t-|x|)+\tilde{u}_x+S^{'}_x(x)\theta(t-|x|)-S(x)\delta(t-|x|)].$$

$$\theta(t-|x|):S^{''}_{xx}(x)-\left(\frac{c(x)}{\sqrt{a(x)}}\right)\left(\frac{\sqrt{a(x)}}{c(x)}\right)^{'}_x S^{'}(x)-\frac{4\pi d(x)}{a(x)}S^{'}(x)=0.$$

$$\delta(t-|x|):-2S^{'}_x(x)+\left(\frac{c(x)}{\sqrt{a(x)}}\right)\left(\frac{\sqrt{a(x)}}{c(x)}\right)^{'}_x S(x)=0 \Rightarrow 2\frac{S^{'}(x)}{S(x)}=\left(\frac{c(x)}{\sqrt{a(x)}}\right)\left(\frac{\sqrt{a(x)}}{c(x)}\right)^{'}_x.$$

$$\delta^{'}(t-|x|):\emptyset.$$

Тогда из обратной задачи (5) имеем:

$$\left.\begin{array}{c} u_{tt}(x,t)=u_{xx}(x,t)-2\frac{S^{'}(x)}{S(x)}u_x(x,t)-\frac{4\pi d(x)}{a(x)}(u_t(x,t)+u_x(x,t)), \quad (x,t)\in\triangle(T), \\ u(x,t)|_{t=|x|}=S(x), \quad x\in[0,T/2], \end{array}\right\} \tag{6}$$

$$u(x,t)|_{x=0}=f(t), \quad t\in[0,T]. \tag{7}$$

Таким образом, мы получим регулярную обратную задачу, в которой необходимо определить функцию $S(x)$. Функции $S(x)$ и $c(x)$ связаны следующей задачей

$$2\frac{S^{'}(x)}{S(x)}=\frac{\left(\frac{\sqrt{a(x)}}{c(x)}\right)^{'}_x}{\left(\frac{\sqrt{a(x)}}{c(x)}\right)}, \quad S(0)=\frac{c(0)r_0}{\sqrt{a(0)}}. \tag{8}$$

Введем обозначения:

$$D(x)=2\frac{S^{'}(x)}{S(x)}, \quad G(x)=\frac{1}{S(x)}. \tag{9}$$

Тогда, они соответственно будут удовлетворять следующим интегральным уравнениям:

$$S(x)=-\frac{c(0)r_0}{\sqrt{a(0)}}+\frac{1}{2}\int_0^x D(\lambda)S(\lambda)d\lambda, \quad x\in[0,T/2], \tag{10}$$

$$G(x)=-\frac{\sqrt{a(0)}}{r_0c(0)}-\frac{1}{2}\int_0^x D(\lambda)G(\lambda)d(\lambda), \quad x\in[0,T/2]. \tag{11}$$

Конечно-разностное решение. Решение обратной задачи (6), (7), (9), (10), (11), где искомой функцией является функция $S(x)$, будем искать конечно-разностным методом. Введем сеточную область

$$\triangle_h(T)=\left\{x_i=ih, \quad t_k=kh, \quad h=T/2N, \quad i=\overline{0,N}, \quad ih<kh<T-ih\right\},$$

где h — сеточный шаг по переменным x,t. Используя сеточные обозначения [3], напишем сеточный аналог обратной задачи (6), (7), (9), (10), (11):

$$\left.\begin{array}{c} u_{\bar{t}t}=u_{x\bar{x}}-D_iu_{\underset{x}{0}}-\frac{4\pi d_i}{a_i}(u_{\bar{t}}+u_{\bar{x}}), \quad (x_i,t_k)\in\triangle_h(T), \\ u^i_i=S_i, \quad i=\overline{0,N}, \\ G_i=\frac{1}{f_0}-\frac{h}{2}\sum_{l=1}^{i-1}D_lG_l, \quad i=\overline{1,N}, \\ D_i=2S_{\underset{x}{0}}G_i, \quad i=\overline{2,N}. \end{array}\right\} \tag{12}$$

$$u_0^k = f_k, \quad k = \overline{0, 2N}. \tag{13}$$

Опишем алгоритм решения обратной задачи (12), (13). Полагаем

$$u_0^k = f^k, \quad k = \overline{0, 2N}. \tag{14}$$

Из четности всех функций следует

$$u_2^k = (f^{k+2} + f^{k-2})/2, \quad k = \overline{2, 2N-2}. \tag{15}$$

Тогда можно определить последовательно

$$S_0 = u_0^0, \quad S_{-2} = u_2^2, \quad G_0 = \frac{1}{f^0},$$

$$D_0 = 2G_i S_{\frac{0}{x}}|_{i=0} = \frac{2}{f^0}\frac{S_0 - S_2}{2h} = \frac{2}{f^0}\frac{u_0^0 - u_2^2}{2h}. \tag{16}$$

Определим следующие значения:

$$u_1^k = (f^{k+1} + f^{k-1})/2 - h^2 D_0 \left(\tfrac{u_0^k - u_2^k}{2h}\right) - \tfrac{4\pi d_0}{a_0} h^2 \left[\left(\tfrac{u_0^k - u_0^{k-1}}{h}\right) + \left(\tfrac{u_1^k - u_0^k}{h}\right)\right],$$
$$S_1 = u_1^1, \quad S_{-1} = u_1^1, \quad G_1 = \tfrac{1}{f^0} - \tfrac{h}{2} D_0 G_0, \quad D_1 = 2G_1 \tfrac{S_1 - S_{-1}}{2h},$$

$$G_2 = -\frac{1}{f^0} - \frac{h}{2} D_0 G_0 - \frac{h}{2} D_1 G_1, \quad D_2 = 2G_2 \frac{S_2 - S_0}{2h}, \tag{17}$$

Допустим, построен i-й слой. Покажем, как определяется следующий слой: определим u_{i+1}^k по формуле Даламбера:

$$u_{i+1}^k = (f^{k+1} + f^{k-1})/2 - h^2 \sum_{p=1}^{i} \sum_{\mu=1}^{p} D_\mu \left[\tfrac{u_\mu^{k-i-\mu+2p} - u_{\mu-2}^{k-i-\mu+2p}}{2h}\right] -$$
$$-4\pi h^2 \sum_{p=1}^{i} \sum_{\mu=1}^{p} \left[\tfrac{u_\mu^{k-i-\mu+2p} - u_\mu^{k-i-\mu+2p-1}}{h}\right], \tag{18}$$

а затем определяем

$$S_{i+1} = u_{i+1}^{i+1}, \quad G_{i+1} = \frac{1}{f^0} - \frac{h}{2}\sum_{l=1}^{i} D_l G_l, \quad D_{i+1} = 2G_{i+1}\frac{S_{i+1} - S_{i-1}}{2h}. \tag{19}$$

Таким образом, последовательно определяется неизвестная функция S_i. Показываем теперь, что S_i точное решение обратной задачи сходится к $\bar{S}_i$ — точному решению по методике [4]. Если определены S_i, то по формуле (8) можем определить и неизвестную $_i$. Проинтегрируя (8) и заменив интеграл квадратурной формулой получим:

$$2\ln S_i = \frac{1}{h}\sum_{i=1}^{N}\left[1 - \frac{c_i}{c_{i-1}}\sqrt{\frac{a_{i-1}}{a_i}}\right] h,$$

отсюда

$$c_i = 2c_{i-1}\sqrt{\frac{a_i}{a_{i-1}}}\left[1 - \ln\left(\frac{S_i}{S_{i-1}}\right)\right].$$

Из (18) получим:

$$u_{i+1}^k = \frac{1}{2}[f^{k+i+1} + f^{k-i-1}] - h^2 \sum_{p=1}^{i}\sum_{\mu=1}^{p} B_\mu^{k-i-\mu+2p}, \tag{20}$$

где

$$B_\mu^{k-i-\mu+2p} = \frac{D_\mu}{2h}[u_\mu^{k-i-\mu+2p} - u_{\mu-2}^{k-i-\mu+2p}] - \frac{4\pi d_\mu}{h a_\mu}[u_\mu^{k-i-\mu+2p} - u_\mu^{k-i-\mu+2p-1}].$$

Предполагая в (20) $k = i+1$ получим:

$$S_{i+1} = \frac{1}{2}[f^{2i+2} + f^0] - h^2 \sum_{p=1}^{i}\sum_{\mu=1}^{p} B_\mu^{1-\mu+2p}. \tag{21}$$

Напишем разностный аналог (9)

$$G_{i+1} = 1/S_{i+1} = 1/\left\{\frac{1}{2}[f^{2i+2} + f^0] - h^2 \sum_{p=1}^{i}\sum_{\mu=1}^{p} B_\mu^{1-\mu+2p}\right\} \tag{22}$$

$$D_{i+1} = 2\left[\tfrac{S_{i+1}-S_i}{h}\right] G_{i+1} = \tfrac{2}{h}\left\{[f^{2i+2} - f^{2i+1} + f^0 - f^1] - h^2 \textstyle\sum_{p=1}^{i}\sum_{\mu=1}^{p}[B_\mu^{1-\mu+2p} - B_{\mu-1}^{-\mu+2p}]\right\} \times$$
$$\times\left\{1/[\tfrac{1}{2}(f^{2i+2} + f^0) - h^2 \textstyle\sum_{p=1}^{i}\sum_{\mu=1}^{p} B_\mu^{1-\mu+2p}]\right\}. \tag{23}$$

Из (20) имеем:

$$u_0^k = \frac{1}{2}[f^k + f^{k-2}], \tag{24}$$

$$\frac{S_i - S_{i-1}}{h} = \frac{1}{2h}(f^{2i} - f^{2i-2}) + h\sum_{\mu=1}^{i-1} B_\mu^{2i-\mu-1} + h\sum_{\mu=1}^{i-3} B_\mu^{2i-\mu-1}. \tag{25}$$

Покажем теперь как определяется неизвестная c^i, если определена сеточная функция S^i.

$$\int \tfrac{2S'(x)dx}{S(x)} = \int \tfrac{c(x)}{\sqrt{a(x)}}\left(\tfrac{\sqrt{a(x)}}{c(x)}\right)'_x dx,$$
$$2\ln S(x) = \int \tfrac{c(x)}{\sqrt{a(x)}}\left(\tfrac{\sqrt{a(x)}}{c(x)}\right)'_x dx,$$
$$2\ln S_i = h\textstyle\sum_{i=1}^{N} \tfrac{c_i}{\sqrt{a_i}}\left[\tfrac{\frac{\sqrt{a_i}}{c_i} - \frac{\sqrt{a_{i-1}}}{c_{i-1}}}{h}\right],$$
$$2\ln S_i = \textstyle\sum_{i=1}^{N}\left[1 - \tfrac{c_i}{c_{i-1}}\sqrt{\tfrac{a_{i-1}}{a_i}}\right],$$
$$2\ln S_i = 1 - \tfrac{c_1}{c_0}\sqrt{\tfrac{a_0}{a_1}} \Rightarrow c_1 = [1 - \ln S_1]c_0\sqrt{\tfrac{a_1}{a_0}},$$
$$2\ln S_2 = \underbrace{\left[1 - \frac{c_1}{c_0}\sqrt{\frac{a_0}{a_1}}\right]}_{2\ln S_1} + \left[1 - \tfrac{c_2}{c_1}\sqrt{\tfrac{a_1}{a_2}}\right],$$
$$2[\ln S_2 - \ln S_1] = 2\ln\tfrac{S_2}{S_1} = \left[1 - \tfrac{c_2}{c_1}\sqrt{\tfrac{a_1}{a_2}}\right],$$
$$c_2 = \left[1 - 2\ln\tfrac{S_2}{S_1}\right]c_1\sqrt{\tfrac{a_2}{a_1}},$$
$$2\ln S_3 = \underbrace{\left[1 - \frac{c_1}{c_0}\sqrt{\frac{a_0}{a_1}}\right] + \left[1 - \frac{c_2}{c_1}\sqrt{\frac{a_1}{a_2}}\right]}_{2\ln S_2} + \left[1 - \tfrac{c_3}{c_2}\sqrt{\tfrac{a_2}{a_3}}\right],$$
$$c_3 = \left[1 - 2\ln\tfrac{S_3}{S_2}\right]c_2\sqrt{\tfrac{a_3}{a_2}},$$
$$c_N = \left[1 - 2\ln\tfrac{S_N}{S_{N-1}}\right]c_{N-1}\sqrt{\tfrac{a_N}{a_{N-1}}}.$$

Составим теперь разностный аналог системы обратной задачи (12), (13)

$$\Phi_{i+1}^k = F_{i+1}^k + h\sum_{p=1}^{i} A[\Phi_p^k], \tag{26}$$

где

$$F_{i+1}^k = \begin{pmatrix} f^{k+i+1} + f^{k-i-1} \\ f^{2i+1} + f^0 \\ f^0 \\ \frac{2}{h}(f^{2i} - f^{2i-2})/(f^{2i} - f^0) \\ f^k + f^{k-2} \end{pmatrix}, \Phi_i^k = \begin{pmatrix} u_i^k \\ u_i^i \\ S_i \\ D_i \\ u_0^k \end{pmatrix}, A[\Phi_\rho^k] = \begin{pmatrix} h\sum_{\mu=1}^{p} B_\mu^{k-i-\mu+2p+1} \\ B_\mu^{1-\mu+2p} \\ B_\mu^{1-\mu+2p} \\ h\sum_{\mu=1}^{p} B_\mu^{1-\mu+2p} \end{pmatrix}.$$

Таким образом, мы получили операторное уравнение (26). Такое же операторное уравнение можно получить для уравнения

$$\tilde{\Phi}_{i+1}^k = \tilde{F}_{i+1}^k + h\sum_{p=1}^{i} A[\tilde{\Phi}_p^k] + O(h). \tag{27}$$

Здесь $\tilde{\Phi}^k_{i+1}$ — есть решение обратной задачи (12)–(13) с малой частью $O(h)$. Тогда из (27) отнимая (26) получим:

$$|\Phi^k_{i+1} - \tilde{\Phi}^k_{i+1}| = |F^k_{i+1} - \tilde{F}^k_{i+1}| + h\sum_{p=1}^{i} A|\Phi^k_p - \tilde{\Phi}^k_p| + O(h).$$

Введем обозначения:

$$\triangle_i = \max(\Phi^k_i - \tilde{\Phi}^k_i), \quad \delta_i = \max(F_{i+1} - \tilde{F}^k_{i+1}), \quad k = \overline{i, 2N-i}.$$

Используя дискретный аналог Гронуолла–Беллмана из последнего выражения получим оценку сходимости:

$$\max_{0\le i\le N} |\triangle_i| \le [|\delta_i|_{\mathbb{C}} + O(h)] \exp hA[\exp \triangle_i]. \tag{28}$$

Таким образом, доказана теорема.

Теорема. Пусть дополнительная информация обратной задачи $f(t) \in \mathbb{C}^4 \quad (0,T)$ и пусть решение прямой задачи (12) $u(x,t) \in \mathbb{C}^6 \quad (\triangle(T))$. Пусть также выполняется условие (4), тогда при малом T, S_i — приближенное решение обратной задачи (12)–(13) сходятся к точному решению обратной задачи $\tilde{S}_i$ в классе $\mathbb{C}$ со скоростью порядка $O(h)$ и имеет оценку сходимости (28).

3 Результаты

Разработано конечно-разностное решение обратной задачи геоэлектрики линией с потерями. Показана сходимость этого решения к точному решению и получена оценка сходимости.

Заключение

В работе получены следующие результаты: построено приближенное решение поставленной задачи, доказана теорема сходимости приближенного решения, установлена оценка сходимости, построен алгоритм решения неизвестной скорости распространения волн.

Список литературы

[1] Крылов С. С. Геоэлектрика: поля искусственных источников. СПб.: СПбГУ, 2004, 140 с.

[2] Романов В. Г., Кабанихин С. И. Обратные задачи геоэлектрики. М.: Наука, 1991. — 304 с.

[3] Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. М.: Либроком, 2009, 3–е издание, 384 с.

[4] Сатыбаев А. Дж. Конечно-разностное регуляризованное решение обратных задач гиперболического типа. Ош: ОшОблТипография, 2001. — 143 с.

[5] Светов Б. С. Основы геоэлектрики. М.: Ozon.ru, 2015, 664 с.

Юлия Владимировна Анищенко — аспирантка каф. "Информационные технологии и управление"
Ошский технологический университет имени М. М. Адышева (Кыргызстан);
e-mail: programm85@mail.ru;
Абдуганы Джунусович Сатыбаев — д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой
"Информационные технологии и управление"
Ошский технологический университет имени М. М. Адышева (Кыргызстан);
e-mail: abdu-satybaev@mail.ru.
Дата поступления — 29 мая 2017 г.

ОЦЕНКА ЧИСЛА ОБУСЛОВЛЕННОСТИ БОЛЬШОЙ ПЛОХО ОБУСЛОВЛЕННОЙ МАТРИЦЫ МЕТОДОМ МОНТЕ — КАРЛО

В. С. Антюфеев[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.6

Рассматриваются плохо обусловленные детерминированные (неслучайные) матрицы систем линейных алгебраических уравнений со случайной ошибкой вектора правой части. Исследуется число ν обусловленности матрицы системы. Показано: если случайный вектор ошибки правой части системы и матрица системы удовлетворяют некоторым естественным условиям, величина числа ν может быть значительно уменьшена сравнительно со «стандартной» величиной.

Ключевые слова: плохо обусловленная матрица, число обусловленности, случайный вектор ошибки, функция распределения

Введение

0.1. Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$. Пусть $\Delta\boldsymbol{b}$ и $\Delta\boldsymbol{x}$ — ошибки правой части $\boldsymbol{b}$ и решения $\boldsymbol{x}$, соответственно. Относительные ошибки решения и правой части связаны неравенством

$$\frac{||\Delta\boldsymbol{x}||}{||\boldsymbol{x}||} \le \nu \cdot \frac{||\Delta\boldsymbol{b}||}{||\boldsymbol{b}||}, \tag{1}$$

где число обусловленности $\nu := ||A^{-1}|| \cdot ||A||$ определяет «качество» матрицы A. Его величина может быть использована при определении коэффициента регуляризации системы. Число ν в неравенстве (1) нельзя заменить на меньшее. Однако, в некотором смысле оценка (1) является грубой. Ниже мы уточним смысл этого утверждения и покажем, как можно значительно уменьшить величину ν в оценке.

0.2. Естественно считать, что вектор ошибки $\Delta\boldsymbol{b}$ является случайным. Если компоненты этого вектора взаимно-независимы, естественно также считать, что случайный радиус-вектор $\boldsymbol{s} := \Delta\boldsymbol{b}/|\Delta\boldsymbol{b}|$ его направления является изотропным, то есть случайная точка $\boldsymbol{s}$ распределена равномерно на единичной сфере $S^{n-1} \subset R^n$. Будем считать, что векторы $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{b}$ фиксированы (неслучайные).

В работе предложен новый способ оценки числа обусловленности, соответствующего норме $||\cdot||_2$ с учетом случайности вектора ошибки. Ниже изложены соображения, которые приводят к такой оценке.

0.3. Неравенство (1) эквивалентно неравенству

$$\frac{|\Delta\boldsymbol{x}|}{|\Delta\boldsymbol{b}|} \cdot \frac{|\boldsymbol{b}|}{|\boldsymbol{x}|} \le ||A^{-1}|| \cdot ||A||,$$

которое является произведением неравенств

$$\frac{|\Delta\boldsymbol{x}|}{|\Delta\boldsymbol{b}|} \le ||A^{-1}|| \tag{2}$$

и

$$\frac{|\boldsymbol{b}|}{|\boldsymbol{x}|} \le ||A||.$$

Неравенство (2) относится к случайным векторам $\Delta\boldsymbol{x}, \Delta\boldsymbol{b}$. Перепишем его в эквивалентной форме:

$$|A^{-1}\boldsymbol{s}| \le ||A^{-1}|| \tag{3}$$

0.4. Если матрица A плохо обусловлена, длина радиус-вектора $\{\boldsymbol{e} = A^{-1}\boldsymbol{s}\}$ испытывает значительные вариации. Для иллюстрации рассмотрим двумерный случай. На Рис.1 точки $\boldsymbol{s}_k$ расположены равномерно на единичной окружности S^1, а соответствующие точки $\{\boldsymbol{e}_k = A^{-1}\boldsymbol{s}_k\}$ расположены на эллипсе E. Из рисунка видно, что с большой вероятностью выполняется соотношение

$$|A^{-1}\boldsymbol{s}| \ll \max_{s\in S^1} |A^{-1}\boldsymbol{s}| \equiv ||A^{-1}|| \tag{4}$$

Поэтому от неравенства (4) для неслучайной величины следует перейти к соотношению для распределения случайной величины $|A^{-1}\boldsymbol{s}|$.

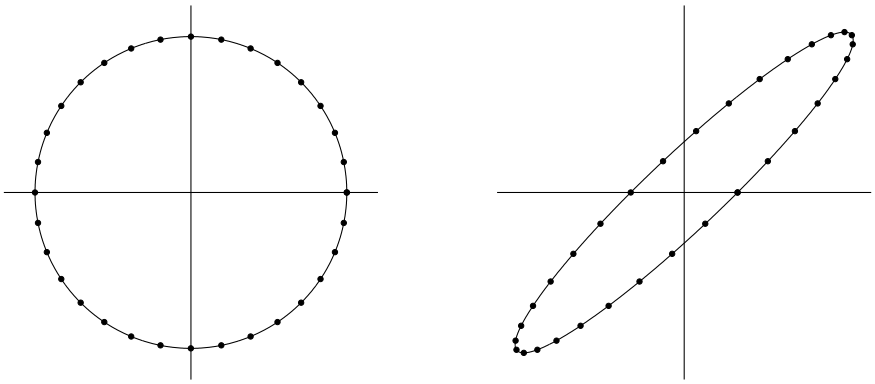


Рис. 1: Расположение точек $\boldsymbol{s}_k \in S^1$ и $\boldsymbol{e}_k \in E$

1 Случайная величина L

1.1. Запишем выражение для длины $\mathbf{L}$ радиус-вектора точки $\boldsymbol{e} = A^{-1}\boldsymbol{s} \in E$:

$$\mathbf{L} := |A^{-1}\boldsymbol{s}| = (A^{-1}\boldsymbol{s}\cdot A^{-1}\boldsymbol{s})^{1/2} = (\boldsymbol{s}\cdot(A^{-1})^* A^{-1}\boldsymbol{s})^{1/2} = ((A^*A)^{-1}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{s})^{1/2}$$

Здесь $\boldsymbol{s}$ случайная точка, поэтому $\mathbf{L}$ — случайная величина.

Пусть $\lambda_1^2 > \ldots > \lambda_n^2 > 0$ — собственные числа матрицы $(A^*A)^{-1}$. Выполняются соотношения [3]:

$$1/||A|| = \lambda_n \le \mathbf{L} = \left(\sum_{k=1}^{n} \lambda_k^2 s_k^2\right)^{1/2} \le \lambda_1 = ||A^{-1}|| \tag{5}$$

1.2. $\boldsymbol{s}$ — случайная точка, поэтому неравенство (3) — оценка случайной величины $|A^{-1}\boldsymbol{s}|$. Оно выполняется с вероятностью 1. Перепишем его в эквивалентной вероятностной форме:

$$P(\mathbf{L} < \lambda_1) = 1 \tag{6}$$

В свою очередь, (6) можно обобщить. Пусть F — функция распределения [1] случайной величины $\mathbf{L}$. Тогда соотношение

$$P(\mathbf{L} < t) = F(t)$$

является обобщением (6).

1.3. Рассмотрим вычисление значений функции F. Пусть μ — мера Лебега на сфере S^{n-1}. Точка $\boldsymbol{s}$ распределена равномерно на S^{n-1} (см. (0.2), поэтому для любого (измеримого) множества $M \subset S^{n-1}$ выполняется соотношение

$$P(\boldsymbol{s} \in M) = \mu(M)/\mu(S^{n-1}). \tag{7}$$

Таким образом,

$$F(t)=\begin{cases}0, & t\le\lambda_n\\ \dfrac{\mu(\mathbf{L}<t)}{\mu(S^{n-1})}, & \lambda_n<t<\lambda_1\\ 1, & t\ge\lambda_1\end{cases} \tag{8}$$

Величину $\mu(\mathbf{L}<t)$ из (8) (и вместе с ней функцию F) не удается найти аналитически. Вместо этого мы вычисляем методом Монте — Карло выборочную функцию распределения величины $\mathbf{L}$. С этой целью моделируем последовательность случайных точек $\boldsymbol{s}_k,\ k=1,2,\dots$ равномерно на S^{n-1}, пользуясь известными формулами. Для каждой точки $\boldsymbol{s}_k$ вычисляем $t_k=|A^{-1}\boldsymbol{s}_k|$. Числа $t_k,\ k=1,2,\dots$ образуют последовательность выборочных значений случайной величины $\mathbf{L}$. Если количество N_s точек $\boldsymbol{s}_k$ достаточно велико, строим приближенную функцию распределения.

Все $t_k,\ k=1,2,\dots,N_s$ удовлетворяют неравенству $\lambda_N\le t_k\le\lambda_1$. Для каждого t_i подсчитаем количество N_i чисел $t_k:\ t_k<t_i$. Функцию F_{N_s} зададим в узлах $t_k,\ k=1,2,\dots,N_s$: $F_{N_s}(t_k)=N_i/N_s$. Кусочно-постоянная аппроксимация функции F_{N_s} между соседними узлами приводит к выборочной функции распределения. Ниже будем рассматривать кусочно-линейную аппроксимацию, чтобы получать удобные графики.

Случайная величина $\mathbf{L}$ и ее функция распределения F определены выбором конечной последовательности $\Lambda(1:n)=\{\lambda_k,k=1,\dots,n\}$, поэтому ниже будем использовать обозначения $\mathbf{L}\equiv\mathbf{L}_{\Lambda(1:n)}$, $F\equiv F_{\Lambda(1:n)}$.

Далее мы рассматриваем лишь числовые последовательности $\Lambda(1:n)$, где n велико, а λ_n/λ_1 мало, не упоминая матрицы, из которых получены.

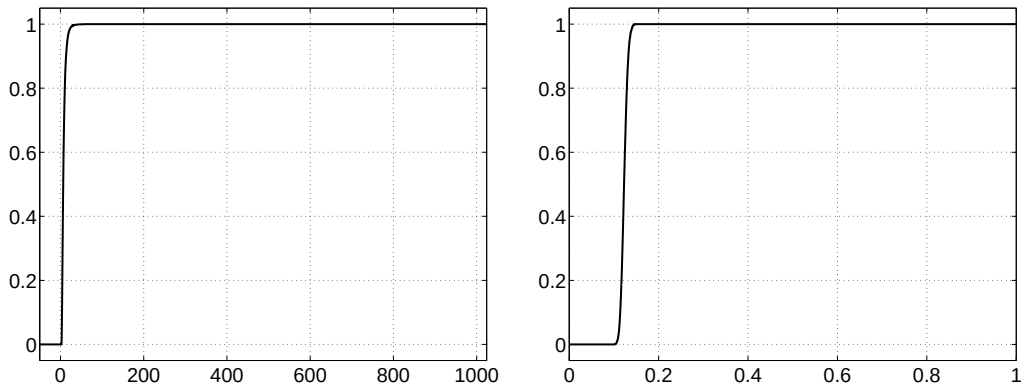


Рис. 2: Слева: $\Lambda^1=\{\lambda_k=2^{10},2^9,\dots,1\}$; справа: $\Lambda^2=\{\lambda_k=1.01^0,1.01^{-1},\dots,1.01^{-300}\}$.

Для двух таких последовательностей Λ^1,Λ^2 приведены графики соответствующих функций $F_{\Lambda^1},F_{\Lambda^2}$. Они похожи на график функции Хевисайда χ. В следующем разделе доказана теорема, объясняющая это.

2 Теорема сходимости

Здесь показано, что для рассматриваемых конечных числовых последовательностей $\Lambda(1:n)$ (см. раздел **1**) $F_{\Lambda(1:n)}\simeq\chi$. Чтобы доказать соответствующее предельное соотношение, образуем вспомогательную «нормированную» последовательность $\bar\Lambda(1:n)=\{\bar\lambda_k=\lambda_k/\lambda_1,k=1,\dots,n\}$. Здесь $\bar\lambda_1=1,\ \bar\lambda_n\simeq0$. Конечную «нормированную» последовательность $\bar\Lambda(1:n)$ можно рассматривать как часть бесконечной последовательности $\{\bar\lambda_k,\ k=1,2,\dots\}$, где $\bar\lambda_k\to0$. Для таких последовательностей выполняется следующая **теорема**

Теорема. *Пусть $\bar\lambda_k\to0$; $\boldsymbol{s}^n=(s_1^n,\dots,s_n^n)$ — случайная точка, распределенная равномерно на единичной сфере S^{n-1}; $\mathbf{L}_{\bar\Lambda(1:n)}=(\bar\lambda_1^2(s_1^n)^2+\dots+\bar\lambda_n^2(s_n^n)^2)^{1/2}$. Тогда для всех $t\in R$*

$$\lim_{n\to\infty}F_{\bar\Lambda(1:n)}(t)=\chi(t), \tag{9}$$

При этом сходимость $F_{\bar\Lambda(1:n)}\to\chi$ при любом $\varepsilon>0$ является равномерной на множестве $R\setminus(0,\varepsilon)$.

Доказательство. Ниже все формулы, содержащие Г-функцию, взяты из [2]. Сначала преобразуем соотношение (9).

2.1. Согласно (5), $0 < \bar{\lambda}_n \le \mathbf{L}_{\bar{\Lambda}(1:n)} \le \bar{\lambda}_1 = 1$. Следовательно, $F_{\bar{\Lambda}(1:n)}(t) \equiv 0$ при $t \in (-\infty, \bar{\lambda}_n]$, и $F_{\bar{\Lambda}(1:n)}(t) \equiv 1$ при $t \in [1, +\infty)$ то есть $F_{\bar{\Lambda}(1:n)}(t) \equiv \chi(t)$ при $t \in (-\infty, 0] \cup [1, +\infty)$. Теперь вместо (9) достаточно доказать, что при $t \in (0, 1)$

$$\lim_{n\to\infty} F_{\bar{\Lambda}(1:n)} = 1, \tag{10}$$

причем сходимость равномерная на множестве $[\varepsilon, 1)$. при любом $\varepsilon \in (0, 1)$.
2.2. Поскольку $F_{\bar{\Lambda}(1:n)}(t) = P(\mathbf{L}_{\bar{\Lambda}(1:n)} < t) = 1 - P(\mathbf{L}_{\bar{\Lambda}(1:n)} \ge t)$, то (10) эквивалентно соотношению

$$P(\mathbf{L}_{\bar{\Lambda}(1:n)} \ge t) \overset{(7)}{=} \frac{\mu(\mathbf{L}_{\bar{\Lambda}(1:n)} \ge t)}{\mu(S^{n-1})} = \frac{\mu\left(\sum\limits_{k=1}^{n} \bar{\lambda}_k^2 (s_k^n)^2 \ge t^2\right)}{\mu(S^{n-1})} \to 0.$$

Итак, вместо (9) будем доказывать эквивалентное соотношение

$$\frac{\mu\left(\sum\limits_{k=1}^{n} \bar{\lambda}_k^2 (s_k^n)^2 \ge t^2\right)}{\mu(S^{n-1})} \to 0 \tag{11}$$

2.3. Докажем вспомогательное неравенство. Пусть функция $f \ge 0$ определена на множестве S, $h > 0$. Тогда

$$\int\limits_S f = \int\limits_{f(\boldsymbol{x})<h} + \int\limits_{f(\boldsymbol{x})\ge h} \ge h \cdot \mu\{f(\boldsymbol{x}) \ge h\}$$

Отсюда

$$\mu\{f(\boldsymbol{x}) \ge h\} \le \frac{1}{h} \cdot \int\limits_S f \tag{12}$$

2.4. Пусть в (12) $f(\boldsymbol{s}) = \sum \bar{\lambda}_k^2 (s_k^n)^2, h = t^2$. Оценим числитель дроби в (11):

$$\mu\left(\sum_{k=1}^{n} \bar{\lambda}_k^2 (s_k^n)^2 \ge t^2\right) \le \frac{1}{t^2} \int\limits_{S^{n-1}} \sum_{k=1}^{n} \bar{\lambda}_k^2 (s_k^n)^2 \, d\boldsymbol{s}^n = \left(\frac{1}{t^2} \sum_{k=1}^{n} \bar{\lambda}_k^2\right) \cdot \int\limits_{S^{n-1}} (s_k^n)^2 \, d\boldsymbol{s}^n \tag{13}$$

Интеграл в правой части (13) не зависит от индекса k, поэтому его можно вынести за знак суммы, считая, что $k : 1 \le k \le n$ является произвольным.
2.5. Вычислим интеграл в правой части (13).

$$\int\limits_{S^{n-1}} (s_k^n)^2 \, d\boldsymbol{s}^n = 2\frac{\pi^{(n-1)/2}}{\Gamma((n-1)/2)} \cdot \int\limits_0^{\pi} \cos^2\varphi \, \sin^{n-2}\varphi \, d\varphi = 2\frac{\pi^{(n-1)/2}}{\Gamma((n-1)/2)} \int\limits_0^{\pi} (\sin^{n-2}\varphi - \sin^n\varphi) \, d\varphi$$

Здесь

$$\int\limits_0^{\pi} \sin^n\varphi \, d\varphi = \sqrt{\pi} \cdot \frac{\Gamma\left(\dfrac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\dfrac{n+2}{2}\right)}$$

Ниже используем два простых утверждения [2]:
2.6.1. если $c_n \to 0$, то

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} c_k \to 0$$

2.6.2. Пусть $\lim\limits_{k\to\infty} a_k = 0$ и $a_k \ge b_k \ge 0$ для всех k. Тогда $\lim\limits_{k\to\infty} b_k = 0$.
2.7. Вернемся к доказательству (11):

$$0 \le \frac{\mu\left(\sum\limits_{k=1}^{n} \bar{\lambda}_k^2 (s_k^n)^2 \ge t^2\right)}{\mu(S^{n-1})} \le \dots$$

учитывая 2.4, 2.5 и формулу $\mu(S^{n-1}) = 2\dfrac{\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}$,

$$\ldots \le \left(\frac{1}{t^2}\sum_{k=1}^{n}\bar{\lambda}_k^2\right)\cdot\frac{2\frac{\pi^{(n-1)/2}}{\Gamma((n-1)/2)}}{2\frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}}\cdot\sqrt{\pi}\cdot\left(\frac{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}-\frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n+2}{2}\right)}\right)=$$

$$=\left(\frac{1}{t^2}\sum_{k=1}^{n}\bar{\lambda}_k^2\right)\cdot\left(1-\frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)\cdot\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)\cdot\Gamma\left(\frac{n+2}{2}\right)}\right)=\ldots$$

используя формулу $\Gamma(x+1)=x\cdot\Gamma(x)$ для $x=(n-1)/2,\ x=n/2$ и учитывая $t\ge\varepsilon$,

$$\ldots=\left(\frac{1}{t^2}\sum_{k=1}^{n}\bar{\lambda}_k^2\right)\cdot\left(1-\frac{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)\cdot\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)\cdot\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)\cdot\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)\cdot\left(\frac{n}{2}\right)}\right)=\frac{1}{t^2}\cdot\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\bar{\lambda}_k^2\le\frac{1}{\varepsilon^2}\left[\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\bar{\lambda}_k\right]$$

Возвращаясь к началу 2.7., имеем:

$$0\le\frac{\mu\left(\sum\limits_{k=1}^{n}\bar{\lambda}_k^2(s_k^n)^2\ge t^2\right)}{\mu(S^{n-1})}\le\frac{1}{\varepsilon^2}\left[\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\bar{\lambda}_k\right],\tag{14}$$

причем, согласно 2.6.1,

$$\frac{1}{\varepsilon^2}\left[\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\bar{\lambda}_k\right]\to 0,$$

а, согласно 2.6.2.,

$$\frac{\mu\left(\sum\limits_{k=1}^{n}\bar{\lambda}_k^2(s_k^n)^2\ge t^2\right)}{\mu(S^{n-1})}\to 0,$$

причем здесь сходимость равномерная, так как мажоранта в (14) не зависит от t. Доказательство теоремы закончено. □

Вернемся к конечной последовательности $\Lambda(1:n)=\{\lambda_k>0,\ k=1,\ldots,n\}$, где n велико, а λ_n/λ_1 мало. Ей соответствует вспомогательная последовательность $\bar{\Lambda}(1:n)$. Поскольку $\mathbf{L}_{\Lambda(1:n)}$ и $\mathbf{L}_{\bar{\Lambda}(1:n)}$ связаны соотношением

$$\mathbf{L}_{\Lambda(1:n)}=(\lambda_1^2(s_1^n)^2+\ldots+\lambda_n^2(s_n^n)^2)^{1/2}=\lambda_1\cdot(\bar{\lambda}_1^2(s_1^n)^2+\ldots+\bar{\lambda}_n^2(s_n^n)^2)^{1/2}=\lambda_1\mathbf{L}_{\bar{\Lambda}(1:n)},$$

то функции $F_{\Lambda(1:n)}$ и $F_{\bar{\Lambda}(1:n)}$ связаны соотношением

$$F_{\Lambda(1:n)}(t)=F_{\bar{\Lambda}(1:n)}(t/\lambda_1)$$

Согласно доказанной теореме, при больших n $F_{\bar{\Lambda}(1:n)}\simeq\chi$ за пределами интервала $(0,\varepsilon)$. Следовательно, $F_{\Lambda(1:n)}\simeq\chi$ за пределами интервала $(0,\lambda_1\varepsilon)$.

В следующем разделе рассмотрим вопросы использования полученных результатов.

3 Замена значения коэффициента ν на ν_ε

Согласно определению и обозначениям, коэффициент обусловленности $\nu(A)$ — это наименьшее число, удовлетворяющее (с вероятностью 1) неравенству $\mathbf{L}\cdot||A||\le\nu$.

Выберем такое малое $\varepsilon>0$, что в расчетах можно пренебречь некоторым случайным событием, если его вероятность меньше ε. Найдем численное решение уравнения $F_{\bar{\Lambda}(1:n)}(t)=1-\varepsilon$ (см. Рис.3 — фрагмент Рис.2). Поскольку $P(\mathbf{L}<L_\varepsilon)\equiv F_{\bar{\Lambda}(1:n)}(L_\varepsilon)=1-\varepsilon$, то $P(\mathbf{L}\ge t_\varepsilon)=1-P(\mathbf{L}<L_\varepsilon)=\varepsilon$. Другими словами, событие $\{\mathbf{L}\ge t_\varepsilon\}$ является настолько маловероятным, что им можно пренебречь в расчетах.

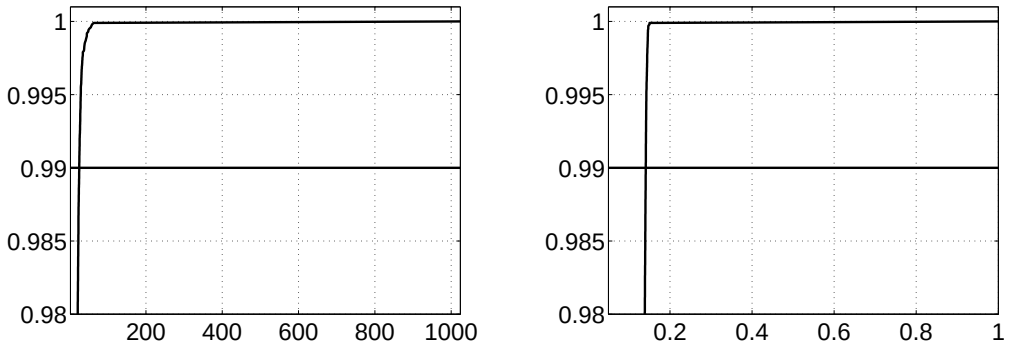


Рис. 3: Графическое решение уравнений $F_{\Lambda^k}(t) = 1 - \varepsilon \quad (k = 1, 2)$.

Пусть $\nu_\varepsilon = L_\varepsilon \cdot ||A||$. Тогда с вероятностью $1 - \varepsilon$ выполняется неравенство

$$\frac{|\Delta \boldsymbol{x}|}{|\Delta \boldsymbol{b}|} \cdot \frac{|\boldsymbol{b}|}{|\boldsymbol{x}|} \equiv \mathbf{L} \cdot ||A|| \leq \nu_\varepsilon.$$

Таким образом, коэффициент ν можно заменить на ν_ε (хотя, см. ниже, $\nu_\varepsilon/\nu \ll 1$).

Отношение значений ν_ε и ν равно $\nu_\varepsilon/\nu = L_\varepsilon||A||/\lambda_1||A|| = L_\varepsilon/\lambda_1$ Вычислим ν_ε/ν для последовательностей Λ^1, Λ^2 (см. раздел **1**, заголовок к рисунку 2). Пусть $\varepsilon = 0.01$.
1) Последовательность Λ^1: $L_\varepsilon = 0.2481,\ \lambda = 1024,\ \nu_\varepsilon/\nu = 0.00024$.
2) Последовательность Λ^2: $L_\varepsilon = 0.1411,\ \lambda = 1,\ \nu_\varepsilon/\nu = 0.14$.
Значения дроби ν_ε/ν в 1), 2) существенно различаются. Видимо, причина заключена в том, что последовательность 1.01^{-k} (Λ^2) сходится к нулю гораздо медленнее, чем 2^{-k} (Λ^1).

Список литературы

[1] Феллер В. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. М.: Мир, 1984.

[2] Фихтенгольц Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. М.: Наука, 1969.

[3] Беллман Р. Введение в теорию матриц. М.: Наука, 1969.

Виктор Степанович Антюфеев — д.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: ant@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

СТРУКТУРИРОВАНИЕ ПАМЯТИ В АНОМАЛЬНЫХ ПРОЦЕССАХ ПЕРЕНОСА

Н. С. Аркашов, В. А. Селезнев

Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск

УДК 519.246

На основании феноменологии потока памяти структурируется память аномального процесса переноса в дискретном времени, для которого нелинейность по времени среднего квадрата формируется за счет пространственно-временных нелокальностей. Приведен статистический тест, который на определенном уровне значимости позволяет вычислить параметры, измеряющие пространственную нелокальность и временную память процесса. Рассматриваемая модель реализует один из способов структурирования памяти в аномальных процессах переноса.

Ключевые слова: аномальный перенос, диффузия, дробное броуновское движение, нелокальность, параметры нелокальности.

1 Модель блуждания

В работе построен случайный процесс, который позволяет моделировать процессы аномальной диффузии таким образом, чтобы учитывать одновременно структуру последействия, определяемую степенной функцией, и корреляционные свойства процесса. Мотивацией для рассмотрения таких процессов является то, что разнообразные методы моделирования аномальной диффузии связаны со следующими свойствами соответствующих процессов: сильная форма зависимости приращений; нестационарность приращений (см., например, [1]–[3]). Известными примерами таких процессов являются модели блуждания в непрерывном времени (общепринятая аббревиатура CTRW), фрактальное (дробное) броуновское движение (см, например, [4]–[6]). На сегодняшний день по всей видимости не существует форматов моделирования, охватывающих все указанные свойства (см., например, [3]).

Классическая модель одномерного блуждания реализуется в виде суммы: $R_n = \sum_{i=1}^{n} X_i,\ n \geq 0,\ X_0 = 0$, где $(X_n)_{n\geq 1}$ — последовательность независимых одинаково распределенных случайных величин с нулевым средним и ненулевой дисперсией σ^2. Дискретную скорость блуждающей точки в моменты времени $n \geq 1$ представим в безразмерном виде $v(n) = R_n - R_{n-1} = X_n$, положим $v(0) = 0$.

Тогда изменение импульса материальной точки единичной массы в единицу времени примет вид:

$$\Delta v(k) = \Delta X_k,\ k \geq 1, \tag{1}$$

где $\Delta X_k = X_k - X_{k-1}$. Кроме того, положим $\Delta X_0 = 0$, соответственно при этом $\Delta v(0) = 0$.

В данной работе мы откажемся от условия независимости и одинаковой распределенности случайных величин $(X_n)_{n\geq 1}$, заменив его на более слабое условие стационарности последовательности $(X_n)_{n\geq 1}$, при этом элементы этой последовательности становятся вообще говоря *зависимыми*.

Последовательность $(\Delta X_k)_{k\geq 0}$ в силу (1) определяет воздействие среды на блуждающую частицу, при этом последовательность $(\Delta X_k)_{k\geq 2}$ является стационарной в силу стационарности последовательности $(X_n)_{n\geq 1}$. Отметим, что отказ от условия независимости случайных величин $(X_n)_{n\geq 1}$ соответствует *нелокальности по времени воздействия среды на частицу*.

При условии стационарности последовательности $(X_n)_{n\geq 1}$ в широких предположениях можно считать, что $(X_n)_{n\geq 1}$ задается следующим образом (см., например, [7], теорема 16.7.1])

$$X_n = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \xi_{n-k} a_k, \tag{2}$$

где $(\xi_k)_{k\in\mathbb{Z}}$ — последовательность некоррелированных случайных величин с нулевыми средними и единичной дисперсией и $(a_k)_{k\in\mathbb{Z}}$ — неслучайная суммируемая с квадратом последовательность действительных чисел.

Мы несколько сузим общность представления (2). В качестве (ξ_k) будем рассматривать последовательность независимых одинаково распределенных величин с нулевыми средними и единичной дисперсией, а в качестве (a_k) возьмем такую последовательность: $a_k = \sigma L_H^{-1/2}((k+1)^{H-1/2} - k^{H-1/2}), k \geq 1$, $a_0 = \sigma L_H^{-1/2}$ и $a_k = 0$, $k < 0$, где H — некоторый параметр, такой что $0 < H < 1$, σ — ненулевая константа и $L_H = \frac{1}{2H} + \int_0^\infty ((1+s)^{H-1/2} - s^{H-1/2})^2\, ds$. В случае $H = 1/2$, получаем, что $a_0 = \sigma$ и $a_k = 0$ при всех $k \neq 0$, в этом случае $X_n = \sigma\xi_n,\ n \geq 1$ — снова обычная последовательность независимых одинаково распределенных величин.

Выбор последовательности (a_k) мотивирован тем, что

$$\langle (\sum_{i=1}^{n} X_i)^2 \rangle \sim \sigma^2 n^{2H},\ n \to +\infty, \tag{3}$$

т. е. с помощью такой последовательности мы можем моделировать весь содержательный спектр степенного изменения второго момента суммы $\sum_{i=1}^n X_i$ (см. [8], [9]).

Для реализации памяти частицы о воздействиях среды воспользуемся феноменологией потока памяти, следуя [10], [11], и заменим представление изменения импульса (1) следующим:

$$\Delta v(k) = \Delta X_k + \sum_{i=1}^{k} \Delta X_{k-i} p(i), \tag{4}$$

где $(p(i))_{i\geq 1}$ — некоторая последовательность неотрицательных чисел. Положим $p(0) = 1$, тогда (4) перепишется в виде

$$\Delta v(k) = \sum_{i=0}^{k} \Delta X_{k-i} p(i), \tag{5}$$

Значение $p(i)$ в (5) будем называть памятью (или информацией) частицы в текущий момент времени k о $(k-i)$-ом моменте времени предыстории, при этом память частицы заканчивается моментом времени 0 (соответствующее значение памяти равно $p(k)$). Принципиально иная ситуация реализуется представлением (2), в этом представлении «память среды» может не ограничиваться некоторым начальным моментом времени.

Последовательность $(p(i))_{i\geq 0}$ представляет память частицы о воздействиях среды и определяет вообще говоря *нелокальность памяти частицы по времени*.

Отметим, что формула (5) реализует «перемешивание» памяти частицы о воздействиях среды и нелокальности по времени воздействия среды.

Для каждого $i \geq 0$ значение $p(i)$ будем искать в виде $\Delta M(i) = M(i+1) - M(i)$, где M — некоторая неубывающая на неотрицательной полуоси функция, при этом для удобства будем считать, что $M(0) = 0$, соответственно при этом $M(1) = 1$. Стало быть, соотношение (5) эквивалентно следующему

$$\Delta v(k) = \sum_{i=0}^{k} \Delta X_{k-i} \Delta M(i). \tag{6}$$

Из (6) выводим

$$v(k) = \sum_{i=0}^{k} X_{k-i} \Delta M(i),\ k = 0, 1, \ldots. \tag{7}$$

Теперь процесс блуждания с памятью реализуется в виде следующего процесса частных сумм

$$R_n = \sum_{i=0}^{n} v(i),\ n = 0, 1, \ldots. \tag{8}$$

Последовательность R_n, построенную по функции M, будем обозначать через $R_n(M)$.

1.1 Формирование параметров памяти

В следующей теореме рассматривается произвольная возрастающая на положительной полуоси, ограниченная функция M, такая что $M(0) = 0$ и $M(1) = 1$.

В дальнейшем будем писать $g(n) \asymp f(n)$, если $g(n) = O(f(n))$ и $f(n) = O(g(n))$ при $n \to \infty$.

Теорема 1. *Пусть* $\lim_{t\to+\infty} M(t) < +\infty$. *Тогда* $\langle R_n^2(M)\rangle \asymp n^{2H}$.

Из теоремы 1 следует, что аномальность блуждания $R_n(M)$, в условиях теоремы 1, определяется нелокальностью воздействия среды на частицу. В этом случае можно говорить о «короткой памяти» частицы.

Через S_α обозначим степенную функцию с показателем α: $S_\alpha(t) = t^\alpha,\ \alpha \geq 0$ (считаем, что $S_0(0) = 0$). В случае $M = S_1$ выполняется равенство $S_1(i+1) - S_1(i) = 1$ для любого $i \geq 0$, т. е. можно говорить о полном сохранении информации о предыстории.

Рассмотрим случай степенной функции $M = S_\alpha$, $0 < \alpha < 1$. Имеет место соотношение $S_\alpha(i+1) - S_\alpha(i) \to 0$ при $i \to +\infty$, чему можно придать смысл «старения информации» о предыстории. В дальнейшем для степенной функции S_α мы будем *рассматривать именно случай* $0 \leq \alpha \leq 1$, что соответствует представлению об уменьшении (возможно, в не строгом смысле) информации о предыстории.

Теорема 2. *При* $n \to +\infty$ *выполняется следующее асимптотическое соотношение*:

$$\langle R_n^2(S_\alpha)\rangle \sim \sigma^2 s_{\alpha,H}^2 n^{2\alpha+2H},$$

где $s_{\alpha,H}^2 = \frac{1}{2}\int_0^1\int_0^1((1-u)^{2H} + (1-v)^{2H} - |u-v|^{2H})dS_\alpha(u)dS_\alpha(v)$.

Отметим, что в теореме 2 параметр H отвечает за нелокальность воздействия среды, а параметр α отвечает за нелокальность памяти частицы.

2 Предельная теорема. Метод тестирования адекватности модели

Через $B_H(t)$ обозначим так называемое дробное броуновское движение (см. [14]), т. е. центрированный гауссовский процесс с ковариационной функцией

$$R(t,s) = \frac{1}{2}\left(t^{2H} + s^{2H} - |t-s|^{2H}\right),\ 0 < H < 1. \tag{9}$$

Легко видеть, что случай $H = 1/2$ соответствует стандартному винеровскому процессу. Стандартный винеровский процесс будем обозначать через $W(t)$.

Отметим известное свойство H-однородности дробного броуновского движения (см. [14]): для любого $\lambda > 0$ конечномерные распределения случайных процессов $\{B_H(\lambda t)\}$ и $\{\lambda^H B_H(t)\}$ совпадают. Кроме того, случайный процесс B_H имеет стационарные приращения.

Определим гауссовский процесс: $Z_{t,H}(M) = \sigma\int_0^t B_H(t-s)dM(s)$. В дальнейшем, там где это не вызывает двусмысленностей, *мы будем опускать индекс* H в обозначении $Z_{t,H}(M)$.

Через $[t]$ в дальнейшем обозначается целая часть числа t.

Теорема 3. *Если* $\langle|\xi_1|^\beta\rangle < \infty$ *для некоторого* $\beta > \max\{2, 1/H\}$. *Тогда при* $n \to \infty$ *выполняется соотношение*:

$$\sup_{t\in[0,1]} \frac{|R_{[nt]}(S_\alpha)|}{n^{H+\alpha}} \xrightarrow{d} \sup_{t\in[0,1]} |Z_t(S_\alpha)|.$$

На теореме 3 основывается возможное тестирование адекватности предложенных моделей блуждания, а также вычисление параметров нелокальности.

Метод тестирования адекватности модели. Пусть для определенности мы проверяем адекватность данных, полученных в результате эксперимента, модели блуждания со степенной памятью. Обозначим полученную в ходе эксперимента выборку через $(R_1, R_2, \ldots, R_n)$. Будем считать, что $\langle R_n\rangle = 0$ для любого n, кроме того, пусть известны оценки k и γ для параметров степенного изменения $\langle R_n^2\rangle$, т. е. $\langle R_n^2\rangle \approx k^2 n^{2\gamma}$. Таким образом, мы располагаем оценкой k для коэффициента $\sigma s_{\alpha,H}$, а также оценкой γ для $\alpha + H$ (см. теорему 2).

На выборке $(R_1, R_2, \ldots, R_n)$ вычислим значение $r = \sup_{t\in[0,1]} \frac{|R_{[nt]}|}{n^\gamma}$. Поскольку нам известна лишь оценка для показателя степенного изменения $\langle R_n^2\rangle$, но не известны слагающие ее параметры α и H, то для поиска этих параметров сформируем массивы значений $\{\alpha_l\}_{l\in\mathcal{M}} \subset (0,1]$ и $\{H_l\}_{l\in\mathcal{M}} \subset (0,1)$, где $\mathcal{M}$ — некоторое множество индексов, такое что $\alpha_l + H_l = \gamma$ для любого $l \in \mathcal{M}$. Выберем уровень значимости ε. Обозначим $\Psi_{\alpha,H}(z) = \mathbf{P}(\sup_{t\in[0,1]} |Z_{t,H}(S_\alpha)| < z)$.

Далее, для каждого $l \in \mathcal{M}$ найдем $t_1(l)$ и $t_2(l)$, такие что

$$\mathbf{P}(\sup_{t\in[0,1]} |Z_{t,H_l}(S_{\alpha_l})| \in [t_1(l), t_2(l)]) = 1 - \varepsilon.$$

Для этого достаточно решить два уравнения:

$$\Psi_{\alpha_l,H_l}(t_1(l)) = \varepsilon/2 \tag{10}$$

и

$$\Psi_{\alpha_l,H_l}(t_2(l)) = 1 - \varepsilon/2. \tag{11}$$

Если найдется пара (α_l, H_l), для которой $r \in [t_1(l), t_2(l)]$, то можно говорить об адекватности на уровне ε проверяемой модели экспериментальным данным.

Заметим, что условие $r \in [t_1(l), t_2(l)]$ эквивалентно неравенству $\varepsilon \le 2\min\{1 - \Psi_{\alpha_l,H_l}(r), \Psi_{\alpha_l,H_l}(r)\}$. Вычислим $\varepsilon^* = 2\max_{l\in\mathcal{M}} \min\{1 - \Psi_{\alpha_l,H_l}(r), \Psi_{\alpha_l,H_l}(r)\}$, при этом пусть на паре (α_{l^*}, H_{l^*}) достигается этот максимум. В итоге, мы получим реально достигнутый уровень значимости ε^*, на котором можно говорить об адекватности модели (см. замечание 1). Кроме того, отметим, что метод тестирования приводит к определению параметров нелокальности, а именно: параметра нелокальности памяти частицы α_{l^*} и параметра нелокальности среды H_{l^*}.

Замечание 1. Численно моделируя достаточно большое количество траекторий гауссовского процесса $Z_{t,H_l}(S_{\alpha_l})$ (см. замечание 2), и, вычисляя на каждой траектории $\sup_{t\in[0,1]} |Z_{t,H_l}(S_{\alpha_l})|$, можно с некоторым приближением найти $\Psi_{\alpha_l,H_l}(r)$ и, стало быть, ε^*.

Замечание 2. Отметим следующее представление $Z_{t,H}(M)$ (см. [15]) в виде стохастического интеграла по винеровскому процессу (это представление можно использовать для численного моделирования $Z_{t,H}(M)$, рассмотрев соответствующую дискретизацию интеграла)

$$Z_{t,H}(M) = \sigma \int_0^t R_H(t,u)dW(u). \tag{12}$$

Ядро интеграла в (12) имеет вид: $R_H(t,u) = \int_0^{t-u} K_H(t-s,u)dM(s)$, где $K_H(t,s) = c_H(t-s)^{H-1/2} + c_H(1/2 - H)\int_s^t (u-s)^{H-3/2}(1-(s/u)^{1/2-H})du$, константа c_H задается таким образом $c_H = \left(\frac{2H\Gamma(3/2-H)}{\Gamma(H+1/2)\Gamma(2-2H)}\right)^{1/2}$, где Γ — гамма-функция Эйлера.

Заключение

В рамках феноменологии потока памяти (см. [10], [11]) построена одномерная модель случайного блуждания, для которой в условии конечности момента второго порядка возможен как суб- так и супердиффузионный режим. Показатель степенного изменения дисперсии построенного процесса блуждания складывается из удвоенного параметра нелокальности воздействия среды и удвоенного параметра памяти частицы. Далее, вычисленные параметры нелокальности можно использовать для прямого стохастического моделирования процесса блуждания с соответствующими параметрами нелокальности и законом изменения дисперсии. Отметим, что, например, структурная ионно-звуковая турбулентность является вероятностным процессом с памятью, поэтому полученную модель можно использовать для моделирования временного ряда плотности турбулентной плазмы.

Список литературы

[1] Аркашов Н. С., Селезнев В. А. Сиб. мат. журнал. 2013. Т. 54, № 6. С. 1216–1236.

[2] Зеленый Л .М., Милованов А. В. УФН. 2004. Т. 174, № 8. С. 809–852.

[3] Заславский Г. М. Гамильтонов хаос и фрактальная динамика: пер. с англ. М.: Регулярная и хаотическая динамика; Ижевск: Ин-т компьютерных исследований, 2010.

[4] Metzler R., Klafter J., Physics Reports. 2000. V. 339, P. 1–77.

[5] Аркашов Н. С., Селезнев В. А. ТВП. 2015. Т. 60, № 2. С. 209–226.

[6] Milovanov A., Lomin A. Phys. Rev. E. 2014. V. 89, iss. 6. P. 062921.

[7] Ибрагимов И. А., Линник Ю. В. Независимые и стационарно связанные величины. М.: Наука, 1965.

[8] Аркашов Н. С., Борисов И. С. Сиб. мат. журнал. 2004. Т.45, № 6. С. 1221–1255.

[9] Konstantopoulos T., Sakhanenko A. Сиб. электронные матем. известия. 2004. Т.1. С. 47–63.

[10] Нигматуллин Р. Р. ТМФ. 1992. Т. 90, № 3. С. 354–368.

[11] Олемской А. И., Флат А. Я. УФН. 1993. Т. 163, № 12. С. 1–50.

[12] Edgar G. Measure, Topology, and Fractal Geometry. New York: Springer, 2008.

[13] Горин Е. А., Кукушкин Б. Н. Алгебра и анализ. 2003. Т. 15, № 3. С. 188–220.

[14] Mandelbrot B., Van Ness J. SIAM Review.1968. V. 10. P. 422–437.

[15] Alós E., Mazet O., Nualart D. Ann. Probab. 2001. Vol. 29, № 2. P. 766–801.

Николай Сергеевич Аркашов — к.ф.-м.н., зав. каф. высшей математики
Новосибирского государственного технического университета;
e-mail: nicky1978@mail.ru;
Селезнев Вадим Александрович — д.ф.-м.н., зав. каф. инженерной математики
Новосибирского государственного технического университета;
e-mail: selvad@ngs.ru.
Дата поступления — 24 мая 2017 г.

АНАЛИЗ РЕШЕНИЙ СТОХАСТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БЮРГЕРСА МЕТОДОМ МОНТЕ — КАРЛО

С. С. Артемьев, А. А. Иванов

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.676

В работе методом Монте — Карло исследуются решения стохастического дифференциального уравнения в частных производных Бюргерса. Расчёт частотных характеристик для решений нелинейных систем СДУ проводится с помощью обобщённого явного метода Эйлера. Приводятся результаты численных экспериментов, проведённых на кластере НКС — 30Т Сибирского Суперкомпьютерного Центра при ИВМиМГ СО РАН с использованием комплекса программ AMIKS

Ключевые слова: стохастические дифференциальные уравнения в частотных производных, обобщённый метод Эйлера, метод Монте — Карло, параллельные алгоритмы, уравнение Бюргерса, частотный портрет решения, частотное временное сечение

Введение

Стохастические дифференциальные уравнения в частных производных (СДУЧП) возникают во многих областях науки и прежде всего в физике. Велико и разнообразие типов используемых уравнений: от линейных уравнений со случайными коэффициентами до нелинейных уравнений со случайными внешними силами. В данной работе с помощью метода Монте—Карло исследуются решения стохастического дифференциального уравнения Бюргерса. Первоначально параболическое уравнение Бюргерса (или одномерное уравнение Навье-Стокса) было предложено в качестве модели для описания движения жидкости [1]. Впоследствии оказалось, что эта модель хорошо описывает динамику нелинейно-диссипативных сред различной физической природы, а также помогает при изучении широкого класса процессов в гидродинамике, нелинейной акустике и физике плазмы [2]. В некоторых частных случаях удаётся получить точные решения нелинейного уравнения Бюргерса, однако в общем виде точное решение не найдено [3]. Если в правую часть уравнения Бюргерса добавить источник, то оно будет описывать динамику физической системы с "подкачкой" энергии, находящуюся во внешнем поле. А если в качестве источника рассматривать случайные внешние или внутренние возмущения, то перейдем от обыкновенного дифференциального уравнения к стохастическому. После дискретизации пространственных производных в СДУЧП получаем систему СДУ с сотнями и тысячами уравнений. Универсальным способом численного анализа решений систем СДУ большой размерности является метод Монте — Карло. Моделирую на компьютере ансамбль независимых между собой траекторий решения СДУ, можно рассчитать любые требуемые статистические и частотные характеристики от решения.

Практика вычислений показала, что моментные функции и даже плотности распределений не дают полной информации о поведении во времени решений нелинейных систем СДУ [4]. Более информативными являются частотные обобщения решений, в которых учитывается вся статистика моделируемого ансамбля траекторий. Для анализа свойств решений в данной работе предложены новые частотные характеристики: частотный портрет решения и частотное временное сечение. Рассчитываемые характеристики решений СДУЧП, прежде всего, должны показать реакцию динамической системы на случайные возмущения, т.е. степень уклонения стохастических решений от детерминированных, а также наличие общих закономерностей в поведении моделируемых траекторий решений СДУЧП, должны дать возможность проведения сравнений при параметрическом анализе решений.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (проект № 17-01-00698 А)

В настоящей работе обсуждаются результаты численного статистического моделирования решений стохастического уравнения Бюргерса , проведенного на кластере НКС — 30Т Сибирского Суперкомпьютерного Центра при ИВМ и МГ СО РАН с помощью комплекса программ AMIKS [5].

1 Стохастическое уравнение Бюргерса и частотные характеристики для анализа решений СДУЧП

Стохастическое уравнение Бюргерса со случайными начально-краевыми условиями запишем в виде

$$\begin{array}{l}\dfrac{\partial u(t,x)}{\partial t} = -\mu u\dfrac{\partial u(t,x)}{\partial x} + \varepsilon^2\dfrac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2} + F(t,x,u), t\in[0,T], x\in[0,1],\\ u(0,x)=\varphi(x),\\ u(t,0)=\psi_0(t),\\ u(t,1)=\psi_1(t).\end{array} \tag{1}$$

Здесь $F(t,x,u)$ — нестационарное случайное поле, характеристики которого будем задавать на уровне дискретной схемы. При $\varepsilon = 0$, $F(t,x,u)\equiv 0$ из уравнение Бюргерса получаем уравнение Хопфа:

$$\frac{\partial u(t,x)}{\partial t} = -\mu u\frac{\partial u(t,x)}{\partial x}. \tag{2}$$

При $\mu = 0$, $F(t,x,u)\equiv 0$ получаем уравнение диффузии:

$$\frac{\partial u(t,x)}{\partial t} = \varepsilon^2\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2}. \tag{3}$$

После дискретизации пространственных производных в уравнении (1) получим, например, следующую систему СДУ Ито с аддитивными винеровскими приращениями

$$du_m(t) = (-\mu u_m(t)\frac{u_{m+1}(t)-u_{m-1}(t)}{2h_x} + \varepsilon^2\frac{u_{m+1}(t)-2u_m(t)+u_{m-1}(t)}{h_x^2} + F_m(t))dt + \sigma_m dw_m(t), \quad m=1,\dots,M. \tag{4}$$

В основе определения СДУ Ито лежит понятие винеровского процесса $w(t)$ со свойствами: гауссовский, с независимыми приращениями, $w(0)=0$, $Ew(t)=0$ для всех $t>0$, $Ew(t)w(s) = min(t,s), t>0, s>0$. В системе СДУ (4) можно в качестве $w_m(t)$ задавать любой процесс с независимыми приращениями с любыми законами распределения. Задача Коши для системы СДУ Ито (4) включает случайные или детерминированные начальные значения и временной интервал интегрирования.

Простейшим численным методом для решения систем СДУ Ито вида:

$$dy(t) = f(t,y)dt + \sigma(t,y)dw(t), y(t_0)=y_0, \tag{5}$$

является обобщенный явный метод Эйлера:

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n,y_n) + \sqrt{h}\sigma(t_n,y_n)\xi_{n+1}. \tag{6}$$

Здесь y_{n+1} — численное решение в узле сетки $t_{n+1}=t_n+h$, $\{\xi_{n+1}\}_0^{N-1}$ — последовательность независимых между собой стандартных гауссовых векторов с независимыми компонентами.

Отметим, что в данной работе не обсуждается вопрос о точности аппроксимации дискретной схемой непрерывной стохастической модели (1), так как в непрерывной модели не определены характеристики случайного поля $F(t,x,u)$. Кроме того, при случайных начальных данных $\varphi(x)$ или наличии некоторых входных шумов с интенсивностями $\sigma_m\neq 0$ вопрос об апроксимации производной $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ выражением $\dfrac{u_{m+1}(t)-2u_m(t)+u_{m-1}(t)}{h_x^2}$ не стоит, так как в этом случае числитель не зависит от величины h_x.

Изучение СДУЧП с помощью метода Монте — Карло является достаточно новым направлением в науке. Для того чтобы анализировать и понимать некоторые свойства решений изучаемых СДУЧП, ставится задача по разработке новых информативных частотных характеристик решения, с помощью которых было бы удобно иллюстрировать и анализировать динамику исследуемых стохастических процессов. После

разработки подобных характеристик проводится их апробация на тестовых задачах. Ниже вводятся новые частотные характеристики для анализа решения СДУЧП методом Монте — Карло, которые должны способствовать более полному пониманию эффектов, присутствующих в изучаемом реальном процессе. При должной постановке дискретной модели, а так же соотношении реального эксперимента модельному — новые характеристики могут способствовать в прогнозировании некоторых событий в будущем для изучаемого физического процесса.

Пусть с помощью метода Монте — Карло получен ансамбль из L траекторий решения системы СДУ (4). По результатам расчетов имеем массив значений $\{U_{mn}^{(e)}\}$, где m — номер компоненты системы СДУ, n — номер временного узла t_n, e — номер смоделированной траектории решения. Далее в двумерной области строится сетка, в каждую ячейку которой попадёт определённое количество значений $\{U_{mn}^{(e)}\}$. Размер и место двумерной сетки выбирается так, чтобы продемонстрировать графически нужный участок поведения решения СДУ.

Введём обозначение ν_{pq} — количество значений $\{U_{mn}^{(e)}\}$, попавших в ячейку S_{pq} сетки. Тогда:

1. ЧПР — частотный портрет решения.
   $\nu_{pq} = \sum\limits_{e,m} \chi_{mn}^{(e)}$, $n = 1, \ldots, N$, $\chi_{mn}^{(e)}$ — индикатор события (принимает значение либо 0, либо 1) $U_{mn}^{(e)} \in S_{pq}$, S_{pq} — ячейки из прямоугольника $[U_1, U_2] \times [T_1, T_2]$. Здесь p — число разбиений отрезка $[U_1, U_2]$, q — число разбиений отрезка $[T_1, T_2]$. Отрезок $[U_1, U_2]$ задаётся произвольным, а отрезок $[T_1, T_2]$ должен целиком лежать в отрезке $[0, T]$. Шаги t_n (шаг интегрирования метода Эйлера) и t_q (шаг сетки по времени) следует синхронизировать: $t_q = zt_n$, z — целое, $z \geq 1$.

2. ЧВС — частотное временное сечение.
   $\nu_{pq} = \sum\limits_{e} \chi_{mn}^{(e)}$, $m = 1, \ldots, M$, n — номер фиксированного узла сетки по времени t_n. Здесь S_{pq} — ячейки из прямоугольника $[U_1, U_2] \times [X_1, X_2]$, отрезок $[X_1, X_2]$ должен целиком лежать в отрезке $[0, 1]$. При расчёте ЧВС для набора значений $n_1 < n_2 < \ldots < n_k$ возможен просмотр в режиме «кино».

2 Численные эксперименты

Численные эксперименты проводились с помощью модифицированной программы AMIKS, в которой добавлены новые расчётные характеристики: ЧПР и ЧВС.

Тест 1.

Численные расчёты системы СДУ (4) проводились на интервале интегрирования $[0, 10]$ с шагом по времени $h_t = 10^{-4}$ и с шагом по пространству $h_x = 10^{-3}$ на интервале $[0, 1]$, при $\varepsilon^2 = 10^{-3}$, $\mu = 0$, $F(t, x, u) \equiv 0$ (СДУ диффузии) с одинаковыми интенсивностями аддитивных шумов $\sigma_m = 1, m = 1, \ldots, 1000$, $\varphi(x) = \sin(\pi x)$, $\psi_0(t) = 0.6 \sin(\pi t)$, $\psi_1(t) = -0.3t$. Уравнение (3) является так же уравнением теплопроводности и показывает распределение температуры в стержне в заданный момент времени. Для расчёта ЧВС на сетке 1500×1000 моделировалось $3 \cdot 10^6$ траекторий на 84 процессорах кластера. Время счёта составило около пяти часов.

На рис. 1 слева приведен график решения детерминированного уравнения дифузии ($\sigma_m = 0$ для всех m) при заданных выше параметрах и начально-краевых условиях при $t = 2$. На графика видно как влияют

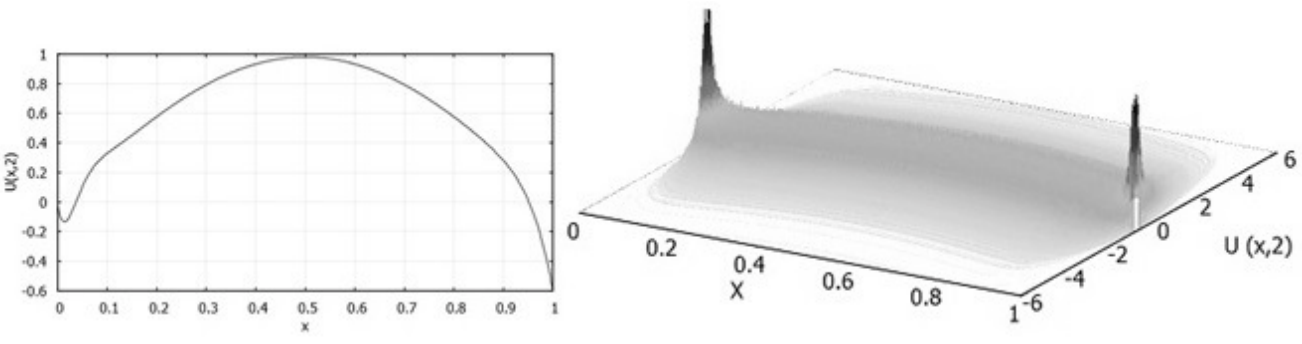


Рис. 1: Детерминированное временное сечение и график ЧВС при $t = 2$

начально-краевые условия на решение детерминированного уравнения. На рис. 1 справа приведен соответствующий график ЧВС, вид сбоку. Из графика ЧВС видно, как происходит распределение значений в фиксированный момент времени n=20000.

В соответствии с определением ЧВС, “вершина холма“ соответствует наиболее часто встречающимся значениям $\{U^{(e)}_{m,20000}\}$. “Ширина холма у основания“ показывает диапазон разброса значений $\{U^{(e)}_{m,20000}\}$ за счёт аддитивного входного шума.

Тест 2.

Численные расчёты системы СДУ (4) аналогичны тесту 1, кроме $\varepsilon^2 = 0$, $\mu = 10^{-3}$ (СДУ Хопфа) с мультипликативными шумами $\sigma_m = 0.5U_m$, $m = 1, \ldots, 1000$.

На рис. 2 слева приведен график детерминированной поверхности решения уравнения Хопфа, на рис. 2 справа график ЧПР (вид сверху). Из графика ЧПР видно, что начиная с момента времени $t = 0.5$ некторые моделируемые траектории начинают рости, и впоследствии они выходят за границы рассматриваемой области. Такой эффект вызван наличием мультипликативного шума, тогда как из графика детерминированной поверхности видно, что роста компонент решения нет.

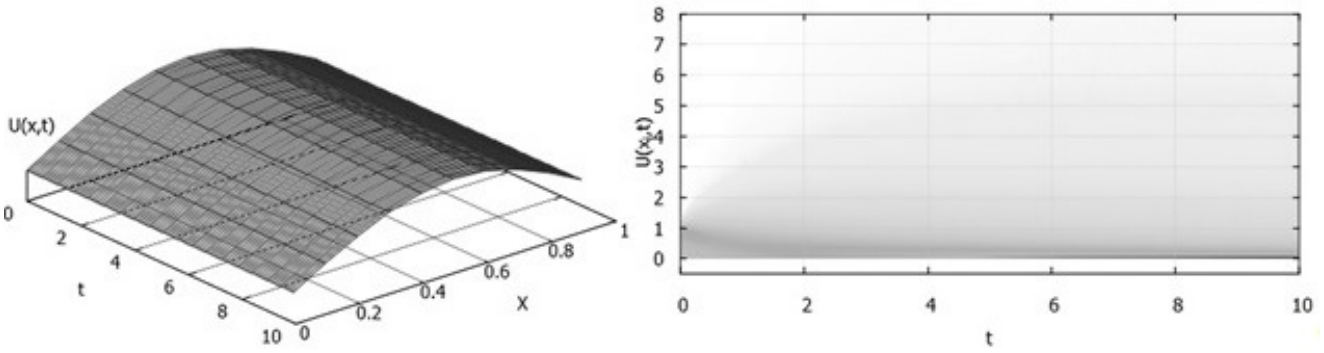


Рис. 2: Детерминированная поверхность решения и график ЧПР

На рис. 3 слева приведен график решения детерминированного уравнения Хопфа при $t = 2$. На рис. 3 справа приведен соответствующий график ЧВС (вид сбоку). Сравнение рис.1 и рис. 3 (детерминированных графиков и графиков ЧВС при $t = 2$) показывает различный характер поведения решения уравнения диффузии и Хопфа. Заметим, что для уравнение Хопфа, в отличие от уравнения диффузии явного влияния начально-краевых условий не видно. Так же заметим, что все значения $U^{(e)}_{m,20000}$ лежат в положительной области, хотя для тех же значений параметров, для уравнения диффузии значения $U^{(e)}_{m,20000}$ лежат как в положительной, так и в отрицательной области.

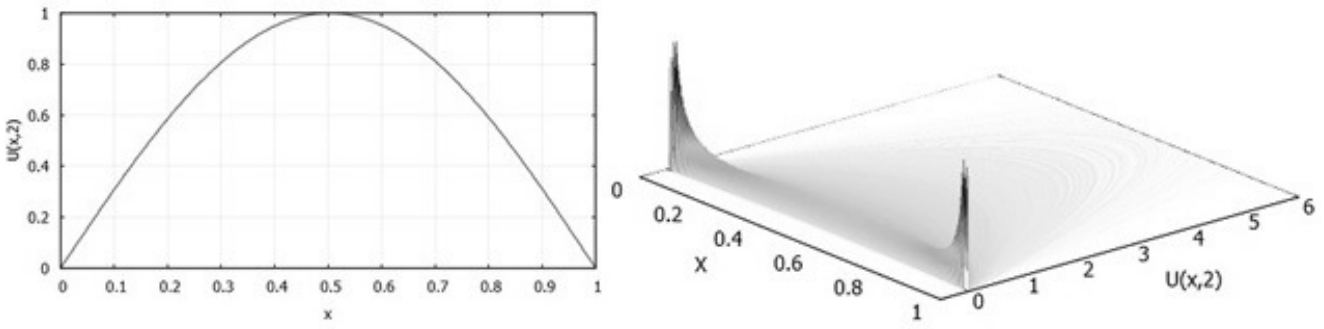


Рис. 3: Детерминированное временное сечение и график ЧВС при $t = 2$

Как известно, квазилинейное уравнение Хопфа описывает разрывные течения или течения с ударными волнами [6]. В какой то момент времени $\dfrac{\partial u(t,x)}{\partial x}$ начинает стремиться к бесконечности. В связи с этим, при увеличении параметра μ, длины интервала интегрирования $[0, T]$ или величины интенсивности муль-

типликативных шумов возникает неограниченный рост некоторых моделируемых траекторий решения, что приводит к остановке счёта.

Тест 3.

Численные расчёты системы СДУ (4) аналогичны тесту 1 кроме $\mu = 1$, $F(t,x) = \frac{\sin(2\pi t)}{10x}$ (СДУ Бюргерса с источником), с интенсивностями аддитивных шумов $\sigma_1 = \sigma_{1000} = 100, \sigma_j = 0, j = 2, \ldots, 999$, $\varphi(x) = \alpha$, где α случайная величина, равномерно распределённая на интервале [0,1] $\psi_0(t) = 0.1$, $\psi_1(t) = -0.1$.

На рис. 4 слева приведён график решения детерминированного уравнения Бюргерса, справа соответствующий ЧПР (вид сбоку), имеющий осциллирующий характер из-за внешнего детерминированного источника $F(t,x)$. Пики на графике ЧПР показывают наиболее частые значения решения в соответствующие моменты времени, и разброс значений, вызванный аддитивным шумом на всём интервале интегрирования.

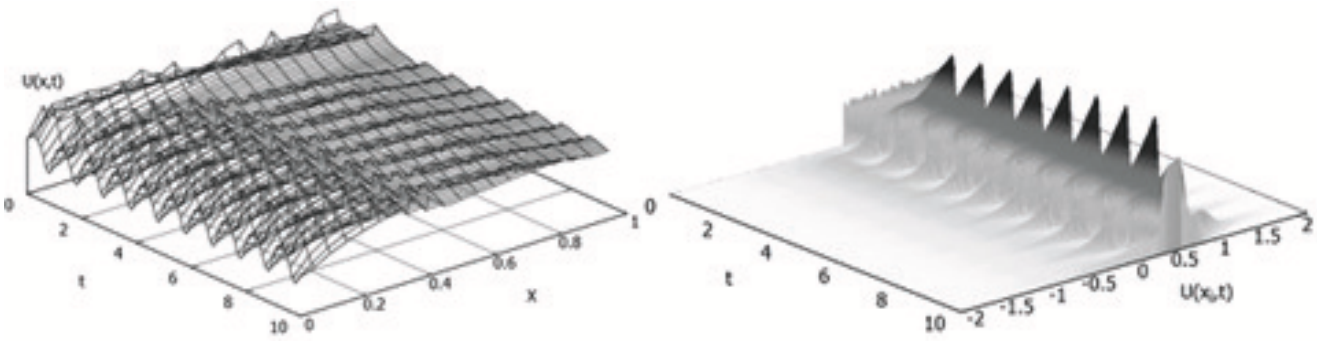


Рис. 4: Детерминированная поверхность решения и график ЧПР

На рис. 5 слева приведён график детерминированного временного сечения слева и график ЧВС (вид сверху) справа при $t = 2$. Сравнение левого и правого графиков дает информацию о степени разброса значений $\{U^{(e)}_{m,20000}\}$, вызванного аддитивными шумами в крайних компонентах системы СДУ (4) (m=1 и m=1000). Отметим, что графики слева и справа визуально схожи, хотя по своей сути рассчитываются совершенно различным образом. Подобный эффект наблюдался при моделировании стохастических колебаний в [4].

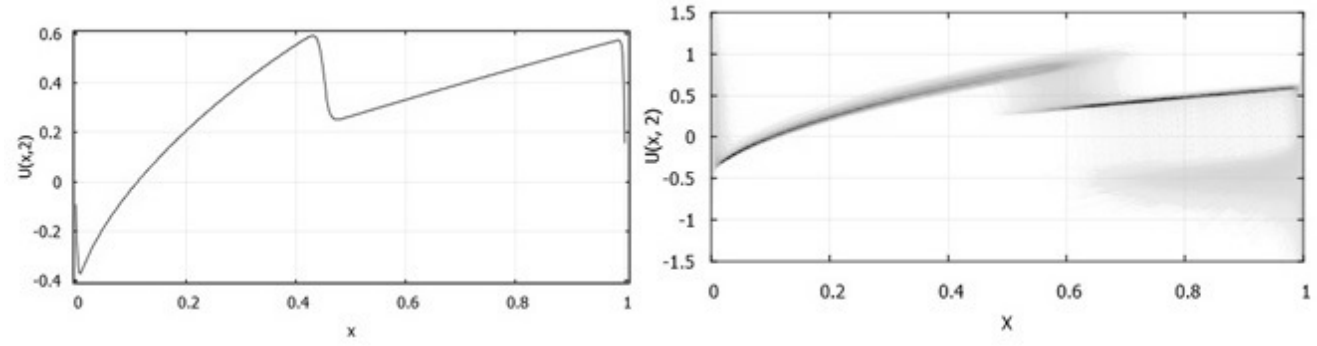


Рис. 5: Детерминированное временное сечение и график ЧВС при $t = 2$

Заключение

В данной работе было исследовано поведение численных решений стохастического уравнения Бюргерса при различных параметрах модели. Для анализа решений были разработаны и построены частотный портрет решения и частотное временное сечение. На приведенных рисунках можно оценить степень влияния внешних и внутренних случайных возмущений на решение детерминированного уравнения Бюргерса. Для расчетов использовался модернизированный комплекс AMIKS, в который были включены частотные характеристики для анализа решений СДУ в частных производных.

Список литературы

[1] Burgers J.M. A mathematical model illustrating the theory of turbulence. Adv. Appl. Mech. 1948. Vol. 1. P. 171 199.

[2] Su C.S., Gardner C.S. Derivation of the Kortweg-de-Vries equation and Burgers equation. J. Math Phys., 1969, Vol.10, p. 536–539

[3] Петровский С.В. Точные решения уравнения Бюргерса с источником. Журнал технической физики, 1999, том 69, вып. 8, с. 10–14

[4] Артемьев С.С.. Марченко М.А., Корнеев В.Д., Якунин М.А., Иванов А.А., Смирнов Д.Д. Анализ стохастических колебаний методом Монте — Карло на суперкомпьютерах. Изд-во СО РАН, Новосибирск, 2016. 293 с.

[5] Марченко М.А., Иванов А.А., Смирнов Д.Д. Комплекс программ AMIKS для численного решения СДУ методом Монте — Карло на суперкомпьютерах. "Вычислительные технологии", 2017г. (в редакции)

[6] Горицкий А.Ю., Кружков С.Н., Чечкин Г.А. Уравнения с частными производными первого порядка. Учебное пособие. — М.: МГУ, 1999.

Артемьев Сергей Семёнович— д.ф.-м.н., профессор Новосибирского Государственного Университета, зав. лабораторией Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: ssa@osmf.sscc.ru;
Иванов Александр Александрович — м.н.с. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: 6ppp@mail.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

МЕТОДЫ ОЦЕНКИ ПРОЕКТОВ И РЫНКОВ СО СВОБОДНЫМ ВЫБОРОМ ОСНОВНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ

С. Н. Астраков[1,2], А. Г. Квашнин[1,2], Ю. С. Отмахова[2,3]

[1] *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[3] *Институт экономики и организации промышленного производства СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.254

Предлагается метод оценки потенциала и инвестиционной привлекательности проектов и рынков со свободным выбором основных показателей по каждому объекту оценки. Метод во многом напоминает теоретико-вероятностный подход: показатели ассоциируются с событиями, а итоговая оценка $M(X)$ является мерой для объединения группы "событий" X. Добавление нового показателя в набор X не может уменьшить значение $M(X)$, как это происходит при определении средних значений. Исследуются другие свойства оценочного критерия и даются рекомендации по его применению в сфере принятия решений, в частности, в области оценки потенциала коммерциализации результатов интеллектуальной деятельности.

Ключевые слова: экспертные оценки, показатели успешной деятельности, алгоритм расчета итоговой оценки.

Введение

Тема исследования связана с созданием системы оценок потенциала и инвестиционной привлекательности проектов, основанной на обработке количественных и качественных показателей. Такие системы широко востребованы в различных областях деятельности, где приходится рассматривать альтернативные варианты развития событий и принимать обоснованные решения. Так, например, мировая потребность в продовольствии растет, однако и конкуренция на мировых рынка весьма высока. В этих условиях возникает проблема оценки существующих и потенциальных рынков и становится актуальным комплексная оценка не только внутренних потребностей, но также и перспективных альтернативных точек роста экспорта.

Каждая сфера деятельности имеет разные особенности при оценке своих достижений. На основе этих оценок должны даваться адекватные рекомендации по управлению проектами, учитывая специфику показателей. Современные критерии успешной деятельности (человека, команды, фирмы и др.) таковы, что они во многом обусловлены профессиональными усилиями в узкоспециализированном направлении. В этом случае отдельные низкие показатели (второстепенные для данного субъекта, но, возможно, важные для других) не должны снижать признание реальных достижений. По этому поводу Альберту Эйнштейну приписывают высказывание: "Нельзя оценивать способности рыбы по умению лазить на деревья".

Большое значение имеют критерии психологической успешности профессиональной деятельности [1, 2], причем как внутренние, так и внешние оценки. Имеется множество теорий и методов обработки количественных данных. Среди них статистические методы и регрессионный анализ, методы эконометрики, ABC анализ, XYZ анализ и другие. Для всех этих методов предполагаются строгие требования для числовых данных, в частности, однородность и независимость показателей. Для многих сложных случаев, требующих оценки и выбора альтернативных решений, соблюдение этих условий невозможно. Например, показатели уровня технологичности производства, качества продукции и объема выпуска продукции связаны между собой и, к тому же, учитываются в разных единицах измерения. В подобных случаях надо предлагать некоторый подход, основанный на «степени» достигнутого относительно заданного уровня или потенциала.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-29-12877 офи-м).

Характеристики показателей могут иметь следующие признаки: (1) количество или качество, (2) интегральные или многокомпонентные оценки, (3) фиксированный или элективный набор показателей, (4) средние или суммарные значения, (5) относительные или абсолютные значения, (6) строгий рейтинговый порядок или распределения по группам, (7) универсальные и специальные системы оценок, (8) субъективность и объективность оценок.

Все это приходится учитывать при создании методики расчетов и при анализе полученных результатов. Пробное тестирование в этом случае является наилучшим способом исправления грубые несоответствий оценочных показателей от реального состояния дел. Стремление к достоверности за счет усложнения системы расчетов не должно быть абсолютным приоритетом, но должно быть отрегулировано принципом разумной достаточности.

Для принятия обоснованных и правильных решений требуются следующие (в общем виде) условия и действия:

(1) — существование задачи и пространства допустимых альтернативных решений,

(2) — наличие достоверных данных количественного или качественного характера,

(3) — проведение предварительной обработки данных, позволяющей сформировать примерно равные по значимости количественные показатели,

(4) — как правило, количественные показатели являются безразмерными, процентными или однотипными,

(5) — количество показателей должно определяться необходимым минимумом (обычно, их число не менее трех и не более десяти),

(6) — проводится расчет итоговой оценки с помощью заданного рационального (обоснованного) алгоритма,

(7) — принимается решение согласно расположению итоговой оценки на «директивной шкале».

Данная схема в том или ином виде применяется в производственно-экономической сфере, социально-политической и в любой другой общечеловеческой деятельности. Чем значимее направление деятельности, тем выше необходимость в разработке адекватных систем оценки ситуации и методов принятия решений.

1 Алгоритм расчета итоговой оценки

Предложенный в данной работе метод во многом напоминает теоретико-вероятностный подход. Каждый показатели ассоциируются с событиями, которые могут быть условно зависящими. Количественные показатели и экспертные оценки удобно задавать в долях от целого или в процентах от некоторого “высокого” стандарта. Итоговая оценка представляет собой аналог вероятностной меры для объединения группы событий. Такой подход позволяет соблюсти важные свойства критерия: симметричность, монотонность и многие др. Заметим, что алгоритм расчета обладает следующим важным свойством: при равных средних показателях итоговая оценка выше тогда, когда больше «дисперсия» или «разброс», т.е. имеется повышенная специализация по одному из направлений деятельности. Кроме того, данный метод позволяет достаточно обоснованно определять предпочтения для проектов разной специализации со свободным выбором показателей. Другими словами, не требуется полного совпадения показателей по разным проектам.

Пусть имеется n показателей $x_1, x_2, \ldots, x_n$, которые используются для сравнения нескольких “проектов”. Для конкретного проекта не обязательно использование всех показателей (неиспользуемые показатели можно полагать равными нулю). Считаем, что все значения $x_i = d_i$ лежат в промежутке $[0, 1]$, что соответствует некоторой доли от целого. Перевод этой величины в проценты наглядно показывает уровень этого отдельного результата. Далее определим алгоритм расчета итоговой оценки и исследуем ее свойства. Рассмотрим набор показателей $X = \{d_1, d_2, \ldots, d_n\}$, $k \le n$. Итоговая оценка может быть получена с помощью последовательных расчетов:

$$M_1 = d_1,$$
$$M_2 = M_1 + d_2 \cdot (1 - M_1),$$
$$\ldots$$
$$M_k = M_{k-1} + d_k \cdot (1 - M_{k-1}).$$

Заметим, что расчетные значения монотонно возрастают. Значение $M(X) = M_k$ можно считать итоговым результатом. При добавлении дополнительного показателя следует провести только один очередной расчет. Докажем важные свойства итоговой оценки.

Утверждение. *Выполняются следующие свойства для оценки M_k:*

(1) $M_k \in [0, 1]$.

(2) Значение M_k не зависит от порядка представленных показателей $d_1, d_2, \ldots, d_n$, т.е. обладает свойством симметрии.

Доказательство свойства (1). Очевидно, что $M_1 = d_1 \in [0, 1]$. Далее,

$$M_2 = M_1 + d_2 \cdot (1 - M_1) = M_1 \cdot (1 - d_2) + d_2 \leq (1 - d_2) + d_2 = 1.$$

Аналогично, по индукции получаем

$$M_k = M_{k-1} + d_k \cdot (1 - M_{k-1}) = M_{k-1} \cdot (1 - d_k) + d_k \leq (1 - d_k) + d_k = 1.$$

Доказательство свойства (2). Покажем, что M_2 обладает свойством симметричности. В самом деле,

$$M_2 = M_1 + d_2 \cdot (1 - M_1) = d_1 + d_2 \cdot (1 - d_1) = d_1 + d_2 - d_1 \cdot d_2.$$

Это соответствует свойству симметрии. Легко показать, что

$$M_3 = d_1 + d_2 + d_3 - d_1 \cdot d_2 - d_1 \cdot d_3 - d_2 \cdot d_3 + d_1 \cdot d_2 \cdot d_3.$$

Следовательно, M_3 тоже является симметричным выражением. Заметим, что все нечетные сочетания имеют знак плюс, а четные сочетания — знак минус. Для всех других оценок, включая M_k, данные закономерности тоже выполняются, а доказательство проводится по индукции. Становится понятно, что предложенный метод расчета соответствует вероятностной мере, так как по формуле "вложения и исключения" вероятность объединения произвольной группы событий определяется аналогичным образом:

$$P(A_1 \cup A_2 \cup \ldots \cup A_n) = \sum_{i=1}^{n} P(A_i) - \sum_{i<j} P(A_i A_j) + \sum_{i<j<m} P(A_i A_j A_m) - \ldots + (-1)^{n-1} P(A_1 A_2 \ldots A_n).$$

В нашем случае итоговая формула будет иметь следующий вид:

$$M(d_1, d_2, \ldots, d_k) = \sum_{i_1 \in I_k^1} d_{i_1} - \sum_{(i_1, i_2) \in I_k^2} d_{i_1} \cdot d_{i_2} + \ldots + (-1)^{k-1} \sum_{(i_1, \ldots, i_k) \in I_k^k} d_{i_1} \cdot \ldots \cdot d_{i_k}, \tag{1}$$

где I_k^m есть множество подмножеств мощности m из $I_k = \{1, 2, \ldots, k\}$. Заметим, что $I_k^1 = I_k$ содержит k элементов, а $I_k^k = \{(1, 2, \ldots, k)\}$ содержит только одно подмножестве. Поэтому первая и последняя суммы имеют простой вид:

$$\sum_{i_1 \in I_k^1} d_{i_1} = d_1 + d_2 + \ldots + d_k, \quad \sum_{(i_1, \ldots, i_k) \in I_k^k} d_{i_1} \cdot \ldots d_{i_k} = d_1 \cdot d_2 \ldots \cdot d_k.$$

Кроме того, формулу можно записать короче в виде двойного суммирования:

$$M(d_1, d_2, \ldots, d_k) = \sum_{m=1}^{k} (-1)^{m-1} \sum_{(i_1, \ldots, i_m) \in I_k^m} d_{i_1} \cdot \ldots \cdot d_{i_m}. \tag{2}$$

Таким образом, свойство (2) о симметричности оценочного критерия полностью доказано.

По сути, формулы (1) и (2) не нужны для вычисления M_k, так как последовательные расчеты проводятся по простому алгоритму, определенному ранее:

(1) Enter $d_1, d_2, \ldots, d_k$;

(2) $M := 0$;

(3) Do $m = 1, 2, \ldots, k$; $M := M + d_m \cdot (1 - M)$;

(4) $M_k := M$;

(5) End

Пример. Выбраны три основных показателя и определены их значения: $d_1 = 0,7$; $d_2 = 0,8$; $d_3 = 0,3$. Требуется вычисление итоговой оценки.

Приведем расчеты:

$M_1 = d_1 = 0,7$;

$M_2 = M_1 + d_2 \cdot (1 - M_1) = 0,7 + 0,8 \cdot (1 - 0,7) = 0,94$;

$M_3 = M_2 + d_3 \cdot (1 - M_2) = 0,94 + 0,3 \cdot (1 - 0,94) = 0,958$ $(95,8\%)$.

Сравним несколько наборов показателей для разных условных оценочных объектов и отметим важные свойства предложенного критерия. Для этого рассмотрим пять вариантов с четырьмя возможными показателями. Пятый дополнительный показатель определяет среднее значение. Представим результаты расчетов в виде следующей таблице:

№	x_1	x_2	x_3	x_4	$\bar{x} \vee \bar{x}^*$	$M(X)$
1	0,5	0,5	0,5	–	$0,5 \vee 0,375$	0,875
2	0,4	0,5	0,6	–	$0,5 \vee 0,375$	0,88
3	0,3	0,4	0,8	–	$0,5 \vee 0,375$	0,916
4	0,3	0,4	0,8	0,1	$0,4 \vee 0,4$	0,9244
5	0,3	0,4	0,8 + 0,1	–	$0,533 \vee 0,4$	0,958

Проанализируем расчетные данные. Первые три варианта имеют одинаковые значения средних величин. Так как четвертый показатель у них отсутствует, то среднее значение можно вычислить двумя способами, причем во втором случае (когда усреднение проводится по четырем значениям) оно существенно меньше. Покажем рассчеты итоговых оценок:

1) $M_1 = 0,5$, $M_2 = 0,5 + 0,5 \cdot 0,5 = 0,75$, $M(X) = M_3 = 0,75 + 0,5 \cdot 0,25 = 0,875$;

2) $M_1 = 0,4$, $M_2 = 0,4 + 0,5 \cdot 0,6 = 0,7$, $M(X) = M_3 = 0,7 + 0,6 \cdot 0,3 = 0,88$;

3) $M_1 = 0,3$, $M_2 = 0,3 + 0,4 \cdot 0,7 = 0,58$, $M(X) = M_3 = 0,58 + 0,8 \cdot 0,42 = 0,916$.

Так как четвертый вариант получается из третьего варианта только добавлением четвертого показателя, то по свойству расчетного алгоритма имеем

4) $M(X) = M_4 = M_3 + d_4 \cdot (1 - M_3) = 0,916 + 0,1 \cdot 0,084 = 0,9244$.

Аналогично вычисляется пятый вариант через третий:

5) $M(X) = M_3 = M_2 + d_3 \cdot (1 - M_2) = 0,58 + 0,9 \cdot 0,42 = 0,958$.

Итоговая оценка по трем первым вариантам (при одинаковых средних значениях) больше у тех, у которых выше "специализация" — третий показатель. Заметим, что четвертый вариант справедливо имеет выше итоговое значение по сравнению с третьим вариантом за счет небольшого дополнительного четвертого показателя. Переходя от четвертого варианта к пятому, "перебросив" значение 0,1 с четвертого показателя на третий, мы получаем наилучший вариант. Это тоже справедливо, так как улучшать рекордные показатели гораздо труднее, чем поднимать на эту же величину не очень высокие результаты.

2 Оценка экспортных возможностей страны на мировой рынке продовольствия с использованием количественных показателей

Перспективы развития экспортных поставок сельскохозяйственного сектора России зависят от способности страны выйти на международные продовольственные рынки и сформировать на них сильное предложение. При этом оценка эффективности и реализуемости научно-технических решений и технологий в продовольственном секторе является критически важным элементом при планировании государственных расходов на их поддержку отечественных производителей, осуществляющих поставки на экспорт. Уровень развития продовольственных технологий является важным фактором для выявления новых точек роста экспортного потенциала продовольствия. Таким образом, метод оценки успешности продовольственных товаров, с точки

зрения вывода на мировой рынок и соответствующая интерпретация результатов расчетов, может помочь определить новые направления развития экспорта страны.

Для выявления успешной группы продуктов для вывода их на мировой рынок необходимо рассмотреть следующие важные показатели: (1) возможности внутреннего производства, (2) уровень технологического развития, (3) мировую потребность в данном товаре или группе товаров и (4) оценку перспективности их реализации. Все эти составляющие (как в целом, так и в отдельности) способны вывести рассматриваемый продукт в разряд приоритетных. Предложенная выше методика оценки показателей идеологически соответствует нашим целям и вполне допускает разностороннее описание количественных характеристик. В процессе обсуждения специфики области исследования для оценки перспективности конкретного продукта (группы продуктов) в целом были предложены следующие показатели:

1) уровень развития технологии производства продукта (УТ),

2) степень потребности в продукте на мировом рынке (СП),

3) уровень производства продукта внутри страны относительно потенциала (УП),

4) перспективы экспортных возможностей (ПЭ).

Итоговая оценка проводится с помощью электронных таблиц Excel следующего типа.

Таблица 1: Программированный расчет итоговой оценки с помощью пакета Excel

№	Товар	УТ	СП	УП	ПЭ	$M(X)$
1	Крахмал касавы (Таиланд)	0,85	0,8	0,8		0,9940
2	Зерно (Россия)	0,4	0,8	0,7	0,5	0,9820
3	xxx	0,22	0,31	0,18	0,22	0,655767
4	xxx	0,37	0,28	0,28	0,27	0,761588
5	xxx	0,53	0,19	0,3	0,33	0,821452
6	xxx	0,29	0,44	0,26	0,32	0,799928
7	xxx	0,43	0,31	0,38	0,49	0,875639
8	xxx	0,24	0,47	0,36		0,742208
9	xxx	0,47	0,36		0,24	0,742208

При расчетах используется рассмотренный ранее алгоритм со свободным выбором показателей. Отсутствие некоторых показателей (см. таблицу 1) может быть вызвано их недостоверностью или практически нулевым значением. Для определения численных значений этих показателей предлагаются специальные рекомендации, основанные на опыте экспериментального тестирования. Заметим, что в первых двух строках таблицы приведены реальные показатели по двум высоко значимым продуктам мирового рынка. В качестве первого примера экспортного товара рассмотрим тропическое сырье — высококачественный крахмал кассавы, произведенный в Таиланде. Авторами были получены экспертные оценки относительно объемов и технологий производства данного товара [3]. В качестве второго примера потенциального экспортного товара рассмотрим отечественную продовольственную пшеницу. Предложенные экспертные оценки были получены на основе анализа данных производства и потребления продовольственной пшеницы [4].

3 Оценка инвестиционной привлекательности проектов коммерциализации результатов интеллектуальной деятельности

В результате изобретательской, научно-исследовательской, инновационной деятельности в мире непрерывно создается огромное количество результатов интеллектуальной деятельности (РИД) в виде изобретений, новых знаний в различных областях науки и техники, инновационных идей. При этом на рынках] всегда значительно меньше ресурсов и времени для реализации проектов, чем новых знаний и проектных предложений по созданию на основе этих знаний новых технологий, продуктов и услуг. Основная проблема, вытекающая из опережающего развития отрасли получения новых знаний, состоит в том, что «... существует гораздо

больше новых идей и инновационных проектов, чем ресурсов, необходимых для их коммерциализации». По выражению Питера Расмуссена, управляющего проектами Данске Банка, «мы тонем в информации» [5]. Необходимы большие траты временных и материальных ресурсов не только на коммерциализацию технологий, но прежде всего на анализ больших массивов информации о новых знаниях, разработках, проектных возможностях.

С лавинным ростом информационных потоков возникает большое разнообразие методов обработки информации и выделения тех данных, на основе которых можно сделать надежные обоснованные заключениях о коммерческих перспективах. Это справедливо и для методов оценки перспектив коммерциализации инновационных технологий, основанных на результатах НИОКР. На первом этапе возникает необходимость предварительной оценки потенциала коммерциализации результатов НИОКР. Далее выбираются методы, которые наиболее полно отвечают выбранным стратегиям [6]. Популярными подходами оценки перспектив инвестиционной привлекательности инновационных проектов являются оценка уровня технологической готовности — Technology Readiness Level [7], методика Quick Look [8], разработанная в Техасском университете для раннего выявления коммерческого интереса к технологической идее, изобретению или определенному направлению научных исследований и многие другие. В связи с этим, нами проведено сравнительное тестирование различных методов оценки проектов с учетом наших критериев и алгоритмов. Результаты показали положительную корреляцию оценок и другие интересные закономерности

Заключение

Количественный критерий успешности результата или процесса всегда представляет собой содержательную, но недостаточно развернутую оценку. Любая такая оценка определяет приближенную картину происходящего. В такой ситуации вполне допустимы ошибочные оценки, в том числе по причине недостоверности показателей. Это, в свою очередь, ведет к принятию не вполне правильных решений. Предлагаемый нами метод дает определенную гарантию достоверности оценки, которая основана на следующих принципах:

1) Значения исходных показателей определяются с учетом вклада (доли процента) в итоговый результат.

2) Имеется возможность соизмерять значения показателей с современными мерками, ориентируясь на “рекордные” значения в рассматриваемой сфере деятельности и учитывая уровень проекта.

3) Расчетный алгоритм существенно уменьшает возможность повторного учета совместной доли успешности для полного набора показателей.

Заметим, что алгоритм расчета однозначно определяет итоговую оценку по исходным показателям. Поэтому эффективность метода в большей степени зависит от критериев определения значений исходных показателей (доли вклада в успех). Существенную пользу в этом направлении приносит экспериментальное тестирование настоящих и прошлых “сценариев”, а также корректировка “чуствительности” показателей при определении рейтинговых расччетов. В настоящее время мы активно используем метод в исследовании современного продовольственного рынка и в сфере оценки привлекательности проектов коммерцелизации результатов интеллектуальной деятельности.

Список литературы

[1] Родина О. Н. О понятии «успешность трудовой деятельности» // Вестник Московского университета. 1996. Сер. 14: Психология. № 3, С. 60–67.

[2] Хаммер Я. С. Профессиональный успех и его детерминанты // Вопросы психологии. 2008. № 4, С. 147–153.

[3] Отмахова Ю.С., Таркулвичин С., Усенко Н.И., Позняковский В.М. Оценка перспективных направлений глубокой переработки тропического агропродовольственного сырья кассавы // Технология и товароведение инновационных пищевых продуктов. 2015. № 3. С. 83–90

[4] Usenko N.,Otmakhova Yu. Problem of management of technological wheat grain properties within the food chain ”grain-flour-bread” // The 1st International workshop ”Plant genetics and genomics for food security”. PGGFS-2016. Novosibirsk, Russia. August 26-28, 2016: abstract book / Fed. Research Center Inst. of Cytology and Genetics SB RAS, Novosib. State Univ., SB RAS. Novosibirsk, 2016. P. 66.

[5] Cooper R. G. Selecting Winning New Product Projects: Using the NewProd System // Journal of Product Innovation Management. 1985. Iss. 2. P. 34–44.

[6] Квашнин А. Г. Как провести экспертизу проекта коммерциализации технологий: Серия методических материалов "Практические руководства для центров коммерциализации технологий" // Проект EuropeAid "Наука и коммерциализация технологий". Москва. 2006. 48 С.

[7] Mankins J.C. Technology readiness levels // A White Paper. Advanced Concepts Office, Office of Space Access and Technology, NASA April 6, 1995. (http://fellowships.teiemt. gr/wp-content/uploads/2016/01/trl.pdf).

[8] Gibson D. V., Gurr G. "Quicklook" Assessment of Greater Adelaide's Assets and Challenges for Accelerated Technology-Based Growth // IC^2 Institute, The University of Texas at Austin, 2001. (http://hdl.handle.net/2152/19062).

Сергей Николаевич Астраков — к.ф.-м.н., вед. науч.сотр. Института вычислительных технологий СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: astrakov90@gmail.com;
Александр Георгиевич Квашнин — к.т.н., вед. науч.сотр. Института вычислительных технологий СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: kvashninag@kti.sbras.ru;
Юлия Сергеевна Отмахова — к.э.н., ст. науч. сотр. Института экономики и организации промышленного производства СО РАН, зав. лаб. Новосибирского государственного университета;
e-mail: otmakhovajs@yandex.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

СУРРОГАТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРАБОТКИ НЕФТЯНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ ПРИ ЗАБОЙНОМ ДАВЛЕНИИ НИЖЕ ДАВЛЕНИЯ НАСЫЩЕНИЯ

И. В. Афанаскин, С. Г. Вольпин, П. В. Ялов

Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, 117218, Москва

УДК 622.276.1/4

Работа посвящена изучению влияния модели скважины на результаты прогнозирования показателей разработки с помощью суррогатного моделирования при забойном давлении добывающих скважин ниже давления насыщения, а пластовом давлении выше давления насыщения. Под суррогатным моделированием понимается гидродинамическое моделирование с помощью концепции суперэлементов. Обычно при моделировании заводнения для учета скважин используется формула, похожая на формулу Дюпюи. В работе показано, что использование формулы Фетковича (по сравнению со стандартной формулой Дюпюи, не учитывающей влияние газа) существенно уточняет показатели работы отдельных скважин.

Ключевые слова: заводнение, экспресс-моделирование, оперативное моделирование, суррогатная модель, суперэлементная модель, сетка Вороного, формула Дюпюи, формула Фетковича.

Введение

В настоящее время в России большинство нефтяных месторождений разрабатывается методом заводнения. При этом полученная нефтеотдача составляет не более 30–35 % начальных запасов нефти. Часто в России нефтеотдача не достигает и 25 %. В итоге накопление остаточных запасов нефти в обводненных пластах во многих нефтедобывающих регионах страны идет весьма быстрыми темпами. Поэтому актуальным является решение задачи математического моделирования заводнения.

Моделирование заводнения все сильнее входит в практику работы инженеров нефтяников на многих уровнях деятельности. Если ранее моделирование было прерогативой только инженеров по проектированию разработки нефтяных месторождений, то сейчас оно активно используется при контроле и управлении разработкой месторождений. Использование модели на основе концепции суперэлеметов позволяет оперативно и оценочно решать подобные задачи. При этом простая и функциональная модель заводнения должна учитывать не только двухфазную фильтрацию нефти и воды, но и тот факт, что забойное давление в добывающих скважинах часто снижается ниже давления насыщения нефти газом. В результате этого в околоскважинной зоне пласта появляется газовая фаза, которая уменьшает продуктивность скважин по жидкости. Рассмотрим такую модель и влияние учета выделения газа в околоскважинной зоне на расчетные показатели разработки.

1 Математическая модель двухфазной фильтрации нефти и воды

Математическая модель упругой двухфазной фильтрации без учета капиллярных и гравитационных сил состоит из двух уравнений сохранения количества основных элементов (объемов каждой из фаз при стандартных условиях) и обобщенного закона Дарси [1, 4, 5]:

уравнения сохранения объемов нефти и воды

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{mS_o}{B_o}\right) + div\left(\frac{\vec{W}_o}{B_o}\right) = -\overline{q}_o, \quad \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{mS_w}{B_w}\right) + div\left(\frac{\vec{W}_w}{B_w}\right) = -\overline{q}_w, \tag{1}$$

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-29-15105 офи_м.

обобщенный закон Дарси

$$\vec{W}_o = -\frac{kk_{ro}}{\mu_o} grad\,(P)\,, \quad \vec{W}_w = -\frac{kk_{rw}}{\mu_w} grad\,(P)\,, \tag{2}$$

где m — пористость; S_o и S_w, B_o и B_w, $\vec{W}_o$ и $\vec{W}_w$, $\overline{q}_o$ и $\overline{q}_w$, k_{ro} и k_{rw}, μ_o и μ_w — насыщенность, объемный коэффициент, вектор скорости фильтрации, плотность источника (стока), моделирующего работу скважины, относительная фазовая проницаемость, вязкость нефти и воды соответственно; k — абсолютная проницаемость; P — пластовое давление.

Система уравнений (1)–(2) дополняется замыкающими соотношениями:

$$S_o + S_w = 1, \quad m = m_0\left[1 + C_r\left(P - P_0\right)\right], \quad B_o = B_{o0}\left[1 - C_o\left(P - P_0\right)\right], \quad B_w = B_{w0}\left[1 - C_w\left(P - P_0\right)\right], \tag{3}$$

где m_0 — пористость при начальном пластовом давлении; B_{o0} и B_{w0} — объемный коэффициент нефти и воды при начальном пластовом давлении; C_r, C_o и C_w — сжимаемость пласта, нефти и воды; P_0 — начальное пластовое давление.

Учитывая эти замыкающие соотношения, систему уравнений (1)–(2) можно привести к системе из двух дифференциальных уравнений в частных производных относительно давления P и водонасыщенности $S \equiv S_w$ [5]:

$$m_0\left[C_r + \left(C_w - C_o\right)S + C_o\right]\frac{\partial P}{\partial t} = -B_{o0}\left[\overline{q}_o + div\left(\frac{\vec{W}_o}{B_o}\right)\right] - B_{w0}\left[\overline{q}_w - \overline{q}_a + div\left(\frac{\vec{W}_w}{B_w}\right)\right], \tag{4}$$

$$m_0\left[\frac{\partial S}{\partial t} + \left(C_r + C_w\right)S\frac{\partial P}{\partial t}\right] = -B_{w0}\left[\overline{q}_w - \overline{q}_a + div\left(\frac{\vec{W}_w}{B_w}\right)\right]. \tag{5}$$

Уравнения (4) и (5) дополняются начальными условиями:

$$P = P\left(x, y, z, t = 0\right), \quad S = S\left(x, y, z, t = 0\right) \tag{6}$$

и граничными условиями непротекания на внешних границах. При моделировании законтурной водоносной области нужно использовать источниковые слагаемые в уравнениях (4) и (5) [1].

2 Численная схема

Рассмотрим расчетную сетку из ячеек, центры которых соответствуют скважинам, а размеры в плане сопоставимы с шагом сетки скважин (300–500 м). Для равномерного покрытия месторождения допускается введение фиктивных скважин. Использование такой сетки значительно сокращает продолжительность расчетов, по сравнению с традиционно используемыми сетками более мелкого шага [7].

Для построения суперэлементной сетки в горизонтальной плоскости используется алгоритм построения зон дренирования для каждой скважины, что сводится к построению областей Вороного [8], рис. 1:

1. Нанесение на карту скважин и границ.
2. Построение выпуклой оболочки по внешним скважинам.
3. Построение триангуляции Делоне по скважинам.
4. Построение областей Вороного по триангуляции.

Копируя построенную в плане сетку для разных слоев и изменяя глубину залегания кровли ячеек и их толщину, суперэлементная сетка преобразуется в 3D сетку.

Воспользуемся большим размером ячеек и рассмотрим полностью явную схему для уравнений (4) и (5):

$$P_i^{n+1} = P_i^n - \Delta t^{n+1}\frac{B_{o0}\left[\left(q_o\right)_i^n + \sum\limits_{j=1}^{N_i}\left(q_o\right)_{ij}^n\right] + B_{w0}\left[\left(q_w\right)_i^n + \sum\limits_{j=1}^{N_i}\left(q_w\right)_{ij}^n\right]}{F_i h_i \left(m_0\right)_i\left[C_r + \left(C_w - C_o\right)S_i^n + C_o\right]}, \tag{7}$$

$$S_i^{n+1} = S_i^n - \Delta t^{n+1} \frac{B_{w0}}{F_i h_i (m_0)_i} \left[(q_w)_i^n + \sum_{j=1}^{N_i} (q_w)_{ij}^n \right] - (C_r + C_w) S_i^n \left(P_i^{n+1} - P_i^n \right), \tag{8}$$

где n — номер шага по времени; i — номер ячейки; Δt^{n+1} — шаг по времени; F_i, h_i и $(m_0)_i$ — площадь, толщина и пористость при давлении P_0 ячейки i; $(q_\alpha)_i^n$ — дебит фазы $\alpha = o, w$ скважины в ячейке i на шаге по времени n; $(q_\alpha)_{ij}^n$ — переток фазы $\alpha = o, w$ между ячейками i и j на шаге по времени n; N_i — количество соседних ячеек для ячейки i.

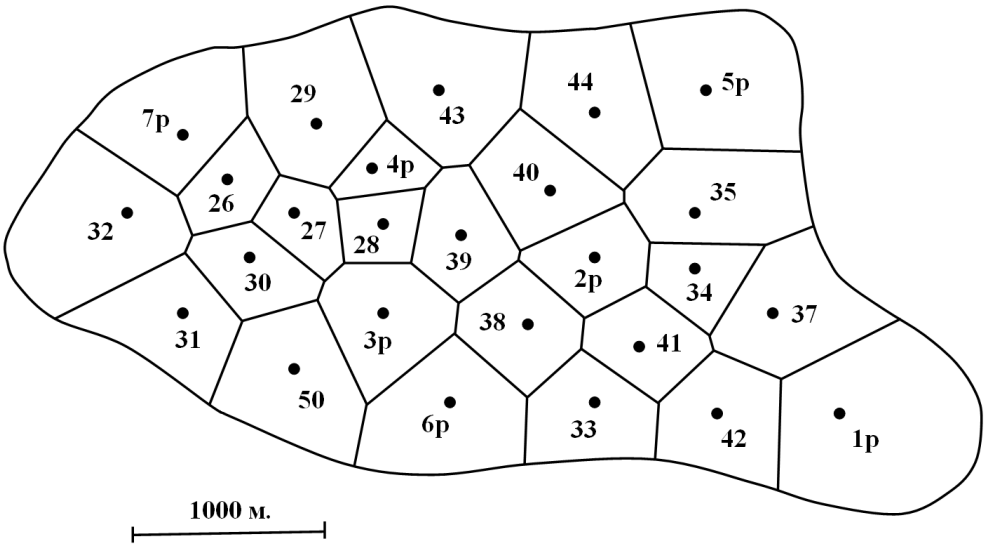


Рис. 1: Пример построения сетки суперэлементов в плане. Точки — скважины, цифры при них — номера скважин

Для исходного состояния системы задаются начальные условия. Шаг по времени рассчитывается так, чтобы максимальное изменение давления и насыщенности по всей модели за один шаг по времени не превышало заданных значений.

Переток между ячейками i и j определяется как:

$$(q_\alpha)_{ij}^n = \frac{k_{ij} (k_{r\alpha})_{ij}^n}{\mu_\alpha (B_\alpha)_{ij}^n} \cdot \frac{P_i^n - P_j^n}{L_{ij}} A_{ij} h_{ij}, \quad \alpha = o, w, \tag{9}$$

где A_{ij} — длина общего ребра ячеек i и j, L_{ij} — расстояние между центрами ячеек (скважинами) i и j, рис. 2,

$$k_{ij} = \frac{2 k_i k_j}{k_i + k_j}, \quad (B_\alpha)_{ij}^n = \frac{1}{2} \left[(B_\alpha)_i^n + (B_\alpha)_j^n \right], \quad h_{ij} = \frac{1}{2} \left[h_i + h_j \right], \tag{10}$$

$$(k_{r\alpha})_{ij}^n = \begin{cases} (k_{r\alpha})_i^n, & P_i^n > P_j^n, \\ (k_{r\alpha})_j^n, & P_i^n < P_j^n. \end{cases} \tag{11}$$

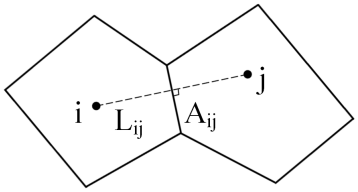


Рис. 2: Схема для расчета перетоков между ячейками

3 Моделирование скважин

Дебиты скважин по нефти q_o, воде q_w и обводненность W рассчитываются при определенном (заданном или рассчитанном) дебите жидкости q_l из следующих соотношений:

$$(q_o)_i^n = (q_l)_i^n \left(1 - W_i^n\right), \quad (q_w)_i^n = (q_l)_i^n \, W_i^n, \tag{12}$$

$$W_i^n = \frac{(k_{rw})_i^n}{(k_{rw})_i^n + (k_{ro})_i^n \, \frac{\mu_w (B_w)_i^n}{\mu_o (B_o)_i^n}}. \tag{13}$$

Как правило (в большинстве гидродинамических симуляторов, в том числе коммерческих) дебиты скважин по жидкости q_l определяются как произведение коэффициента продуктивности на депрессию:

$$(q_l)_i^n = PI_i^n \left(P_i^n - (P_w)_i^n\right), \tag{14}$$

где P_w — забойное давление, PI_i^n — коэффициент продуктивности скважины i по жидкости (в различных симуляторах он определяется по разному), который в данном случае определяется как:

$$PI_i^n = \frac{2\pi k_i h_i}{\ln\left[\frac{(R_c)_i}{(r_w)_i}\right] + Skin_i^n} \cdot \left[\frac{(k_{ro})_i^n}{\mu_o \, (B_o)_i^n} + \frac{(k_{rw})_i^n}{\mu_w \, (B_w)_i^n}\right], \tag{15}$$

где $(r_w)_i$ — радиус скважины по долоту, $Skin_i^n$ — скин-фактор скважины, $(R_c)_i$ — эквивалентный радиус блока, определяемый как:

$$(R_c)_i = 0,14\sqrt{2F_i}. \tag{16}$$

Видно, что уравнение для моделирования скважины (14) напоминает известную формулу Дюпюи. Для простоты так и будем его называть (хотя, строго говоря, это не так). Очевидно, что в постановке (12)–(16) в модели скважины не учитывается выделение газа в призабойной зоне. Его конечно можно учесть косвенно с помощью скин-фактора. Но возникает вопрос, как задавать требуемую зависимость для скин-фактора? Другим способом расчета дебита жидкости при забойном давлении скважины ниже давления насыщения, а пластовом давлении выше давления насыщения является формула Фетковича [6]. Рассмотрим обобщенную формулу Фетковича, которую можно применять при забойном давлении как ниже, так и выше давления насыщения (при этом пластовое давление P_i^n должно быть выше давления насыщения):

$$(q_l)_i^n = \begin{cases} PI_i^n \left(P_i^n - (P_w)_i^n\right), & (P_w)_i^n > P_S, \\ PI_i^n \left(P_i^n - P_S^*\right) + J_i \Big(\left(P_S^*\right)^2 - \left((P_w)_i^n\right)^2\Big)^{n_i}, & (P_w)_i^n < P_S, \end{cases} \tag{17}$$

где PI_i^n — коэффициент продуктивности скважины при забойном давлении выше давления насыщения, определяемый по формуле (15), P_S — давление насыщения нефти газом, P_S^* — давление искривления индикаторной диаграммы, $P_S^* \le P_S$, J_i и n_i — коэффициенты, характеризующие совместную фильтрацию жидкости и газа.

Коэффициенты J_i и n_i определяются как функции PI_i^n по результатам гидродинамических исследований скважин [6]:

$$\ln\left(J_i\right) = \ln\left(a\right) + b \ln\left(PI_i^n\right), \quad n_i = c - d \, PI_i^n, \tag{18}$$

где a, b, c, d — коэффициенты зависимости J_i и n_i от PI_i^n, обычно мало меняются по пласту. Поэтому для применения формулы Фетковича достаточно исследовать несколько скважин.

Нетрудно заметить, что в такой модели вода появится в продукции добывающей скважины сразу же после превышения текущей водонасыщенности ячейки значения насыщенности связанной водой. Это, конечно, неверно. Воде необходимо время для того, чтобы пройти расстояние от нагнетательной скважины до добывающей. Для воссоздания этого эффекта используется ступенчатое задание функций относительной фазовой проницаемости в зависимости от водонасыщенности на фронте вытеснения [2].

Предложенная 2D расчетная схема легко обобщается на случай 3D. При этом приток в скважину из каждого слоя определяется согласно его продуктивности при известном дебите скважины по жидкости или забойном давлении.

4 Пример моделирования разработки нефтяных месторождений при забойном давлении ниже давления насыщения, а пластовом давлении выше давления насыщения

Рассмотрим простейшую секторную модель с 4 скважинами — 1 нагнетательная и 3 добывающих, рис. 3. Параметры модели следующие:

1. Размеры модели в плане $1500 * 1500$ м.
2. Абсолютная проницаемость — переменная, табл. 1.
3. Пористость — переменная, табл. 1.
4. Начальное пластовое давление — 339 атм.
5. Начальная водонасыщенность — 0,2 д.ед.
6. Объемный коэффициент воды — 1,02 $м^3/м^3$. Вязкость воды — 0,36 сПз. Сжимаемость воды – $4,7 \cdot 10^{-5}$ 1/атм.
7. Объемный коэффициент нефти — 1,55 м3/м3. Вязкость нефти — 0,397 сПз. Сжимаемость нефти — $1,01 \cdot 10^{-4}$ 1/атм. Растворимость газа в нефти — 150 $м^3/м^3$. Давление насыщения нефти газом – 170 атм.
8. Сжимаемость породы — $4,7 \cdot 10^{-5}$ 1/атм.
9. Капиллярным давлением пренебрегается.
10. Функции относительных фазовых проницаемостей (ОФП) — приведены на рис. 4.
11. Дебит жидкости добывающих скважин — не ограничен. Забойное давление в добывающих скважинах указано в табл. 1.
12. Закачка воды в нагнетательную скважину – табл. 1. Забойное давление в нагнетательной скважине — не ограничено.
13. Скин-фактор для всех скважин – 0 ед.
14. Радиус скважин — 0,2 м.
15. Срок разработки — 35 лет.
16. Притока воды из-за контура нет.
17. Индикаторные диаграммы (зависимость забойного давления от дебита) приведены на рис. 5.

Добывающие скважины управлялись забойным давлением, а нагнетательная – закачкой. Расстановка скважин в плане и конфигурация суперэлементов приведена на рис. 3.

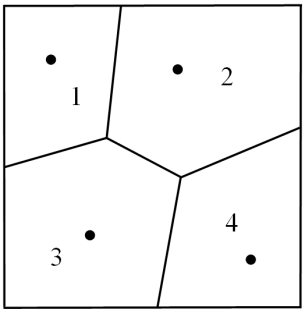


Рис. 3: Расстановка скважин в плане и конфигурация суперэлементов

Таблица 1: Параметры модели

Скважина (суперэлементная ячейка)	Площадь, тыс. $м^2$	Толщина, м.	Пористость, д. ед.	Абсолютная проницаемость, мД	Дебит (закачка), $м^3$/сут	Забойное давление, атм
1 – нагн.	514	25	0,20	23	600	-
2 – доб.	628	22	0,18	18	-	136
3 – доб.	603	19	0,16	15	-	136
4 – доб.	504	15	0,15	13	-	136

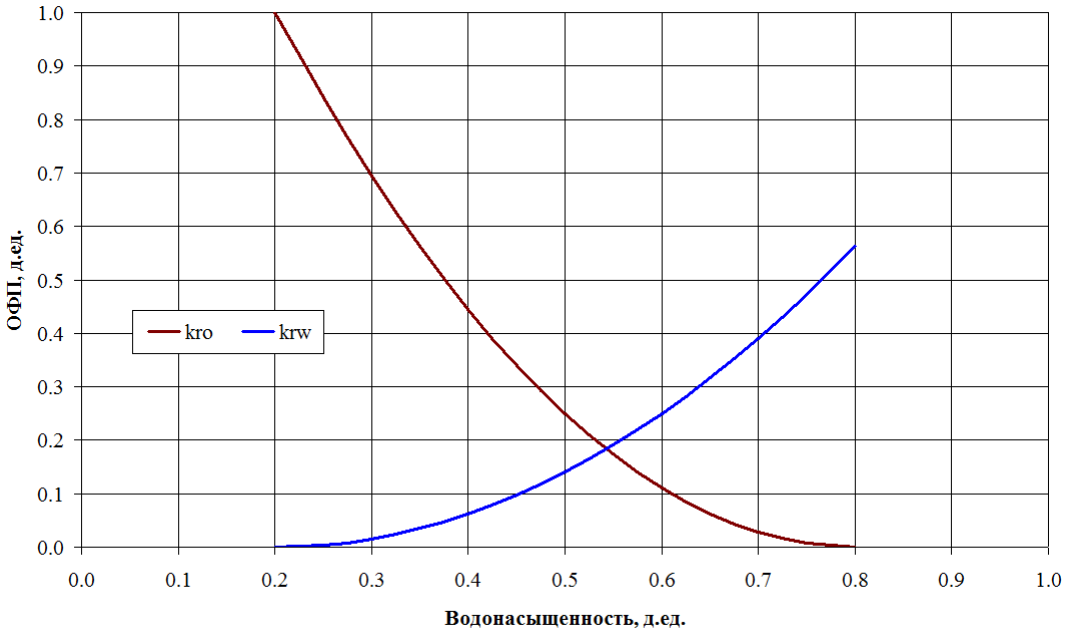


Рис. 4: Относительные фазовые проницаемости (ОФП) для нефти (kro) и воды (krw)

Таблица 2: Геометрические параметры суперэлементной модели

Пары ячеек	1–2	1–3	2–3	2–4	3–4
Длина совместного ребра ячеек, м.	650	538	425	650	663
Расстояние между центрами соседних ячеек, м.	638	889	925	1013	813

Длина совместного ребра соседних ячеек для суперэлементной модели и расстояние между центрами соседних ячеек (скважинами) приведены в табл. 2.

Накопленная добыча нефти по каждой из скважин при моделировании с использованием формулы Дюпюи и формулы Фетковича приведены на рис. 6.

Заключение

При использовании формулы Фетковича для учета влияния выделения газа в околоскважинной зоне (по сравнению с использованием формулы Дюпюи) изменяется продуктивность добывающих скважин по жидкости, что приводит к изменениям в добыче нефти. При этом у высокодебитных (в отсутствие свободного газа) скважин коэффициент продуктивности падает намного сильнее, чем у низкодебитных, что приводит к перераспределению потоков в пласте; добыча по одним скважинам растет, а по другим падает. Следовательно, учитывать выделение свободного газа в околоскважинной зоне пласта при математическом моделировании необходимо.

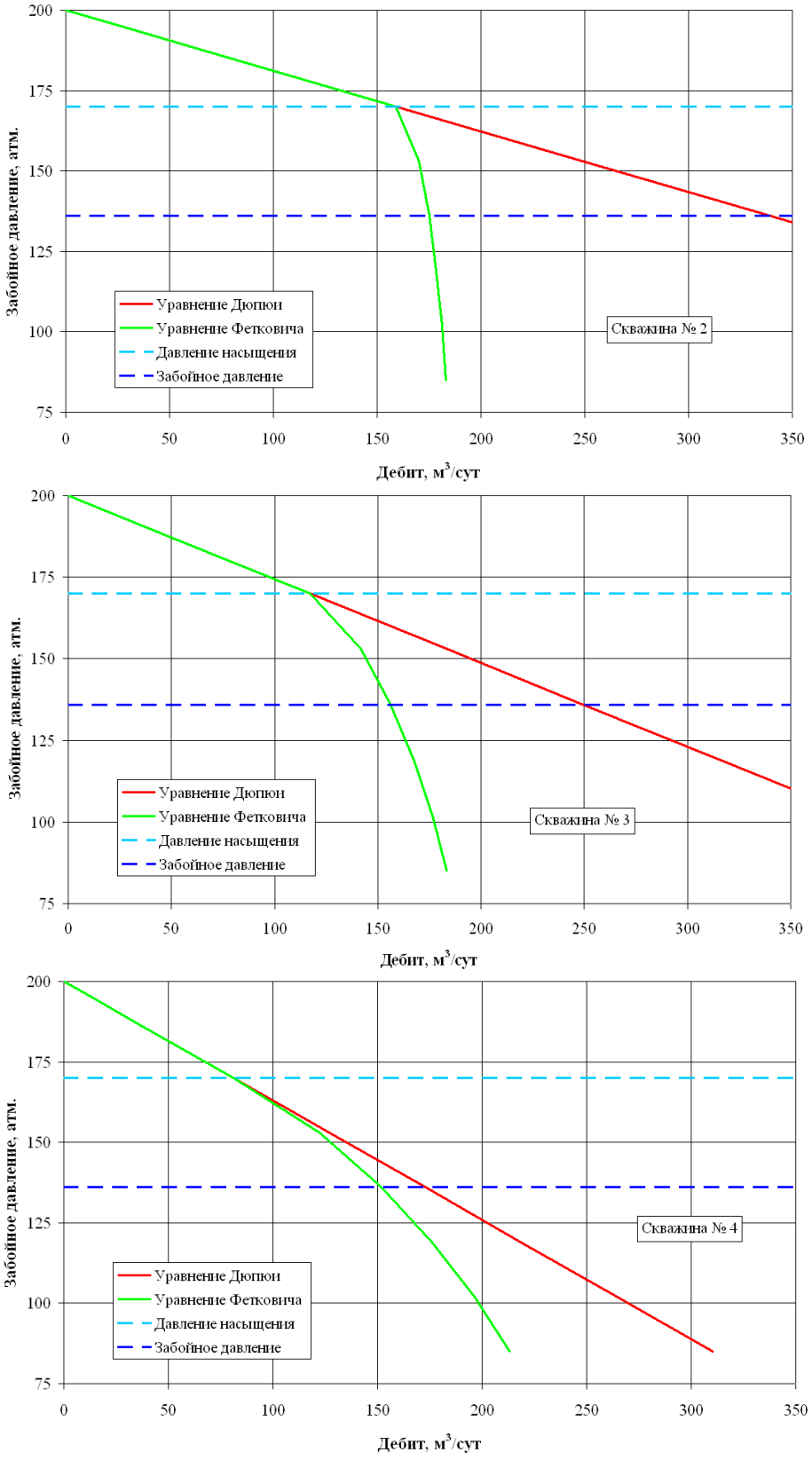


Рис. 5: Индикаторные диаграммы (зависимость забойного давления от дебита) для скважин № 2–4

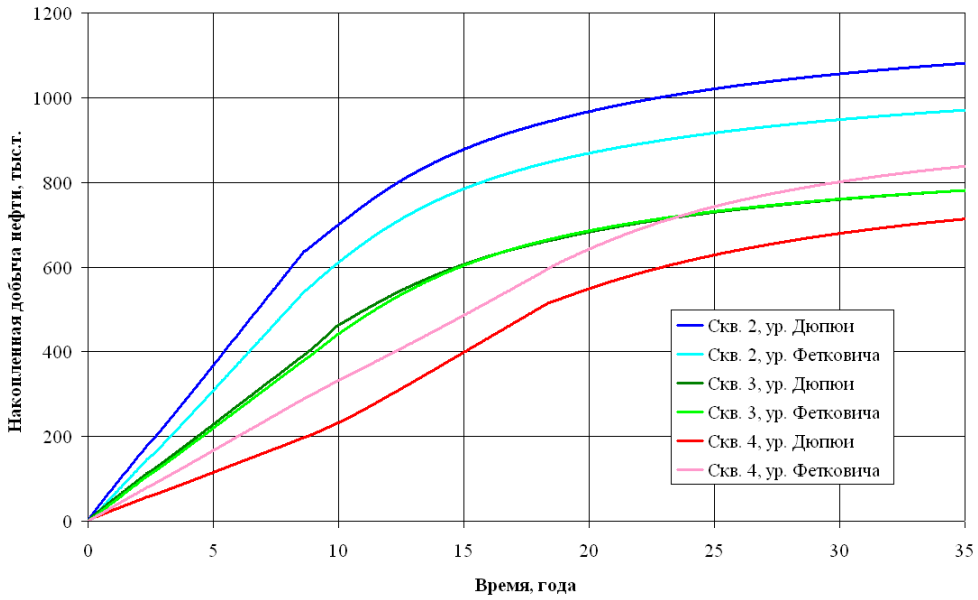


Рис. 6: Накопленная добыча нефти по скважинам при моделировании по формулам Дюпюи и Фетковича

Список литературы

[1] Азиз Х., Сеттари Э. Математическое моделирование пластовых систем. М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004. 416 с.

[2] Афанаскин И. В., Егоров А. А., Колеватов А. А. Экспресс-моделирование заводнения нефтяных месторождений с помощью концепции суперэлементов // Вестник кибернетики. 2016. Вып. 2(22). С. 153–163.

[3] Булыгин Д. В., Мазо А. Б., Поташев К. А., Калинин Е. И. Геолого-технические аспекты суперэлементной фильтрационной модели нефтяных месторождений // Научно-технический журнал «Георесурсы», 2013. Вып. 3(53). С. 31–35.

[4] Каневская Р. Д. Математическое моделирование гидродинамических процессов разработки месторождений углеводородов. М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002. 140 с.

[5] Кац Р. М., Волгин Е. Р., Афанаскин И. В. Численное моделирование двухфазной фильтрации нефти и воды // Труды НИИСИ РАН, 2014. Том 4. Вып. 2. С. 141–148.

[6] Корнаева Д. А. Совершенствование методов гидродинамических исследований скважин, работающих при забойном давлении ниже давления насыщения // Дис. на соиск. уч. степ. канд. техн. наук. М.: ОАО «ВНИИнефть», 2015. 109 с.

[7] Мазо А. Б., Булыгин Д. В. Суперэлементы. Новый подход к моделированию разработки нефтяных месторождений // Научно-технический журнал «Нефть. Газ. Новации», 2011. Вып. 11. С. 6–8.

[8] Хисамутдинов Н. И., Хасанов М. М., Телин А. Г. и др. Разработка нефтяных месторождений. Издание в 4 т. Том 1. Разработка нефтяных месторождений на поздней стадии. М.: ВНИИОЭНГ, 1994. 240 с.

Иван Владимирович Афанаскин — к.т.н., зав. группой Научно-исследовательского института системных исследований РАН;
e-mail: Ivan@Afanaskin.ru;
Сергей Григорьевич Вольпин — к.т.н., зав. отделом Научно-исследовательского института системных исследований РАН;
e-mail: SGVolpin@niisi.ras.ru;
Петр Владимирович Ялов — инженер Научно-исследовательского института системных исследований РАН;
e-mail: PVYalov@niisi.ras.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

О ТИПАХ СКРЫТЫХ ДЕФЕКТОВ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ВИДОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОКРЫТИЯ И ОСНОВАНИЯ

О. М. Бабешко[1], Е. М. Горшкова[1], А. Г. Федоренко[2], О. В. Евдокимова[2], Д. А. Хрипков[1], С. Б. Уафа[1]

[1] *Кубанский государственный университет, 350040, Краснодар*

[2] *Южный научный центр РАН, 630090, Ростов-на-Дону*

УДК 539.3

Рассматриваются статические граничная задача о напряженно-деформированном состоянии материалов с покрытиями, которые в процессе эксплуатации, приобрели скрытые дефекты. Скрытыми дефектами являются трещины или включения, плоскости которых перпендикулярны к границе покрытия, что делает их трудно обнаруживаемыми. Покрытия могут, в соответствии с технологическими требованиями, по-разному, как соединяться с основанием, так и нагружаться. В качестве покрытий приняты пластины Кирхгофа, а основания — трехмерные слои. Методом блочного элемента, опирающегося на топологические и факторизационные подходы, исследованы основные свойства наряжено-деформированного состояния таких блочных структур с дефектами, оценены возникающие концентрации напряжений в зонах дефектов для основных постановок граничных задач и сформирована их классификация. Полученные результаты важны в ряде отраслей, в том числе, в машиностроении и авиастроении.

Ключевые слова: метод блочного элемента, граничная задача, псевдодифференциальные уравнения, трещина, пластина, дефекты.

1 Постановка и решение задачи

Исследуются случаи статической граничной задачи для полубесконечных покрытий с прямолинейными границами, параллельными друг другу, находящихся на деформируемом основании в двух состояниях. В первом случае дистанция между торцами плит отлична от нуля, равна $2\theta > 0$, во втором случае — она отсутствует, $\theta = 0$, хотя плиты не взаимодействуют. Предполагается, что в случае вертикальных воздействий на покрытия, горизонтальные усилия не учитываются, а в случае горизонтльных воздействий на них, вертикальными составляющими контактных напряжений можно пренебречь.

Статическая граничная задача для скалярного варианта вертикальных воздействий на покрытия, моделируемые пластинами Кирхгофа, лежащими на деформируемом основании, описывается уравнениями, имеющими вид

$$\mathbf{R}_b(\partial x_1, \partial x_2)u_{3b} + \varepsilon_{53b}(t_{3b} - g_{3b}) \equiv \left(\frac{\partial^4}{\partial x_1^4} + 2\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^4}{\partial x_2^4}\right)u_{3b} + \varepsilon_{53b}(t_{3b} - g_{3b}) = 0,$$

$$\mathbf{R}_b(-i\alpha_1, -i\alpha_2)U_{3b} \equiv R_b(-i\alpha_1, -i\alpha_2)U_{3b} \equiv (\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^2 U_{3b},$$

$$U_{3b} = \mathbf{F_2}u_{3b}, \quad G_{3b} = \mathbf{F_2}g_{3b}, \quad T_{3b} = \mathbf{F_2}t_{3b}, \quad b = \lambda, r,$$

$$M_b = -D_{b1}\left(\frac{\partial^2 u_{3b}}{\partial x_2^2} + \nu_b\frac{\partial^2 u_{3b}}{\partial x_1^2}\right), \quad D_{b1} = \frac{D_b}{H^2}, \quad D_{b2} = \frac{D_b}{H^3},$$

Отдельные фрагменты работы выполнены в рамках реализации Госзадания на 2017 г. (код проекта 0256-2014-0006), Программы президиума РАН 1-33П (коды проектов с 0256-2015-0088 по 0256-2015-0093), Минобрнауки (код проекта 9.8753.2017/БЧ) и при поддержке грантов РФФИ (коды проектов 14-08-00404, 15-01-01379, 15-08-01377, 16-41-230214, 16-41-230218, 16-48-230216, 17-08-00323).

$$Q_b = -D_{b2}\left(\frac{\partial^3 u_{3b}}{\partial x_2^3} + (2-\nu_b)\frac{\partial^3 u_{3b}}{\partial x_1^2 \partial x_2}\right) = f_{4b}(\partial\Omega_b), \quad u_{3b} = f_{1b}(\partial\Omega_b), \quad \frac{\partial u_{3b}}{H\partial x_2} = f_{2b}(\partial\Omega_b),$$

$$D_b = \frac{E_b h_b^3}{12(1-\nu_b^2)}, \quad \varepsilon_{53b} = \frac{(1-\nu_b^2)12H^4}{E_b h_b^3}, \quad \varepsilon_6^{-1} = \frac{(1-\nu)H}{\mu}.$$

Связь между граничными напряжениями и перемещениями на поверхности упругого материала, на котором находятся покрытия-пластины, имеет вид

$$u_{3m}(x_1,x_2) = \varepsilon_6^{-1}\sum_{n=1}^{2}\iint\limits_{\Omega_n} k(x_1-\xi_1, x_2-\xi_2) g_{3n}(\xi_1,\xi_2)\,d\xi_1 d\xi_2, \quad x_1,x_2 \in \Omega_m, \quad m = \lambda, r, \theta,$$

$$\Omega_\lambda(|x_1| \leqslant \infty;\ x_2 \leqslant -\theta), \quad \Omega_r(|x_1| \leqslant \infty;\ \theta \leqslant x_2), \quad \Omega_\theta(|x_1| \leqslant \infty;\ -\theta \leqslant x_2 \leqslant \theta), \quad n = \lambda, r.$$

M_b и Q_b — изгибающий момент и перерезывающая сила в системе координат $x_1 o x_2$; h_b — толщины пластин, H — размерный параметр подложки, например, толщина слоя. $\mathbf{F}_2 \equiv \mathbf{F}_2(\alpha_1,\alpha_2)$ и $\mathbf{F}_1 \equiv \mathbf{F}_1(\alpha_1)$ двумерный и одномерный операторы преобразования Фурье соответственно.

Здесь приняты оси координат $x_1 o x_2$ расположенными в плоскости покрытий, а ось x_3 имеющей направление по внешней нормали к основанию. Ось ox_1 параллельна торцам дефекта, а ось ox_2 — перпендикулярна.

Уравнения векторной граничной задачи для случая горизонтальных воздействий на покрытия представимы в форме

$$\mathbf{R}_b\left(\partial x_1, \partial x_2\right)\mathbf{u}_b - \varepsilon_{5b}\mathbf{g}_b = \varepsilon_{5b}\mathbf{t}_b, \tag{1}$$

$$\mathbf{R}_b\left(\partial x_1, \partial x_2\right)\mathbf{u}_b = \left\| \begin{array}{cc} \left(\dfrac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \varepsilon_{1b}\dfrac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) u_{1b} & \left(\varepsilon_{2b}\dfrac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2}\right) u_{2b} \\ \left(\varepsilon_{2b}\dfrac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2}\right) u_{1b} & \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \varepsilon_{1b}\dfrac{\partial^2}{\partial x_1^2}\right) u_{2b} \end{array} \right\|.$$

Системы интегральных уравнений, связывающие горизонтальные напряжения и перемещения векторной граничной задачей, имеют

$$\mathbf{u}(x_1,x_2) = \varepsilon_6^{-1}\frac{1}{4\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int \mathbf{K}(\alpha_1,\alpha_2)\mathbf{G}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\,\langle\alpha,x\rangle}\,d\alpha_1 d\alpha_2,$$

$$x \in \Omega_\lambda, \quad x \in \Omega_r, \quad x \in \Omega_\theta, \quad \langle\alpha, x\rangle = \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2,$$

$$\Omega_\lambda(|x_1| \leqslant \infty;\ x_2 \leqslant -\theta), \quad \Omega_r(|x_1| \leqslant \infty;\ \theta \leqslant x_2), \quad \Omega_\theta(|x_1| \leqslant \infty;\ -\theta \leqslant x_2 \leqslant \theta), \tag{2}$$

$$\mathbf{K} = \|K_{mn}\|, \quad m,n = 1,2 \quad \mathbf{K}(\alpha_1,\alpha_2) = O(A^{-1}), \quad A = \sqrt{\alpha_1^2+\alpha_2^2} \to \infty,$$

$$\varepsilon_6^{-1} = \frac{(1-\nu)H}{\mu}, \quad \mathbf{G}(\alpha_1,\alpha_2) = \mathbf{F}_2(\alpha_1,\alpha_2)\mathbf{g},$$

$\mathbf{g}$ — вектор касательных напряжений под пластинами.

Свойства матриц-функций $K_{ks}\left(\alpha_1,\alpha_2,x_3\right)$ в статическом случае описаны в [1, 2].

Рассматривая пластины и основание как блочную структуру, состоящую из трех деформируемых блоков, применим для ее исследования метод блочного элемента. Этот метод, как описано в [3, 4], предполагает, как первый шаг, погружение граничной задачи в топологическую структуру, и лишь на этом этапе использует внешнюю алгебру [5] в варианте, изложенном в [6–8]. В результате строится функциональное уравнение граничной задачи для блочной структуры. Многошаговый алгоритм дальнейших исследований функционального уравнения, уже не имеющих никакого отношения к аппарату внешней алгебры, чтобы не повторять всякий раз операции алгоритма, назван авторами «внешним анализом» [9]. Основанием такого названия является то, что аналитические преобразования алгоритма осуществляются над математическими объектами, которые включают в себя также и внешние формы. Поэтому название «внешний анализ» несет в себе понятные специалисту вполне определенные действия над функциональными уравнением, включающие дифференциальную факторизацию матриц-функций с элементами из нескольких комплексных переменных, реализации. автоморфизма, состоящее в вычислении форм-вычетов Лере, либо неполных функциональных уравнений Винера–Хопфа, построение псевдодифференциальных уравнений, извлечение из них

интегральных уравнений, диктуемых конкретными граничными условиями граничной задачи, решением интегральных уравнений и получение интегрального представления граничной задачи в каждом блоке в форме «упакованного» блочного элемента [4]. Наконец, «склейка» решений каждого блока, состоящая в построении фактор-топологии некоторых топологических пространств, являющихся декартовыми произведениями топологических пространств носителей и решений [4].

Применяя описанный подход, функциональное уравнение скалярной граничной задачи для вертикального случая, представленное для каждой пластины, принимает вид

$$R_b(-i\alpha_1,-i\alpha_2)U_{3b}\equiv(\alpha_1^2+\alpha_2^2)^2U_{3b}=-\int\limits_{\partial\Omega_b}\omega_b-\varepsilon_{53b}S_{3b}(\alpha_1,\alpha_2).$$

Внешние формы для каждой пластины представимы в форме

$$\omega_b=e^{i\langle\alpha,x\rangle}\left\{-\left[\frac{\partial^3u_{3b}}{\partial x_2^3}-i\alpha_2\frac{\partial^2u_{3b}}{\partial x_2^2}-\alpha_2^2\frac{\partial u_{3b}}{\partial x_2}+i\alpha_2^3u_{3b}+2\frac{\partial^3u_{3b}}{\partial x_1^2\partial x_2}-2i\alpha_2\frac{\partial^2u_{3b}}{\partial x_1^2}\right]dx_1+\right.$$
$$\left.+\left[\frac{\partial^3u_{3b}}{\partial x_1^3}-i\alpha_1\frac{\partial^2u_{3b}}{\partial x_1^2}-\alpha_1^2\frac{\partial u_{3b}}{\partial x_1}+i\alpha_1^3u_{3b}\right]dx_2\right\},\quad b=\lambda,r.$$

Вычислив формы-вычеты Лере, в том числе двукратные, псевдодифференциальные уравнения скалярной граничной задачи с учетом принятых обозначений можем представить, для пластин $b=\lambda,r$ в виде

$$\mathbf{F}_1^{-1}(\xi_1^\lambda)\left\langle-\int\limits_{\partial\Omega_\lambda}\left\{i\alpha_{2-}D_{\lambda1}^{-1}M_\lambda-D_{\lambda2}^{-1}Q_\lambda-(\alpha_{2-}^2+\nu_\lambda\alpha_1^2)\frac{\partial u_{3\lambda}}{\partial x_2}+i\alpha_{2-}\left[\alpha_{2-}^2+(2-\nu_\lambda)\alpha_1^2\right]u_{3\lambda}\right\}e^{i\alpha_1x_1}dx_1+\right.$$
$$\left.+\varepsilon_{53\lambda}S_{3\lambda}(\alpha_1,\alpha_{2-})\right\rangle=0,\quad\alpha_{2-}=-i\sqrt{\alpha_1^2},\quad\xi_1^\lambda\in\partial\Omega_\lambda,\quad(3)$$

$$\mathbf{F}_1^{-1}(\xi_1^\lambda)\left\langle-\int\limits_{\partial\Omega_\lambda}\left\{iD_{\lambda1}^{-1}M_\lambda-2\alpha_{2-}\frac{\partial u_{3\lambda}}{\partial x_2}+i\left[\,3\alpha_{2-}^2+(2-\nu_\lambda)\alpha_1^2\,\right]u_{3\lambda}\right\}e^{i\alpha_1x_1}dx_1+\right.$$
$$\left.+\varepsilon_{53\lambda}S'_{3\lambda}(\alpha_1,\alpha_{2-})\right\rangle=0,\quad\xi_1^\lambda\in\partial\Omega_\lambda,\quad\partial\Omega_\lambda=\{-\infty\leqslant x_1\leqslant\infty,\quad x_2=-\theta\}.$$

Соответственно для правой пластины

$$\mathbf{F}_1^{-1}(\xi_1^r)\left\langle-\int\limits_{\partial\Omega_r}\left\{i\alpha_{2+}D_{r1}^{-1}M_r-D_{r2}^{-1}Q_r-(\alpha_{2+}^2+\nu_r\alpha_1^2)\frac{\partial u_{3r}}{\partial x_2}+i\alpha_{2+}\left[\alpha_{2+}^2+(2-\nu_r)\alpha_1^2\right]u_{3r}\right\}e^{i\alpha_1x_1}dx_1+\right.$$
$$\left.+\varepsilon_{53r}S_{3r}(\alpha_1,\alpha_{2+})\right\rangle=0,\quad\alpha_{2+}=i\sqrt{\alpha_1^2},\quad\xi_1^r\in\partial\Omega_r,\quad(4)$$

$$\mathbf{F}_1^{-1}(\xi_1^r)\left\langle-\int\limits_{\partial\Omega_r}\left\{iD_{r1}^{-1}M_r-2\alpha_{2+}\frac{\partial u_{3r}}{\partial x_2}+i\left[3\alpha_{2+}^2+(2-\nu_r)\alpha_1^2\right]u_{3r}\right\}e^{i\alpha_1x_1}dx_1+\right.$$
$$\left.+\varepsilon_{53r}S'_{3r}(\alpha_1,\alpha_{2+})\right\rangle=0,\quad\xi_1^r\in\partial\Omega_r,\quad\partial\Omega_r=\{-\infty\leqslant x_1\leqslant\infty,\quad x_2=\theta\}.$$

Производная вычисляется по параметру α_2. Введем следующую систему обозначений, основываясь на (3) и (4).

$$\mathbf{Y}_\lambda=\{y_{1\lambda},y_{2\lambda}\},\quad\mathbf{Z}_\lambda=\{z_{1\lambda},z_{2\lambda}\},\quad\mathbf{Y_r}=\{y_{1r},y_{2r}\},\quad\mathbf{Z_r}=\{z_{1r},z_{2r}\},$$
$$\mathbf{F}_1g=\mathbf{F}_1(\alpha_1)g,\quad\mathbf{F}_2g=\mathbf{F}_2(\alpha_1,\alpha_2)g,$$

$$y_{1\lambda}=D_\lambda^{-1}\mathbf{F}_1M_\lambda,\quad y_{2\lambda}=D_\lambda^{-1}\mathbf{F}_1Q_\lambda,\quad y_{1r}=D_r^{-1}\mathbf{F}_1M_r,\quad y_{2r}=D_r^{-1}\mathbf{F}_1Q_r,$$
$$z_{1\lambda}=\mathbf{F}_1\frac{\partial u_\lambda}{\partial x_2^\lambda},\quad z_{2\lambda}=\mathbf{F}_1u_\lambda,\quad z_{1r}=\mathbf{F}_1\frac{\partial u_r}{\partial x_2^r},\quad z_{2r}=\mathbf{F}_1u_r,$$
$$\mathbf{K}_\lambda=\{k_{1\lambda},k_{2\lambda}\},\quad \mathbf{K_r}=\{k_{1r},k_{2r}\},\quad k_{1\lambda}=\varepsilon_{53\lambda}\mathbf{F}_2(\alpha_1,\alpha_{2-})(t_\lambda-g_\lambda)=\varepsilon_{53\lambda}S_{3\lambda}(\alpha_1,\alpha_{2-}),$$
$$k_{2\lambda}=\varepsilon_{53\lambda}S'_{3\lambda}(\alpha_1,\alpha_{2-}),\quad k_{1r}=\varepsilon_{53r}\mathbf{F}_2(\alpha_1,\alpha_{2+})(t_\lambda-g_\lambda)=\varepsilon_{53r}S_{3r}(\alpha_1,\alpha_{2+}),\quad k_{2r}=\varepsilon_{53r}S'_{3r}(\alpha_1,\alpha_{2+}).$$

В результате псевдодифференциальные уравнения для этого случая можно переписать в виде системы алгебраических уравнений

$$-i\alpha_{2-}y_{1\lambda}+y_{2\lambda}+(\alpha_{2-}^2+\nu_\lambda\alpha_1^2)z_{1\lambda}-i\alpha_{2-}\left[\alpha_{2-}^2+(2-\nu_\lambda)\alpha_1^2\right]z_{2\lambda}+k_{1\lambda}=0,$$
$$-iy_{1\lambda}+2\alpha_{2-}z_{1\lambda}-i\left[3\alpha_{2-}^2+(2-\nu_\lambda)\alpha_1^2\right]z_{2\lambda}+k_{2\lambda}=0,$$
$$-i\alpha_{2+}y_{1r}+y_{2r}+(\alpha_{2+}^2+\nu_r\alpha_1^2)z_{1r}-i\alpha_{2+}\left[\alpha_{2+}^2+(2-\nu_r)\alpha_1^2\right]z_{2r}+k_{1r}=0,$$
$$-iy_{1r}+2\alpha_{2+}z_{1r}-i\left[3\alpha_{2+}^2+(2-\nu_r)\alpha_1^2\right]z_{2r}+k_{2r}=0.$$

В матричной форме система имеет вид

$$\mathbf{A}_\lambda\mathbf{Y}_\lambda+\mathbf{B}_\lambda\mathbf{Z}_\lambda+\mathbf{K}_\lambda=0,$$
$$\mathbf{A}_r\mathbf{Y}_\mathbf{r}+\mathbf{B}_r\mathbf{Z}_r+\mathbf{K}_r=0.$$

Ради простоты, рассмотрим тот случай, когда изгибающий момент и перерезывающая сила равны нулю, тогда имеем $\mathbf{Y}_\lambda=0$, $\mathbf{Y_r}=0$.

Решения получившихся уравнений легко находится

$$\mathbf{Z}_\lambda=-\mathbf{B}_\lambda^{-1}\mathbf{K}_\lambda,\quad \mathbf{Z}_r=-\mathbf{B}_r^{-1}\mathbf{K}_r,$$
$$(-1+\nu_\lambda)\alpha_1^2z_{1\lambda}-i\alpha_{2-}\left[(1-\nu_\lambda)\alpha_1^2\right]z_{2\lambda}=-k_{1\lambda},\quad 2\alpha_{2-}z_{1\lambda}+i\left[(1+\nu_\lambda)\alpha_1^2\right]z_{2\lambda}=-k_{2\lambda},$$
$$(-1+\nu_r)\alpha_1^2z_{1r}-i\alpha_{2+}\left[(1-\nu_r)\alpha_1^2\right]z_{2r}=-k_{1r},\quad 2\alpha_{2+}z_{1r}+i\left[(1+\nu_r)\alpha_1^2\right]z_{2r}=-k_{2r},$$
$$\Delta_{\lambda0}=-i(1-\nu_\lambda)(3+\nu_\lambda)\alpha_1^4,\quad \Delta_{r0}=-i(1-\nu_r)(3+\nu_r)\alpha_1^4,$$
$$z_{1\lambda}=\frac{i\alpha_1^2\left[-(1+\nu_\lambda)k_{1\lambda}-(1-\nu_\lambda)k_{2\lambda}\alpha_{2-}\right]}{\Delta_{\lambda0}},\quad z_{2\lambda}=\frac{2\alpha_{2-}k_{1\lambda}+(1-\nu_\lambda)\alpha_1^2k_{2\lambda}}{\Delta_{\lambda0}},$$
$$z_{1r}=\frac{i\alpha_1^2\left[-(1+\nu_r)k_{1r}-(1-\nu_r)k_{2r}\alpha_{2-}\right]}{\Delta_{r0}},\quad z_{2r}=\frac{2\alpha_{2-}k_{1r}+(1-\nu_r)\alpha_1^2k_{2r}}{\Delta_{r0}}.$$

Внеся найденные соотношения в выражения для внешних форм в (3), (4), будем иметь два уравнения для $\theta>0$ и $\theta=0$, положив $G_{3r}=G^+$, $G_{3\lambda}=G^-$.

$$\left[\varepsilon_{53r}(\alpha_1^2+\alpha_2^2)^{-2}+\varepsilon_6^{-1}K_1(\alpha_1,\alpha_2)\right]G^+(\alpha_1,\alpha_2)=-\left[\varepsilon_{53\lambda}(\alpha_1^2+\alpha_2^2)^{-2}+\varepsilon_6^{-1}K_1(\alpha_1,\alpha_2)\right]G^-(\alpha_1,\alpha_2)+$$
$$+U_{3\theta}(\alpha_1,\alpha_2)+(\alpha_1^2+\alpha_2^2)^{-2}\left[A_\lambda k_{1\lambda}+B_\lambda k_{2\lambda}+A_rk_{1r}+B_rk_{2r}+\varepsilon_{53\lambda}T^+(\alpha_1,\alpha_2)+\varepsilon_{53r}T^-(\alpha_1,\alpha_2)\right],\quad \theta>0,$$

$$U_{3\theta}(\alpha_1,\alpha_2)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\theta}^{\theta}u_3(x_1,x_2)e^{i\langle\alpha,x\rangle}dx_1dx_2,$$

$$\left[\varepsilon_{53r}(\alpha_1^2+\alpha_2^2)^{-2}+\varepsilon_6^{-1}K_1(\alpha_1,\alpha_2)\right]G^+(\alpha_1,\alpha_2)=-\left[\varepsilon_{53\lambda}(\alpha_1^2+\alpha_2^2)^{-2}+\varepsilon_6^{-1}K_1(\alpha_1,\alpha_2)\right]G^-(\alpha_1,\alpha_2)+$$
$$+(\alpha_1^2+\alpha_2^2)^{-2}\left[A_\lambda k_{1\lambda}+B_\lambda k_{2\lambda}+A_rk_{1r}+B_rk_{2r}+\varepsilon_{53\lambda}T^+(\alpha_1,\alpha_2)+\varepsilon_{53r}T^-(\alpha_1,\alpha_2)\right],\quad \theta=0.$$

При $\theta\to0$, то есть когда пластины сближаются, первое уравнение непрерывно переходит во второе. Получили два разных функциональных уравнения Винера–Хопфа. Первое — обобщенное функциональных уравнения Винера–Хопфа в связи с присутствием функции $U_{3\theta}(\alpha_1,\alpha_2)$. Оно решается изложенным в [10] обращением системы двух интегральных уравнений второго рода с вполне непрерывными операторами вида

$$X^+-\left\{-\frac{M_1^+}{M_2^-}Y^-e^{-i2\alpha_2\theta}\right\}^+=\left\{\frac{1}{M_2^-}\Phi e^{-i\alpha_2\theta}\right\}^+,\quad Y^-+\left\{\frac{M_2^-}{M_1^+}X^+e^{i2\alpha_2\theta}\right\}^-=\left\{\frac{1}{M_1^+}\Phi e^{i\alpha_2\theta}\right\}^-,$$
$$M_1=M_1^+M_1^-,\quad M_2=M_2^+M_2^-,\quad M_2^+G^+=X^+,\quad M_1^-G^-=Y^-.$$

Здесь приняты обозначения работы [10].

В процессе решения функционального уравнения приходится определять функционалы $S_{3b}(\alpha_1,\alpha_{2\pm})$, $b=\lambda,r$ из некоторой системы алгебраических уравнений [4].

2 Свойства решений

При исследовании решения первого уравнения, доказано, что для $\theta > 0$ имеют место следующие свойства контактных напряжений между пластинами и подложкой

$$g_{3\lambda}(x_1, x_2) = \sigma_{1\lambda}(x_1, x_2)(-x_2 - \theta)^{-1/2}, \quad x_2 < -\theta,$$

$$g_{3r}(x_1, x_2) = \sigma_{1r}(x_1, x_2)(x_2 - \theta)^{-1/2}, \quad x_2 > \theta.$$

Здесь $\sigma_{1b}(x_1, x_2)$, $b = \lambda, r$ непрерывные по обоим координатам функции для достаточно гладких t_{3b}, $b = \lambda, r$ [10].

Обращение второго уравнения при $\theta = 0$ строится традиционным методом Винера–Хопфа [10] и приводит при $x_2 \to 0$ к следующим свойствам решений

$$\begin{aligned} g_{3\lambda}(x_1, x_2) &\to \sigma_{2\lambda}(x_1, x_2)x_2^{-1} + \sigma_{3\lambda}(x_1, x_2)\ln|x_2|\,, \\ g_{3r}(x_1, x_2) &\to \sigma_{2r}(x_1, x_2)x_2^{-1} + \sigma_{3r}(x_1, x_2)\ln|x_2|\,. \end{aligned} \tag{5}$$

Функции $\sigma_{nb}(x_1, x_2)$, $b = \lambda, r$; $n = 2, 3$ непрерывны по обоим параметрам.

В случае горизонтальных воздействий на покрытия, функциональное уравнение векторной граничной задачи приобретает вид матричного относительно вектора двух компонент касательных контактных напряжений

$$-\mathbf{R}_b(-i\alpha_{1b}, -i\alpha_{2b})\mathbf{U}_b = \int\limits_{\partial\Omega_b} \omega_b - \varepsilon_{5b}\mathbf{F}_2(\alpha_{1b}, \alpha_{2b})(\mathbf{g}_b + \mathbf{t}_b), \quad \mathbf{U}_b = \{U_{1b}, U_{2b}\}\,. \tag{6}$$

Здесь ω_b — вектор внешних форм для каждой пластины, имеющий представление

$$\omega_b = \{\omega_{1b}, \omega_{2b}\}\,,$$

$$\omega_{1b} = e^{i\langle\alpha,x\rangle}\left\{-\left(\varepsilon_{1b}\frac{\partial u_{1b}}{\partial x_2} + \varepsilon_{2b}\frac{\partial u_{2b}}{\partial x_1} - i\varepsilon_{1b}\alpha_{2b}u_{1b}\right)dx_1 + \left(\frac{\partial u_{1b}}{\partial x_1} - i\alpha_{1b}u_{1b} - i\varepsilon_{2b}\alpha_{2b}u_{2b}\right)dx_2\right\},$$

$$\omega_{2b} = e^{i\langle\alpha,x\rangle}\left\{-\left(\varepsilon_{2b}\frac{\partial u_{1b}}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{2b}}{\partial x_2} - i\alpha_{2b}u_{2b}\right)dx_1 + \left(\varepsilon_{1b}\frac{\partial u_{2b}}{\partial x_1} - i\varepsilon_{1b}\alpha_{1b}u_{2b} - i\varepsilon_{2b}\alpha_{2b}u_{1b}\right)dx_2\right\},$$

$b = \lambda$ — для левой пластины и $b = r$ — для правой.

Для построения псевдодифференциальных уравнений осуществляется дифференциальная факторизация как коэффициента функционалного уравнения, который является функцией в скалярном случае и факторизуется просто, так и матрицы-функции $-\mathbf{R}_b(-i\alpha_1, -i\alpha_2)$ функционального уравнения, где методом дифференциальной факторизации строится факторизующая матрица-функция $\mathbf{D}_b(-i\alpha_{1b}, -i\alpha_{2b})$. Принимая во внимание, что определитель матрицы-функции $-\mathbf{R}_b(-i\alpha_1, -i\alpha_2)$ имеет двукратные корни $\alpha_{2b\pm} = \pm i\sqrt{\alpha_{1b}^2} \equiv \equiv \pm i\,|\alpha_{1b}|$, получаем факторизующие матрицы-функции для левой и правой пластин в виде

$$\mathbf{D}_\lambda(-i\alpha_1, -i\alpha_2) = \left\| \begin{matrix} \dfrac{1}{(\alpha_2 - \alpha_{2-})^2} & \dfrac{\alpha_{2-}}{(\alpha_2 - \alpha_{2-})^2\,\alpha_1} - \dfrac{(1+\varepsilon_{1\lambda})}{(\alpha_2 - \alpha_{2-})\,\varepsilon_{2\lambda}\alpha_1} \\ 0 & 1 \end{matrix} \right\|.$$

В случае векторной граничной задачи имеет место более сложное исследование, которое включает построение системы функциональных уравнений в результате сопряжения покрытий с основанием, то есть построением фактор-топологии топологических пространств покрытий и основания. Имеют место соотношения

$$\begin{gathered} \mathbf{P}_\lambda\mathbf{u}\,(x_1, x_2, 0) + \mathbf{P}_\theta\mathbf{u}\,(x_1, x_2, 0) + \mathbf{P}_r\mathbf{u}\,(x_1, x_2, 0) = \varepsilon_6^{-1}\mathbf{F}_\mathbf{2}^{-1}\mathbf{K}\,(\alpha_1, \alpha_2, 0)\,[\,\mathbf{G}_\lambda\,(\alpha_1, \alpha_2) + \mathbf{G}_r\,(\alpha_1, \alpha_2)\,]\,, \\ \mathbf{G}_\lambda\,(\alpha_1, \alpha_2) = \mathbf{F}_2\mathbf{P}_\lambda\mathbf{g}\,(x_1, x_2)\,, \quad \mathbf{G}_r(\alpha_1, \alpha_2) = \mathbf{F}_2\mathbf{P}_r\mathbf{g}\,(x_1, x_2)\,, \\ \mathbf{u}_p = \mathbf{F}_2^{-1}\left[\mathbf{R}_p(-i\alpha_1, -i\alpha_2)\right]^{-1}\left\langle -\int\limits_{\partial\Omega_p} \omega_p + \varepsilon_{5p}\mathbf{F}_2(\mathbf{g}_p + \mathbf{t}_\lambda)\right\rangle, \quad p = \lambda,\ r. \end{gathered} \tag{7}$$

Здесь $\mathbf{P}_\lambda$, $\mathbf{P}_r$, $\mathbf{P}_\theta$ — проекторы на левую, правую пластины и на область Ω_θ. Применив оператор $\mathbf{F}_2^{-1}$, получим представление вида

$$[\mathbf{R}_\lambda(-i\alpha_1,-i\alpha_2)]^{-1}\left\langle -\int\limits_{\partial\Omega_\lambda}\omega_\lambda+\varepsilon_{5\lambda}\left(\mathbf{G}_\lambda+\mathbf{T}_\lambda\right)\right\rangle+[\mathbf{R}_r(-i\alpha_1,-i\alpha_2)]^{-1}\left\langle -\int\limits_{\partial\Omega_r}\omega_r+\varepsilon_{5r}\left(\mathbf{G}_r+\mathbf{T}_r\right)\right\rangle-$$
$$-\varepsilon_6^{-1}\mathbf{K}(\alpha_1,\alpha_2,0)\left[\mathbf{G}_\lambda(\alpha_1,\alpha_2)+\mathbf{G}_r(\alpha_1,\alpha_2)\right]=0,$$

$$\mathbf{T}_\lambda=\mathbf{F}_2\mathbf{t}_\lambda(x_1,x_2),\quad \mathbf{T}_r=\mathbf{F}_2\mathbf{t}_r(x_1,x_2).$$

Вектор-функции $\mathbf{G}_\lambda(\alpha_1,\alpha_2)$, $\mathbf{G}_r(\alpha_1,\alpha_2)$, являющиеся преобразованиями Фурье функций, с носителями в полуплоскостях, являются регулярными функциями параметров α_2 при фиксированном α_1 в левой и правой полуплоскостях соответственно. В связи с этим можем обозначить вектор-функции, регулярные по параметру α_2 в нижней, знак минус, и в верхней, знак плюс, полуплоскостях, положив

$$\mathbf{G}_\lambda(\alpha_1,\alpha_2)=\mathbf{G}_-(\alpha_1,\alpha_2),\quad \mathbf{G}_r(\alpha_1,\alpha_2)=\mathbf{G}_+(\alpha_1,\alpha_2)$$

Внося эти обозначения в предыдущее соотношение, приходим при $\theta>0$ к матричному функциональному уравнению Винера– Хопфа следующего вида

$$\mathbf{M}\mathbf{G}_+=\mathbf{G}_-+\mathbf{V}+\mathbf{K}_1^{-\mathbf{1}}\mathbf{U}_\theta,\quad \mathbf{M}=\mathbf{K}_1^{-\mathbf{1}}\mathbf{K}_2,\quad \mathbf{K}_2=\varepsilon_{5r}\mathbf{R}_r^{-1}-\varepsilon_6^{-1}\mathbf{K},\quad \mathbf{K}_1=\varepsilon_6^{-1}\mathbf{K}-\varepsilon_{5\lambda}\mathbf{R}_\lambda^{-1},$$

$$\mathbf{V}=\mathbf{K}_1^{-1}\left(\mathbf{R}_\lambda^{-1}\int\limits_{\partial\Omega_\lambda}\omega_\lambda+\mathbf{R}_r^{-1}\int\limits_{\partial\Omega_r}\omega_r-\varepsilon_\lambda\mathbf{R}_\lambda^{-1}\mathbf{T}_\lambda-\varepsilon_r\mathbf{R}_r^{-1}\mathbf{T}_r\right),\quad \mathbf{U}_\theta=\mathbf{F}_2\mathbf{P}_\theta u\left(x_1,x_2\right).$$

При $\theta\to 0$ последнее функциональное уравнение непрерывно переходит в следующее

$$\mathbf{M}\mathbf{G}_+=\mathbf{G}_-+\mathbf{V}.$$

Эти два функциональных уравнений имеют совершенно разные качественные решения. Первое, являющееся обобщенным функциональным уравнением Винера–Хопфа, при решении сводится к векторной системе интегральных уравнений вида [10]

$$X_2^+ + \left\{N_+(\alpha,\beta)D_-^{-1}(\alpha,\beta)e^{-2i\alpha\theta}X_1^-\right\}^+ = \left\{N_-^{-1}(\alpha,\beta)F_2^+(\alpha,\beta)\right\}^+,$$

$$X_1^- + \left\{D_-(\alpha,\beta)N_+^{-1}(\alpha,\beta)e^{2i\alpha\theta}X_2^+\right\}^- = \left\{D_+^{-1}(\alpha,\beta)F_1^-(\alpha,\beta)\right\}^-,$$
$$M(\alpha,\beta)=D_+(\alpha,\beta)D_-(\alpha,\beta)=N_-(\alpha,\beta)N_+(\alpha,\beta).$$

Векторы контактных напряжений на краях пластин имеют представление

$$\begin{aligned}\mathbf{g}_\lambda(x_1,x_2)&=\sigma_{1\lambda}(x_1,x_2)(-x_2-\theta)^{-1/2},\quad x_2<-\theta,\\ \mathbf{g}_r(x_1,x_2)&=\sigma_{1r}(x_1,x_2)(x_2-\theta)^{-1/2},\quad x_2>\theta.\end{aligned}\tag{8}$$

Векторы $\sigma_{1\lambda}$, σ_{1r} непрерывны по обоим параметрам

Второе уравнение приводит к решениям, имеющим следующие концентрации напряжений в зоне схождения трех блоков

$$\mathbf{g}_\lambda(x_1,x_2)\to\sigma_{2\lambda}(x_1,x_2)x_2^{-1},\quad \mathbf{g}_r(x_1,x_2)\to\sigma_{2r}(x_1,x_2)x_2^{-1}.$$

Все векторы $\sigma_{n\lambda}(x_1,x_2)$ и $\sigma_{nr}(x_1,x_2)$, $n=1,\ldots,4$ непрерывны по обоим параметрам. Таким образом, и для касательных напряжений в области контакта при полной близости пластин –дефекта покрытия, возникают сингулярные касательные напряжения.

Отсюда можно ввести классификацию типов дефектов в покрытиях в зависимости от их поведения при различных видах контакта покрытий с основанием, основываясь на типах разрушений, которые они могут нанести блочной структуре.

1. В том случае, если покрытие контактирует с основанием без трения или испытывает, в основном, нормальные к границе давления, то перпендикулярный к границе дефект опасен возможностью разрушения основания, сформировав его ступенчатую форму в зоне дефекта или вертикально разрезав основание.

2. В том случае, если покрытие имеет характер приклеенной пленки, сопротивляющейся горизонтальному сдвигу, но не сопротивляющейся вертикальным воздействиям, то вертикальный дефект может, при соответствующей горизонтальной нагрузке, вектор которой параллелен торцам дефекта, вызвать разрыв основания сдвигового характера, параллельного торцам дефекта.

3. В том случае, если покрытие имеет характер приклеенной пленки, сопротивляющейся горизонтальному сдвигу, но не сопротивляющейся вертикальным воздействиям, то вертикальный дефект может, при соответствующей горизонтальной нагрузке, вектор которой перпендикулярен торцам дефекта, вызвать разрыв основания растягивающего характера.

Список литературы

[1] Бабешко В.А., Бабешко О.М., Гладской И.Б., Евдокимова О.В, Уафа Г.Н., Хафуз Т.А., Шестопалов В.Л. О локализации статического процесса в телах с дефектными покрытиями // МТТ. 2015. № 4. С. 90–97.

[2] Бабешко В.А., Евдокимова О.В., Бабешко О.М. Об особенностях скрытых дефектов в разнотипных тонкостенных покрытиях // ДАН. 2015. Т. 460. № 4. С. 403–407.

[3] Бабешко В.А., Евдокимова О.В., Бабешко О.М. Топологический метод решения граничных задач и блочные элементы // ДАН. 2013. Т. 449. № 6. С. 657–660.

[4] Babeshko V.A., Evdokimova O.V., Babeshko O.M. The theory of the starting earthquake // Ecological Bulletin of Research Centers of the Black Sea Economic Cooperation, 2016, No. 1, Vol. 2. Pp. 37–80.

[5] Математическая энциклопедия / Под ред. И. М. Виноградова. Внешняя алгебра. М.: Изд-во Советская энциклопедия. Т. 1, 1977. 1151 с.

[6] Ефимов Н.В. Введение в теорию внешних форм. М.: Наука, 1977. 88 с.

[7] Зорич В.А. Математический анализ. Ч. 2. М.: МЦНМО, 2002. 788 с.

[8] Шабат Б.В. Введение в комплексный анализ. Ч. II. М: Наука, 1985. 464 с.

[9] Бабешко В.А., Евдокимова О.В., Бабешко О.М. Внешний анализ в проблеме скрытых дефектов и прогнозе землетрясений// Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2016, № 2. С. 19–28.

[10] Ворович И.И., Бабешко В.А Динамические смешанные задачи теории упругости для неклассических областей. М.: Наука, 1979. 320 с.

Бабешко Ольга Мефодиевна — д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник Научно-исследовательского центра прогнозирования и предупреждения геоэкологических и техногенных катастроф Кубанского государственного университета;
e-mail: babeshko49@mail.ru;

Горшкова Елена Михайловна — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Научно-исследовательского центра прогнозирования и предупреждения геоэкологических и техногенных катастроф Кубанского государственного университета;
e-mail: gem@kubsu.ru.

Федоренко Алексей Григорьевич — канд. физ.-мат. наук, младший научный сотрудник Южного научного центра РАН;
e-mail: afedorenko@mail.ru;

Евдокимова Ольга Владимировна — д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник Южного научного центра РАН;
e-mail: evdokimova.olga@mail.ru;

Хрипков Дмитрий Александрович — научный сотрудник Кубанского государственного университета;
e-mail: vestnik@kubsu.ru;

Уафа Самир Баширович — инженер Кубанского государственного университета;
e-mail: uafa70@mail.ru.

Дата поступления — 10 мая 2017 г.

О ХАРАКТЕРЕ НАРАСТАНИЯ НАПРЯЖЕНИЙ ДЛЯ РАЗНЫХ ТИПОВ СТАРТОВЫХ ЗЕМЛЕТРЯСЕНИЙ

В. А. Бабешко[1,2], А. Г. Федоренко[2], Е. М. Горшкова[1], О. В. Евдокимова[2], А. С. Мухин[1], С. Б. Уафа[1], И. С. Телятников[2], И. Б. Гладской[1]

[1] *Кубанский государственный университет, 350040, Краснодар*

[2] *Южный научный центр РАН, 630090, Ростов-на-Дону*

УДК 539.3

Ранее на примере двух полубесконечных литосферных плит, моделируемых пластинами Кирхгофа, с прямолинейными границами, способных сближаться, установлена возможность возникновения землетрясения в зоне сближения литосферных плит, которое было названо «стартовым». Рассматривался лишь случай статических вертикальных воздействий на основание тяжестей литосферных плит. Для исследования применялся метод упакованных блочных элементов в сочетании с факторизационными и топологическими методами. В настоящей статье рассматриваются статические граничные задачи, в которых изучаются результаты горизонтальных воздействий на литосферные плиты. Выяснены характеристики возникающих концентраций напряжений в зоне сближения литосферных плит. Доказано, что для касательных напряжений в области контакта при сближении литосферных плит имеет место нарастание контактных напряжений по мере сближения торцов плит.

Ключевые слова: метод блочного элемента, граничная задача, псевдодифференциальные уравнения, трещина, пластина, разломы.

1 Постановка задачи

Изучается случай статической задачи для полубесконечных литосферных плит с прямолинейными границами, параллельными друг другу, находящихся на деформируемом основании в двух состояниях. В первом случае дистанция между торцами плит отлична от нуля, равна $2\theta > 0$, во втором случае — она отсутствует, $\theta = 0$, хотя плиты не взаимодействуют. Предполагается, что горизонтальные воздействия на плиты, которые, как известно, крайне медленно движутся, настолько велики, что вертикальными составляющими контактных напряжений можно пренебречь. В реальности, считаем, что кора Земли в этой области состоит из гранитных плит, моделируемых пластинами, находящихся на деформируемом базальтовом основании, на границе Конрада. В статическом варианте можно считать, что плиты, «слиплись» с основанием, что при горизонтальных воздействиях вызывает появление вектора касательных контактных напряжений. В основе исследования лежит ранее развитая теория скрытых дефектов в деформируемых материалах.

2 Исследование проблемы

Статическая граничная задача для векторного варианта горизонтальных воздействий на плиты, моделируемые пластинами Кирхгофа, лежащими на деформируемом основании, ранее рассматривалась в [1]. Примем оси координат x_1ox_2 расположенными в плоскости пластин, а ось x_3 имеющей направление по внешней нормали к основанию. Уравнения граничных задач для пластин имеют форму

$$\mathbf{R}_b\left(\partial x_1, \partial x_2\right)\mathbf{u}_b - \varepsilon_{5b}\mathbf{g}_b = \varepsilon_{5b}\mathbf{t}_b, \tag{1}$$

Отдельные фрагменты работы выполнены в рамках реализации Госзадания на 2017 г. (код проекта 0256-2014-0006), Программы президиума РАН 1-33П (коды проектов с 0256-2015-0088 по 0256-2015-0093), Минобрнауки (код проекта 9.8753.2017/БЧ) и при поддержке грантов РФФИ (коды проектов 14-08-00404, 15-01-01379, 15-08-01377, 16-41-230214, 16-41-230218, 16-48-230216, 17-08-00323).

$$\mathbf{R}_b\left(\partial x_1, \partial x_2\right)\mathbf{u}_b = \left\| \begin{array}{cc} \left(\dfrac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \varepsilon_{1b}\dfrac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) u_{1b} & \left(\varepsilon_{2b}\dfrac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2}\right) u_{2b} \\ \left(\varepsilon_{2b}\dfrac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2}\right) u_{1b} & \left(\dfrac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \varepsilon_{1b}\dfrac{\partial^2}{\partial x_1^2}\right) u_{2b} \end{array} \right\|.$$

Рассматривается каждая пластина как многообразие с краем, причем $\mathbf{u}_b = \{u_{1b}, u_{2b}\}$ — вектор перемещения точек пластин по касательной и нормали к торцам пластин лежит в их срединных плоскостях.

Преобразование Фурье дифференциальной части системы уравнений имеет вид

$$-\mathbf{R}_b(-i\alpha_1, -i\alpha_2)\mathbf{U}_b = \left\| \begin{array}{cc} \left(\alpha_1^2 + \varepsilon_{1b}\alpha_2^2\right) U_{1b} & \varepsilon_{2b}\alpha_1\alpha_2 U_{2b}, \\ \varepsilon_{2b}\alpha_1\alpha_2 U_{1b} & \left(\alpha_2^2 + \varepsilon_{1b}\alpha_1^2\right) U_{2b} \end{array} \right\|,$$

$$\mathbf{U} = \mathbf{F}_2\mathbf{u}, \quad \mathbf{G} = \mathbf{F}_2\mathbf{g}, \quad b = 1, 2, \ldots, B,$$

$$\varepsilon_{1b} = 0.5(1-\nu_b), \quad \varepsilon_{2b} = 0,5(1+\nu_b), \quad \varepsilon_{5b} = \frac{1-\nu_b^2}{E_b h_b},$$

$$g_{1b} = \mu_{0b}\left(\frac{du_{1b}}{dx_3} + \frac{du_{3b}}{dx_1}\right), \quad g_{2b} = \mu_{0b}\left(\frac{du_{2b}}{dx_3} + \frac{du_{3b}}{dx_2}\right), \quad \mu_{0b} = \frac{\mu_b}{H}, \quad x_3 = 0.$$

Приняты следующие обозначения: μ_b — модуль сдвига, ν_b — коэффициент Пуассона, E_b — модуль Юнга, h_b — толщины пластин, H — толщина основания, $\mathbf{g}_b = \{g_{1b}, g_{2b}\}$, $\mathbf{t}_b = \{t_{1b}, t_{2b}\}$ — векторы контактных напряжений и внешних горизонтальных воздействий соответственно, действующих по касательной к границе основания, как и перемещения, в областях Ω_b, где $b = \lambda$ для левой плиты и $b = r$ — для правой. $\mathbf{F}_2 \equiv \equiv \mathbf{F}_2(\alpha_1, \alpha_2)$, $\mathbf{F}_1 \equiv \mathbf{F}_1(\alpha_1)$ — двумерный и одномерный операторы преобразования Фурье соответственно. Описанные в [1] граничные условия здесь сохраняются. Выражения для нормальной N_{x_2} и касательной $T_{x_1x_2}$ составляющих напряжений к срединной плоскости на торцах пластин даются соответственно соотношениями

$$T_{x_1x_2} = \varepsilon_7\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_2}\right), \quad N_{x_2} = \varepsilon_8\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \nu\frac{\partial u_1}{\partial x_1}\right),$$

$$\varepsilon_7 = \frac{E}{2(1+\nu)H}, \quad \varepsilon_8 = \frac{E}{(1-\nu^2)H}.$$

Для деформируемого основания, описываемого граничной задачей (1), применимы различные модели, даваемые соотношениями

$$\mathbf{u}(x_1, x_2) = \varepsilon_6^{-1}\frac{1}{4\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int \mathbf{K}(\alpha_1, \alpha_2)\mathbf{G}(\alpha_1, \alpha_2)e^{-i\langle\alpha, x\rangle}\, d\alpha_1 d\alpha_2,$$

$$x \in \Omega_\lambda, \quad x \in \Omega_r, \quad x \in \Omega_\theta, \quad \langle\alpha, x\rangle = \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2,$$

$$\Omega_\lambda(|x_1| \leqslant \infty;\ x_2 \leqslant -\theta), \quad \Omega_r(|x_1| \leqslant \infty;\ \theta \leqslant x_2), \quad \Omega_\theta(|x_1| \leqslant \infty;\ -\theta \leqslant x_2 \leqslant \theta), \tag{2}$$

$$\mathbf{K} = \|K_{mn}\|, \quad m, n = 1, 2, \quad \mathbf{K}(\alpha_1, \alpha_2) = O(A^{-1}), \quad A = \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2} \to \infty,$$

$$\varepsilon_6^{-1} = \frac{(1-\nu)H}{\mu}, \quad \mathbf{G}(\alpha_1, \alpha_2) = \mathbf{F}_2(\alpha_1, \alpha_2)\mathbf{g},$$

$\mathbf{g}$ — вектор касательных напряжений под пластинами.

Свойства матриц-функций $K_{ks}\left(\alpha_1, \alpha_2, x_3\right)$ в статическом случае описаны в [2, 3].

Рассматривая плиты и основание как блочную структуру, состоящую из трех деформируемых блоков, применим для ее исследования метод блочного элемента. Этот метод, как описано в [4], предполагает, как первый шаг, погружение граничной задачи в топологическую структуру, и лишь на этом этапе использует внешнюю алгебру [5] в варианте, изложенном в [6–8]. В результате строится функциональное уравнение граничной задачи для блочной структуры. Многошаговый алгоритм дальнейших исследований функционального уравнения, уже не имеющих никакого отношения к аппарату внешней алгебры, чтобы не повторять всякий раз операции алгоритма, назван авторами «внешним анализом» [9]. Основанием такого названия является

то, что аналитические преобразования алгоритма осуществляются над математическими объектами, которые включают в себя также и внешние формы. Поэтому название «внешний анализ» несет в себе понятные специалисту вполне определенные действия над функциональными уравнением, включающие дифференциальную факторизацию матриц-функций с элементами из нескольких комплексных переменных, реализации. автоморфизма, состоящее. в вычислении форм-вычетов Лере, либо неполных функциональных уравнений Винера–Хопфа, построение псевдодифференциальных уравнений, извлечение из них интегральных уравнений, диктуемых конкретными граничными условиями граничной задачи, решением интегральных уравнений и получение интегрального представления граничной задачи в каждом блоке в форме «упакованного» блочного элемента [4]. Наконец, «склейка» решений каждого блока, состоящая в построении фактор — топологии некоторых топологических пространств, являющихся декартовыми произведениями топологических пространств носителей и решений [4]. Применяя описанный подход, функциональное уравнение граничной задачи для этого случая, представленное для каждой пластины, превращается в матричное и имеет вид [1]

$$\begin{gathered} -\mathbf{R}_b(-i\alpha_{1b},-i\alpha_{2b})\mathbf{U}_b = \int\limits_{\partial\Omega_b} \boldsymbol{\omega}_b - \varepsilon_{5b}\mathbf{F}_2(\alpha_{1b},\alpha_{2b})(\mathbf{g}_b+\mathbf{t}_b), \\ \mathbf{U}_b = \{U_{1b},U_{2b}\}. \end{gathered} \tag{3}$$

Здесь $\boldsymbol{\omega}_b$ — вектор внешних форм, имеющий представление

$$\boldsymbol{\omega}_b = \{\omega_{1b},\omega_{2b}\},$$

$$\omega_{1b} = e^{i\langle\alpha,x\rangle}\left\{-\left(\varepsilon_{1b}\frac{\partial u_{1b}}{\partial x_2}+\varepsilon_{2b}\frac{\partial u_{2b}}{\partial x_1}-i\varepsilon_{1b}\alpha_{2b}u_{1b}\right)dx_1+\left(\frac{\partial u_{1b}}{\partial x_1}-i\alpha_{1b}u_{1b}-i\varepsilon_{2b}\alpha_{2b}u_{2b}\right)dx_2\right\},$$

$$\omega_{2b} = e^{i\langle\alpha,x\rangle}\left\{-\left(\varepsilon_{2b}\frac{\partial u_{1b}}{\partial x_1}+\frac{\partial u_{2b}}{\partial x_2}-i\alpha_{2b}u_{2b}\right)dx_1+\left(\varepsilon_{1b}\frac{\partial u_{2b}}{\partial x_1}-i\varepsilon_{1b}\alpha_{1b}u_{2b}-i\varepsilon_{2b}\alpha_{2b}u_{1b}\right)dx_2\right\}.$$

$b=\lambda$ — для левой пластины и $b=r$ — для правой.

Для построения псевдодифференциальных уравнений осуществляется дифференциальная факторизация матрицы-функции $-\mathbf{R}_b(-i\alpha_1,-i\alpha_2)$ функционального уравнения. Ради краткости индексы локальных систем координат опущены. Применением алгоритма внешнего анализа, строится факторизующая матрица-функция $\mathbf{D}_b(-i\alpha_{1b},-i\alpha_{2b})$. Принимая во внимание, что определитель матрицы- функции $-\mathbf{R}_b(-i\alpha_1,-i\alpha_2)$ имеет двукратные корни $\alpha_{2b\pm}=\pm i\sqrt{\alpha_{1b}^2}\equiv\pm i\,|\alpha_{1b}|$, получаем факторизующую матрицу-функцию для левой пластины

$$\mathbf{D}_\lambda(-i\alpha_1,-i\alpha_2) = \left\|\begin{matrix} \dfrac{1}{(\alpha_2-\alpha_{2-})^2} & \dfrac{\alpha_{2-}}{(\alpha_2-\alpha_{2-})^2\alpha_1}-\dfrac{(1+\varepsilon_{1\lambda})}{(\alpha_2-\alpha_{2-})\varepsilon_{2\lambda}\alpha_1} \\ 0 & 1 \end{matrix}\right\|$$

Для правой пластины она аналогична.

Дальнейшее применение внешнего анализа, описанного выше, с учетом схемы, реализованной в [4], приводит к следующим соотношениям при $\theta>0$:

$$\mathbf{P}_\lambda\mathbf{u}(x_1,x_2,0)+\mathbf{P}_\theta\mathbf{u}(x_1,x_2,0)+\mathbf{P}_r\mathbf{u}(x_1,x_2,0) = \varepsilon_6^{-1}\mathbf{F}_2^{-1}\mathbf{K}(\alpha_1,\alpha_2,0)\left[\mathbf{G}_\lambda(\alpha_1,\alpha_2)+\mathbf{G}_r(\alpha_1,\alpha_2)\right], \tag{4}$$

$$\mathbf{G}_\lambda(\alpha_1,\alpha_2) = \mathbf{F}_2\mathbf{P}_\lambda\mathbf{g}(x_1,x_2), \quad \mathbf{G}_r(\alpha_1,\alpha_2) = \mathbf{F}_2\mathbf{P}_r\mathbf{g}(x_1,x_2),$$

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{F}_2^{-1}\left[\mathbf{R}_p(-i\alpha_1,-i\alpha_2)\right]^{-1}\left\langle-\int\limits_{\partial\Omega_p}\omega_p+\varepsilon_{5p}\mathbf{F}_2(\mathbf{g}_p+\mathbf{t}_\lambda)\right\rangle, \quad p=\lambda,r.$$

Здесь $\mathbf{P}_\lambda$, $\mathbf{P}_r$, $\mathbf{P}_\theta$ — проекторы на левую, правую полуплоскости и на область Ω_θ. Применив оператор $\mathbf{F}_2^{-1}$, получим соотношения вида

$$\left[\mathbf{R}_\lambda(-i\alpha_1,-i\alpha_2)\right]^{-1}\left\langle-\int\limits_{\partial\Omega_\lambda}\omega_\lambda+\varepsilon_{5\lambda}(\mathbf{G}_\lambda+\mathbf{T}_\lambda)\right\rangle+\left[\mathbf{R}_r(-i\alpha_1,-i\alpha_2)\right]^{-1}\left\langle-\int\limits_{\partial\Omega_r}\omega_r+\varepsilon_{5r}(\mathbf{G}_r+\mathbf{T}_r)\right\rangle-$$
$$-\varepsilon_6^{-1}\mathbf{K}(\alpha_1,\alpha_2,0)\left[\mathbf{G}_\lambda(\alpha_1,\alpha_2)+\mathbf{G}_r(\alpha_1,\alpha_2)\right]=0,$$

$$\mathbf{T}_\lambda = \mathbf{F}_2\mathbf{t}_\lambda(x_1, x_2), \quad \mathbf{T}_r = \mathbf{F}_2\mathbf{t}_r(x_1, x_2).$$

Вектор-функции $\mathbf{G}_\lambda(\alpha_1, \alpha_2)$, $\mathbf{G}_r(\alpha_1, \alpha_2)$, являющиеся преобразованиями Фурье функций, с носителями в полуплоскостях, являются регулярными функциями параметров α_2 при фиксированном α_1 в левой и правой полуплоскостях соответственно. В связи с этим можем обозначить вектор-функции, регулярные по параметру α_2 в нижней, знак минус, и в верхней, знак плюс, полуплоскостях, положив

$$\mathbf{G}_\lambda(\alpha_1, \alpha_2) = \mathbf{G}_-(\alpha_1, \alpha_2), \quad \mathbf{G}_r(\alpha_1, \alpha_2) = \mathbf{G}_+(\alpha_1, \alpha_2).$$

3 Результаты исследования

Внося последние формулы в предыдущее соотношение, приходим при $\theta > 0$ к матричному функциональному уравнению Винера–Хопфа следующего вида

$$\mathbf{M}\mathbf{G}_+ = \mathbf{G}_- + \mathbf{V} + \mathbf{K}_1^{-\mathbf{1}}\mathbf{U}_\theta, \quad \mathbf{M} = \mathbf{K}_1^{-\mathbf{1}}\mathbf{K}_2, \quad \mathbf{K}_2 = \varepsilon_{5r}\mathbf{R}_r^{-1} - \varepsilon_6^{-1}\mathbf{K}, \quad \mathbf{K}_1 = \varepsilon_6^{-1}\mathbf{K} - \varepsilon_{5\lambda}\mathbf{R}_\lambda^{-1},$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{K}_1^{-1}\left(\mathbf{R}_\lambda^{-1}\int\limits_{\partial\Omega_\lambda}\omega_\lambda + \mathbf{R}_r^{-1}\int\limits_{\partial\Omega_r}\omega_r - \varepsilon_\lambda\mathbf{R}_\lambda^{-1}\mathbf{T}_\lambda - \varepsilon_r\mathbf{R}_r^{-1}\mathbf{T}_r\right), \quad \mathbf{U}_\theta = \mathbf{F}_2\mathbf{P}_\theta u\,(x_1, x_2)\,.$$

При $\theta \to 0$ последнее функциональное уравнение непрерывно переходит в следующее

$$\mathbf{M}\mathbf{G}_+ = \mathbf{G}_- + \mathbf{V}.$$

Эти два функциональных уравнения имеют совершенно разные качественные решения. Первое, являющееся обобщенным функциональным уравнением Винера–Хопфа, при решении сводится к векторной системе интегральных уравнений вида [2]

$$X_2^+ + \left\{N_+(\alpha,\beta)D_-^{-1}(\alpha,\beta)e^{-2i\alpha\theta}X_1^-\right\}^+ = \left\{N_-^{-1}(\alpha,\beta)F_2^+(\alpha,\beta)\right\}^+,$$

$$X_1^- + \left\{D_-(\alpha,\beta)N_+^{-1}(\alpha,\beta)e^{2i\alpha\theta}X_2^+\right\}^- = \left\{D_+^{-1}(\alpha,\beta)F_1^-(\alpha,\beta)\right\}^-,$$

$$M(\alpha,\beta) = D_+(\alpha,\beta)D_-(\alpha,\beta) = N_-(\alpha,\beta)N_+(\alpha,\beta).$$

Контактные напряжения на краях пластин имеют представление

$$\mathbf{g}_\lambda(x_1, x_2) = \operatorname{Re}\sigma_{1\lambda}(x_1, x_2)(x_2 + \theta)^{-1/2}, \quad x_2 < -\theta,$$

$$\mathbf{g}_r(x_1, x_2) = \operatorname{Re}\sigma_{1r}(x_1, x_2)(x_2 - \theta)^{-1/2}, \quad x_2 > \theta.$$

Векторы $\sigma_{1\lambda}$, σ_{1r} непрерывны по обоим параметрам.

Второе уравнение приводит к решениям, имеющим следующие концентрации напряжений в зоне схождения трех блоков

$$\mathbf{g}_\lambda(x_1, x_2) \to \sigma_{2\lambda}(x_1, x_2)x_2^{-1}, \quad \mathbf{g}_r(x_1, x_2) \to \sigma_{2r}(x_1, x_2)x_2^{-1},$$

Все векторы $\sigma_{n\lambda}(x_1, x_2)$ и $\sigma_{nr}(x_1, x_2)$, $n = 1, \ldots, 4$ непрерывны по обоим параметрам. Таким образом, и для касательных напряжений в области контакта при сближении литосферных плит имеет место нарастание контактных напряжений по мере сближения торцов плит.

Список литературы

[1] Бабешко В.А., Бабешко О.М., Гладской И.Б., Евдокимова О.В, Уафа Г.Н., Хафуз Т.А., Шестопалов В.Л. О локализации статического процесса в телах с дефектными покрытиями // МТТ. 2015. № 4. С. 90–97.

[2] Ворович И.И., Бабешко В.А., Динамические смешанные задачи теории упругости для неклассических областей. М.: Наука, 1979. 320 с.

[3] Ворович И.И.,Бабешко В.А., Пряхина О.Д. Динамика массивных тел и резонансные явления в деформируемых средах. М.: Наука, 1999. 246 с.

[4] Babeshko V.A., Evdokimova O.V., Babeshko O.M. The theory of the starting earthquake // Ecological Bulletin of Research Centers of the Black Sea Economic Cooperation, 2016, no. 1, vol. 2. Pp. 37–80.

[5] Математическая энциклопедия / Под ред. И. М. Виноградова. Внешняя алгебра. М.: Изд-во Советская энциклопедия. Т. 1. 1977, 1151 с.

[6] Ефимов Н.В. Введение в теорию внешних форм. М.: Наука, 1977. 88 с.

[7] Зорич В.А. Математический анализ. Ч. 2. М.: МЦНМО, 2002. 788 с.

[8] Шабат Б.В. Введение в комплексный анализ. Ч. II. М.: Наука, 1985. 464 с.

[9] Бабешко В.А., Евдокимова О.В., Бабешко О.М. Внешний анализ в проблеме скрытых дефектов и прогнозе землетрясений// Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2016, № 2. С. 19–28.

Бабешко Владимир Андреевич — академик РАН, д-р физ.-мат. наук, заместитель председателя Южного научного центра РАН, зав. кафедрой математического моделирования Кубанского государственного университета, директор Научно-исследовательского центра прогнозирования и предупреждения геоэкологических и техногенных катастроф Кубанского государственного университета;
e-mail: babeshko41@mail.ru;

Федоренко Алексей Григорьевич — канд. физ.-мат. наук, младший научный сотрудник Южного научного центра РАН;
e-mail: afedorenko@mail.ru;

Горшкова Елена Михайловна — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Научно-исследовательского центра прогнозирования и предупреждения геоэкологических и техногенных катастроф Кубанского государственного университета;
e-mail: gem@kubsu.ru.

Евдокимова Ольга Владимировна — д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник Южного научного центра РАН;
e-mail: evdokimova.olga@mail.ru

Мухин Алексей Сергеевич — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Научно-исследовательского центра прогнозирования и предупреждения геоэкологических и техногенных катастроф Кубанского государственного университета;
e-mail: muhin@mail.kubsu.ru

Уафа Самир Баширович — инженер Кубанского государственного университета;
e-mail: uafa70@mail.ru

Телятников Илья Сергеевич — канд. физ.-мат. наук, младший научный сотрудник лаборатории прикладной математики и механики Южного научного центра РАН;
e-mail: ilux_t@list.ru

Гладской Игорь Борисович — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Научно-исследовательского центра прогнозирования и предупреждения геоэкологических и техногенных катастроф Кубанского государственного университета;
e-mail: i.glad@list.ru

Дата поступления — 10 мая 2017 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУХ АЛГОРИТМОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОДНОРОДНЫХ СЛУЧАЙНЫХ ПОЛЕЙ С ЧЕТЫРЕХПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИЕЙ

Г. А. Бабичева[1], Н. А. Каргаполова[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.6

В работе исследуются два алгоритма моделирования однородных гауссовских двумерных полей с четырехпараметрической экспоненциальной корреляционной функцией. В основе первого алгоритма лежат метод факторизации корреляционной функции и рандомизация ее параметров. Второй алгоритм основан на методе условных распределений для моделирования векторных гауссовских последовательностей с блочно-теплицевой корреляционной матрицей. Основной вопрос, рассматриваемый в работе — численное исследование областей практической применимости указанных алгоритмов.

Ключевые слова: численное моделирование, однородное гауссовское поле, регулярная сетка.

Введение

При решении широкого класса прикладных задач методами статистического моделирования достаточно часто приходится моделировать случайные гауссовские поля с заданной корреляционной структурой. Существует ряд алгоритмов моделирования случайных полей, например, векторные алгоритмы, основанные на методе условных распределений, на векторных моделях авторегрессии, скользящего среднего, смешанных моделях авторегрессии и скользящего среднего и др., позволяющих строить реализации гауссовских полей дискретных аргументов с заданной корреляционной структурой [7].

В ряде задач статистической метеорологии корреляционная структура однородного поля определяется функцией вида

$$r\left(x_1, y_1, x_2, y_2\right) = \exp\left(-\left(\alpha x^2 + \beta xy + \gamma y^2\right)^{\theta}\right), \tag{1}$$

где (x_i, y_i), $i = 1, 2$ — координаты точки поля, $x = x_1 - x_2$, $y = y_1 - y_2$, а $\alpha, \beta, \gamma, \theta$ — некоторые числовые коэффициенты. Перечисленные выше алгоритмы можно использовать для моделирования случайных полей с корреляционной структурой, определяемой функцией вида (1). Однако, они обладают общим недостатком: моделирование большого количества реализаций случайного поля оказывается достаточно трудоёмкой задачей в смысле затрат времени на вычисления и затрат машинной памяти. Кроме того, для корреляционных функций указанного выше вида стандартные алгоритмы при некоторых наборах параметров $\alpha, \beta, \gamma, \theta$ вычислительно неустойчивы. В связи с этими недостатками, для различных частных случаев разрабатывают специальные более экономичные и устойчивые алгоритмы моделирования [5, 6, 7].

В данной работе исследуются два алгоритма моделирования однородных гауссовских двумерных полей с четырехпараметрической экспоненциальной корреляционной функцией вида (1). В основе первого алгоритма лежат метод факторизации корреляционной функции и рандомизация ее параметров. Второй алгоритм основан на методе условных распределений для моделирования векторных гауссовских последовательностей с блочно-теплицевой корреляционной матрицей. Основной вопрос, рассматриваемый в работе — численное

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 15-01-01458-а, 16-31-00038-мол-а, 16-31-00123-мол-а) и гранта Президента РФ (номер гранта МК-659.2017.1).

исследование областей практической применимости указанных алгоритмов. В частности, в работе будет показано, что первый алгоритм применим для более узкого, по сравнению с вторым, класса корреляционных функций, но позволяет устойчиво моделировать поля на сетках с существенно большим числом узлов.

1 Описание алгоритмов

В данном параграфе приведено краткое описание двух алгоритмов моделирования гауссовских однородных полей на регулярных сетках с корреляционными функциями вида (1).

Для корреляционных функций $r(\rho) = \exp\left(-\alpha\rho^2\right)$, $\rho = \sqrt{x^2+y^2}$, $r(x_1, y_1, x_2, y_2) = \exp\left(-\left(\alpha x^2 + \gamma y^2\right)\right)$, которые являются частными случаями функции вида (1), существует эффективный алгоритм моделирования гауссовских полей на регулярных сетках. В литературе его называют алгоритмом "по строкам и столбцам" [2, 3, 7].При его реализации корреляционные матрицы задаются отдельно на горизонтальных и вертикальных сечениях поля. В основе этого алгоритма лежит тот факт, что корреляционная матрица поля представима в виде прямого произведения корреляционных матриц его горизонтального и вертикального сечений. Преимуществом данного метода является то, что он сводится к последовательному использованию алгоритмов моделирования гауссовских векторов с теплицевыми корреляционными матрицами, заданными функциями вида $r(x) = \exp\left(-\alpha x^2\right)$. Для них алгоритмы, основанные на методе условных распределений, реализуются с высокой точностью.

Алгоритм моделирования "по строкам и столбцам" имеет специфику, которую можно проиллюстрировать следующим примером. Предположим, что мы моделируем однородное гауссовское поле на равномерной прямоугольной сетке размера $m \times n$ узлов (для простоты здесь и далее используем единичный шаг сетки). Элементы корреляционных матриц горизонтального $R^{(1)} = \left(r_{ij}^{(1)}\right)$, $i,j = 1,\ldots,n$ и вертикального $R^{(2)} = \left(r_{kp}^{(2)}\right)$, $k,p = 1,\ldots,m$ сечений поля задаются функциями $r_{ij}^{(1)} = \exp\left(-\alpha_1 |i-j|^2\right)$ и $r_{kp}^{(2)} = \exp\left(-\alpha_2 |k-p|^2\right)$ соответственно. После реализации алгоритма "по строкам и столбцам" корреляционная функция построенного однородного случайного поля имеет вид

$$r(i,j,k,p) = \exp\left(-\left(\alpha_1 (i-j)^2 + \alpha_2 (k-p)^2\right)\right).$$

При этом, изолинии корреляционной функции (сечения поверхности корреляционной функции горизонтальными плоскостями) будут представлять собой эллипсы с главными осями, ориентированными вдоль осей Ox, Oy.

Однако, в прикладных задачах достаточно часто встречаются корреляционные функции случайных полей, изолинии которых являются эллипсами с главными осями, повернутыми относительно положительных направлений осей Ox, Oy на некоторый угол $\phi \in (0^o, 180^o)$.Так, например, для корреляционной функции поля геопотенциала на уровне 500 мбар угол поворота $\phi \approx 45^o$, а для корреляционной функции поля скорости ветра на этом же уровне $\phi \approx 100^o$ [1]. Для моделирования полей с такими корреляционными функциями в работе [6] была предложена модификация метода "по строкам и столбцам". Суть предложенной модификации заключается в том, что после моделирования векторов с корреляционной матрицей $R^{(1)}$, на втором шаге алгоритма "по строкам и столбцам" производится преобразование не по вертикальным сечениям поля, а по наклонным (т.е. по узлам, находящимся на прямых некоторого наклона d относительного горизонтального направления сетки). Эта модификация имеет свои ограничения, в том числе угол ϕ не может быть произвольным. Ограничения на угол ϕ накладываются за счет того, что должно выполняться равенство

$$tg2\phi = \frac{2d\alpha_1}{\alpha_2 + \alpha_1(d^2-1)},$$

а сдвиг d не может превышать число n узлов сетки в горизонтальном направлении. Второй алгоритм, рассматриваемый в данной статье, основан на методе условных распределений вероятностей, в котором матрицы коэффициентов регрессии вычисляются на основе решения уравнений Юла–Уолкера с блочно-теплицевой корреляционной матрицей с помощью известного рекурсивного алгоритма Робинсона [4, 7]. Этот алгоритм является общим в том смысле, что теоретически он должен работать для произвольной блочно-теплицевой корреляционной матрицы, в том числе и матрицы, построенной с помощью корреляционной функции вида (1). Также, теоретически, этот алгоритм позволяет моделировать гауссовские поля с произвольным углом поворотаϕ. На практике же, этот алгоритм устойчив не для всех наборов параметров корреляционной функции (1). Соответствующие примеры будут приведены в следующем параграфе.

2 Численные эксперименты

Был проведен ряд экспериментов по моделированию гауссовских полей с корреляционной функцией вида (1) с помощью алгоритмов, описанных в предыдущем параграфе. Во всех экспериментах моделировалось N реализаций поля размерности 25×30 узлов.

Если говорить об алгоритме, основанном на методе условных распределений вероятностей, то эксперименты показали, что для $\theta \leq 0.85$ алгоритм работает корректно при произвольных параметрах α, β, γ и определяемом этими параметрами угле ϕ. В качестве примера на Рис. 1 и Рис. 2 приведены теоретические изолинии и изолинии, полученные при оценке корреляционной функции по модельным реализациям для различных наборов параметров α, β, γ.

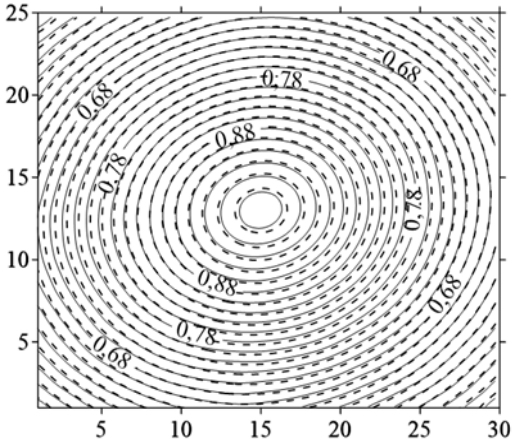


Рис. 1: Теоретические (пунктир) и эмпирические (сплошная) изолинии. $\alpha = 0.00098$, $\beta = -0.00016$, $\gamma = -0.00147$, $\theta = 0.7$, $N = 10^5$.

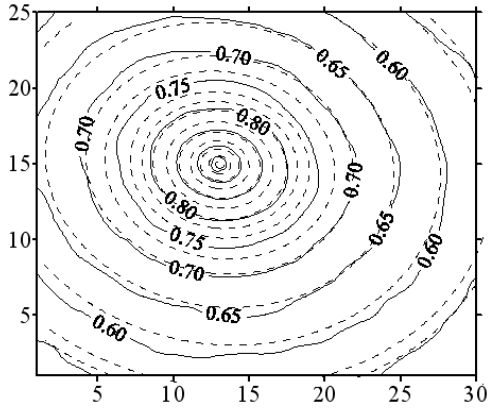


Рис. 2: Теоретические (пунктир) и эмпирические (сплошная) изолинии. $\alpha = 0.00147$, $\beta = 0.00016$, $\gamma = 0.00098$, $\theta = 0.36$, $N = 10^4$.

При $\theta > 0.85$ алгоритм, основанный на методе условных распределений перестает быть устойчивым. При $\theta > 0.85$ используемые при моделировании матрицы оказываются плохо обусловленными, в следствии чего при моделировании накапливаются существенные ошибки. Для иллюстрации на Рис. 3 приведены теоретические и экспериментальные изолинии при $\theta = 0.9$.

Несмотря на то, что теоретических ограничений на размерность сетки при использовании рассматриваемого алгоритма нет, на практике уже для сеток размерностью порядка 100×100 узлов алгоритм оказывается

непригодным в том смысле, что время построения одной реализации поля слишком велико. Таким образом, можно заключить, что алгоритм на основе метода условных распределений применим только для моделирования на относительно небольших сетках и при $\theta \leq 0.85$.

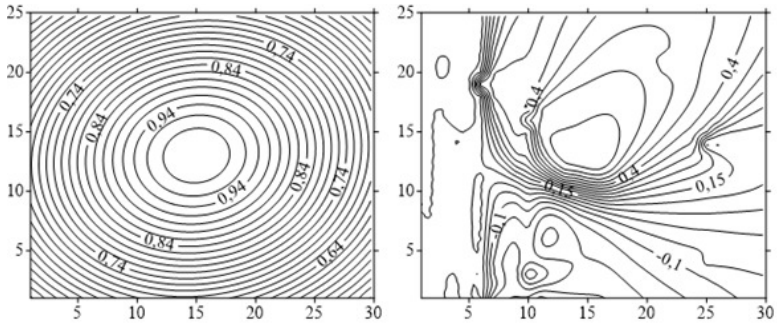


Рис. 3: Теоретические (слева) и эмпирические (справа) изолинии. $\alpha = 0.00098$, $\beta = -0.00016$, $\gamma = -0.00147$, $\theta = 0.9$, $N = 10^5$.

Что касается алгоритма, основанного на модификации метода "по строкам и столбцам", то по своему построению он применим только для случая $\theta = 1$ (заметим, что для такого значения θалгоритм на основе метода условных распределений, как уже отмечалось выше, неустойчив). При этом алгоритм устойчиво работает при произвольных параметрах α, β, γ (хотя и требует регуляризации корреляционной матрицы в ряде случаев). Также следует отметить, что численные эксперименты не выявили каких-либо ограничений на размерность сетки, кроме тех, что накладываются размером оперативной памяти компьютера. На Рис. 4 приведен пример теоретических и экспериментальных изолинии, полученных при использовании рассматриваемой модификации метода "по строкам и столбцам".

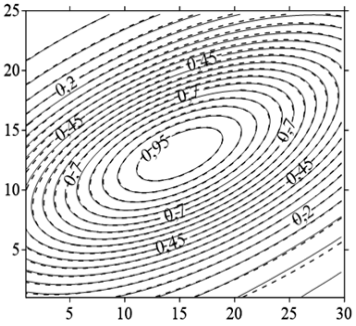


Рис. 4: Теоретические (пунктир) и эмпирические (сплошная) изолинии. $\alpha = 0.005, \beta = -0.01, \gamma = 0.015, \theta = 1$, $N = 10^5$.

Заключение

В работе были численно исследованы области практической применимости двух алгоритмов моделирования однородных гауссовских полей с корреляционной структурой, определяемой функцией вида (1). Было показано, что алгоритм, основанный на методе условных распределений устойчиво работает для значений параметра $\theta \leq 0.85$, и неустойчив при $\theta > 0.85$. При этом использование этого алгоритма позволяет моделировать поля с произвольным углом поворота ϕ, но лишь на сетках с относительно небольшим числом узлом. В тоже время, модификация алгоритма "по строкам и столбцам" применима только при $\theta = 1$, и возможные углы поворота определяются соотношениями между параметрами корреляционной функции. Зато на раз-

мерность сетки, на которой осуществляется моделирование, не накладывается никаких ограничений, кроме тех, что определяются размером оперативной памяти компьютера, на котором производится моделирование.

Список литературы

[1] Гандин Л.С., Каган Р.Л. Статистические методы интерпретации метеорологических данных. Л: Гидрометеоиздат, 1976.

[2] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.

[3] Каган Р.Л., Федорченко Е.И. К вопросу о статистическом моделировании двумерных метеорологических полей // Труды ГГО. 1973/.No 308. С. 20–26.

[4] Марпл-мл. С.Л. Цифровой спектральный анализ и его приложения. М.: Мир, 1990.

[5] Огородников В.А. Моделирование одного класса изотропных гауссовских полей // Сб. научных трудов "Теория и приложения статистического моделирования".Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1988. С. 25–30.

[6] Babicheva G.A., Kargapolova N.A., Ogorodnikov V.A. Special algorithms for the simulation of homogeneous random fields // Numerical Analysis and Applications. 2016. .Vol. 9, iss. 2. P. 95–106.

[7] Ogorodnikov V.A., Prigarin S.M. Numerical Modelling of Random Processes and Fields: Algorithms and Applications. The Netherlands, Utrecht: VSP, 1996.

Галина Андреевна Бабичева — асп. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: galinab2811@gmail.com;
Нина Александровна Каргаполова — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: nkargapolova@gmail.com.
Дата поступления — 15 мая 2017 г.

О ПОГРЕШНОСТИ АППРОКСИМАЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ ДЛЯ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ, ПОСТРОЕННЫХ НА СИМПЛЕКСАХ РАЗМЕРНОСТЕЙ 3 И 4

Н. В. Байдакова

Институт математики и механики им. Н.Н.Красовского УрО РАН, 620990, Екатеринбург

УДК 517.51

Для случая интерполяции функции по равномерным узлам d-симплекса многочленом степени n известны полученные П. Жамэ оценки сверху величин аппроксимации производных функции в терминах характеристики, требующей вычисления максимума некоторой величины по всем единичным векторам d-мерного пространства. Указанные оценки являются близкими к неулучшаемым на естественном классе функций. В работе обсуждаются оценки сверху через новую характеристику, близкие к оценкам П. Жамэ и требующие вычисления максимума на конечном множестве, в трехмерном и четырехмерном пространствах.

Ключевые слова: многомерная интерполяция, метод конечных элементов.

Введение

Пусть $\Delta \subset \mathbb{R}^d$ — невырожденный d-симплекс с вершинами $a_1, a_2, \ldots, a_{d+1}$; H — диаметр симплекса Δ (длина наибольшего ребра); $n \in \mathbb{N}$; $\{a_{i_1 i_2 \ldots i_{d+1}}\}$ — узлы равномерной сетки на d-симплексе Δ, т. е. узлы, имеющие следующие барицентрические координаты:

$$a_{i_1 i_2 \ldots i_{d+1}} = \left(\frac{i_1}{n}, \frac{i_2}{n}, \ldots, \frac{i_{d+1}}{n} \right),$$

$$i_k \in \{0, \ldots, n\}, \quad i_1 + i_2 + \ldots + i_{d+1} = n;$$

$W^{n+1}M$ — множество функций, определенных и непрерывных на Δ вместе со всеми своими частными производными до порядка $n+1$ включительно, у которых все производные порядка $n+1$ ограничены по модулю константой M; $P_n^d = P_n^d[f]$ — многочлен степени не выше n по совокупности d переменных, интерполирующий функцию $f \in W^{n+1}M$ в узлах равномерной сетки симплекса Δ, т. е.

$$P_n^d(a_{i_1 i_2 \ldots i_{d+1}}) = f(a_{i_1 i_2 \ldots i_{d+1}}),$$

$$i_k \in \{0, \ldots, n\}, \quad i_1 + i_2 + \ldots + i_{d+1} = n.$$

Будем писать, что величины ψ_1 и ψ_2 находятся в отношении $\psi_1 \underset{\alpha_1,\ldots,\alpha_s}{\lesssim} \psi_2$ (или $\psi_1 \underset{\alpha_1,\ldots,\alpha_s}{\gtrsim} \psi_2$), где $\alpha_1, \ldots, \alpha_s$ — некоторые числовые параметры, если найдется неотрицательное число $C(\alpha_1, \ldots, \alpha_s)$, зависящее от $\alpha_1, \ldots, \alpha_s$, такое, что $\psi_1 \le C(\alpha_1, \ldots, \alpha_s)\psi_2$ (или $\psi_1 \ge C(\alpha_1, \ldots, \alpha_s)\psi_2$). Если $\psi_1 \underset{\alpha_1,\ldots,\alpha_s}{\lesssim} \psi_2 \underset{\alpha_1,\ldots,\alpha_s}{\lesssim} \psi_1$, то будем писать $\psi_1 \underset{\alpha_1,\ldots,\alpha_s}{\asymp} \psi_2$. Аналогично будем использовать обозначения $\psi_1 \lesssim \psi_2$, $\psi_1 \gtrsim \psi_2$, $\psi_1 \asymp \psi_2$, если найдется такая неотрицательная константа C, что соответственно выполняются соотношения $\psi_1 \le C\psi_2$, $\psi_1 \ge C\psi_2$, $\psi_1 \lesssim \psi_2 \lesssim \psi_1$.

Для произвольных d и n П. Жамэ [1] был получен следующий результат. Пусть $E_d = \{e_s\}_{s=1}^d$ — множество единичных линейно независимых векторов; ξ — произвольный единичный вектор из $\mathbb{R}^d$; $\mathcal{E}_N = \{e_s\}_{s=1}^N$ —

Работа выполнена за счет Российского научного фонда (проект № 14-11-00702П).

множество всех единичных векторов, параллельных ребрам d-симплекса Δ. Пусть θ_s — угол между ξ и прямой с направляющим вектором e_s (т. е. $0 \le \theta_s \le \pi/2$). Положим

$$\theta = \theta(\Delta) = \min_{E_d \subset \mathcal{E}_N} \max_{\xi \in \mathbb{R}^d} \min_{e_s \in E_d} \{\theta_s\}.$$

Тогда в соответствии с [1] для любых единичных векторов $\xi_1, \dots, \xi_s \in \mathbb{R}^d$ имеет место оценка

$$\left\| D^s_{\xi_1,\dots,\xi_s} \left(f - P^d_n\right) \right\| \underset{n,d}{\lesssim} M \frac{H^{n+1-s}}{(\cos\theta)^s}\ , \quad s = 0, \dots, n, \tag{1}$$

где $\|\cdot\|$ — равномерная норма на Δ.

В [4] было показано, что оценки (1) качественно являются близкими к неулучшаемым по отношению к их зависимости от геометрии симплекса. Однако эти оценки, несмотря на их широкую известность, не так часто используются. Возможно, это происходит в том числе из-за сложности определения величины $\cos\theta$. Существует ряд других оценок типа (1) через другие геометрические характеристики симплекса при $d = 2, 3$ или при $n = 1$ (случаев произвольных $d, n \in \mathbb{N}$ в литературе рассмотрено не так много), однако полных сравнений этих характеристик с характеристикой $\cos\theta$, как правило, не проводится. Частичный обзор таких результатов можно найти в [4]. Мы рассмотрим еще одну геометрическую характеристику симплекса, которая достаточно просто определяется и качественно ведет себя аналогично $\cos\theta$.

1 Определение новой геометрической характеристики симплекса

Обозначим через T_i $(i = 0, \dots, d)$ грани размерности $d-1$ симплекса Δ, для которых соответственно $a_i \notin T_i$; τ_{ij} — единичные векторы, направленные от a_i к a_j. Пусть γ_{ij} — угол между τ_{ij} и T_i; γ_i и γ — такие углы, что

$$\sin\gamma_i = \max_{\substack{1 \le j \le d+1 \\ j \ne i}} \sin\gamma_{ij}\ ,$$

$$\sin\gamma = \min_{1 \le i \le d+1} \sin\gamma_i\ .$$

Кроме того, нам понадобятся следующие обозначения: $\mathcal{T}_{ijk}$ — треугольник с вершинами a_i, a_j, a_k; ω_{ijk}, ν_{ijk} — соответственно наибольший и средний углы треугольника $\mathcal{T}_{ijk}$; $\alpha^{ij}_{k_1 \dots k_s}$ — угол между вектором τ_{ij} и плоскостью размерности $s-1$, натянутой на точки $a_{k_1}, \dots, a_{k_s}$; ω — такой угол, что

$$\sin\omega = \max_{\substack{1 \le i,j,k \le d+1 \\ i \ne j, i \ne k, j \ne k}} \sin\omega_{ijk}\ .$$

Теорема 1. *Для $d = 3, 4$ имеет место соотношение* $\cos\theta \lesssim \sin\gamma \lesssim \sqrt[d]{\cos\theta}$.

Доказательство. Оценка $\cos\theta \lesssim \sin\gamma$ для $d = 3$ доказана в [3]. Для $d \ge 4$ справедливость этого неравенства устанавливается аналогично с помощью характеристики

$$\theta_{\mathcal{R}} = \theta_{\mathcal{R}}(\Delta) = \max_{|\xi|=1} \min_{\tau \in \mathcal{E}_N} \arccos(\xi \cdot \tau) \le \theta,$$

предложенной в [2]. Пусть $\sin\gamma = \sin\gamma_{d+1}$. Выбирая в качестве ξ_0 единичную нормаль к плоскости грани T_{d+1}, получаем

$$\cos\theta \le \cos\theta_{\mathcal{R}} \le \max_{e \in \mathcal{E}} \left|\cos(\widehat{\xi_0, e})\right| = \max_{e \in \mathcal{E}} \left|\sin(\widehat{T_{d+1}, e})\right| = \sin\gamma,$$

где $(\widehat{T_{d+1}, e})$ — угол между плоскостью размерности $d-1$, в которой лежит грань T_{d+1}, и вектором e.

Неравенство $\sin\gamma \lesssim (\cos\gamma)^{1/(d-1)}$ при $d = 3$ доказано в [3] (см. лемму 1). При $d = 4$ используем аналогичный метод (также этот метод был применен в [4] при доказательстве теоремы 1, но в [4] речь идет о другой геометрической характеристике, в связи с чем имеются отличия в рассуждениях) с некоторыми дополнениями, которые требуются в этом случае.

В случае $d = 4$ любая грань T_i (i=1,. . .,5) является тетраэдром. Рассмотрим треугольник $\mathcal{T}_{ijk}$, для которого $\sin\omega_{ijk} = \sin\omega$, и тетраэдр T_s, для которого $\mathcal{T}_{ijk}$ является одной из граней. Тогда у тетраэдра T_s

найдется еще одна грань $\mathcal{T}_{i^*j^*k^*}$, отличная от $\mathcal{T}_{ijk}$ и такая, что $\sin\omega_{i^*j^*k^*} \asymp \sin\omega_{ijk}$. Кроме того, для любого треугольника $\mathcal{T}_{ijk}$ выполняется соотношение $\sin\omega_{ijk} \asymp \sin\nu_{ijk}$. Таким образом, мы можем считать, что вершины симплекса Δ занумерованы таким образом, что

$$\begin{cases} \sin\gamma \lesssim \sin\alpha_{1234}^{5,k_5} \lesssim \sin\alpha_{123}^{5,k_5} \lesssim \sin\alpha_{123}^{4,k_4} \lesssim \sin\alpha_{12}^{4,k_4} \lesssim \sin\alpha_{12}^{13} \asymp \sin\omega, \\ \sin\gamma \lesssim \sin\alpha_{1234}^{5,k_5} \lesssim \sin\alpha_{123}^{5,k_5} \lesssim \sin\alpha_{12}^{5,k_5} \lesssim \sin\alpha_{12}^{13} \asymp \sin\omega, \end{cases} \tag{2}$$

где $k_4, k_5 \in \{1,2\}$.

Положим

$$E_0 = \{\tau_{12};\tau_{13};\tau_{4,k_4};\tau_{5,k_5}\};$$
$$b_1 = \tau_{12};\ b_2 = \tau_{13};\ b_3 = \tau_{4,k_4};\ b_4 = \tau_{5,k_5};$$
$$\beta = \max_{\xi\in\mathbb{R}^3}\min_{e\in E_0}\{\theta_e\}, \tag{3}$$

где $\theta_e = \arccos|(\xi,e)|$ — угол между вектором ξ и прямой с направляющим вектором e (через $(\cdot,\cdot)$ обозначено скалярное произведение). Тогда согласно определению величины θ будет

$$\cos\beta \le \cos\theta.$$

Возьмем последовательность векторов b_1, b_2, b_3, b_4 применим к ней процесс ортогонализации Грама-Шмидта, нормируем полученные векторы и получим соответственно ортонормированную систему векторов e_1, e_2, e_3, e_4, т. е.

$$e_1 = b_1,\ e_i = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1}(b_i,e_j)e_j\right) \Big/ \left|b_i - \sum_{j=1}^{i-1}(b_i,e_j)e_j\right|, \quad i = 2,\dots,4.$$

Пусть $\xi_0 \in \mathbb{R}$ — единичный вектор, на котором реализуется (3). Тогда

$$|(b_i,\xi_0)| = \left|\cos\left(\widehat{b_i,\xi_0}\right)\right| \le \cos\beta \le \cos\theta \tag{4}$$

для всех $i = 1,\dots,d$. Если $\xi_0 = \alpha_1e_1+\alpha_2e_2+\alpha_3e_3+\alpha_4e_4$, то $\alpha_1^2+\alpha_2^2+\alpha_3^2+\alpha_4^2 = 1$. Тогда найдется $\kappa \in \{1,2,3,4\}$ такое, что $|\alpha_\kappa| \ge 1/2 \ge (\cos\theta)^{1-(\kappa-1)/4}/2$. С учетом (2) для всех $i = 1,\dots,4$ получаем

$$\sin\gamma \le |(b_i,e_i)|. \tag{5}$$

Если $\kappa = 1$, то $(b_1,\xi_0) = \alpha_1\,(b_1,c_1) = \alpha_1$, откуда с учетом (4) следует $|\alpha_1| = |(b_1,\xi_0)| \le \cos\theta$.

При $\kappa = 2,3,4$ последовательно получаем

$$|(b_\kappa,\xi_0)| = |\alpha_1\,(b_2,e_1) + \ldots + \alpha_\kappa\,(b_\kappa,e_\kappa)| \lesssim \cos\theta.$$

Если $|\alpha_2| \ge (\cos\theta)^{3/4}/2$, то

$$|(b_2,e_2)| \lesssim \frac{\cos\theta + |\alpha_1\,(b_2,e_1)|}{|\alpha_2|} \lesssim \frac{\cos\theta+|\alpha_1|}{(\cos\theta)^{1-1/4}} \lesssim \frac{\cos\theta}{(\cos\theta)^{1-1/4}} = (\cos\theta)^{1/4}.$$

Если $|\alpha_2| < (\cos\theta)^{3/4}/2$, то переходим к $\kappa = 3$. Если $|\alpha_3| \ge (\cos\theta)^{2/4}/2$, то

$$|(b_3,e_3)| \lesssim \frac{\cos\theta + |\alpha_1\,(b_3,e_1)| + |\alpha_2\,(b_3,e_2)|}{|\alpha_3|} \lesssim \frac{\cos\theta+|\alpha_1|+|\alpha_2|}{(\cos\theta)^{1-2/4}} \lesssim \frac{(\cos\theta)^{1-1/4}}{(\cos\theta)^{1-2/4}} = (\cos\theta)^{1/4}.$$

Если $|\alpha_3| < (\cos\theta)^{2/4}/2$, то рассматриваем $\kappa = 4$, и тогда $|\alpha_4| \ge (\cos\theta)^{1/4}/2$ и $|(b_4,e_4)| \lesssim (\cos\theta)^{1/4}$. Таким образом, найдем $\kappa \in \{1,2,3,4\}$ для которого выполняется

$$|(b_\kappa,e_\kappa)| \lesssim (\cos\theta)^{1/4}.$$

Остается применить (5). Теорема 1 доказана. □

2 Оценки сверху погрешности аппроксимации производных функции

Теорема 1 позволяет переписать оценки (1) для $d = 3, 4$ в виде

$$\left\|D^s_{\xi_1,\dots,\xi_s}\left(f - P^d_n\right)\right\| \underset{n}{\lesssim} M\frac{H^{n+1-s}}{(\cos\gamma)^{sd}}\ , \quad s = 0, \dots, n.$$

Однако можно получить более точные оценки с использованием характеристики γ. Рассмотрим случай $n = 1$.

Теорема 2. *При $n = 1$, $d = 3, 4$ для любого единичного вектора $\xi \in \mathbb{R}^d$ имеет место оценка*

$$\left\|D_\xi\left(f - P^d_n\right)\right\| \lesssim \frac{MH}{\sin\gamma}\ .$$

Доказательство. Рассмотрим случай $d = 4$ (тогда случай $d = 3$ будет следствием доказанного результата). Возьмем векторы b_1, b_2, b_3, b_4 и e_1, e_2, e_3, e_4, введенные при доказательстве теоремы 1. Соответственно базису e_1, e_2, e_3, e_4 введем прямоугольную систему координат $Ox_1x_2x_3x_4$, начало которой для определенности совместим с точкой a_1. Обозначим через $\varphi^j_{i_1\dots i_s}$ величины углов между вектором b_j и плоскостью размерности s, натянутой на векторы $e_{i_1}, \dots, e_{i_s}$. Из формулы (2) известно, что

$$\begin{cases} \sin\gamma \lesssim \sin\varphi^4_{123} \lesssim \sin\varphi^4_{12} \lesssim \sin\varphi^3_{12} \lesssim \sin\varphi^3_1 \lesssim \sin\varphi^2_1 \asymp \sin\omega, \\ \\ \sin\gamma \lesssim \sin\varphi^4_{123} \lesssim \sin\varphi^4_{12} \lesssim \sin\varphi^4_1 \lesssim \sin\varphi^2_1 \asymp \sin\omega. \end{cases} \tag{6}$$

Положим

$$\mathcal{R} = f - P^4_1[f] = f - P^4_1.$$

Рассмотрим вектор b_k ($k = 1, 2, 3, 4$) и соответствующее ему ребро a_ia_j (т. е. $\tau_{ij} \| b_k$). На отрезке a_ia_j мы имеем дело с одномерной интерполяцией функции f многочленом первой степени P^4_1 в узлах a_i, a_j, поэтому можем утверждать, что

$$\left|\frac{\partial\mathcal{R}(a_i)}{\partial b_k}\right| \lesssim MH.$$

Пользуясь формулой конечных приращений Лагранжа на отрезке, соединяющем произвольную точку $u \in \Delta$ и точку a_i, получаем оценки

$$\left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial b_k}\right| \lesssim MH, \quad k = 1, 2, 3, 4.$$

Таким образом,

$$\left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_1}\right| = \left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial x_1}\right| \lesssim MH; \tag{7}$$

$$\left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial b_2}\right| = \left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_1}\cos\varphi^2_1 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_2}\cos\varphi^2_2\right| = \left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_1}\cos\varphi^2_1 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_2}\sin\varphi^2_1\right| \lesssim MH,$$

откуда следует оценка

$$\left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_2}\right| = \left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial x_2}\right| \lesssim \frac{MH}{\sin\varphi^2_1} \lesssim \frac{MH}{\sin\gamma}\ . \tag{8}$$

Далее,

$$\left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial b_3}\right| = \left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_1}\cos\varphi^3_1 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_2}\cos\varphi^3_2 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_3}\cos\varphi^3_3\right| =$$

$$= \left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_1}\cos\varphi^3_1 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_2}\cos\varphi^3_2 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_3}\sin\varphi^3_{12}\right| \lesssim MH.$$

Так как $\cos\varphi^3_2 \le \sin\varphi^3_1 \lesssim \sin\varphi^2_1$ (см. (6)), то, принимая во внимание (7)–(8) и (6), получаем

$$\left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_3}\right| = \left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial x_3}\right| \lesssim \frac{MH}{\sin\varphi^3_{12}} \lesssim \frac{MH}{\sin\gamma}\ . \tag{9}$$

Наконец, рассмотрим неравенство

$$\left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial b_4}\right| = \left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_1}\cos\varphi_1^4 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_2}\cos\varphi_2^4 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_3}\cos\varphi_3^4 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_4}\cos\varphi_4^4\right| =$$

$$= \left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_1}\cos\varphi_1^4 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_2}\cos\varphi_2^4 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_3}\cos\varphi_3^4 + \frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_4}\sin\varphi_{123}^4\right| \lesssim MH.$$

Так как $\cos\varphi_2^4 \le \sin\varphi_1^4 \lesssim \sin\varphi_1^2$ и $\cos\varphi_3^4 \le \sin\varphi_{12}^4 \lesssim \sin\varphi_{12}^3$ (см. (6)), то, учитывая (7)–(9) и (6), имеем

$$\left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial e_4}\right| = \left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial x_4}\right| \lesssim \frac{MH}{\sin\varphi_{123}^4} \lesssim \frac{MH}{\sin\gamma}\,. \tag{10}$$

Поскольку

$$|\nabla\mathcal{R}(u)| \ge \left|\frac{\partial\mathcal{R}(u)}{\partial\xi}\right|$$

для любой точки $u \in \Delta$ и любого единичного вектора ξ (через ∇ обозначен градиент), то неравенства (7)–(10) завершают доказательство теоремы. Теорема 2 доказана. □

Замечание. *Результат, аналогичный теореме 2 (замена* $\cos\theta$ *на* $\sin\gamma$ *в формуле (1)), справедлив для любых* $n \in \mathbb{N}$ *при* $d = 3, 4$ *(доказательство является несколько более сложным и выходит за рамки данной статьи).*

Список литературы

[1] Jamet P. Estimation d'erreur pour des éléments finis droits presque dégénérés // RAIRO Anal. Numer. 1976. V. 10, № 1. P. 43–60.

[2] Rand A. Average interpolation under the maximum angle condition // SIAM J. Numer. Anal. 2012. V. 50, № 5. P. 2538–2559.

[3] Байдакова Н.В. Алгоритм построения эрмитовых конечных элементов третьей степени // Сиб. электрон. матем. изв. 2016. Т. 13. С. 799–814.

[4] Байдакова Н.В. Об оценках П. Жамэ для конечных элементов с интерполяцией в равномерных узлах симплекса // Матем. тр. 2017. Т. 20, № 1. С. 43–74.

Наталия Васильевна Байдакова — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института математики и механики им. Н.Н.Красовского УрО РАН;
e-mail: baidakova@imm.uran.ru.

Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ЦИКЛЫ ДИСКРЕТНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ ЦИРКУЛЯНТНОГО ТИПА

Ц. Ч.-Д Батуева

Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.174

В работе исследуются циклы дискретных динамических систем циркулянтного типа. Предложен алгоритм поиска всех неподвижных точек таких систем. Описаны свойства циклов дискретных динамических системы, полученных циклическим сдвигом одного состояния и чередованием циклических сдвигов двух состояний.
Ключевые слова: дискретная динамическая система, циркулянт, функционлаьный граф, цикл.

Введение

Дискретная динамическая система задается парой, состоящей из конечного множества состояний S и отображения $A : S \to S$. Если изобразить последовательные переходы всех состояний графически, то получится функциональный граф данной системы, то есть ориентированный граф вершинами которого являются состояния системы, а состояния $\widetilde{v}$ и $\widetilde{u}$ соединены ребром, если $A(\widetilde{v}) = \widetilde{u}$. Так как число состояний системы конечно, то каждая компонента связности функционального графа состоит из деревьев, ориентированных к корню, а корни в свою очередь образуют цикл [11]. То есть каждое состояние за несколько шагов работы системы попадет в некоторый цикл. Так же можно отметить, что число компонент связности функционального графа равно числу его циклов.

Нами рассматривается случай когда все состояния системы это циклические слова длины n над конечным алфавитом Z_q и значение координаты i в состоянии $\widetilde{u} = A(\widetilde{v})$ зависит только от предыдущих $k \leq n$ значений координат в состоянии $\widetilde{v}$. Матрица влияния значений координаты i на j для такой системы образует циркулянт. Поэтому эти дискретные динамические системы называют системами циркулянтного типа. Впервые такая модель дискретной динамической системы были введена в работе [8].

Дискретные динамические системы определенные таким образом могут служить для описания многих процессов. Их исследование имеет свое начало в биологии и генетике [13, 14, 16]. Например, они могут служить моделью регуляторного контура генной сети (см. [5, 9]). Вершины графа-носителя которой соответствуют различным химическим веществам в клетке. Метки вершин характеризуют концентрации веществ, а циклы функционального графа описывают периодические процессы. В работе [6] описаны подходы и методы исследований дискретных моделей функционирования генных сетей.

Большим интересом сейчас пользуются системы с высокой степенью симметричности. Например, системы циркулянтного типа. Работы [1]–[4], [7] посвящены свойствам таких систем с пороговыми функциями в вершинах сети. В [8] описана структура функционального графа обобщенной дискретной динамической системы циркулянтного типа с линейными функциями в вершинах сети. Рассматривались и модификации циркулянта, например, двойной циркулянт [10].

1 Основные определения

Пусть $G = (V, D)$ — ориентированный граф с множеством вершин $V = \{0, 1, \ldots, n-1\}$ (граф-носитель). Рассмотрим следующую дискретную динамическую систему. В каждый момент времени вершины графа G помечены элементами $v_0, v_1, \ldots, v_{n-1}$ из Z_q. Набор $\widetilde{v} = (v_0, v_1, \ldots, v_{n-1}) \in Z_q^n$ называется *состоянием*

системы. В следующий момент времени (такт работы системы) состояние системы пересчитывается под действием отображения

$$A_{\varphi,q,n} : Z_q^n \to Z_q^n,$$

где $\varphi = (f_0, f_1, \ldots, f_{n-1})$. Каждая вершина приобретает новую метку, равную значению функции $f_i : Z_q^k \to Z_q$, где $k < n$, аргументами которой являются значения старых меток, из которых выходят дуги в вершину i.

Функциональным графом $G_{\varphi,q,n}$ называется ориентированный граф, вершинами которого являются элементы из Z_q^n, а дуги соединяют вершины $\widetilde{v}$ и $\widetilde{u}$ тогда и только тогда, когда $A_{\varphi,q,n}(\widetilde{v}) = \widetilde{u}$.

В последнее время активно исследуется циркулянтный тип данной системы, то есть в качестве графа-носителя рассматривается циркулянт, а именно ориентированный граф (V, D), где $V = \{0, 1, \ldots, n-1\}$ и

$$D = \{\overrightarrow{ij} \mid (j-i) \mod n \leqslant k,\ i \neq j\}.$$

Работы [1, 2, 4, 7, 12, 15] посвящены свойствам таких систем с пороговыми функциями в вершинах.

В данной работе рассматриваются системы с циркулянтом в качестве графа-носителя, то есть исследуется структура функционального графа в случае отображения $A_{\varphi,q,n} : Z_q^n \to Z_q^n$, когда все функции f_i равны между собой, и каждому состоянию системы $\widetilde{v}$ ставится в соответствие состояние $\widetilde{u}$ тогда и только тогда, когда

$$u_i = f_0(v_{(i-k) \bmod n}, v_{(i-(k-1)) \bmod n}, \ldots, v_{(i-1) \bmod n}),$$

где $i \in \{0, 1, \ldots, n-1\}$.

Введем обозначение $A_{f_0,q,n}$ вместо $A_{\varphi,q,n}$, поскольку в рассматриваемой системе функции во всех вершинах одинаковы: $\varphi = (f_0, f_0, \ldots, f_0)$. Функциональный граф также будем обозначать $G_{f_0,q,n}$.

2 Неподвижные точки

Пусть $f : Z_q^k \to Z_q$. Ориентированным графом $P_{f,q}$ обозначается граф, вершинами которого являются элементы Z_q^k, причем дуга идет из вершины $(v_0, v_1, \ldots, v_{k-1})$ в вершину $(v_1, v_2, \ldots, v_k)$ тогда и только тогда, когда $f(v_0, \ldots, v_{k-1}) = v_k$ (см. [2]). Примеры графа $P_{f,2}$ для функций $f(x, y, z) = (01001100)$ и $f(x, y, z) = (10001001)$ изображены на рисунке 1.

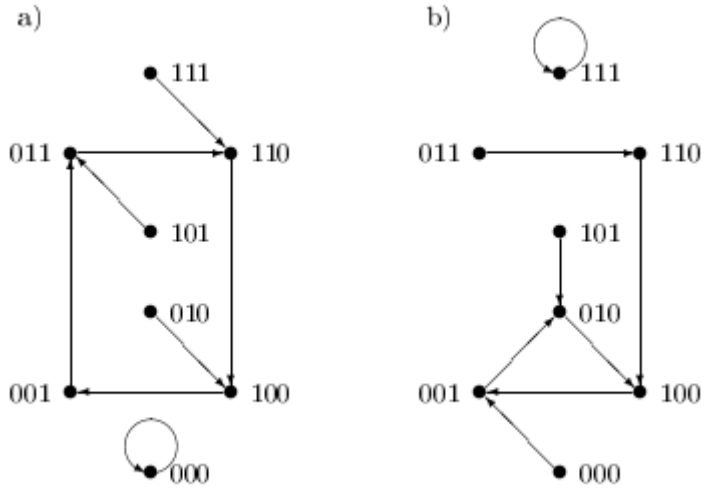


Рис. 1: Граф $P_{f,2}$ для функций a) (01001100) и b) (10001001).

В работе [2] был предложен алгоритм нахождения всех неподвижных точек отображения $A_{f,q,n}$ через граф $P_{f,q}$.

Обозначение $\widetilde{v} = \alpha^{n/s}$, если n кратно s, означает n/s раз конкатенацию слова $\alpha \in Z_q^s$.

Теорема о неподвижных точках. [2] Состояние $\widetilde{v} = (v_0, v_1, \ldots, v_{l-1})^{n/l}$ с минимальным периодом l является неподвижной точкой отображения $A_{f,q,n}$ тогда и только тогда, когда граф $P_{f,q}$ содержит простой цикл $\widetilde{u}^0, \ldots, \widetilde{u}^{l-1}$, где

$$\widetilde{u}^i = (v_i, v_{(i+1)\bmod\ l}, \ldots, v_{(i+k-1)\bmod\ l})$$

для $i \in \{0, 1, \ldots, l-1\}$.

Так как граф $P_{f,q}$ имеет для каждой вершины единственную выходящую дугу, то нахождение всех ее контуров не составляет труда. Число всех состояний в контурах данного графа является верхней оценкой на число неподвижных точек в системах с функцией f вершинах сети. Оценка достигается при n кратном всем длинам контуров в графе $P_{f,q}$. Максимальное число неподвижных точек возможно, когда граф $P_{f,q}$ состоит только из контуров, а длина состояний системы кратна длинам этих контуров. Следовательно, максимальное число неподвижных точек равно q^k.

3 Циклы

Пусть состояние $\widetilde{v} = (v_0, v_1, \ldots, v_{n-1})$. Введём обозначения циклического сдвига состояния на s позиций вправо

$$\delta_s(\widetilde{v}) = (v_{(n-s)\bmod\ n}, \ldots, v_{n-1}, v_0, \ldots, v_{(n-s-1)\bmod\ n}).$$

Обозначим за $g_i : Z_q^k \to Z_q$ функцию $g_i(x_1, x_2, \ldots, x_k) = x_{k-i+1}$, где $i \in \{1, \ldots, k\}$.

Теорема о циклах, образованных циклическими сдвигами. Пусть $f : Z_q^k \to Z_q$, $\widetilde{v} \in Z_q^n$ и $i \in \{1, \ldots, k\}$. Состояние $\widetilde{v}$ обладает свойством $A_{f,q,n}(\widetilde{v}) = \delta_i(\widetilde{v})$, если состояние $\widetilde{v}$ избегает все слова при которых значения функций g_i и f не совпадают.

Обозначим за $B_{f,q}$ граф де Брейна размерности k вершины которого раскрашены в значения функции f от значения вершины. Пример графа для функции $f(x, y, z) = (01001100)$ изображен на рисунке 2.

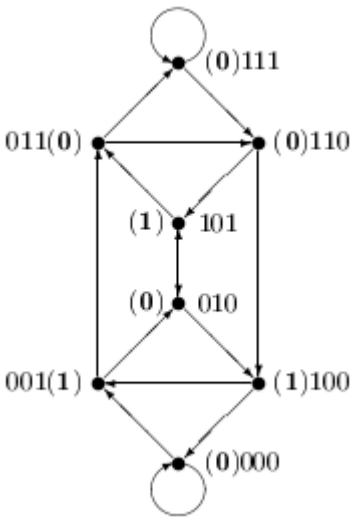


Рис. 2: Граф $B_{f,2}$ для функций (01001100).

Простой контур в графе $B_{f,q}$ называется *пороговым*, если для значений его вершин выполняются следующие условия

1. циклическое слово, соответствующее этому контуру, содержит ровно один раз подслово 01.
2. функция f принимает значение 1 (0) хотя бы для одной вершины с максимальным числом подряд идущих нулей (единиц, соответственно).

3. существует только две пары смежных в контуре вершин для которых значения их меток не совпадает.

Если $f(0^k) = 1$ ($f(1^k) = 0$), то петля для вершины 0^k (1^k, соответственно) тоже называется пороговой. Циклический маршрут называется *пороговым*, если он состоит только из пороговых простых циклов.

Теорема о циклах, образованных циклическими сдвигами двух состояний. Пусть $f : Z_2^k \to Z_2$ булева функция, $\widetilde{v} \in Z_2^n$ и $i \in \{1, \ldots, k\}$. Состояние $\widetilde{v}$ обладает свойством $A^2(\widetilde{v}) = \delta_i(\widetilde{v})$, если циклический маршрут соответствующий состоянию $\widetilde{v}$ в графе $B_{f,2}$ является пороговым.

4 Системы с пороговыми булевыми функциями в вершинах сети

Пороговой функцией называется функция, имеющая следующий вид

$$f(x_1, \ldots, x_k) = [\sum_{i=1}^{k} a_i x_i > T],$$

где a_i — вес аргумента x_i, T — порог функции f и $a_i, T \in \mathbb{R}$.

В результате исследования дискретных динамических систем, заданных на циркулянте с пороговыми булевыми функциями в вершинах сети было обнаружено, что множество истоков (состояний без прообразов) задается конечным языком запретов [3]. Множества истоков и состояний в циклах для систем с не пороговыми функциями таким свойством не обладают.

Вычисления показали, что функциональные графы для дискретных динамических систем с пороговыми функциями в вершинах сети от не более чем трех переменных содержат циклы только рассмотренных выше видов: неподвижные точки, циклические сдвиги состояния и чередование циклических сдвигов двух состояний. Мы предполагаем, что такие системы не содержат других видов циклов.

Список литературы

[1] Батуева Ц. Ч.-Д. Свойства генных сетей циркулянтного типа с пороговыми функциями // Прикладная дискретная математика. Приложение. 2013. № 6. С. 72—73.

[2] Батуева Ц. Ч.-Д. Дискретные динамические системы циркулянтного типа с пороговыми функциями в вершинах // Дискретный анализ и исследование операций. 2014. № 4. С. 25—32.

[3] Батуева Ц. Ч.-Д. Дискретные динамические системы циркулянтного типа с пороговыми функциями от не более чем трех переменных // Дискретный анализ и исследование операций. 2016. № 1. С. 17—34. (Перевод: Batueva Ts. Ch.-D. Circulant discrete dynamical systems with threshold functions of at most three variables // Journal of Applied and Industrial Mathematics. 2016. V. 10. N 1. P. 51-60.)

[4] Григоренко Е. Д., Евдокимов А. А., Лихошвай В. А., Лобарева И. А. Неподвижные точки и циклы автоматных отображений, моделирующих функционирование генных сетей // Вестник Томского государственного университета. 2005. № 14. С. 206—212.

[5] Демиденко Г. В., Колчанов Н. А., Лихошвай В. А., Матушкин Ю. Г., Фадеев С. И. Математическое моделирование регулярных контуров генных сетей // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2004. Т. 44, № 12. С. 2276—2295.

[6] Евдокимов А. А. Дискретные модели генных сетей: анализ и сложность функционирования // Совместный выпуск журналов Вычислительные технологии 2008. Т. 13, № 3 и Вестник КАЗНУ им. Аль-Фараби. Серия математика, механика, информатика. 2008. № 3(58). С. 31–37.

[7] Евдокимов А. А., Лиховидова Е. О. Дискретная модель генной сети циркулянтного типа с пороговыми функциями // Вестник Томского государственного университета. — 2008. — № 2(3). — С. 18–21.

[8] Евдокимов А. А., Пережогин А. Л. Дискретные динамические системы циркулянтного типа с линейными функциями в вершинах сети // Дискретный анализ и исследование операций. 2011. Т. 18, № 3. С. 39–48. (Перевод: Evdokimov A. A., Perezhogin A. L. Discrete dynamical systems of a circulant type with linear functions at vertices of network// J. Appl. Industr. Math. 2012. Vol. 6, № 2. P. 160–166.)

[9] Лихошвай В. А., Голубятников В. П., Демиденко Г. В., Евдокимов А. А., Матвеева И. И., Фадеев С. И. Теория генных сетей // Системная компьютерная биология. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008. — С. 397-–480.

[10] Нажмиденова А. М., Пережогин А. Л. Дискретная динамическая система на двойном циркулянте // Дискретный анализ и исследование операций. — 2014. — № 4. — С. 80—88.

[11] Оре О. Теория графов. М.: Наука, 1980. 336 с.

[12] Evdokimov A. A., Kutumova E. O. The discrete model of the gene networks regulatory loops with the threshold functions // Proc. 7th International conference on bioinformatics of genom regulation and structure (Novosibirsk, June 20–27, 2010). — Novosibirsk: SB RAS, 2010. — P. 155.

[13] Kauffman S. A., Smith R. G. Adaptive automata based on Darwinian selection // Physica D. 1986. V. 22, № 1–3. P. 68–82.

[14] Kauffman S. A. At Home in the Universe: The Search for the Laws of Self-Organization and Complexity. Oxford University Press, Oxford, 1995. 336 p.

[15] Kutumova E. O., Evdokimov A. A. Reversible states of functioning the regulatory circuits discrete models the gene nets // Вестник Томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. 2011. № 1(14). С. 85–94.

[16] Laubenbacher R., Mendes P. A discrete approach to top-down modeling of biochemical networks. In: A. Kriete, R. Eils (Eds.), Computational Systems Biology, 2005. P. 229–247.

Батуева Цындыма Чимит-Доржиевна — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН;
e-mail: batueva@math.nsc.ru;
Дата поступления — 30 апреля 2017 г.

АНАЛИЗ ДАННЫХ В ПРОБЛЕМЕ ДЕШИФРОВКИ ЗНАМЕННЫХ ПЕСНОПЕНИЙ

И. В. Бахмутова, В. Д. Гусев, Л. А. Мирошниченко, Т. Н. Титкова

Институт математики им. С.Л.Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 004.93:781.1

Рассматривается известная, но не утратившая актуальности, проблема нотолинейной реконструкции (дешифровки) древнерусских церковных песнопений, представленных в знаменной форме записи. Описаны существующие подходы и оценивается текущее состояние. Отмечаются многочисленные аналогии с проблемой распознавания образов в части формирования исходных данных (обучающая и контрольная подборки), контроля ошибок, выбора информативной системы описания, принятия решений, оценки эффективности. Описана начальная версия алгоритма дешифровки, обеспечивающая в среднем 60–70–процентную точность дешифровки по разным гласам. Указаны возможности дальнейшего развития подхода.

Ключевые слова: распознавание образов, дешифровка, двознаменники, знаменный распев, нотолинейное представление.

Введение

Древнерусские церковные песнопения XII–XVIII веков представлялись преимущественно в знаменной форме записи. Знамена (или "крюки") — специальные знаки, служащие для передачи мелодии. Они интерпретируются цепочками нот разной длины (обычно от одной до пяти—шести нот). Проблема перевода знаменных песнопений в современную нотную форму записи носит дешифровочный характер и в общем случае (песнопения раннего и среднего периода) остаётся нерешённой [1]. Общие сведения о знаменном пении (знаменном распеве) можно найти в [2].

Основные трудности дешифровки связаны с многозначностью соответствия "знамя–нота" . Отдельные знамена, например, такие как  (статья закрытая малая) или (статья простая с подвёрткой), имеют до 10 различных интерпретаций, отличающихся друг от друга интервальными (I), ритмическими (R) характеристиками и высотой. Начиная с XVII века, для облегчения интерпретации знамен вводятся степенные и указательные пометы. Первые определяют наивысший звук в распеве знамени, вторые — уточняют особенности его распева. Термин "читаемые" с определёнными оговорками относится лишь к пометным рукописям. Беспометные рукописи XVI века и более раннего периода практически нечитаемы. По оценкам, приведённым в [3], количество известных певческих книг (рукописей) превышает тысячу экземпляров, из которых лишь около половины считаются "читаемыми" . Указанное обстоятельство и определяет актуальность рассматриваемой проблемы.

Немногочисленные известные примеры дешифровки знаменной нотации сделаны вручную и касаются отдельных песнопений (или узких классов песнопений), эволюцию которых удаётся проследить по архивным материалам в течение достаточно длинного периода. При этом предполагается наличие поздней (читаемой) версии песнопения, отталкиваясь от которой можно переходить к более ранним (беспометным) версиям. Положительным фактором также является наличие графически близких и читаемых византийских версий.

Целью работы является описание развиваемого нами подхода к решению проблемы нотолинейной реконструкции знаменных песнопений. Он ориентирован на массовое применение и основан на использовании *двознаменников*— рукописных певческих книг конца XVII — начала XVIII в.в., в которых песнопения записаны параллельно в знаменной и нотолинейной форме. Последовательно рассмотрены этапы предлагаемого

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16 -07 - 00812).

решения, как планируемые, так и уже реализованные. Многие из них функционально близки к процедурам (алгоритмам), используемым в анализе данных и распознавании образов, чем и обусловлено название статьи. Можно отметить, в частности, формирование обучающей и контрольной подборок песнопений, их кодирование, контроль ошибок, выбор информативной системы описания разных классов песнопений, принятие решения (собственно, дешифровка), оценка эффективности подхода, интеграция различных подходов (коллективное решающее правило) .

1 Система обозначений

Знаменные песнопения в двознаменниках представлены в диапазоне *обиходного звукоряда*: G, A, H малой октавы, c, d, e, f, g, a, b первой октавы, C, D второй октавы. Длительности звуков кодируются следующим образом: 𝅝 — 1 (целая), 𝅗𝅥 — 2 (половинная), ♩ — 4 (четвертная), ♪ — 8 (восьмая). Для указания высоты и длительности звука используем комбинацию буквы и цифры (например, $H4$ — это четвертная нота «си» малой октавы). Знак $(*)$ используется в качестве разделителя между нотолинейными интерпретациями разных знамен, а $(\sim)$ — как символ эквивалентности, отделяющий знаменную цепочку от её нотолинейного представления (так, запись $\sim d4c4d2 * c4e4$ означает, что цепочка из двух знамен, стоящая слева от $(\sim)$, интерпретируется в тексте двознаменника, соответственно, цепочками из трёх и двух нот, отделёнными друг от друга знаком $(*)$).

2 Исходный материал

В нашем распоряжении имеется 5 пометных двознаменников: три Октоиха конца XVII– начала XVIII века (РНБ, г. С.–Петербург, Соловецкое собрание, шифры 619/647, 618/644 и QI 188), "Праздники" (РНБ, г. С.–Петербург, Кирилло–Белозерское собрание, шифр 797/1054) и Ирмологий (РГБ, г.Москва, собрание В.Ф. Одоевского, Ф.210, № 108). Каждое песнопение в них представлено знаменным, нотолинейным и стихотворным текстами, синхронизированными друг с другом. Один квант информации характеризуется тройкой: <начертание знамени, его нотолинейная интерпретация, распеваемый слог стихотворного текста>.

Знаменное пение регламентируется так называемой *системой осмогласия*. В древнегреческой музыкальной традиции этому соответствовало пение на 8 ладов (гласов): дорийский, фригийский и т.д. В русском осмогласии понятие лада деформировалось и средством его мелодической характеристики стала выступать система *попевок*—основных структурных единиц (СЕ) знаменного распева. Одним из проявлений системы осмогласия является разбиение всех песнопений на 8 классов (гласов). Интерпретация знамени зависит от гласа, типа СЕ, в состав которой оно входит, её позиции в тексте и ряда других факторов. В Октоихах 619/647 и 618/644 каждый глас содержит от 25 до 29 песнопений, для QI 188 этот показатель на треть ниже. Из Ирмология закодировано по 35 песнопений каждого гласа. Из Праздников закодировано в среднем по 20 песнопений на глас, за исключением гласа 3, представленного в этой певческой книге всего 9-ю песнопениями и гласа 7 (8 песнопений).

Длины песнопений колеблются в диапазоне от нескольких десятков до нескольких сотен знамен. Песнопения из Ирмология — наиболее короткие и простые, из Праздников — наиболее длинные и развитые в мелодическом отношении. В качестве *обучающего* материала использованы Октоихи в силу того, что они наиболее полно и сбалансированно представлены по всем гласам и содержат песнопения разных жанров. Для *контроля* (оценка эффективности подхода) привлекались песнопения из моножанрового Ирмология и Праздников.

Достаточно объёмная и кропотливая работа по переводу двознаменников в цифровую форму выполнена авторами вручную. Это обусловлено тем, что программ распознавания знаменной нотации, насколько нам известно, не существует*. Среди факторов, тормозящих создание подобных программ, следует отметить большой размер алфавита (порядка 200 знаков)†, рукописный характер исходного материала, невысокое (в общем случае) качество рукописей, затруднения с выявлением конкретного знамени и интерпретирующей его цепочки нот из слитного знаменного (соответственно, нотолинейного) текста.

*Отдельные попытки создания таких программ предпринимались, но оценки их эффективности не приводились.

†Знамена без помет и они же с отличающимися комбинациями помет рассматриваются как отдельные элементы алфавита.

3 Выявление ошибок и разночтений

Поскольку и на этапе обучения, и на этапе контроля мы используем двознаменники, ошибки могут иметь место как на знаменном, так и на нотолинейном уровне. Они встречаются в исходном двознаменнике, а также возникают в процессе перевода его в цифровую форму (этап кодирования). Нотолинейный текст на выходе алгоритма дешифровки также следует рассматривать как текст с потенциально возможными ошибками. В основе обнаружения ошибок лежат (см. [4]) понятия "нормы" и "отклонения от нормы". Незначительные отклонения обычно трактуются как допустимая вариативность, аномальные — как потенциально возможные ошибки или нестандартные распевы *лиц* и *фит* — структурных единиц, характеризующихся своей "тайнозамкненностью" (аналог идиоматичности в естественном языке). Представление о "норме" формируется выявлением всех вариантов распева каждого знамени в каждом гласе и подсчётом их частот встречаемости. Примерами аномальных отклонений могут служить распевание знамени двумя звуками вместо предписываемого (в старых азбуках) одного, замена восходящего (в норме) движения звуковысотной линии нисходящим, уменьшение или увеличение длительности звука по сравнению со стандартной и др. Как правило, отклонения такого типа являются редкими (один—два случая на глас). Любые же регулярно наблюдаемые аномалии мы склонны трактовать как неоговариваемые исключения из правил (*разночтения*).

Важную роль в принятии решения об ошибке играет *наличие модели* её возникновения. Простейшие модели, объясняющие выявляемые несоответствия, могут иметь следующий вид: а) пропущен один из вспомогательных знаков знаменной нотации, меняющий интерпретацию знамени (отсека— , подвёртка— , задержка— и т.п.).; б) вспомогательный знак есть, но не учитывается при интерпретации; в) нестандартно трактуется, пропущена или игнорируется указательная помета и др.

Степенные пометы в двознаменниках, в принципе, являются избыточными ввиду наличия нотолинейного текста. В норме степенная помета и звуковысотная привязка нотной цепочки, интерпретирующей знамя, должны совпадать. Рассогласования между ними возникают из-за: 1) ошибок в нотном тексте; 2) секвентного переноса фрагментов песнопений; 3) неоговариваемых разночтений или исключений в трактовке степенных помет и указазательной пометы "равно" ( ). Последняя в трактовке М.В.Бражникова ([2], с. 315) "указывает на то, что знамя, при котором она стоит, исполняется на той же (равной) ноте, что и предшествующее ему (при многогласостепенности знамени относится к наивысшему звуку в его распеве)".

Пример 1 (Октоих 618/644): $\sim f2 * e4d4 * f2$. Интерпретация знамени не стыкуется здесь с интерпретациями соседних знамен (нет нот с "равной" высотой). Вероятно, вместо $e4d4$ должно быть $f4e4$, тогда всё согласуется при условии, что помета трактуется по Бражникову.

Пример 2 (Октоих 619/647): $\sim d2 * d4H4 * \ c4d4 * e4d4$. Здесь помета перед последним знаменем не соответствует ни трактовке, принятой в Октоихе 619/647 (равенство высот звуков на стыке знамен), ни трактовке Бражникова (согласование по наивысшим звукам). Несоответствие, видимо, возникает из-за того, что в распеве "голубчика борзого" ( ) не учтена указательная помета (ломка). Стандартно интерпретируется двумя четвертными в восходящем движении с интервалом "терция" $I = 2+$, т.е. вместо $c4d4$ должно быть $c4e4$, что устраняет несоответствие с пометой у следующего знамени.

Более подробная информация о типах ошибок в двознаменниках и возможности их устранения содержится в [4]. Заметим, что наличие ошибки в контрольном двознаменнике автоматически приводит к ошибке в дешифровке даже при правильной интерпретации знамени.

4 Выбор информативных признаков

На базе трёх Октоихов, представлявших обучающий материал, нами была построена электронная азбука знаменного распева, содержащая полную количественную информацию о частоте встречаемости каждого знамени и всевозможных его интерпретаций во всех гласах [5]. Анализ этой азбуки показал, что при всей вариативности знаменного распева некоторые знамена однозначно интерпретируются в пределах одного гласа. Их естественно назвать **внутригласовыми инвариантами** (ВИ). Например, знамя "ключ" ( ) во всех гласах интерпретируется целой нотой, причём во всех гласах, кроме пятого, имеет одинаковую звуковысотную привязку ('e' $\sim$ "ми" первой октавы), а в гласе 5-м — 'g' ("соль" первой октавы). Понятие ВИ — условное, поскольку с изменением (или увеличением) исходной подборки могут возникнуть отклонения от приведённой (доминирующей) интерпретации. Обычно этих отклонений бывает немного, в связи с чем знамена, демонстрирующие такого рода аномалии, можно назвать "**квазиинвариантами**" (КВИ). Под значениями ВИ и КВИ будем в дальнейшем понимать их доминирующие интерпретации.

Позднее, когда понадобилось формально уточнить число допустимых искажений, мы стали применять термин КВИ по отношению к знаменам, у которых частота доминирующей интерпретации превышает сумму частот всех остальных интерпретаций[‡]. Так, например, знамя "запятая с крыжом" (), интерпретируемое половинной нотой (R = ), имеет в гласе 7 частоту встречаемости F()=38, распределение которой по ступеням звукоряда таково: F('c')=27, F('d')=10, F('e')=1. Поскольку доминирующая частота (F('c')=27) значимо превышает суммарную частоту двух других интерпретаций (F('d') + F('e')=11), мы относим знамя () к разряду КВИ. Следует отметить, однако, что частота F('d') не является пренебрежимо малой по сравнению с F('c'), поэтому игнорирование данного факта может привести к значительному количеству ошибок в процессе дешифровки.

В работе [6] авторы показали, что в качестве ВИ и КВИ могут выступать не только отдельные знамена, но и цепочки знамен длины $L(L = 2, 3, ...)$. Места вхождения их в текст характеризуются существенным снижением уровня неоднозначности в интерпретации знамен. Переход к ВИ и КВИ произвольной длины с доминирующими интерпретациями, удовлетворяющими соотношению $F_{dom}/F > 1/2$, где F — частота встречаемости цепочки в обучающей подборке ($F \geq 2$), значительно расширил объёмы словарей ВИ и КВИ (в сумме порядка полутора тысяч цепочек знамен разной длины в каждом гласе). Это, соответственно, привело к увеличению покрываемости ими песнопений гласа, что, в свою очередь, обусловило использование ВИ и КВИ в качестве основного инструмента при дешифровке. Следует добавить, что словари ВИ и КВИ построены нами в формате "беспометное знамя–нота", для чего из исходных двознаменников предварительно удалялись все пометы. Это приводило к агрегированию исходного знаменного алфавита, при котором объединялись в одну группу и обозначались одним символом все пометные и беспометные варианты конкретного знамени. Формат "беспометное знамя–нота" ориентирован на дешифровку знаменных песнопений в общем случае (беспометная нотация).

5 Схема дешифровки

Начальная версия алгорита дешифровки была описана в [7] (её результаты приведены в столбцах 1, 2 и 4 нижеследующей таблицы). Текущая версия дополнена процедурой устранения "отказов" (результаты приведены в столбце 3). Приведём описание текущей версии. Пусть $T = t_1, t_2, \ldots, t_N$ — последовательность знамен в песнопении с известной гласовой принадлежностью. Схема дешифровки сводится к покрытию песнопения всевозможными цепочками знамен из словарей ВИ и КВИ, построенных для того же гласа. В случае удачного завершения поиска по конкретному ВИ (КВИ), найденному фрагменту песнопения приписывается певческое значение этого ВИ (КВИ), зафиксированное в словарях. При этом возможны отказы (не нашлось ни одного ВИ (КВИ), покрывающего данное знамя) и конфликты интересов (знамя покрыто разными ВИ или КВИ, в составе которых ему приписываются неидентичные певческие значения). Поясним схему покрытия более детально.

Покрытие песнопения цепочками знамен из словарей ВИ и КВИ осуществляется итеративно по L, т.е. сначала используются ВИ и КВИ длины 1, затем длины 2 и т.д. При $L = 1$ произвольное знамя t_n, расположенное в $n-$й позиции песнопения, может оказаться непокрытым (отказ) либо покрытым, если найдётся идентичный ему ВИ (КВИ) длины 1. Помещаем его певческое значение в список S потенциально возможных певческих интерпретаций знамени. При $L = 2$ знамя t_n может оказаться непокрытым, если среди ВИ или КВИ длины 2 не найдётся ни одного, совпадающего с биграммами $t_{n-1}t_n$ или t_nt_{n+1}. Если же такие ВИ (КВИ) находятся, пополняем список S певческими значениями знамени t_n из состава указанных биграммных инвариантов.

При $L \geq 3$ на каждой итерации имеем не более, чем L возможностей покрытия знамени t_n цепочками ВИ и КВИ длины L . Продолжаем пополнять список возможных интерпретаций знамени t_n вплоть до исчерпания словарей ВИ и КВИ для данного гласа. Из множества полученных потенциально возможных певческих значений для t_n выбираем самое частое. При равенстве голосов отдаём предпочтение тому варианту, за который "проголосовали" более длинные ВИ и КВИ (обычно такие певческие значения завершают список S).

Описанная схема дешифровки допускает отказы, когда знамя не покрывается ни одной из цепочек, представленных в словарях ВИ и КВИ. В таких случаях ориентируемся на ближайших соседей знамени слева и справа (триграммный подход). Пусть непокрытым осталось знамя $t_n(2 \leq n \leq N - 1)$. Выделяем триграмму

[‡]При этом имеет место некоторое расширение понятия КВИ, поскольку отдельные недоминирующие интерпретации могут не слишком сильно отличаться от доминирующей по частоте

$t_{n-1}t_nt_{n+1}$ и находим максимальную по частоте интерпретацию этой триграммы в соответствующем гласе обучающей подборки. Певческое значение t_n заимствуем из этой триграммы. Если триграмма отсутствует в обучающей подборке, восстанавливаем певческое значение t_n по электронной азбуке [5], используя для этого максимальную по частоте интерпретацию знамени.

Эффективность подхода определяется либо на исходных данных в режиме скользящего контроля, либо на контрольном двознаменнике. Применительно к конкретному песнопению вычисляется коэффициент $k = n_+/N$, где n_+ —количество правильно интерпретированных знамен, N — число знамен в песнопении ($0 \le k \le 1$). Для гласа, представленного группой контрольных песнопений, оценкой эффективности может служить отношение $\overline{k} = \overline{n_+}/\overline{N}$, где $\overline{n_+}$ — суммарное число правильно интерпретированных знамен в контрольных песнопениях, $\overline{N}$ — суммарная длина песнопений.

6 Обсуждение результатов

Были проведены 4 эксперимента с имевшимися в нашем распоряжении двознаменниками (см. раздел 2).

Эксперимент 1. Исходная азбука, а также словари ВИ и КВИ были построены на основе трёх двознаменных Октоихов (порядка 70 песнопений на глас). В формировании словарей ВИ и КВИ принимали участие только повторяющиеся цепочки знамен с частотой встречаемости $F \ge 2$. Исключение сделано лишь для 3-го эксперимента, где минимальный порог встречаемости был поднят до трёх, чтобы проверить влияние этого параметра на результаты (они ухудшились, но незначительно). Дешифровка осуществлялась в режиме "скользящего контроля" с поочерёдным удалением одного песнопения, коррекцией построенных словарей и использованием удалённого песнопения в качестве контрольного. Обработка отказов не проводилась, что незначительно ухудшает точность дешифровки. Результаты в виде значений $\overline{k}$ для всех гласов представлены в столбце 1 таблицы 1.

Эксперимент 2. Исходная азбука и словари ВИ и КВИ строились на материале Ирмология (35 песнопений на глас). Дешифровка, как и в эксперименте 1, проводилась в режиме "скользящего контроля" без обработки отказов. Результаты представлены в столбце 2 таблицы.

Эксперимент 3. Песнопения Ирмология реконструировались на основе словарей ВИ и КВИ, построенных по трём Октоихам, т.е. Ирмологий не участвовал в обучении, а лишь выступал в качестве контрольного материала. Отказы устранялись по триграммной схеме. Результаты представлены в третьем столбце таблицы.

Эксперимент 4. Песнопения двознаменника "Праздники" реконструировались на основе словарей ВИ и КВИ, построенных по трём Октоихам. Напомним, что из двознаменника "Праздники" было закодировано порядка 20 песнопений на глас за исключением слабо представленных в этой певческой книге гласов 3 (9 песнопений) и 7 (8 песнопений). Обработка отказов не проводилась. Результаты представлены в четвёртом столбце таблицы.

Таблица 1: Оценки эффективности дешифровки (показатель ($\overline{k}$)), достигнутые в экспериментах $1 \div 4$

Гласы	Эксперимент 1	Эксперимент 2	Эксперимент 3	Эксперимент 4
1	0,767	0,720	0,702	0,690
2	0,666	0,628	0,632	0,518
3	0,731	0,618	0,654	0,726
4	0,723	0,675	0,667	0,652
5	0,730	0,691	0,652	0,603
6	0,662	0,569	0,557	0,546
7	0,763	0,812	0,802	0,602
8	0,745	0,632	0,528	0,543

По итогам описанных экспериментов можно сделать следующие выводы:

(1) Подавляющая часть оценок доли правильно интерпретированных знамен во всех четырёх экспериментах укладывается в диапазон $(60 \div 80)\%$. Несколько выпадают из общей канвы (в сторону ухудшения) результаты для гласа 2 и (считающегося плагальным или близким к нему) гласа 6. На данный момент мы не

можем указать какую-то правдоподобную причину, объясняющую данный эффект. Для других аналогичных пар (1,5), (3,7), (4,8) зна́чимого снижения оценок не наблюдается.

(2) Наилучшие результаты достигаются при дешифровке песнопений по "собственным" словарям (Октоихи по Октоихам, Ирмологий по Ирмологию — см. столбцы 1 и 2 таблицы). Дешифровка Ирмология по словарям, составленным на основе Октоихов, ожидаемо приводит к ухудшению результатов (см. столбец 3). Аналогично обстоит дело и с дешифровкой "Праздников" по словарям, составленным на основе Октоихов (столбец 4). Несколько удивляет, что результаты по "Праздникам" (столбец 4) лишь незначительно (и не всегда) уступают результатам по дешифровке Ирмология (столбец 3), хотя в обоих случаях используются одни и те же словари ВИ и КВИ. Можно было бы ожидать гораздо бóльшего расхождения в оценках, поскольку песнопения из "Праздников" отличаются от ирмосов сложностью и развитостью распева, вариативностью и широтой динамического диапазона. Возможно, объяснение кроется в том, что при формировании словарей ВИ и КВИ в эксперименте 3 порог отбора $L-$грамм по частоте был поднят до 3, что несколько ухудшило результат. Возможно, некоторую роль сыграло и различие по времени создания двознаменников: Ирмологий датируется второй половиной XVII века, тогда как два из трёх Октоихов относятся к началу XVIII века. Этот фактор также мог способствовать понижению оценок, представленных в столбце 3.

(3) Анализ ошибок дешифровки показывает, что бóльшая их часть связана с определением звуковысотных привязок знамен. Ошибки в восстановлении ритмической (R) и/или интервальной (I) структуры встречаются редко. Повышенная концентрация ошибок имеет место на стыках попевочных структур и в местах вхождения лиц и фит, поскольку в разводах (интерпретациях) их "рядовым" знаменем порой ещё сохраняется элемент тайнозамкненности.

(4) Многие ошибки носят характер "допустимого варьирования" и фактически понижают приводимые показатели эффективности. Например, знамя "стопица с очком" () стандартно интерпретируется двумя четвертными в нисходящем движении ($R = \text{♩♩}$, $I = 1-$). Именно на это "настроены" словари инвариантов. Однако, когда последний звук в распеве знамени совпадает с первым звуком следующего знамени, происходит скачок на две ступени вниз, чтобы избежать совпадения. Это классифицируется как ошибка. Интересно отметить, что таким же образом, как "стопица с очком", интерпретируются и некоторые другие знамена, например, "крюк светлый с подвёрткой" () или "палка с подвёрткой" (), однако, на них указанное выше правило почему-то не распространяется.

(5) Прослушивание восстановленных песнопений показывает, что, в целом, они довольно хорошо воспринимаются на слух. Тем не менее, возможны появления диссонансов, скачков в мелодии, изменений направления движения мелодической линии, которые служат сигналом о наличии ошибок при дешифровке.

На основании приведённых комментариев можно сделать вывод о том, что выбранный авторами способ оценивания качества (эффективности) дешифровки, предусматривающий *точное* совпадение певческих значений знамен в двознаменнике со значениями на выходе алгоритма дешифровки, является слишком жёстким, занижающим результаты. Даже два музыковеда, дешифрующие одно и то же песнопение, получат в чём-то отличающиеся результаты, не выходящие, тем не менее, за рамки допустимого варьирования. Нотолинейные попевки из подборки В.М.Металлова при поиске их на точное соответствие в текстах двознаменников обеспечивают в среднем лишь 30%–е покрытие нотолинейного текста. Если разрешить одно–два допустимых искажения на попевку, степень покрытия увеличивается до 60%, т.е. те же самые попевки присутствуют в реальных мелодиях, но в слегка завуалированной форме. В связи с этим проблема вариативности знаменного распева представляется особенно важной, требующей отдельного исследования как на качественном, так и на количественном уровне.

Заключение

В данной работе авторы излагают своё понимание проблемы дешифровки знаменных песнопений, описывают существующие подходы и текущее состояние дел. Отмечаются многочисленные аналогии (в подходах) с проблемой распознавания образов. Описана начальная версия алгоритма дешифровки, приведены оценки эффективности подхода (порядка 60–70% точно идентифицированных знамен в среднем по разным гласам). По отдельным (преимущественно, коротким) песнопениям точность дешифровки оказывается близкой к 100%. Проводится анализ ошибок дешифровки, делается вывод о том, что используемый критерий оценивания, не учитывающий проявлений вариативности, является слишком жёстким, что может приводить к формальному и ничем не обоснованному занижению результатов. Дальнейшие исследования предполагается проводить в направлении интеграции различных подходов, анализа вариативности и многочисленных

проявлений системы осмогласия, регламентирующей знаменный распев.

Список литературы

[1] Бражников М.В. Пути развития и задачи дешифровки знаменного распева XII — XVIII веков. Л.—М.: Музыка, 1949. 104 с.

[2] Бражников М. В. Древнерусская теория музыки. По рукописным материалам XV—XVIII веков. Л.: Музыка, 1972. 423 с.

[3] Кутузов Б.П. Русское знаменное пение. Изд–во Андрей Рублёв, М. 2008. 304 с.

[4] Бахмутова И. В., Гусев В. Д., Титкова Т. Н. Автоматическое выявление разночтений и потенциально возможных ошибок в текстах двознаменников // Проблемы музыкальной науки. Российский научный специализированный журнал, Уфа. 2013. /№ 1(12). С. 22–26.

[5] Бахмутова И. В., Гусев В. Д., Титкова Т. Н.. Шиндин Б. А. Электронные азбуки для нотолинейной реконструкции знаменного распева // Проблемы музыкальной науки. Российский научный специализированный журнал, Уфа. 2017. /№ 2. С. 92–99.

[6] Бахмутова И. В., Гусев В. Д., Титкова Т. Н. Компьютерный поиск инвариантных структурных единиц знаменного распева // Проблемы музыкальной науки. Российский научный специализированный журнал, Уфа. 2011. /№ 1(8). С. 20–24.

[7] Бахмутова И. В., Гусев В. Д., Мирошниченко Л. А, Титкова Т. Н. Параллельные тексты в задаче дешифровки древнерусских знаменных песнопений. // Машинное обучение и анализ данных. 2015. Т.1, №13, с. 1866-1876.

Ирина Владимировна Бахмутова— науч.сотр. Института математики им. С.Л.Соболева СО РАН;
e-mail: bakh@math.nsc.ru;
Владимир Дмитриевич Гусев — к.т.н., ст. науч.сотр. Института математики им. С.Л.Соболева СО РАН;
e-mail: gusev@math.nsc.ru;
Любовь Алекстандровна Мирошниченко — к.т.н., ст. науч.сотр. Института математики им. С.Л.Соболева СО РАН;
e-mail: luba@math.nsc.ru;
Татьяна Николаевна Титкова — к.т.н., науч.сотр. Института математики им. С.Л.Соболева СО РАН;
e-mail: titkova@math.nsc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ОБ ИНТЕРПОЛИРОВАНИИ L-СПЛАЙНАМИ ФУНКЦИЙ С БОЛЬШИМИ ГРАДИЕНТАМИ В ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ

И. А. Блатов[1], А. И. Задорин[2], Е. В. Китаева[3]

[1] *Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики, 443090, Самара*

[2] *Институт математики им. С.Л.Соболева СО РАН, Омский филиал, 644043, Омск*

[3] *Самарский национальный исследовательский университет им. С.П. Королева, 443086, Самара*

УДК 519.652

Рассматривается задача обобщенной сплайн-интерполяции функций, имеющих области больших градиентов. Рассматриваются сплайны класса C^2, являющиеся на каждом сеточном интервале суммой многочлена второй степени и экспоненциальной функции, соответствующей пограничному слою. Доказано существование и единственность построенного сплайна и получены асимптотически точные двусторонние оценки погрешности на классе функций с экспоненциальным погранслоем. Установлено, что кубический и параболический интерполяционные сплайны являются предельными для решения рассматриваемой задачи. Приводятся результаты численных экспериментов.

Ключевые слова: пограничный слой, экспоненциальный сплайн, оценка погрешности.

Введение

Для сингулярно возмущенных задач известны два подхода к построению разностных схем, обладающих свойством сходимости, равномерной по малому параметру. При первом подходе разностные схемы строятся на сетках, сгущающихся в области пограничных слоев, отметим работы [1, 2, 3]. При втором подходе [4] строятся разностные схемы на равномерных сетках на основе того, чтобы они были точными на быстро растущей погранслойной составляющей.

Для сеточных функций, найденных с помощью равномерно сходящихся схем, необходимы сплайн- интерполяционные формулы, так же обладающие свойством равномерной сходимости по возмущающему параметру, для восполнения их для всех значений независимых переменных.

В случае сетки Шишкина [2] кубический сплайн для функций с большими градиентами в пограничном слое исследовался в [5].

Остановимся на случае, когда необходимо осуществить интерполяцию функции с большими градиентами в пограничном слое, заданной в узлах равномерной сетки. В [5] показано, что интерполяция функций с большими градиентами в пограничном слое кубическими сплайнами на равномерных сетках неэффективна. В [6] построен сплайн класса $C^2[0,1]$, на основе того, чтобы он был точным на многочленах второй степени и на функции пограничного слоя. Однако обоснования точности сплайна в [6] не приведено.

В данной работе мы предлагаем строить L-сплайны, точные на всех многочленах второй степени и на составляющей, задающей основной рост интерполируемой функции в экспоненциальном пограничном слое. Доказано существование и единственность интерполяционного сплайна и получены асимптотически неулучшамые оценки погрешности, из которых вытекает равномерная по малому параметру ε сходимость интерполяционного процесса на функциях, имеющих большие градиенты в пограничном слое. Также показано, что предельные по возмущающему параметру постановки задач приводят к кубическим и параболическим интерполяционным сплайнам. Как следствие основного результата получено, что для параболической сплайн-интерполяции в случае совпадения узлов интерполяции с узлами сплайна на равномерной сетке, несмотря

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 15-01-06584).

на неограниченность совокупности констант Лебега, на классе четырежды непрерывно дифференцируемых функций имеет место сходимость третьего порядка по шагу сетки, как и в случае традиционной сплайн-интерполяции по Субботину или Марсдену [7].

Отметим, что интерполяционные L-сплайны рассматривались во многих работах, например, в [8],[9], см. также обзор литературы в [9]. Однако важные для сингулярно возмущенных задач вопросы равномерной по параметру сходимости интерполяционных процессов для таких сплайнов исследованы очень слабо.

Введем обозначения. Пусть $\varepsilon \in (0,1]$ — положительный параметр. Пусть $\Omega = \{x_n : x_n = nh, n = 0,1,\ldots,N,\ x_0 = 0, x_N = 1\}$ — равномерная сетка интервала $[0,1]$ с шагом $h = 1/N$. Обозначим через $S(\Omega,k,1)$ пространство полиномиальных сплайнов степени k дефекта 1 на сетке Ω. В случае необходимости будем считать разбиение Ω продолженным левее точки $x=0$ и правее точки $x=1$ на всю ось с шагом h. Под C и C_j будем подразумевать положительные постоянные, не зависящие от параметра ε и шага h. При этом один и тот же символ C_j может обозначать разные константы. Будем писать $f = O(g)$, если справедлива оценка $|f| \le C|g|$ и $f = O^*(g)$, если $f = O(g)$ и $g = O(f)$, где C не зависит от ε. Пусть $C[a,b]$ - пространство непрерывных на $[a,b]$ функций с нормой $\|\cdot\|_{C[a,b]}$ Через $C_h[0,1]$ обозначим линейное нормированное пространство функций из $C[0,1]$, имеющих в точках $x=0$ и $x=1$ односторонние производные второго порядка, с нормой $\| u \|_{C,h} = \| u \|_{C[0,1]} + h^2(|u''(0)| + |u''(1)|)$. Если предполагается зависимость функции $u(x)$ от параметра ε, то будем писать $u(x,\varepsilon)$.

1 Постановка задачи и формулировка результатов

Пусть Ω — равномерная сетка интервала $[0,1]$ с узлами $x_n,\ n = 0,1,\ldots,N$ и шагом h, заданная во введении. Предполагаем, что функция $u(x)$ задана в узлах сетки Ω, $u_n = u(x_n), n = 0,1,\cdots N$. Зададим пространство L-сплайнов, учитывающих наличие погранслойной составляющей экспоненциального вида у интерполируемой функции:

$$SL(\Omega,3,1) = \{S(x) \in C^2[0,1] : S(x) = a_n + b_n x + c_n x^2 + d_n e^{-x/\varepsilon},$$
$$x \in [x_n, x_{n+1}], 0 \le n \le N-1\}.$$

Интерполяционный L-сплайн $S(x;u) \in SL(\Omega,3,1)$ функции $u(x)$ определим из условий

$$S(x_n;u) = u(x_n),\ 0 \le n \le N,\ S''(0;u) = u''(0),\ S''(1;u) = u''(1). \tag{1}$$

Основным для настоящей работы является случай, когда для интерполируемой функции $u(x,\varepsilon)$ справедлива декомпозиция в виде суммы регулярной и сингулярной составляющих:

$$u(x,\varepsilon) = q(x) + \gamma\Phi(x,\varepsilon), \tag{2}$$

где

$$|q^{(j)}(x)| \le C_1,\ 0 \le j \le 4, \Phi(x,\varepsilon) = e^{-\alpha x/\varepsilon}, \alpha > 0,\ \varepsilon > 0,\ x \in [0,1].$$

Предполагаем, что в представлении (2) регулярная составляющая $q(x)$ и постоянная γ не заданы, функция $\Phi(x,\varepsilon)$ известна, ее производные неограниченно растут у границы $x=0$, если $\varepsilon \to 0$. Представление (2) соответствует решению краевой задачи для уравнения с малым параметром ε при старшей производной [2].

В дальнейшем, не ограничивая общности, считаем, что $\alpha = 1$, т.к. этот параметр можно включить в значение ε.

Теорема 1. *Для любой функции $u(x) \in C_h[0,1]$ при всех значениях h и $\varepsilon \in (0,+\infty)$ существует единственный интерполяционный сплайн $S(x;u) \in SL(\Omega,3,1)$, удовлетворяющий условиям (1), причем справедлива оценка погрешности*

$$\| S(x;u) - u(x) \|_{C[0,1]} \le C \min\left\{\frac{1}{h}, 1 + \frac{h}{\varepsilon}\right\} \inf_{v \in SL(\Omega,3,1)} \| u - v \|_{C,h}\ . \tag{3}$$

Если функция $u(x,\varepsilon)$ имеет вид (2), то справедливы оценки

$$\| S(x;u) - u(x,\varepsilon) \|_{C[0,1]} \le C \begin{cases} \min\left\{h^3, \frac{h^4}{\varepsilon}\right\}, & \varepsilon \in (0,1], \\ h^4, & \varepsilon \in (1,+\infty). \end{cases} \tag{4}$$

Замечание 1. Из (4) вытекает равномерная по $\varepsilon \in (0,1]$ сходимость с третьим порядком точности интерполяционного процесса (1) для функций вида (2).

В соответствии со следующей теоремой оценки (3) и (4) являются не улучшаемыми.

Теорема 2. Найдется такая константа $C_1 > 0$, что для любых $\varepsilon \in (0,1]$ и h существуют такая функция $u(x) \in C_h[0,1]$, что $u''(0) = u''(1) = 0$,

$$\| S(x;u) - u(x) \|_{C[0,1]} \geq C_1 \min\left\{\frac{1}{h}, 1 + \frac{h}{\varepsilon}\right\} \inf_{v \in SL(\Omega,3,1)} \| u - v \|_{C[0,1]} \tag{5}$$

и такая функция $u_1(x) \in C^4[0,1]$, что

$$\| S(x;u_1) - u_1(x) \|_{C[0,1]} \geq C_1 \min\left\{h^3, \frac{h^4}{\varepsilon}\right\} \| u_1 \|_{C[0,1]} . \tag{6}$$

Получим некоторые следствия из теорем 1 и 2 для параболического и кубического сплайнов. Пусть $S_3(x;u) \in S(\Omega,3,1)$ — интерполяционный кубический сплайн функции $u(x)$, определяемый из условий (1), а $S_2(x;u) \in S(\Omega,2,1)$ — интерполяционный параболический сплайн, определяемый из условий

$$S_2(x_n;u) = u(x_n),\ 0 \leq n \leq N, \quad S_2''(1-0;u) = u''(1). \tag{7}$$

Изучим предельные по параметру ε свойства экспоненциального сплайна $S(x;u) \in SL(\Omega,3,1)$.

Теорема 3. *Для любой функции $u(x) \in C_h[0,1]$ интерполяционные сплайны $S_2(x;u)$ и $S_3(x;u)$ существуют, единственны, и при каждом фиксированном $h = 1/N$ имеют место формулы*

$$\lim_{\varepsilon \to +\infty} \| S(x;u) - S_3(x;u) \|_{C[0,1]} = 0, \tag{8}$$

$$\lim_{\varepsilon \to 0+0} \| S(x;u) - S_2(x;u) \|_{C[0,1]} = 0. \tag{9}$$

Замечание 2. Аналогичные (8),(9) предельные переходы к кубическим и линейным сплайнам для гиперболических сплайнов [10], содержащих две экспоненты, были получены в [11],[12]. Ниже мы приведем приложения оценок (8),(9) к обычной полиномиальной сплайн-интерполяции.

Следствие 1. Справедливы следующие оценки:

$$\| S_3(x;u) - u(x) \|_{C[0,1]} \leq C \inf_{v \in S(\Omega,3,1)} \| u - v \|_{C,h}, \tag{10}$$

$$\| S_2(x;u) - u(x) \|_{C[0,1]} \leq \frac{C}{h} \inf_{v \in S(\Omega,2,1)} \| u - v \|_{C,h} . \tag{11}$$

Если $u(x) \in C^4[0,1]$, то справедливы оценки погрешности:

$$\| S_3(x;u) - u(x) \|_{C[0,1]} \leq Ch^4, \tag{12}$$

$$\| S_2(x;u) - u(x) \|_{C[0,1]} \leq Ch^3. \tag{13}$$

Замечание 3. Оценки (10), (12) — хорошо известные оценки погрешности кубической сплайн-интерполяции на равномерных сетках [13]. Оценки (11), (13)— это оценки погрешности параболической сплайн-интерполяции в случае совпадения узлов сплайна и узлов интерполяции. В [14], [15] отмечается, что такая постановка задачи параболической сплайн-интерполяции не является удачной. Однако из оценки (13) следует, что, несмотря на неограниченность совокупности констант Лебега в соответствии с (11) и теоремой 4 ниже, при повышенной гладкости, когда $u(x) \in C^4[0,1]$, погрешность интерполяции будет иметь такой же порядок, как и в случае обычной интерполяции по Субботину или Марсдену.

В теореме 3 предельный переход по ε делается при фиксированном $h = 1/N$. Однако аналогичный результат справедлив, если предельный переход осуществляется в зависимости от отношения ε/h.

Следствие 2. *Для любой функции $u(x) \in C_h[0,1]$ интерполяционные сплайны $S_2(x;u)$ и $S_3(x;u)$ существуют, единственны, и при всех $\varepsilon \in (0,1], h = 1/N$ имеют место формулы:*

$$\lim_{\varepsilon/h \to +\infty} \| S(x;u) - S_3(x;u) \|_{C[0,1]} = 0, \tag{14}$$

$$\lim_{\varepsilon/h\to 0} \| S(x;u) - S_2(x;u) \|_{C[0,1]} = 0. \tag{15}$$

Остановимся на обосновании следствия 2. Формулы (14), (15) вытекают из (8), (9), поскольку доказательство формул (8), (9) основано на предельных переходах при фиксированном $h = 1/N$ от экспоненциальных B-сплайнов к кубическим и параболическим B-сплайнам соответственно. Но для каждого отдельного B-сплайна на сетке с меняющимся шагом h предельный переход при $\varepsilon/h \to 0$ или $\varepsilon/h \to +\infty$ можно рассматривать как предельный переход при $\varepsilon_1 \to 0$ или $\varepsilon_1 \to +\infty$, где $\varepsilon_1 = \varepsilon h_1/h$, для B-сплайна на сетке с фиксированным шагом $h_1 = 1/N_1$, получающегося из исходного B-сплайна растяжением в h_1/h раз.

Теорема 4. Найдется такая константа $C_1 > 0$, что для любого $h = 1/N$ существует такая функция $u(x) \in C_h[0,1]$, что $u''(0) = u''(1) = 0$, и

$$\| S_2(x;u) - u(x) \|_{C[0,1]} \geq \frac{C_1}{h} \inf_{v\in SL(\Omega,3,1)} \| u - v \|_{C[0,1]} . \tag{16}$$

2 Численные результаты

Зададим функцию вида (2)

$$u(x,\varepsilon) = \cos\frac{\pi x}{2} + e^{-\frac{x}{\varepsilon}}, \quad x \in [0,1], \tag{17}$$

а также семейство быстроосциллирующих функций, определяемых формулами

$$u_N(x) = (-1)^i \frac{x_{2i+1} - x}{h}, x \in [x_{2i}, x_{2i+2}) \cap [0,1], 0 \leq i \leq N/2, x_i = i/N. \tag{18}$$

Таблица 1: Погрешности и наблюдаемые скорости сходимости для функции (17).

ε	N					
	2^2	2^3	2^4	2^5	2^6	2^7
1	$1.56\cdot 10^{-4}$	$9.75\cdot 10^{-6}$	$6.05\cdot 10^{-7}$	$3.77\cdot 10^{-8}$	$2.36\cdot 10^{-9}$	$1.47\cdot 10^{-10}$
		4.01	4.01	4.00	4.00	4.00
10^{-1}	$1.25\cdot 10^{-3}$	$7.18\cdot 10^{-5}$	$4.17\cdot 10^{-6}$	$2.50\cdot 10^{-7}$	$1.53\cdot 10^{-8}$	$9.46\cdot 10^{-10}$
		4.12	4.11	4.06	4.03	4.02
10^{-2}	$3.73\cdot 10^{-3}$	$4.33\cdot 10^{-4}$	$4.22\cdot 10^{-5}$	$3.02\cdot 10^{-6}$	$1.78\cdot 10^{-7}$	$1.03\cdot 10^{-8}$
		3.10	3.36	3.81	4.08	4.11
10^{-3}	$3.83\cdot 10^{-3}$	$4.83\cdot 10^{-4}$	$6.02\cdot 10^{-5}$	$7.43\cdot 10^{-6}$	$8.62\cdot 10^{-7}$	$9.21\cdot 10^{-8}$
		2.99	3.00	3.01	3.08	3.25
10^{-4}	$3.95\cdot 10^{-3}$	$4.83\cdot 10^{-4}$	$6.05\cdot 10^{-5}$	$7.57\cdot 10^{-6}$	$9.46\cdot 10^{-7}$	$1.18\cdot 10^{-7}$
		3.03	2.99	3.00	3.00	3.00
10^{-5}	$3.96\cdot 10^{-3}$	$4.86\cdot 10^{-4}$	$6.06\cdot 10^{-5}$	$7.57\cdot 10^{-6}$	$9.46\cdot 10^{-7}$	$1.18\cdot 10^{-7}$
		3.03	3.00	3.00	3.00	3.00
10^{-6}	$3.97\cdot 10^{-3}$	$4.86\cdot 10^{-4}$	$6.06\cdot 10^{-5}$	$7.57\cdot 10^{-6}$	$9.46\cdot 10^{-7}$	$1.18\cdot 10^{-7}$
		3.03	3.00	3.00	3.00	3.00
10^{-7}	$3.97\cdot 10^{-3}$	$4.86\cdot 10^{-4}$	$6.06\cdot 10^{-5}$	$7.57\cdot 10^{-6}$	$9.46\cdot 10^{-7}$	$1.18\cdot 10^{-7}$
		3.03	3.00	3.00	3.00	3.00
10^{-8}	$3.96\cdot 10^{-3}$	$4.86\cdot 10^{-4}$	$6.06\cdot 10^{-5}$	$7.57\cdot 10^{-6}$	$9.46\cdot 10^{-7}$	$1.18\cdot 10^{-7}$
		3.03	3.00	3.00	3.00	3.00

Результаты расчетов сведены в две таблицы. В таблицах приведены максимальные погрешности сплайновой интерполяции, вычисленные в узлах сгущенной сетки, получающейся из исходной расчетной сетки разбиением каждого ее сеточного интервала на 10 равных частей. В табл. 1 приведены погрешности и вычисленные порядки точности для функции (17), а в табл. 2 приведены погрешности для быстроосциллирующих

Таблица 2: Погрешность для быстроосциллирующих функций (18).

ε	N					
	2^4	2^5	2^6	2^7	2^8	2^9
1	$6.25 \cdot 10^{-1}$	$6.20 \cdot 10^{-1}$	$6.10 \cdot 10^{-1}$	$6.05 \cdot 10^{-1}$	$6.03 \cdot 10^{-1}$	$6.02 \cdot 10^{-1}$
10^{-1}	$9.94 \cdot 10^{-1}$	$8.18 \cdot 10^{-1}$	$7.03 \cdot 10^{-1}$	$6.50 \cdot 10^{-1}$	$6.25 \cdot 10^{-1}$	$6.13 \cdot 10^{-1}$
10^{-2}	2.42	3.06	1.98	1.22	$8.81 \cdot 10^{-1}$	$7.32 \cdot 10^{-1}$
10^{-3}	2.92	6.28	7.61	8.09	4.37	2.39
10^{-4}	2.99	6.92	14.5	25.6	31.5	20.0
10^{-5}	3.00	6.99	14.9	30.4	58.2	93.4
10^{-6}	3.00	7.00	15.0	31.0	62.4	122
10^{-7}	3.00	7.00	15.0	31.0	63.0	126
10^{-8}	3.00	7.00	15.0	31.0	63.0	127

ломаных (18). При этом для каждого N в табл. 2 бралась своя функция $u_N(x)$. Численные результаты из табл. 1 согласуются с оценками (4) теоремы 1. Результаты вычислений, приведенные в табл. 2, согласуются с оценкой (5) теоремы 2 и при заданном достаточно малом значении ε погрешность растет с уменьшением h со скоростью $O(h^{-1})$.

Заключение

В работе получены следующие результаты. Для интерполяции функций с большими градиентами в экспоненциальном пограничном слое построен обобщенный L сплайн. Сплайн построен таким образом, чтобы он был точным на многочленах второй степени и на погранслойной составляющей, задающей основной рост интерполируемой функции в экспоненциальном пограничном слое. Доказано, что такой сплайн существует и единственный, получены двусторонние оценки погрешности на классе функций с погранслойной составляющей, соответствующей экспоненциальному пограничному слою. Установлено, что кубический и параболический интерполяционные сплайны являются предельными для построенного экспоненциального сплайна. Результаты численных экспериментом согласуются с полученными оценками погрешности.

Список литературы

[1] Бахвалов Н. С. К оптимизации методов решения краевых задач при наличии пограничного слоя // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1969. Т. 9, № 4. С. 841–890.

[2] Шишкин Г. И. Сеточные аппроксимации сингулярно возмущенных эллиптических и параболических уравнений. Екатеринбург: УрО РАН, 1992.

[3] Блатов И. А., Китаева Е. В. Сходимость метода адаптации сеток Н.С. Бахвалова для сингулярно возмущенных краевых задач // Сибирский ж. вычисл. матем. 2016. Т. 19, № 1. С. 43–55.

[4] Ильин А. М. Разностная схема для дифференциального уравнения с малым параметром при старшей производной // Матем. заметки. 1969. Т. 6, № 2. С. 237–248.

[5] Блатов И. А., Задорин А. И., Китаева Е. В. Об интерполяции кубическими сплайнами функций с большими градиентами в пограничном слое // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2016. Т. 57, № 1. С. 7–26.

[6] Zadorin A.I., Guryanova M. V. Analogue of a Cubic Spline for a Function with a Boundary Layer Component // Proc. Fifth Conference on Finite Difference Methods: Theory and Applications, 2010. Rousse: Rousse University, 2011. P. 166–173.

[7] Волков Ю. С. Интерполяция сплайнами четной степени по Субботину и по Марсдену // Украинский математический журнал. 2014. Т. 66, № 7. С. 891–908.

[8] Ahlberg J. H., Nilson E. N., Walsh J. L. The theory of splines and their applications. New York: Academic Press, 1967.

[9] Стрелкова Е. В., Шевалдин В. Т. О равномерных константах Лебега локальных экспоненциальных сплайнов с равноотстоящими узлами // Труды Института математики и механики УрО РАН. 2015. Т. 21, № 4. С. 261–272.

[10] Квасов Б. И. О построении интерполяционных гиперболических сплайнов // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2008. Т. 48, № 4. С. 570–579.

[11] Pruess S. Properties of splines in tension // J. Approximation Theory. 1976. V. 17. P. 86–96.

[12] Mc. Cartin B. J. Theory of exponential splines //J. Approximation Theory. 1991. V. 66. P. 1–23.

[13] Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.

[14] Стечкин С. Б., Субботин Ю. Н. Сплайны в вычислительной математике. М.: Наука, 1976.

[15] Бор К.Де. Практическое руководство по сплайнам. М.: Радио и связь, 1985.

Игорь Анатольевич Блатов — д.ф.-м.н., зав. кафедрой Поволжского государственного университета телекоммуникаций и информатики
e-mail: blatow@mail.ru;
Александр Иванович Задорин — д.ф.-м.н., зав. лабораторией Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, Омский филиал;
e-mail: zadorin@ofim.oscsbras.ru;
Елена Викторовна Китаева — к.ф.-м.н., доцент Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королёва;
e-mail: el_kitaeva@mail.ru.
Дата поступления — 4 мая 2017 г.

ПРИЛОЖЕНИЕ ДИХОТОМИИ МАТРИЧНОГО СПЕКТРА К ИССЛЕДОВАНИЮ УСТОЙЧИВОСТИ ТЕЧЕНИЙ

М. А. Блинова[1], Н. И. Попова[2], Э. А. Бибердорф[1,3]

[1] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*
[2] *Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, 630090, Новосибирск*
[3] *Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.61

Традиционным приемом исследования течений на устойчивость является дискретизация соответствующих дифференциальных операторов и изучение расположения спектра полученных матриц. Такие матрицы обладают рядом специфических особенностей, например, большой размер, большая норма и, возможно, нелинейная зависимость от собственных значений исходного дифференциального оператора. В данной работе представлена модификация метода дихотомии матричного спектра, которая позволяет исследовать спектр матриц с большой нормой, а также новый метод дихотомии гиперболой. Сочетание этих подходов позволяет изучать устойчивость плоскопараллельного течения Пуазейля и пограничного слоя Блазиуса.

Ключевые слова: дихотомия матричного спектра, плоскопараллельное течение, пограничный слой.

Введение

Как правило при численном исследовании устойчивости течений сначала проводится дискретизация соответствующего дифференциального оператора. Затем возникающая алгебраическая задача решается одним из стандартных методов линейной алгебры с рассмотрением полной спектральной задачи (см., например, [1]–[3]). Метод дихотомии матричного спектра является перспективной и интересной альтернативой традиционным подходам. Идея метода заключается в определении расположения спектральных пятен (групп собственных значений) относительно определенных кривых в интересующей области и нахождении базисов соответствующих им инвариантных подпространств, при этом нет необходимости вычислять собственные значения по отдельности ([4]–[7]). Поэтому применение данного метода в задачах гидродинамической устойчивости позволит исследовать только интересные с точки зрения физики неустойчивые собственные значения без нахождения всего спектра.

Одним из наиболее эффективных инструментов визуализации расположения спектра матрицы A являются одномерные спектральные портреты. Они представляют собой графики функций $f(s) = \|H_{\gamma(s)}(A)\|$, где $\gamma(s)$ — заданное однопараметрическое семейство кривых, а $H_{\gamma(s)}(A)$ — критерий дихотомии спектра A относительно кривой $\gamma(s)$. Причем $\|H_{\gamma(s)}(A)\|$ обращается в бесконечность тогда и только тогда, когда точки спектра матрицы A находятся на кривой $\gamma(s)$. Заметим, что для визуального анализа более удобны графики $\log_{10} f(s)$, которые изображены в примерах ниже.

Большая норма является особенностью матриц, полученных дискретизацией дифференциальных операторов. Вычисление матричной экспоненты (первый этап алгоритма дихотомии мнимой осью) для таких матриц невозможно, так как вызывает переполнение. Если же матрицу предварительно нормировать, то наименьшие собственные значения, представляющие особый интерес, как бы "прижимаются" к границе между полуплоскостями, и результат метода дихотомии оказывается ложно-отрицательным. Что касается матриц, полученных при дискретизации дифференциального оператора, описывающего пограничный слой Блазиуса, то они нелинейно зависят от собственных значений исходных дифференциальных операторов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00791_а).

В данной работе рассмотрены пути решения этих проблем. Во-первых, описана модификация алгоритма дихотомии мнимой осью, позволяющая осуществлять дихотомию спектра матриц с большой нормой. Во-вторых, описан метод дихотомии спектра линейного матричного пучка гиперболой. В-третьих, предложен способ, позволяющий свести задачу об устойчивости пограничного слоя Блазиуса к дихотомии относительно гиперболы спектра линейного матричного пучка. Приведены примеры.

1 Плоско-параллельное течение Пуазейля

1.1 Постановка задачи

Рассмотрим плоско-параллельное течение вязкой несжимаемой жидкости (рис. 1), причем без потери общности для удобства положим расстояние между пластинами $2h = 2$, т.е. $h = 1$. Для того, чтобы постро-

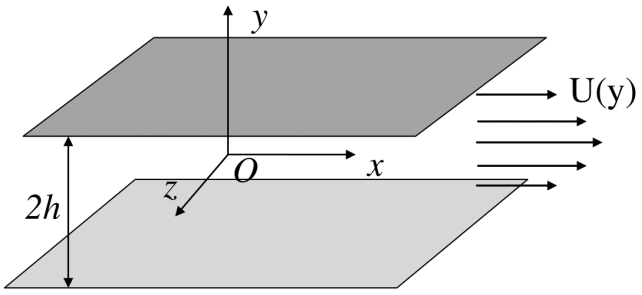


Рис. 1: Схема плоско-параллельного течения .

ить матричный пучок, чьи спектральные характеристики отражают устойчивость течения, будем следовать [1]-[3]. Скорость $\vec{U}(\vec{r})$ и давление $P(\vec{r})$ установившегося течения, а также результат их возмущения $\vec{U}_1(\vec{r}) = \vec{U}(\vec{r}) + \vec{u}(\vec{r}, t)$ и $P_1(\vec{r}) = P(\vec{r}) + p(\vec{r}, t)$ удовлетворяют уравнениям Навье — Стокса. Разность двух этих систем после отбрасывания квадратичных членов представляет собой линейную систему для возмущений установившегося течения. Она должна быть дополнена условиями на плоскостях ограничивающих течение, а именно условиями прилипания и непротекания. Для изучения условий роста возмущений рассматриваются частные решения вида

$$\{u, v, w, p\} = \{\hat{u}(y), \hat{v}(y), \hat{w}(y), \hat{p}(y)\} e^{i[(\alpha x + \beta z) - wt]}, \tag{1}$$

где $\hat{u}(y), \hat{v}(y), \hat{w}(y), \hat{p}(y)$ — комплексные амплитуды возмущений потока, α и β — комплексные волновые числа, ω — комплексная круговая частота. Очевидно, что частное решение растет, если $\operatorname{Im} w > 0$ или $\operatorname{Im} \alpha < 0$ или $\operatorname{Im} \beta < 0$. При подстановке решений (1) в описанную выше линейную систему уравнений получается, в частности, уравнение Орра — Зомерфельда

$$\left\{ i(\alpha U - w) \left(\frac{d^2}{dy^2} - k^2 \right) - i\alpha U'' - \frac{1}{Re} \left(\frac{d^2}{dy^2} - k^2 \right)^2 \right\} \hat{v} = 0, \tag{2}$$

где $k^2 = \alpha^2 + \beta^2$, $Re = UL/\nu$ — число Рейнольдса, U, L — характерные скорость и длина рассматриваемого течения, ν — кинематический коэффициент вязкости среды. Профиль установившегося течения как правило принимается квадратичным $U(y) = 1 - y^2$ (течение Пуазейля). Условия прилипания и непротекания влекут за собой краевые условия для $\hat{v}$:

$$\hat{v}|_{y=\pm 1} = 0, \qquad \hat{v}'|_{y=\pm 1} = 0.$$

1.2 Дискретизация задачи

Дискретизация дифференциальных операторов с учетом краевых условий приводит к дискретному уравнению Орра — Зоммерфельда

$$\{(D_N^2 - k^2 I_N)^2 - iRe[diag(\alpha U - w)(D_N^2 - k^2 I_N) - diag(\alpha U'')]\}\hat{v} = 0,$$

которое равносильно алгебраической задаче на собственные значения $(A_1 - \widetilde{\omega}B_1)\hat{v} = 0$, где $\widetilde{\omega} = \omega_i - i\omega_r$,

$$A_1 = \frac{1}{Re}(D_N^2 - k^2 I)^2 - i\alpha \mathrm{diag}U(D_N^2 - k^2 I) - 2i\alpha I, \qquad B_1 = (D_N^2 - k^2 I) \tag{3}$$

или

$$(\widetilde{A} - \widetilde{\omega} I)\hat{v} = 0, \text{ где } \widetilde{A} = B_1^{-1} A_1, \quad \widetilde{\omega} = \omega_i - i\omega_r. \tag{4}$$

Чтобы определить, устойчиво течение Пуазейля или нет, необходимо узнать, есть ли в правой полуплоскости собственные значения матрицы $\widetilde{A}$.

1.3 Дихотомия спектра матриц с большой нормой мнимой осью

Дихотомия спектра матрицы A мнимой осью сводится к дихотомии спектра единичной окружностью с помощью экспоненциального преобразования $B = e^{\tau A}$ (см. [4], [5], [7]), где нормировочный множитель τ выбирается так, чтобы гарантировать вычислимость матричной экспоненты, например, $\tau = (2\|A\|)^{-1}$.

Если норма матрицы A — велика, то вычисление матрицы e^A, может оказаться невозможным, так как значения элементов будут выходить за границы машинной арифметики. В то же время переход к нормированной матрице τA, $\tau \approx 1/2\|A\|$ приводит к тому, что ее спектр как бы прижимается к мнимой оси, соответственно спектр матричной экспоненты $e^{\tau A}$ становится практически неотделим от единичной окружности. В итоге может быть получено слишком большое значение критерия дихотомии даже в том случае, если спектр исходной матрицы находился на существенном расстоянии от мнимой оси. Таким образом, для матриц с большой нормой вычисление экспоненты невозможно, а вычисление критерия дихотомии для нормированной матрицы дает ложный результат.

Чтобы разрешить эту ситуацию, необходимо использовать модификацию метода дихотомии матричного спектра мнимой осью для матриц с большой нормой.

Дихотомия спектра матриц с большой нормой мнимой осью Задана матрица A, $\|A\| >> 1$.
1. Выбрать k из условия $2^k \approx 2\|A\|$.
2. Присвоить $A_{-k} = e^{\tau A}$, где $\tau = 2^{-k}$, $B_{-k} = I$.
3. Применить k раз ортогональные исключения к матричному пучку $A_{-k} - \lambda B_{-k}$:

$$\begin{pmatrix} -B_j & A_j & 0 \\ A_j & 0 & -B_j \end{pmatrix} = \mathcal{Q}_j \begin{pmatrix} * & * & * \\ 0 & A_{j+1} & -B_{j+1} \end{pmatrix}.$$

Результат — матричный пучок $\tilde{A}_0 - \lambda \tilde{B}_0$.
4. Применить дихотомии спектра единичной окружностью к пучку $\tilde{A}_0 - \lambda \tilde{B}_0$ ([4]–[7]).

1.4 Численный пример

Положим $Re = 5900$, $\alpha = 1.02$, $\beta = 0$, $N = 50$ и изобразим линейный одномерный спектральный портрет матрицы $\widetilde{A}$ (4) или, что то же самое, пучка (3), а именно график критерия дихотомии $\log_{10} \|H(\widetilde{A} - \omega_i I)\|$. На рис. 2 видно, что часть собственных значений пучка (3) находится в правой полуплоскости, что означает, что течение Пуазейля неустойчиво. Так как в действительности в правой полуплоскости находится только одно собственное значение матрицы $\widetilde{A}$, то метод дихотомии позволяет вычислить собственную функцию для этого значения (рис. 2, справа). Полученные результаты полностью соответствуют известному факту, что плоско-параллельное течение Пуазейля теряет устойчивость при $Re = 5772.22$, $\alpha = 1.02$, $\beta = 0$.

2 Дихотомии матричного спектра относительно кривых второго порядка

В данном разделе на примере задачи об устойчивости пограничного слоя будет показано, что для решения подобных задачи возможности метода дихотомии матричного спектра должны быть распространены на кривые второго порядка. Затем мы опишем способ сведения задачи дихотомии относительно гиперболы к дихотомии относительно мнимой оси и продемонстрируем этот подход на модельном примере.

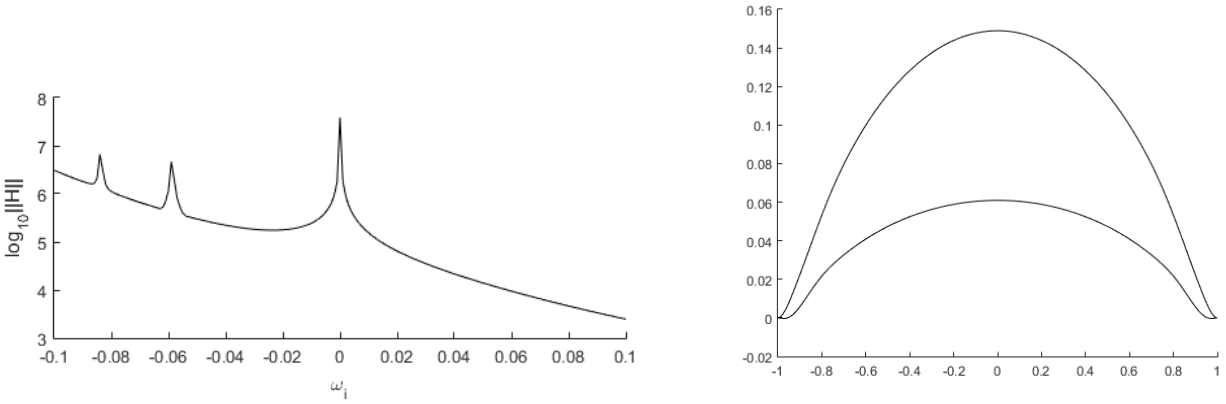


Рис. 2: Линейный спектральный портрет дискретизированного оператора Орра — Зоммерфельда при $Re = 5900$, $\alpha = 1.02$, $\beta = 0$, $N = 50$ (слева); вещественная и мнимая части собственной функции, соответствующей неустойчивому собственному значению (справа)

2.1 Спектральная задача для уравнения Орра-Зоммерфельда в случае течения Блазиуса

Рассматривается задача устойчивости пограничного слоя на бесконечной пластине (течение Блазиуса). Так же как в предыдущем пункте, исследование устойчивости течения Блазиуса сводится к исследованию спектра оператора Орра — Зоммерфельда. На пластине ставятся однородные условия прилипания и непротекания:

$$\varphi|_{y=0} = \frac{d\varphi}{dy}|_{y=0} = 0. \tag{5}$$

Отличия от плоскопараллельного течения заключаются в профиле основного течения и граничном условии на бесконечности. В свободном потоке, вдали от стенки ставится условие ограниченности возмущений:

$$| \varphi |_{y\to\infty} < \infty,$$

которое равносильно равенству

$$\varphi|_{y\to\infty} = C_1 e^{-ky} + C_2 e^{-\sqrt{k^2+iRe(\alpha-\omega)}y}, \tag{6}$$

следующему из вида уравнения Орра — Зоммерфельда при $y \to \infty$.

Профиль основного течения $U = U(y) = \frac{df(y)}{dy}$ определяется из решения обыкновенного дифференциального уравнения для функции тока $f(y)$ (течение Блазиуса):

$$2\frac{d^3 f}{dy^3} + f\frac{d^2 f}{dy^2} = 0,$$

$$f(0) = \frac{df}{dy}(0) = 0, \qquad \frac{df}{dy}(y \to \infty) = 1.$$

Устойчивость исследуется в предположении вещественности волнового числа k^2 (α и β заданы). Задачей является определение комплексной частоты $\omega = \omega_r + i\omega_i$ (временная устойчивость).

2.2 Сведение к дихотомии спектра линейного матричного пучка относительно гиперболы

Дискретизация уравнения (2) и условий (5), (6) сводит задачу к исследованию расположения относительно мнимой оси параметра ω такого, что

$$(\tilde{A}(\omega) - \omega I)\varphi = 0, \tag{7}$$

причем зависимость $\tilde{A}(\omega)$ нелинейная.

Однако замена

$$\sigma = \sqrt{k^2 + iRe(\alpha - \omega)}.$$

превращает задачу (7) в спектральную задачу для квадратичного матричного пучка $P + \sigma R + \sigma^2 S$ относительно гиперболы $\mathrm{Im}\sigma\mathrm{Re}\sigma = Re\alpha/2$. Увеличение размеров, позволяет свести задачу к вопросу о расположении собственных значений линейного матричного пучка относительно гиперболы. Действительно, если σ — собственное значение пучка $P + \sigma R + \sigma^2 S$ и v — соответствующий ему собственный вектор, то σ также собственное значение пучка

$$\begin{bmatrix} 0 & I \\ -P & -R \end{bmatrix} - \sigma \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & S \end{bmatrix}.$$

с собственным вектором $(v, \sigma v)^T$.

2.3 Метод дихотомии спектра линейного матричного пучка относительно гиперболы

Нам дан линейный матричный пучок $(A - \sigma B)$, дихотомия которого проводится относительно гиперболы γ, заданной формулой

$$\mathrm{Re}\sigma\mathrm{Im}\sigma = c. \tag{8}$$

Введем параметризацию γ: $\xi = i\mathrm{Im}\sigma$, $\sigma = \frac{ic}{\xi} + \xi$. При такой замене гипербола γ переходит в мнимую ось, а матричный пучок приобретает вид:

$$A - \sigma B = A - \frac{ic}{\xi}B + \xi B.$$

Очевидно, что у пучка $A - \sigma B$ отсутствуют собственные значения на γ тогда и только тогда, когда у пучка $A - \frac{ic}{\xi}B + \xi B$ нет точек спектра на мнимой оси. Так как ξ при конечных значениях $\sigma \in \gamma$ не обращается в ноль, то, не теряя общности, вместо пучка $A - \frac{ic}{\xi}B + \xi B$ можно рассматривать квадратичный пучок

$$\xi(A - \frac{ic}{\xi}B + \xi B) = \xi^2 B + \xi A - icB$$

и исследовать дихотомию его спектра мнимой осью.

Уже использованный ранее прием удвоения размерности (см. предыдущий раздел) позволяет свести задачу к стандартному случаю дихотомии мнимой осью спектра линейного пучка

$$\tilde{A}(c) - \xi\tilde{B} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ icB & -A \end{bmatrix} - \xi \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix}. \tag{9}$$

Теперь к такой задаче мы можем применить метод дихотомии матричного спектра мнимой осью, то есть вычислить матричного интеграла

$$H(c) = \int_{-\infty}^{\infty} (\tilde{A}^*(c) + i\xi\tilde{B}^*)^{-1} C (\tilde{A}(c) - i\xi\tilde{B})^{-1} d\xi. \tag{10}$$

Если $\|H(c)\| < \infty$, то на мнимой оси отсутствуют собственные значения пучка (9), а значит у пучка $(A - \sigma B)$ нет собственных значений на гиперболе (8).

Алгоритм

Дано: матричный пучок $(A - \sigma B)$, гипербола с параметром c.

1. Формируем дополнительные линейные матрицы для A и B соответственно

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ icB & -A \end{bmatrix}, \qquad \tilde{B} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix}.$$

Результат — линейный матричный пучок $\tilde{A} - \xi\tilde{B}$.

2. Применение метод дихотомии матричного спектра мнимой осью для матриц с большой нормой к пучку $\tilde{A} - \xi\tilde{B}$.

2.4 Численный пример дихотомии гиперболой

Рассмотрим матричный пучок $A - \sigma B$

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 3 & 5 & -3 & 0 \\ -1 & 3 & 1 & 1 & -15 & 0 \\ 0 & 0 & 7 & -8 & -3 & 1 \\ 0 & 0 & 8 & 7 & 11 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -6 & 6 \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{11}$$

и семейство гипербол $\mathrm{Re}\sigma\mathrm{Im}\sigma = c$, $0 < c < 75$ и изобразим одномерный гиперболический спектральный портрет пучка $A - \sigma B$. Максимумы функции $f(c) = \log_{10} \|H(c)\|$, где $H(c)$ — критерий дихотомии (10), приходятся на $c_1 = 3$, $c_2 = 36$, $c_3 = 56$ (см. рис. 3 слева). Это означает, что на гиперболах $\mathrm{Re}\sigma\mathrm{Im}\,\sigma = c_i$, $i = 1, 2, 3$, есть собственные значения пучка (11), что проиллюстрировано на рис. 3 справа.

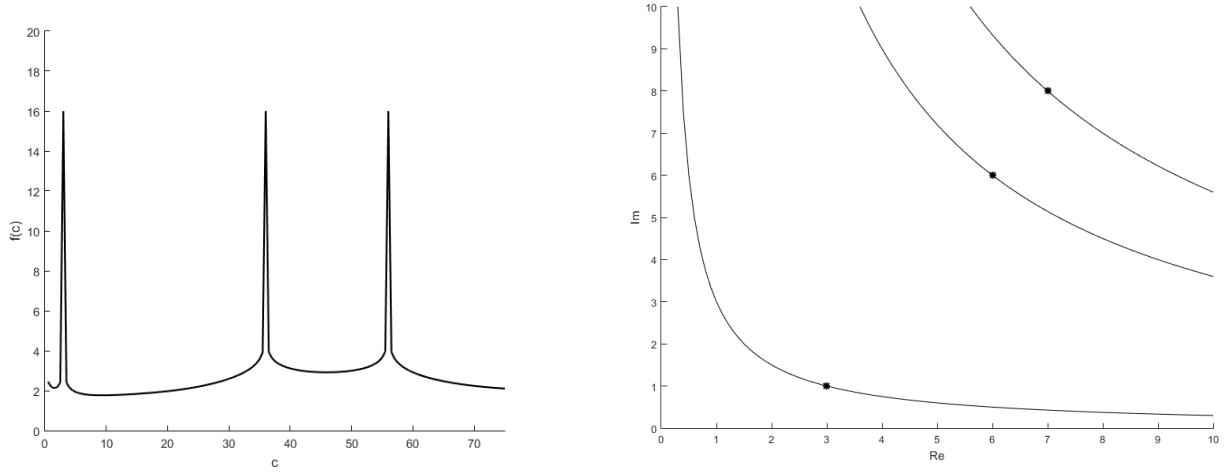


Рис. 3: Одномерный спектральный гиперболический портрет пучка (11) (слева); собственные значения $3+i$, $6+6i$ и $7+8i$ пучка, и гиперболы $\mathrm{Re}\sigma\mathrm{Im}\sigma = c_i$, $c_1 = 3$, $c_2 = 36$, $c_3 = 56$ (справа).

Заключение

Как видно из представленных примеров, вычислительные методы дихотомии матричного спектра и построения одномерных спектральных портретов представляют эффективный инструментарий для изучения несимметричных спектральных задач. Однако для использования в задачах об устойчивости течений, требуется их дополнительная модификация и развитие.

Список литературы

[1] Бойко А.В., Грек Г.Р., Довгаль А.В., Козлов В.В. Физические механизмы перехода к турбулентности в открытых течениях. Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика"Институт компьютерных исследований, 2006.

[2] Дразин Ф. Введение в теорию гидродинамической устойчивости.М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005.

[3] Алгазин С.Д., Соловьев Г.Х. О спектральной задаче для оператора Орра — Зоммерфельда // Изв. Тульского государственного университета, Естественные науки. 2015. Вып. 4. С. 5–13.

[4] Годунов С.К. Лекции по современным аспектам линейной алгебры. Новосибирск: Научная книга, 2002.

[5] Малышев А.Н. Введение в вычислительную линейную алгебру. Новосибирск: Наука Сибирское отделение, 1991.

[6] Бибердорф Э.А. Критерий дихотомии корней полинома единичной окружностью // Сиб. журн. инд. мат. 2000. Т. 3, No. 1. С. 16–32.

[7] Godunov S.K., Sadkane M. Some new algorithms for the spectral dichotomy methods // Linear Algebra Appl. 2003. Vol. 358. P. 173–194.

Марина Александровна Блинова — студентка Новосибирского государственного университета; e-mail: blin_mary@mail.ru;
Нэли Иннокентьевна Попова — науч. сотр. Института ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН; e-mail: N.I.Popova@inp.nsk.su
Элина Арнольдовна Бибердорф — к.ф.-м.н., ст. науч. сотр. Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН; доцент Новосибирского государственного университета; e-mail: biberdorf@ngs.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С НЕНУЛЕВЫМ УГЛОМ ВСТРЕЧИ

М. А. Боронина, В. А. Вшивков

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 517.968

Схема Crab Waist фокусировки пучков была использована в физических экспериментах и продемонстрировала свою высокую эффективность для повышения светимости — количества актов взаимодействий частиц пучков при единичном сечении. На пути реализации полностью трехмерного алгоритма для проведения математического моделирования пучков с учетом параметров Crab Waist первым шагом явилось создание алгоритма для моделирования пучков с ненулевым углом встречи. В работе представлены результаты численных экспериментов и сравнения их с теми немногими аналитическими решениями, которые существуют для данной трехмерной задачи.

Ключевые слова: математическое моделирование, релятивистские пучки, коллайдеры, ненулевой угол встречи, метод частиц-в-ячейках.

Введение

Работа посвящена математическому моделированию динамики пучков заряженных частиц в современных линейных коллайдерах. Целью физических экспериментов является исследование фундаментальных физических явлений. Достижение высокой светимости при высокой энергии пучков представляет собой актуальную задачу и требует развития научных подходов и технологий, в том числе методов математического моделирования. Рассматривается динамика пучков в ультрарелятивистском случае, когда релятивистские факторы частиц достигают значений $10^3 - 10^5$. В этом случае сильные поперечные электромагнитные поля приводят к деформированию или разрушению пучка, оказывая существенное влияние на светимость. Для повышения светимости была предложена схема встречи пучков Crab Waist, которая предполагает наличие достаточно большого угла встречи между пучками и ограничений на конфигурации пучков [1]. В физических экспериментах схема продемонстрировала высокую эффективность и перспективность [2].

Стандартный подход для математического моделирования динамики пучков по сути двумерен: каждый из пучков представляется набором слоев частиц, слои взаимодействуют друг с другом при совпадающих продольных координатах [3]. Данный подход наилучшим образом подходит для моделирования динамики пучков в циклических коллайдерах, где изменения на каждом обороте невелики. Полностью трехмерный подход позволяет наиболее полно описать динамику частиц в случае сильных деформаций пучка в однопролетном режиме [4, 5, 6].

Для возможности математического моделирования схемы Crab Waist в полностью трехмерном случае необходимым шагом явилась реализация алгоритма динамики пучков с ненулевым углом встречи. В качестве тестовых решений использованы круглые гауссовы цилиндрические и эллипсоидальные пучки. В работе предложены результаты численных экспериментов и их сравнение с аналитическими решениями.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 16-31-00301, 16-07-00916).

1 Модель и алгоритм

Предполагается, что пучок электронов двигается навстречу пучку позитронов и взаимодействует с ним. Движение происходит в самосогласованных электромагнитных полях в вакууме. Расчетная область включает в себя пучки перед самым взаимодействием, границы области находятся достаточно близко к пучку [4]. Динамику системы можно описать кинетическим уравнением Власова и уравнениями Максвелла:

$$\frac{\partial f_{+,-}}{\partial t} + \vec{v}_{+,-}\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F}_{+,-}\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = 0, \tag{1}$$

$$rot\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \tag{2}$$

$$rot\vec{H} = \frac{4\pi}{c}\vec{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \tag{3}$$

$$div\vec{E} = 4\pi(n_- e^- + n_+ e^+) \tag{4}$$

$$div\vec{H} = 0 \tag{5}$$

$$\vec{F}_{+,-} = e^{+,-}(\vec{E} + \vec{v}_{+,-} \times \vec{H}/c) \tag{6}$$

$\vec{p} = \gamma_{+,-} m_e \vec{v}_{+,-}$, где релятивистский фактор $\gamma_{+,-} = 1/\sqrt{1 - |\vec{v}_{+,-}|^2/c^2}$, n_+, n_- — плотности заряда пучков, $\vec{j}$ — токи, $\vec{E}$ и $\vec{H}$ — электрическое и магнитное поле.

Для обезразмеривания предполагается, что характерная скорость — скорость света $c = 2.9979 \cdot 10^{10}$см/сек, а длина пучка — 1см.

Задача решается методом частиц-в-ячейках [7] с использованием разнесенных сеток, позволяющих проводить расчеты со вторым порядком точности по времени и пространству. Для вычисления токов используется алгоритм Виллансенора-Бунемана [8], при этом разностный аналог уравнения неразрывности выполняется точно, что уменьшает погрешности и увеличивает устойчивость метода. Данный алгоритм позволяет учитывать движение пучков под углом, но необходимо задавать начальные и граничные условия для электрического поля. Магнитное поле в начальный момент можно вычислить через скорости частиц и электрическое поле, граничные значения для магнитного поля вычисляются по дополнительным узлам электрического поля. Таким образом, необходимо разработать алгоритм вычисления электрического поля пучка при движении его под углом.

Предположим, что один пучок движется под углом θ к оси z в плоскости (z,x), а второй пучок двигается строго вдоль продольной оси z (рис. 1, 2). В безразмерных переменных импульсы частиц равны $\vec{p}_{0_1} = (sin\theta, 0, cos\theta)p_{0_1}$, $\vec{p}_{0_2} = (0, 0, -1)p_{0_2}$, где $p_{0_1} = \sqrt{{\gamma_1}^2 - 1}$, $p_{0_2} = \sqrt{{\gamma_2}^2 - 1}$.

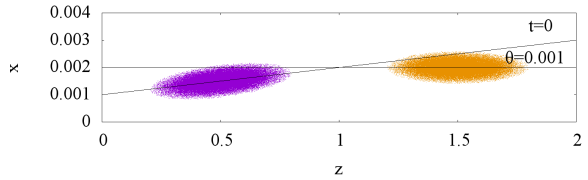


Рис. 1: Координаты пучков (z,x) при t=0

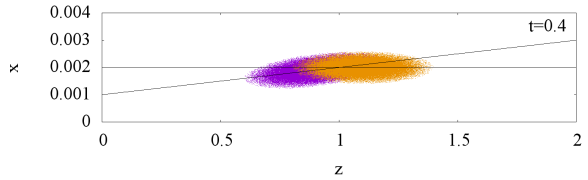


Рис. 2: Координаты пучков (z,x) при t=0.4

Поле пучка вычисляется через поперечное поле $E_r = E_\perp cos\theta$, которое вычисляется по принципу суперпозиции через вклады полей

$$E_\perp = \frac{1}{\gamma^2}\frac{1}{(1 - \beta^2 sin^2\theta)^{\frac{3}{2}}}\frac{q\vec{R}}{R^3},$$

где $\vec{R}$ — радиус-вектор точки, в которой вычисляется поле [9]. Таким образом, поле $E_\perp$ в плоскости, проходящей через необходимый граничный узел(i_1, l_1, k_1) (рис. 3), задается с помощью формул

$$E_\perp(i_1, l_1, k_1) = \sum_{i,l} h_x h_y \rho(i, l, k_i) \frac{r}{r^3},$$

где $k_i = k_1 + xtg\theta/h_x$, $x = (i_1 - i)h_x$, $y = (l_1 - l)h_y$, $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, и ρ — плотность модельных частиц в виде игл [10].

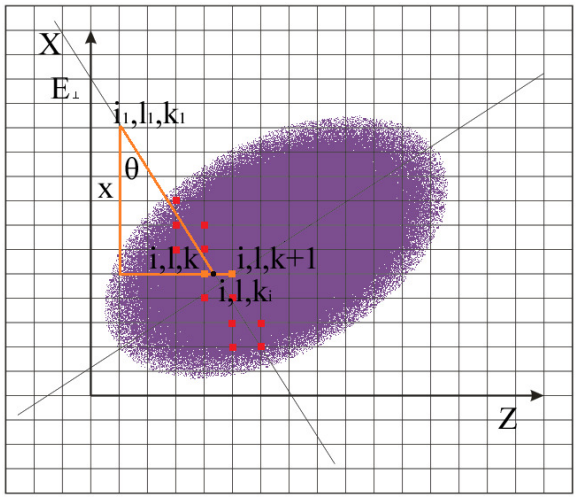


Рис. 3: Вычисление поля пучка

Величина продольного шага сетки определяет количество используемых ближайших узлов. В ускорительных установках пучки имеют большой продольный размер по сравнению с поперечным (соотношение их размеров достигает $1 : 10^3 : 10^5$) [11], а углы взаимодействия составляют 0.1 рад, поэтому использовать количество узлов для определения значения плотности более двух нецелесообразно. Значение плотности $\rho(i, l, k_i)$ определяется линейной интерполяцией между узлами $\rho(i, l, k)$ и $\rho(i, l, k + 1)$, $k < k_i < k + 1$. При использовании схемы на сдвинутых сетках все значения берутся с соответствующими сдвигами.

В качестве тестового решения взят пучок цилиндрической формы, распределение частиц которого гауссово в поперечных направлениях и равномерно в продольном:

$$\rho(r, z) = \frac{1}{2\pi\sigma^2 L_{cyl}} \left(1 - \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right)\right),$$

где его длина L_{cyl}. Заряд пучков выбирается достаточно малым, и влияние поперечных полей на частицы обоих пучков не учитывается. Для длинного цилиндра по теореме Гаусса можно вычислить поперечное поле пучка аналитически:

$$E(r) = \frac{2Ne}{rL_{cyl}} \left(1 - \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right)\right).$$

В центральной части пучка его поперечное поле постоянно в направлении z и совпадает с полем цилиндра в нерелятивистском случае. После вычисления поля по этой формуле в узлах сетки производится его поворот на угол θ.

Светимость определяется как количество взаимодействий между частицами встречных пучков в единицу времени при единичном сечении. Известная формула для интегральной светимости [12]

$$L = KN_1N_2 \iiint \rho_1(x)\rho_1(y)\rho_1(s - s_0)\rho_2(x)\rho_2(y)\rho_1(s + s_0)dx\,dy\,ds\,ds_0,$$

где $K = \sqrt{(\vec{v_1} - \vec{v_2})^2 - (\vec{v_1} \times \vec{v_2})^2}$ — кинематический фактор, равный 2 при лобовом взаимодействии, для гауссовых пучков с количеством частиц N_1 и N_2, одинаковыми размерами и плотностями заряда

$$\rho_{1,2}(x, y, z) = \frac{N_{1,2}e}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right]$$

превращается в

$$L = \frac{N_1 N_2}{4\sigma_x \sigma_y}.$$

При взаимодействии пучков под углом светимость L_0 уменьшается:

$$L = \frac{L_0}{\sqrt{1+\phi^2}},$$

где $\phi = \frac{\sigma_z}{\sigma_x} \operatorname{tg}(\frac{\theta}{2})$ — угол Пивинского.

Численный метод расчета светимости предполагает суммирование соответствующих значений плотностей:

$$L = KN_1N_2 \sum_m \sum_{i,l,k} \rho_1(x)\rho_1(y)\rho_1(z-ct)\rho_2(x)\rho_2(y)\rho_1(z+ct)h_x h_y h_z \tau,$$

где $x = (i-1.5)h_x, y = (i-1.5)h_y, z = (i-1.5)h_z, t = m\tau$, и $c = 1$ в безразмерных переменных. Т.к. светимость в алгоритме вычисляется на основе плотности, которая, в свою очередь, вычисляется по координатам частиц, то правильное поведение светимости демонстрирует корректное вычисление координат частиц во все моменты времени взаимодействия пучков во всей области.

2 Результаты

Численные эксперименты проводились в расчетной области $[0 : L_x] \times [0 : L_y] \times [0 : L_z]$, $L_x = 0.004$ см, $L_y = 0.002$ см, $L_z = 2$ см, для пучков цилиндрической и эллипсоидальной формы радиусом $R = 3\sigma$, $\sigma = \sigma_x = \sigma_y = 2 \cdot 10^{-4}$ см. Длина цилиндрического пучка равна $L_{cyl} = 0.6$ см, дисперсия эллипсоидального пучка в продольном направлении $\sigma_z = 0.2$ см.

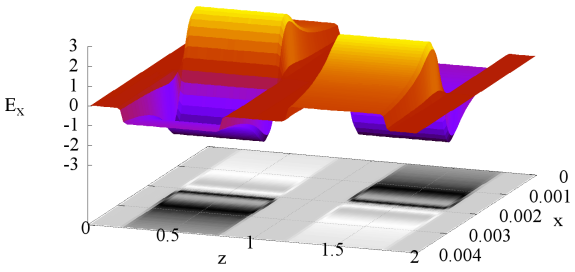


Рис. 4: Поле E_x при $\theta = 0$

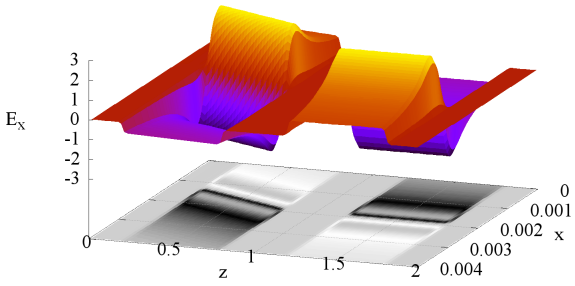


Рис. 5: Поле E_x при $\theta = 0.001$

Заряд пучков $Q_1 = -N_1 e$, $Q_2 = N_2 e, N_1 = N_2 = 10^6$. Релятивистские факторы частиц $\gamma = 6850$.

На рисунке 6 представлено поле E_x (единица измерения — Гс) в плоскости $y = 0.00087$ см,$z = 0.35$ см, вычисленное численно и аналитически в начальный момент времени для сетки $100 \times 100 \times 100$ и $2 \cdot 10^7$ модельных частиц в каждом пучке. Предлагаемый алгоритм вычисления поля в начальный момент достаточно хорошо задает электрическое поле.

На рисунках 7, 8 изображены графики поля E_x для различного количества узлов по направлению z (100, 200, 400) в плоскости $x = 0.00156$ см, $y = 0.00101$ см в различные моменты времени. В значениях поля присутствуют погрешности, характерные для метода частиц, которые появляются вследствие ограниченного числа частиц в ячейке. Из рисунков видно, что более мелкая в продольном направлении сетка позволяет точнее описывать высокие градиенты поля на границе пучка и обеспечивает сходимость метода. Тем не менее, в ускорительных установках используются пучки с гладким распределением частиц, и градиенты на границе пучков без деформации невелики. Данные тесты проводились для цилиндров с круглым сечением, провести аналогичные тесты для пучков с параметрами реальных физических установок не представляется возможным из-за отсутствия аналитических решений.

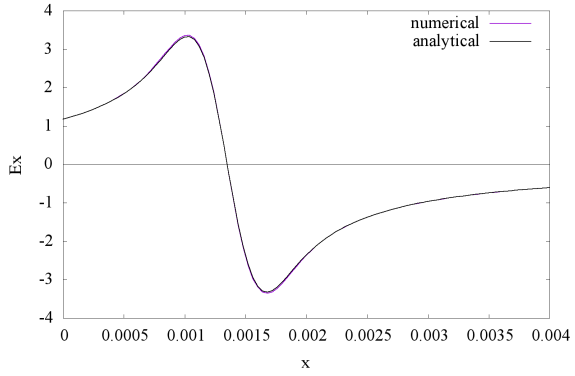


Рис. 6: Аналитические и численные значения поля

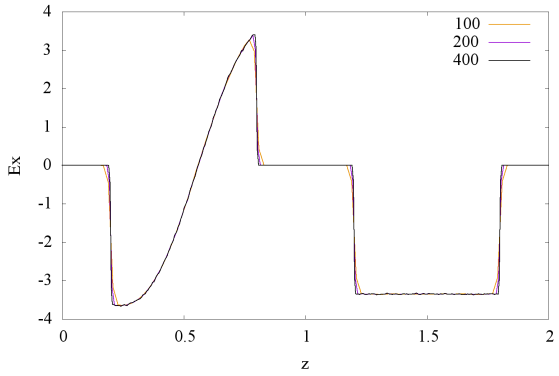


Рис. 7: Поле E_x при $t = 0$

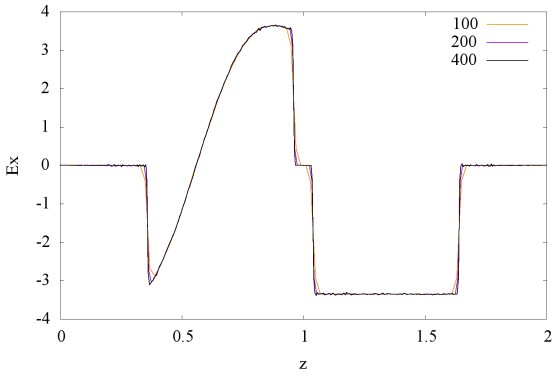


Рис. 8: Поле E_x при $t = 0.53$

В качестве тестового решения для светимости были использованы пучки с гауссовым распределением во всех трех направлениях с 10^7 частиц в каждом пучке на сетке $100 \times 100 \times 100$. Алгоритм расчета динамики частиц показал хорошие результаты. На рисунке 9 представлена зависимость убывания светимости от угла встречи. Рисунок демонстрирует совпадение численной светимости с соответствующими аналитическими значениями.

Расчеты проводились на суперкомпьютерах “Ломоносов” (МГУ) и “Политехник РСК Торнадо” (СПбПУ).

Заключение

Предложен алгоритм для моделирования динамики пучков заряженных ультрарелятивистских частиц с ненулевым углом встречи. Алгоритм наиболее полно учитывает трехмерную динамику системы. Особенностью алгоритма является его высокая эффективность для длинных пучков. Результаты численных экспериментов демонстрируют работоспособность и перспективность метода для проведения математического моделирования с параметрами Crab Waist.

Список литературы

[1] P. Raimondi, D. Shatilov, M. Zobov. Beam-Beam Issues for Colliding Schemes with Large Piwinski Angle and Crabbed Waist // LNF-07/003 (IR), 2007, arXiv:physics/ 0702033.

[2] M. Zobov et al. Phys. Rev. Lett. 104, 174801

[3] Schulte D. Study of Electromagnetic and Hadronic Background in the Interaction Region of the Tesla Collider // Tesla Reports, Hamburg. — 1996. — Vol. 97–08.

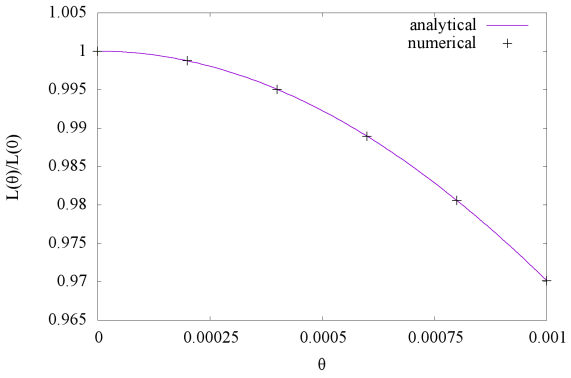


Рис. 9: Зависимость светимости от угла встречи θ

[4] Boronina M., Vshivkov V. Parallel 3-D particle-in-cell modelling of charged ultrarelativistic beam dynamics // Journal of Plasma Physics. 2015. 81(6).

[5] M.A. Boronina, G. Dudnikova, and V.A. Vshivkov 3D Computer Simulations of the Ultrarelativistic Beam Dynamics in Super Colliders // Proc. of IPAC2015, Richmond, VA, USA. 2015. MOPJE023. P. 326–329.

[6] Boronina M., Vshivkov V. Parallel three-dimensional PIC code for beam-beam simulation in linear colliders // Proc. of IPACT14, Dresden, Germany, MOPME027. – 2014.

[7] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. — М. : Мир, 1962.

[8] Villansenor J., Buneman O. Rigorous Charge Conservation for Local Electromagnetic Field Solvers // Computer Physics Communications, 1992, v.69, p. 306–316.

[9] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика (Том 2. Теория поля). — М.: Наука, 1988.

[10] В. А. Вшивков, М. А. Боронина, Трехмерное моделирование динамики ультрарелятивистских пучков заряженных частиц: особенности вычисления начальных и граничных условий // Матем. моделирование, 2012, том 24, номер 2, 67–83.

[11] Adolphsen C et al. 2013 The International Linear Collider Technical Design Report — Volume 3.II: Accelerator Baseline Design

[12] T. Suzuki. General formulae of luminosity for various types of colliding beam machines (KEK–76-3), Japan.

Боронина Марина Андреевна — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: boronina@ssd.sscc.ru;
Вшивков Виталий Андреевич — д.ф.-м.н., зав. лабораторией Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: vsh@ssd.sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

СЕРВИСЫ НАУЧНОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ «АКТИВНАЯ СЕЙСМОЛОГИЯ»

Л. П. Брагинская[1], А. П. Григорюк[1], В. В. Ковалевский[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 550.34

В работе рассмотрены принципы построения, структура и предоставляемые пользователям сервисы научной информационной системы (НИС) для поддержки теоретических и экспериментальных исследований в области активной сейсмологии [1].
Основные функции НИС:

- интеграция тематических информационных ресурсов;
- обеспечение содержательного доступа к результатам полевых и вычислительных экспериментов;
- интерактивный анализ зарегистрированных сейсмических сигналов (сейсмограмм);
- автоматическое построение интерактивных карт районов полевых работ на основе сервиса Google Maps.

Целостное представление научного направления «Активная сейсмология» и содержательный доступ к информационным ресурсам обеспечивает портал знаний, организованный на основе онтологии предметной области.
Ключевые слова: сейсмология, онтология, портал знаний, вычислительные информационные системы, базы данных.

Введение

Результативность современной научно-исследовательской деятельности в значительной мере зависит от эффективного доступа к общим цифровым научным данным и знаниям определенных предметных областей. Те научные области, в которых используются высокоточные инструменты и высокопроизводительные вычислительные кластеры для натурных и вычислительных экспериментов, порождают все большие объемы информации. Как правило, размещаются результаты исследований на сайтах научных организаций. На сегодняшний день наиболее распространенными видами коллекций научной информации являются базы данных (БД) и электронные библиотеки (ЭБ). В рамках этих коллекций накапливаются как данные экспериментов и результаты их обработки, так и различные текстовые, графические и иные документы — научные отчеты, статьи, описания экспериментов, технические описания инструментальных средства и т.п. Таким образом, знания и данные, относящиеся к одной предметной области, зачастую оказываются представленными на разрозненных интернет-ресурсах. Для того, чтобы обеспечить возможность как можно большему количеству исследователей пользоваться результатами, полученными в данной предметной области, необходимо решить задачи систематизации и структуризации информации, формализации научных и инженерных знаний, обеспечить эффективный содержательный поиск, описание сервисов, используемых для решения расчетных задач. Принято считать, что в современном мире наиболее перспективны те исследования, которые проводятся на стыке разных наук. В связи с этим представляется актуальной задача создания такой научной среды, которая позволит участникам процесса научных исследований, представляющим различные научные направления, использовать разнородные распределенные ресурсы.

Особенностью научных сервисов [2], информационной поддержки научных коллективов является:

- необходимость включения подробной информации о персонах, связи персон сохраняют актуальность;

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 15-07-06821).

- необходимость включения подробной информации о структуре групп;
- возможность вхождения персоны сразу в несколько групп;
- максимально подробное представление информации о предмете деятельности;
- наличие связей между персонами и предметом деятельности.

В лаборатории геофизической информатики ИВМиМГ СО РАН разработана система информационной поддержки исследований в области активной сейсмологии, охватывающая все этапы научных исследований предметной области: полевые эксперименты, обработку и анализ данных, вычислительные эксперименты, публикацию и обсуждение результатов исследований. Целостное представление предметной области и научной деятельности обеспечивает Портал знаний по активной сейсмологии. Портал знаний разработан средствами, предоставленными Лабораторией искусственного интеллекта ИСИ СО РАН [3].

1 Архитектура интернет-ресурса

Архитектуру интернет-ресурса по поддержке исследований в области активной сейсмологии можно представить в виде двух взаимодействующих подсистем (рис. 1). Первая из них Научная информационная система (НИС) «Активная сейсмология» обеспечивает доступ пользователей к полученным в ходе полевых и вычислительных экспериментов данным и средствам их анализа, а также включает в себя пополняемую пользователями тематическую электронную библиотеку, содержащую отчеты, полные тексты статей и другие документы. Вторая Портал знаний предназначен как для систематизации данной предметной области в целом, так и разнородных данных и средств их обработки, представленных в НИС. Концептуальным базисом информационной модели портала знаний является онтология предметной области «Активная сейсмология».

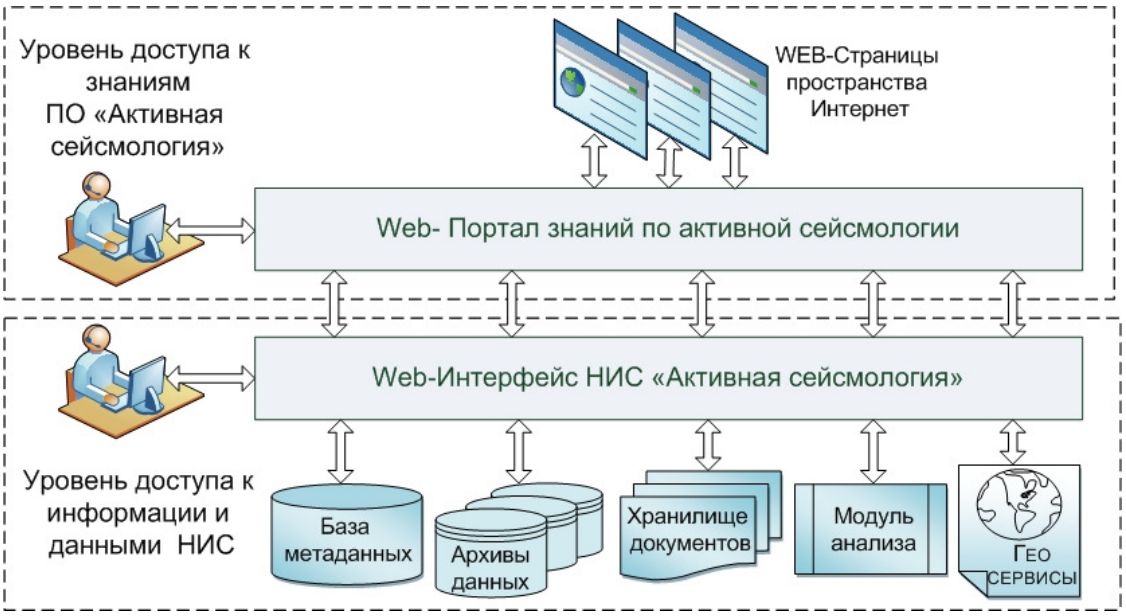


Рис. 1: Структура Интернет-ресурса

Основные компоненты НИС «Активная сейсмология»:

1. Информационно-вычислительная система по глубинному сейсмическому просвечиванию Земли (ИВС «Вибросейсмическое просвечивание Земли» [4], которая обеспечивает выполнение следующих основных функций:
   - получение из базы данных подробной информации по любому из проведенных экспериментов;
   - индексный и параметрический поиск сейсмотрасс одновременно по 18 параметрам вибропросвечивания;

- автоматическое построение по результатам поиска интерактивных карт с обозначенными на них сейсмическими источниками и регистраторами;
- интерактивный анализ сейсмических сигналов во временной, частотной, частотно-временной и пространственной областях. Анализ осуществляется в режиме онлайн с отображением результатов в веб-браузере пользователя.

По своей структуре и функциям ИВС «Вибросейсмическое просвечивание Земли» в рамках современной терминологии может быть отнесена к центрам научных данных. Порядок работы в таких центрах состоит в посылке запросов приложениям, выполняемым на сервере, и получении ответов, а не в массовом копировании необработанных данных на локальный компьютер для дальнейшего анализа.

ИВС использует СУБД MySQL, картографическая подсистема реализована на базе сервиса Google Maps. Вычислительная подсистема (модуль анализа) представляет собой приложение, выполняемое непосредственно в среде операционной системы сервера. Для обеспечения достаточного для онлайн-режима быстродействия приложение написано на языке C++ и использует программные библиотеки с низкоуровневой оптимизацией Intel Performance Libraries.

Подробно модель данных и структура базы данных, лежащей в основе ИВС рассмотрены в работе [7].

2. База данных результатов вычислительных экспериментов (Синтетические сейсмограммы).
3. Архив снимков волнового поля (Волновые поля). В архивах представлены файлы волновых форм синтетических сейсмограмм и снимков волновых полей, которые являются результатами математического моделирования с использованием высокопроизводительных кластеров Сибирского суперкомпьютерного центра.
4. Пополняемая пользователями база данных научных работ электронная библиотека и пополняемый пользователями библиографический каталог.

   Для пользователей предусмотрена возможность комментирования статей и установления контактов с авторами.

Портал знаний обеспечивает целостное представление знаний о предметной области, устанавливает взаимосвязи между относящимися к этой науке событиями, объектами, результатами и методами исследования и обеспечивает доступ к ним через Интернет. В качестве концептуальной основы и информационной модели портала знаний используется онтология, разработанная авторами статьи [5].

Онтология активной сейсмологии строится согласно методологии [6] путем достройки и развития двух базовых онтологий — онтологии научной деятельности и онтологии научного знания. В построении иерархии понятий участвовала инициативная группа экспертов, занимающихся исследованиями в различных научных направлениях активной сейсмологии. В дальнейшем планируется обогащение разработанной онтологии путем автоматического извлечения концептов и семантических связей между ними на основе анализа корпуса научных текстов предметной области.

Онтология портала вводит формальные описания понятий предметной области в виде классов объектов и отношений между ними, тем самым задавая структуры для представления реальных объектов и их связей. В соответствии с этим данные на портале представлены в виде семантической сети, т.е. как множество разнотипных взаимосвязанных информационных объектов. Содержательный доступ к систематизированным знаниям и информационным ресурсам обеспечивается с помощью предоставляемых порталом развитых средств навигации и поиска, функционирование которых также базируется на онтологии.

2 Пользовательский интерфейс

Интернет-ресурса по активной сейсмологии имеет две точки входа, т.к. каждая из подсистем снабжена пользовательским интерфейсом. На рис. 2. представлена страница Портала знаний с описанием объекта «Экспедиция «Эльбрус-2010», относящегося к подклассу «Экспедиционные работы» класса «Деятельность». Портал устанавливает семантическую связь между объектом, организациями и персонами, участвующими в экспедиции, публикациями, описывающими эту деятельность, объектом исследования, а также результатами исследований, представленными в НИС «Активная сейсмология».

На рис. 3 представлены страницы ИВС «Вибрационное просвечивание Земли», содержащие описание эксперимента и предоставляющие доступ к данным Эксперимента и их анализу — результат перехода со

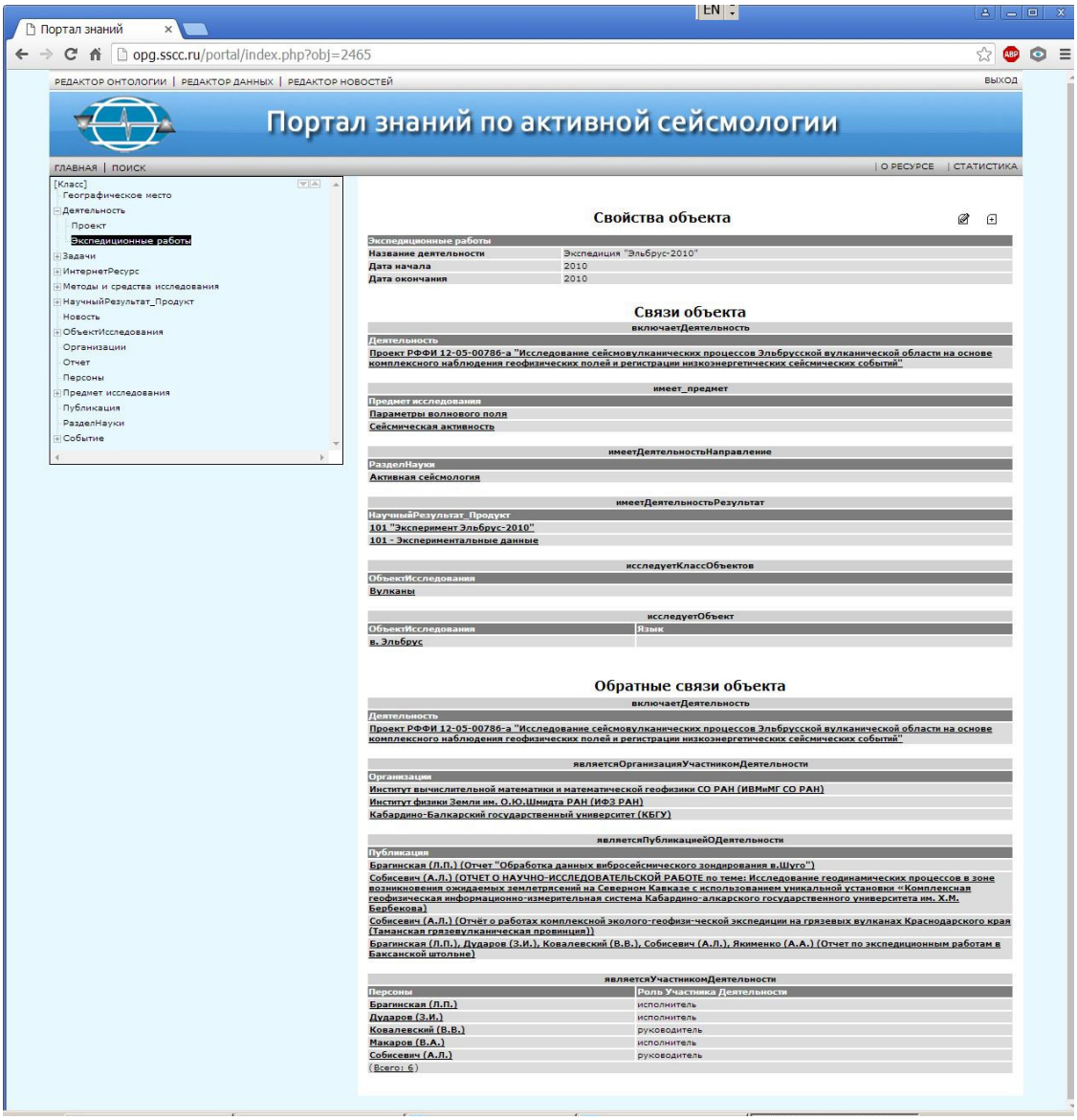


Рис. 2: Страница Портала

страницы Портала по гиперссылкам «101 — Эксперимент «Эльбрус-2010» и «101 — Экспериментальные данные».

Пользовательское меню НИС «Активная сейсмология»позволяет обращаться непосредственно к разделам информационной системы. Пользователи, прошедшие процедуру регистрации, имеют возможность, не только просматривать все страницы НИС, но и устанавливать контакты с участниками НИС, публиковать собственные статьи в разделах ЭБ, а также комментировать статьи коллег.

Пользовательский интерфейс НИС позволяет формировать запросы к базе данных сейсмотрасс по следующим параметрам:

- дата и время сеанса регистрации (интервал значений);
- код эксперимента, номер сеанса, номер регистратора, номер датчика, компонента датчика (данная информация, включая географическую карту с обозначенными на ней источниками и регистраторами имеется в кратком описании каждого эксперимента, доступном через меню «Эксперименты»);
- тип источника и параметры сейсмического сигнала (интервал значений);
- географические координаты регистратора, расстояние и азимут источник—регистратор (диапазон значений).

В результате выполнения запроса пользователю выдается список найденных файлов сейсмотрасс и форма для выбора необходимых процедур анализа, которые будут применены к найденным данным. Метаданные, соответствующие каждой из найденных сейсмотрасс, могут быть получены через меню «Эксперименты».

На рис. 4 представлен пример пользовательского запроса (отрисовка карты и выбор Z-компоненты датчика № 1 регистратора №1 эксперимента №111), выбор процедуры анализа (суммирование корреляционных сверток выбранного сигнала и их их спектрально-временной анализ) и страница результата выполнения запроса.

Заключение

Представленная НИС «Активная сейсмология» обеспечивает интеграцию тематических информационных ресурсов и содержательный доступ к результатам полевых и вычислительных экспериментов по активному вибросейсмическому мониторингу, интерактивный анализ данных, автоматическое построение интерактивных карт районов полевых работ. Взаимосвязь между деятельностью исследователей, результатами этой деятельности, персонами и организациями, осуществляющими исследования в области активной сейсмологии, обеспечивает Портал знаний. Реализация семантической интеграции и семантически обусловленного поиска информации в разрозненных интернет-ресурсах обеспечивает лучшее понимание и взаимодействие исследователей, представляющих не только активную сейсмологию, но и смежные направления геофизики.

Список литературы

[1] Алексеев А.С., Глинский Б.М., Ковалевский В.В., Хайретдинов М.С. и др. «Активная сейсмология с мощными вибрационными источниками». Монография. Филиал «Гео» Издательства СО РАН, Новосибирск, 350 стр., 2004 г.

[2] Барахнин В.Б., Федотов А.М. Исследование информационных потребностей научного сообщества для построения информационной модели описания его деятельности // Вестник НГУ. Сер.: Информационные технологии. 2008. Т. 6. Вып. 3. С. 48–59.

[3] Загорулько Ю.А., Боровикова О.И. Информационная модель портала научных знаний // Информационные технологии. — 2009. — № 12. — С.2–7.

[4] Брагинская Л.П., Григорюк А.П., Ковалевский В.В. Научная информационная система «Активная сейсмология» для комплексных геофизических исследований // Вестник КРАУНЦ, Науки о земле, 2015, № 1, Выпуск № 25, — С. 94–98.

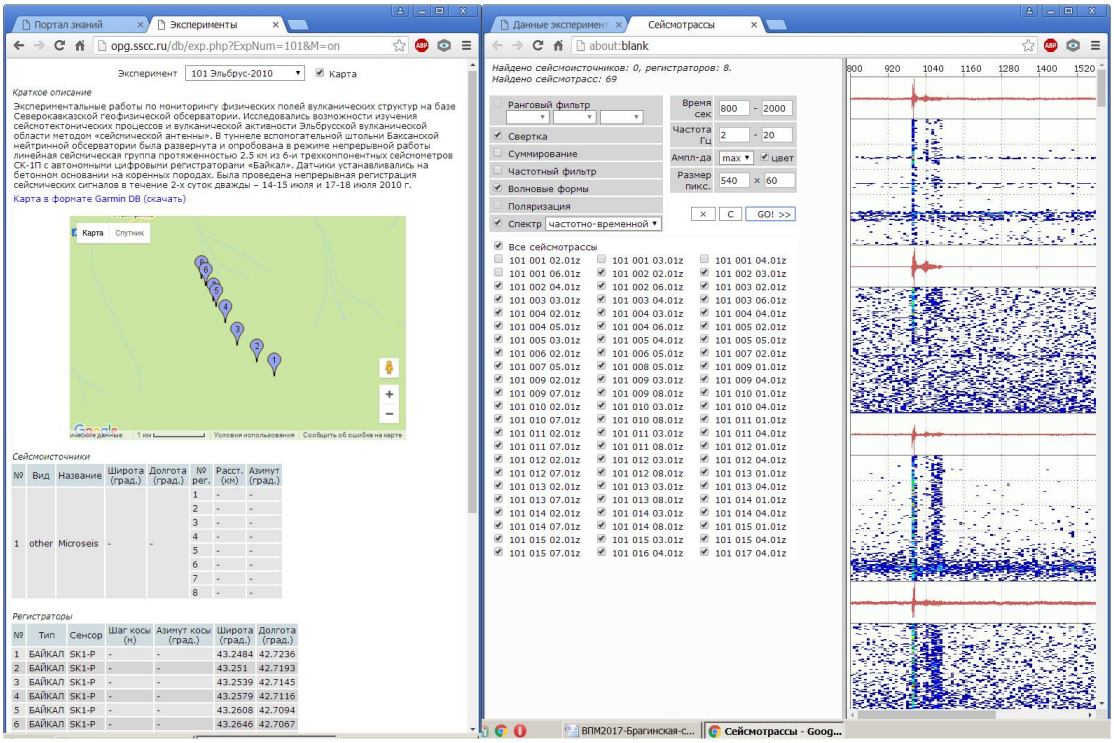


Рис. 3: Страницы ИВС “Вибросейсмическое просвечивание Земли”

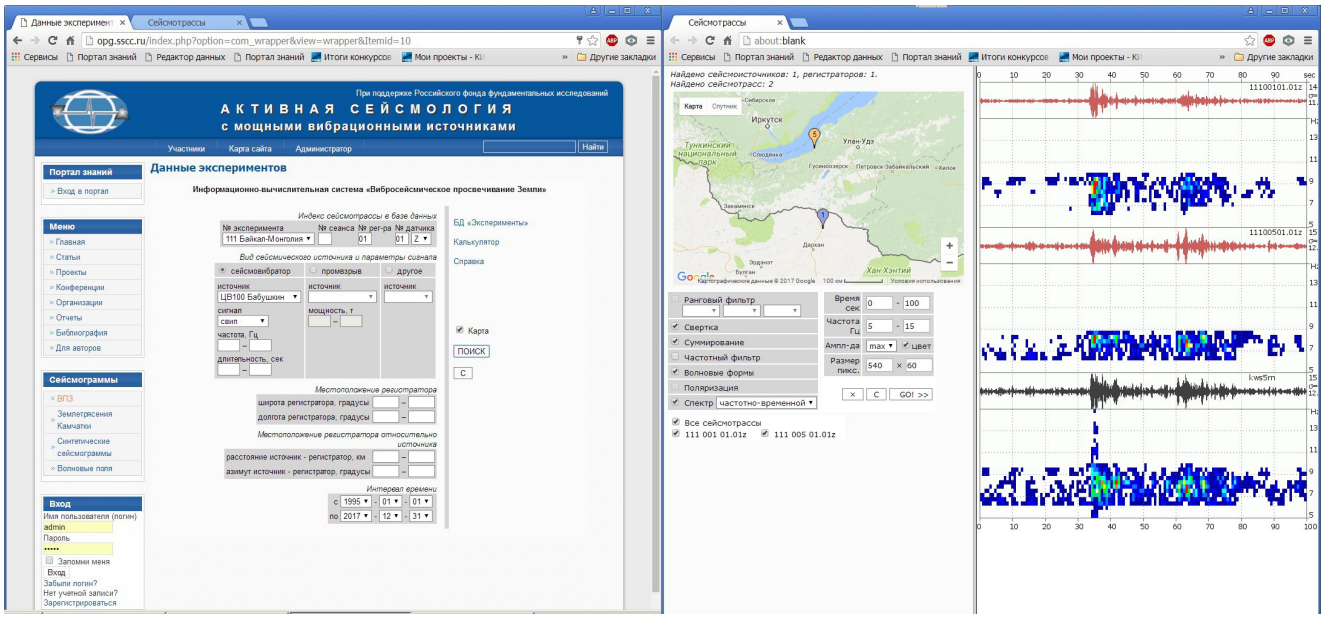


Рис. 4: Страницы пользовательского запроса и результата его выполнения

[5] Боровикова О.И., Брагинская Л.П., Загорулько Ю.А., Ковалевский В.В. Онтология предметной области «Активная сейсмология» // Материалы Всероссийской конференции с международным участием «Знания-Онтологии-Теории» (ЗОНТ-2015), Новосибирск, 2015, Т.1., С. 39–43.

[6] Загорулько Ю. А. Технология разработки интеллектуальных научных интернет-ресурсов, ориентированная на экспертов предметной области // Инфраструктура научных информационных ресурсов и систем. Сборник избранных научных статей. Труды Четвертого Всероссийского симпозиума (С.-Петербург, 6—8 октября 2014 г.). Под ред. Е.В. Кудашева, В.А. Серебрякова. М.: ВЦ РАН, 2014, Т.1., С.69–86.

[7] Grigoryuk, A. P.; Kratov, S. V. Data Experiments Management on Web-Technologies Basis // Proceedings of the 12th International Conference on Actual Problems of Electronics Instrument Engineering (APEIE) 2014, p.259–261

Людмила Петровна Брагинская — вед. программист Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: ludmila@opg.sscc.ru;
Андрей Павлович Григорюк — научный сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: and@opg.sscc.ru;
Валерий Викторович Ковалевский — д.т.н., зам. директора Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: kovalevsky@sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОЦЕНКИ ПО СТОЛКНОВЕНИЯМ ПРИ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ СМОЛУХОВСКОГО МЕТОДОМ МОНТЕ — КАРЛО

А. В. Бурмистров[1,2], М. А. Коротченко[1]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.642

Рассматривается нелинейное уравнение Смолуховского, которое часто возникает при описании процессов коагуляции частиц в различных физических системах. В работе изучается уравнение с линейными коэффициентами коагуляции, зависящими от размера взаимодействующих частиц [1]. Для численной оценки линейных функционалов от решения этого уравнения строится "модельная" эволюция "физического" многочастичного ансамбля с помощью соответствующих марковских цепей. В рамках "весового" статистического моделирования разработаны новые оценки "по столкновениям" для численного решения рассматриваемого кинетического уравнения. Построенные оценки могут быть использованы для рандомизированного ветвления траекторий модельного ансамбля коагулирующих частиц.

Ключевые слова: статистическое моделирование, динамика многочастичного ансамбля, уравнение коагуляции, параметрические производные, мультипликативный вес.

Введение

В данной работе мы рассмотрим динамику системы, состоящей из частиц с целочисленными размерами, в которой протекает процесс коагуляции, описываемый уравнением Смолуховского. Будем называть k-мером мультимер (частицу) размера $k \in \mathbb{N}$.

Пусть заданы коэффициенты коагуляции K_{lm}, которые не зависят от пространственных координат и такие, что вероятность взаимодействия двух мультимеров (l-мера и m-мера), в результате которого образуется новый мультимер ($(l+m)$-мер), в течение временно́го интервала Δt равна $K_{lm}\Delta t$. В этом случае, функция $u_k(t)$ — концентрация k-меров в системе в момент времени t — удовлетворяет уравнению Смолуховского с заданными коэффициентами следующего вида:

$$\frac{\partial u_k(t)}{\partial t} = \frac{1}{2}\sum_{l+m=k} K_{lm}u_l(t)u_m(t) - \sum_{l\geq 1} K_{kl}u_k(t)u_l(t), \quad k \geqslant 1. \tag{1}$$

Зададим начальные условия $u_k(t_0) = u_{0k}$, $(k > 0)$, и тем самым полностью определим задачу Коши для этого уравнения.

В настоящей работе мы численно оцениваем линейные функционалы от решения $u_k(t)$, а также их параметрические производные с помощью весовых модификаций методов Монте — Карло. Для этого мы рассмотрим динамику многочастичного ансамбля и будем моделировать однородную марковскую цепь (см., например, [2]). Переходы в этой цепи происходят в результате коагуляции пары мультимеров. Для символа Кронекера и дельта-функции Дирака будем использовать стандартные обозначения: $\delta_{l,m}$ и $\delta(\cdot)$, соответственно. Для описания рассматриваемого процесса взаимодействия введем обозначения:

- N_0 и N — начальное (без ограничения общности $t_0 = 0$) и текущее число мультимеров, моделируемых в ансамбле ($N_0 \geqslant N$);

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 16-01-00530, 17-01-00698).

- $\pi = (i, j)$ — номера мультимеров, которые взаимодействуют в данный момент времени (таким образом коагулируют l_i-мер и l_j-мер);
- вектор $W = (N, l_1, \cdots, l_N) \in \mathbf{W}$ однозначно описывает текущее состояние нашего ансамбля;
- расширенный вектор $M = (W, \pi) \in \mathbf{M}$, описывает текущее состояние моделируемого ансамбля в модифицированном фазовом пространстве. При этом $\mathtt{d}M = \mathtt{d}W\mathtt{d}\mu(\pi)$; и под интегрированием по дискретной мере μ понимаем суммирование по всевозможным парам (i, j), а интегрирование по $\mathtt{d}W$, в свою очередь, является суммированием по всему множеству значений N и $l_1, \cdots, l_N$.
- вероятность $P(W, t)$ описывает распределение состояния ансамбля в текущий момент времени t;
- $\mathcal{C}(W) = \sum\limits_{\pi} \mathrm{c}(N, l_i, l_j)$, где

$$\mathrm{c}(N, l_i, l_j) = \frac{1 - \delta_{1,N}}{N_0} \sum_{l=1}^{\infty} K_{l_i,l_j} \delta_{l_i+l_j,l}.$$

Как было показано в работе [5], в предположении молекулярного хаоса имеет место следующий предельный переход

$$\frac{1}{N_0} \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{l_2=1}^{\infty} \cdots \sum_{l_N=1}^{\infty} NP(N, l, l_2, \ldots, l_N, t) \to u_l(t), \text{ при } N_0 \to \infty.$$

Этот факт обосновывает правомерность использования описанных ниже интегрального уравнения и алгоритмов для оценки функционалов от решения $u_l(t)$ уравнения (1).

В работе [4] был предложен подход, заключающийся во введении новой координаты — номера пары π коагулирующих мультимеров — в набор фазовых координат. Такая модификация фазового пространства позволила авторам построить в работе [4] интегральное уравнение второго рода относительно новой искомой функции $F(W, \pi, t) = \mathrm{c}(\pi)P(W, t)$ в модифицированном пространстве $\mathbf{M} \times [0, T]$: $F = \mathbf{K}F + F_0$ или

$$F(M, t) = \int_0^t \int_{\mathbf{M}} F(M', t')K(M', t' \to M, t)\, \mathtt{d}M'\, \mathtt{d}t' + F_0(M, t). \tag{2}$$

Здесь $F_0(M, t) = \delta(t) \cdot F_0(M)$ — источник, а ядро имеет вид

$$K(M', t' \to M, t) = K_1(t' \to t|W') \cdot K_2(\pi|W') \cdot K_3(W' \to W|\pi).$$

При этом

$$K_1(t' \to t|W') = \mathcal{C}(W') \exp\{-\mathcal{C}(W')(t - t')\},$$

то есть время между элементарными взаимодействиями распределено экспоненциально. Вероятность взаимодействия пары $\pi = (i, j)$ в N'-частичном ансамбле имеет вид

$$K_2(\pi|W') \equiv K_2(i, j|W') = \frac{\mathrm{c}(\pi)}{\mathcal{C}(W')} = \frac{\mathrm{c}(N', l_i, l_j)}{\mathcal{C}(W')}.$$

Последний множитель $K_3(W' \to W|\pi)$ описывает изменение ансамбля после коагуляции выбранной пары: в результате взаимодействия двух выбранных мультимеров с номерами i и j образуется новый мультимер размера $l = l_i + l_j$, и тем самым общее число мультимеров в моделируемом ансамбле уменьшается на единицу $(N = N' - 1)$.

Заметим, что мультипликативная структура ядра оператора $\mathbf{K}$ позволяет на основе уравнения (2) строить весовые модификации алгоритмов метода Монте—Карло, поскольку обобщенные функции в ядре присутствуют в виде сомножителей. В работе [6] показано, что оператор $\mathbf{K}$ можно рассматривать действующим из $L_1(\mathbf{M} \times [0, T])$ в $L_1(\mathbf{M} \times [0, T])$. Более того, в силу конечности интервала $[0, T]$, его норма строго меньше единицы, и поэтому ряд Неймана для уравнения (2) сходится в норме L_1. Следовательно мы можем строить весовые оценки функционалов на основе уравнения (2).

Мы будем оценивать функционалы с весовой функцией $H(W) \in L_\infty$ вида:

$$G_H(T) = \int_{\mathbf{W}} H(W)P(W, T)\, \mathtt{d}W,$$

которые, как правило, возникают при решении кинетических уравнений. В работе [4] было показано, что $G_H(T)$ является линейным функционалом от решения F уравнения (2):

$$G_H(T) = \int_0^T \int_{\mathbf{M}} \underbrace{H(W)\exp\{-\mathcal{C}(W)(T-t')\}}_{\tilde{H}(W,T-t')} F(M,t')\,\mathtt{d}M\,\mathtt{d}t' \equiv (F,\tilde{H}), \tag{3}$$

1 Постановка задачи

Мы рассматриваем уравнение Смолуховского с линейными коэффициентами

$$K_{lm} = \alpha + \beta\frac{(l+m)}{2}, \tag{4}$$

которые зависят от двух заданных постоянных параметров α и β. Подробное описание "классической модели полимеров $\mathbf{A}$—R—$\mathbf{B}_{f-1}$", в которой возникают коэффициенты вида (4), можно найти, например, в работе [7].

В качестве мономеров в этой модели рассматривают соединения из f молекул: одной молекулой типа $\mathbf{A}$ и $(f-1)$ молекулами типа $\mathbf{B}$. Молекулы обоих типов химически активны, однако химические связи образуются исключительно между молекулами разных типов и разных мультимеров. Это приводит к образованию ветвящихся мультимеров при $f \geqslant 3$ (см. рисунок в [1]). Легко понять, что в описанной модели скорость полимеризации (или коагуляции) имеет вид (4) с $\beta = (f-2)\alpha$.

Поскольку

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N}\frac{\alpha}{N_0} = \frac{\alpha}{2N_0}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}1 = \frac{(N-1)}{2}\alpha\frac{N}{N_0},$$

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N}\frac{\beta}{2N_0}(l_i+l_j) = \frac{\beta}{2N_0}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}\left(\sum_{j\neq i}^{N}(l_i+l_j)\right) = \frac{\beta}{4N_0}\sum_{i=1}^{N}(N_0+(N-2)l_i)) = \frac{(N-1)}{2}\beta,$$

то для линейных коэффициентов вида (4) имеем:

$$\mathrm{c}(\alpha,\beta,\pi) = \frac{\alpha+(l_i+l_j)\beta/2}{N_0} = \frac{2\alpha+\beta(l_i+l_j)}{2N_0},$$
$$\mathcal{C}(\alpha,\beta,W) = \frac{(N-1)}{2}\left[\alpha\frac{N}{N_0}+\beta\right].$$

Таким образом компоненты ядра K вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} K_1(\alpha,\beta,t'\to t|W') &= \mathcal{C}(\alpha,\beta,W')\exp\{-\mathcal{C}(\alpha,\beta,W')(t-t')\},\\ K_2(\alpha,\beta,i,j|W') &= \frac{\mathrm{c}(\alpha,\beta,i,j)}{\mathcal{C}(\alpha,\beta,W')} = \frac{2\alpha+\beta(l_i+l_j)}{\alpha N(N-1)+\beta N_0(N-1)}. \end{aligned}$$

При этом легко проверить условия нормировки:

$$\int K_1\,\mathtt{d}t \equiv 1,\ \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=i+1}^{N}K_2(i,j) \equiv 1.$$

В настоящей работе мы построим новые весовые алгоритмы метода Монте — Карло для решения двух задач:

1. численно оценить набор функционалов $G_H(T) \equiv G_H(\alpha,\beta,T)$ одновременно для различных значений параметров α и β с помощью моделирования эволюции многочастичного ансамбля для некоторой пары значений параметров α^* и β^*;

2. оценить параметрические производные этих функционалов $\dfrac{\partial G_H}{\partial\alpha}(\alpha^*,\beta^*,T)$ и $\dfrac{\partial G_H}{\partial\beta}(\alpha^*,\beta^*,T)$.

2 Весовое моделирование цепи Маркова

Для оценки функционалов вида $G_H(T) \equiv G_H(\alpha, \beta, T)$ мы будем моделировать эволюцию многочастичного ансамбля для фиксированных значений параметров α^* и β^*. При этом разницу, появляющуюся из-за отличия $G_H(\alpha, \beta, T)$ от $G_H(\alpha^*, \beta^*, T)$, будем учитывать с помощью весовых множителей. Для этого будем моделировать вспомогательную марковскую цепь

$$\{M_n, t_n\}_{n=0}^{\kappa}; \;\; \kappa = \max_n\{n : \, t_n < T\}$$

с переходной плотностью

$$P^*(M', t' \to M, t) = P_1(t' \to t|W') \cdot P_2(\pi|W') \cdot K_3(W' \to W|\pi)$$

и плотностью $\delta(t) \cdot F_0(M)$ распределения начального состояния (M_0, t_0). Случайные весовые множители определяются после каждого шага по стандартным формулам (см., например, [3]):

$$Q_0 = 1, \;\; Q_n = Q_{n-1} Q(M_{n-1}, t_{n-1}; M_n, t_n);$$
$$Q(M', t'; M, t) = \frac{K_1(\alpha, \beta, t' \to t|W')}{P_1(t' \to t|W')} \cdot \frac{K_2(\alpha, \beta, \pi|W')}{P_2(\pi|W')}.$$

Моделирование каждого перехода в марковской цепи состоит из двух последовательных элементарных этапов: на первом этапе выбирается временной интервал между взаимодействиями, после этого выбираются два мультимера для взаимодействия. Мы предлагаем на этих этапах использовать плотность K_1 и вероятности K_2 при фиксированных значениях параметров α^* и β^*:

$$P_1(t' \to t|W') = K_1(\alpha^*, \beta^*, t' \to t|W'); \;\; P_2(\pi|W') = K_2(\alpha^*, \beta^*, \pi|W').$$

С учетом вида функций K_1 и K_2, мы получим формулы для элементарных весов $Q(M', t'; M, t; \alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*)$ на каждом шаге (обозначим $W' = W_{n-1}$ и заметим, что $[\mathcal{C}(\alpha, \beta, W') - \mathcal{C}(\alpha^*, \beta^*, W')] = \mathcal{C}(\alpha - \alpha^*, \beta - \beta^*, W')$):

$$Q(M_{n-1}, t_{n-1}; M_n, t_n; \alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*) = \frac{K_1(\alpha, \beta, t_{n-1} \to t_n|W')}{K_1(\alpha^*, \beta^*, t_{n-1} \to t_n|W')} \cdot \frac{K_2(\alpha, \beta, \pi|W')}{K_2(\alpha^*, \beta^*, \pi|W')} =$$
$$= \left.\frac{2\alpha + \beta(l_i + l_j)}{2\alpha^* + \beta^*(l_i + l_j)}\right|_{t=t_n} \cdot \exp\left\{-\frac{N_{n-1} - 1}{2}\left[\frac{N_{n-1}}{N_0}(\alpha - \alpha^*) + (\beta - \beta^*)\right](t_n - t_{n-1})\right\}.$$

Для оценки величины $G_H(\alpha, \beta, T) = (F(\alpha, \beta), \tilde{H})$ в данной работе построим оценку по столкновениям ξ — функционал от траекторий моделируемой марковской цепи (см., например, [3, 6]):

$$\xi(\alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*) = \sum_{n=0}^{\kappa} Q_n(\alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*) \tilde{H}(W_n, T - t_n|\alpha, \beta),$$

Заметим, что оценка по поглощениям η была построена авторами в работе [1].

Принимая во внимание представление (3):

$$\tilde{H}(W_n, T - t_n|\alpha, \beta) = H(W_n) \exp\{-\mathcal{C}(\alpha, \beta, W_n)(T - t_n)\}, \;\; H(\cdot) \in L_\infty,$$

можно показать, что для оценки ξ имеет место равенство

$$\xi = \sum_{n=0}^{\kappa} Q_n(\alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*) \cdot E(T, n|\alpha, \beta) \cdot H(W_n)$$

с весами

$$\tilde{Q}_n(\alpha, \beta|\alpha^*, \beta^*) = \prod_{k=1}^{n}\left[\left.\frac{2\alpha + \beta(l_i + l_j)}{2\alpha^* + \beta^*(l_i + l_j)}\right|_{t=t_k}\right] \prod_{k=1}^{n} \exp\{-\mathcal{C}(\alpha - \alpha^*, \beta - \beta^*, W_{k-1})(t_k - t_{k-1})\} \times E(T, n|\alpha, \beta),$$

где $t_0 \equiv 0$, $t_{\kappa+1} \equiv T$ и $E(T, n|\alpha, \beta) = \exp\{-\mathcal{C}(\alpha, \beta, W_n)(T - t_n)\}$.

Используя результаты работы [6], можно доказать следующие теоремы.

Теорема 1. *Если $Q(M',t';M,t) < +\infty$ для $M', M \in \mathbf{M}$ и $t', t < T$, то $\mathbf{E}\xi = G_H(T)$. Если, кроме того, веса Q равномерно ограничены и $H \in L_\infty$, то существует такое T^*, что $\mathbf{Var}\xi < +\infty$ при $T < T^*$.* □

Принимая во внимание вид весов $Q_n(\alpha,\beta|\alpha^*,\beta^*)$, возможно показать, что существуют некоторые интервалы $\alpha^* - \varepsilon_\alpha < \alpha < \alpha^* + \varepsilon_\alpha$ и $\beta^* - \varepsilon_\beta < \beta < \beta^* + \varepsilon_\beta$, на которых условия Теоремы 1 удовлетворены.

Пусть $\mathbf{K}_P$ — интегральный оператор с ядром K^2/P^*, $\rho(\cdot)$ — спектральный радиус оператора.

Теорема 2. *Если в условиях Теоремы 1 имеем $\rho(\mathbf{K}) < 1$, $\rho(\mathbf{K}_P) < 1$, а величины $||K'_\alpha||$ и $||K'_\beta||$ равномерно ограничены в некоторых интервалах $\alpha^* - \varepsilon_\alpha < \alpha < \alpha^* + \varepsilon_\alpha$ и $\beta^* - \varepsilon_\beta < \beta < \beta^* + \varepsilon_\beta$, то:*

$$\mathbf{E}\left(\frac{\partial\xi}{\partial\alpha}\right) = \frac{\partial G_H}{\partial\alpha}(\alpha^*,\beta^*,T), \quad \mathbf{Var}\left(\frac{\partial\xi}{\partial\alpha}\right) < +\infty, \quad \mathbf{E}\left(\frac{\partial\xi}{\partial\beta}\right) = \frac{\partial G_H}{\partial\beta}(\alpha^*,\beta^*,T), \quad \mathbf{Var}\left(\frac{\partial\xi}{\partial\beta}\right) < +\infty. \quad \square$$

Возможно показать, что, в силу структуры ядер операторов $\mathbf{K}$ и $\mathbf{K}_P$, в нашем случае условия Теоремы 2 также выполнены.

В случае оценки по столкновениям для параметрических производных получаем (здесь $\gamma = \alpha$ или $\gamma = \beta$):

$$\frac{\partial\xi}{\partial\gamma} = \sum_{n=0}^{\kappa}\left[\frac{\partial Q_n}{\partial\gamma}(\alpha,\beta|\alpha^*,\beta^*)\cdot E(T,n|\alpha,\beta) + Q_n(\alpha,\beta|\alpha^*,\beta^*)\cdot\frac{\partial E}{\partial\gamma}(T,n|\alpha,\beta)\right]\cdot H(W_n). \tag{5}$$

Формула (5) используется для значений $(\alpha,\beta) = (\alpha^*,\beta^*)$. Заметим, что $Q_n(\alpha^*,\beta^*|\alpha^*,\beta^*) \equiv 1$. Далее,

$$\frac{\partial E}{\partial\alpha}(T,n|\alpha^*,\beta^*) = -\frac{(N_n-1)N_n}{2N_0}(T-t_n)E(T,n|\alpha^*,\beta^*) = -C_n^a\cdot E(T,n|\alpha^*,\beta^*),$$
$$\frac{\partial E}{\partial\beta}(T,n|\alpha^*,\beta^*) = -\frac{(N_n-1)}{2}(T-t_n)E(T,n|\alpha^*,\beta^*) = -C_n^b\cdot E(T,n|\alpha^*,\beta^*).$$

и

$$\frac{\partial Q_n}{\partial\alpha}(\alpha^*,\beta^*|\alpha^*,\beta^*) = \sum_{k=1}^{n}\left[\frac{2}{2\alpha^*+\beta^*(l_i+l_j)}\Big|_{t=t_k} - \frac{(N_{k-1}-1)N_{k-1}}{2N_0}(t_k-t_{k-1})\right] = dQ_n^a,$$
$$\frac{\partial Q_n}{\partial\beta}(\alpha^*,\beta^*|\alpha^*,\beta^*) = \sum_{k=1}^{n}\left[\frac{l_i+l_j}{2\alpha^*+\beta^*(l_i+l_j)}\Big|_{t=t_k} - \frac{(N_{k-1}-1)}{2}(t_k-t_{k-1})\right] = dQ_n^b.$$

Из двух последних равенств следуют рекуррентные соотношения

$$dQ_0^a = 0,\ \ dQ_n^a = dQ_{n-1}^a + \frac{2}{2\alpha^*+\beta^*(l_i+l_j)}\Big|_{t=t_n} - \frac{(N_{n-1}-1)N_{n-1}}{2N_0}(t_n-t_{n-1}),$$
$$dQ_0^b = 0,\ \ dQ_n^b = dQ_{n-1}^b + \frac{l_i+l_j}{2\alpha^*+\beta^*(l_i+l_j)}\Big|_{t=t_n} - \frac{(N_{n-1}-1)}{2}(t_n-t_{n-1}).$$

В итоге получаем следующие формулы:

$$\frac{\partial\xi}{\partial\alpha}(T|\alpha^*,\beta^*) = \sum_{n=0}^{\kappa}\left[dQ_n^a - C_n^a\right]\cdot E(T,n|\alpha^*,\beta^*)\cdot H(W_n),$$
$$\frac{\partial\xi}{\partial\beta}(T|\alpha^*,\beta^*) = \sum_{n=0}^{\kappa}\left[dQ_n^b - C_n^b\right]\cdot E(T,n|\alpha^*,\beta^*)\cdot H(W_n).$$

3 Численные результаты

В данном параграфе мы приводим результаты численной оценки двух функционалов, полученные при помощи предложенных алгоритмов, для тестовой задачи с известным аналитическим решением. А именно, рассматриваем уравнение (1) с коэффициентами коагуляции вида (4) и начальными данными $u_l(0) = \delta_{l,1}$. В этом монодисперсном случае аналитическое решение известно и имеет вид (см., например, [8]):

$$u_l(t) = \lambda(t)(1-\lambda(t))^{l-1}\left(\frac{\alpha\lambda(t)+\beta}{\alpha+\beta}\right)^{1+l\beta/\alpha},\ \ \lambda(t) = \frac{\beta}{(\alpha+\beta)\exp\{\beta t/2\}-\alpha},$$

где $\lambda(t) = \sum\limits_{i=1}^{\infty} u_i(t)$ — полная концентрация мультимеров.

Результаты численных расчетов приведены в Таблицах 1-3, в которых мы используем следующие обозначения:

σ — среднеквадратичное отклонение;

ε — относительная погрешность (в процентах).

Для оценки были выбраны два функционала: $G_{H_1}(T)$ — концентрация мономеров, и $G_{H_\lambda}(T)$ — полная концентрация мультимеров. Для данных функционалов весовые функции имеют следующий вид:

$$H_1(W) = \frac{1}{N_0}\sum_{i=1}^{N}\delta(l_i - 1); \;\; H_\lambda(W) = \frac{1}{N_0}\sum_{i=1}^{N} 1 \equiv \frac{N}{N_0}.$$

Отметим, что эти функционалы приближают решение исходного уравнения (1):

$$G_{H_1}(T) = u_1(T) + \mathcal{O}(N_0^{-1}), \;\; G_{H_\lambda}(T) = \lambda(T) + \mathcal{O}(N_0^{-1}),$$

а детерминированная погрешность порядка $\mathcal{O}(N_0^{-1})$, как показано в работе [5], здесь появляется вследствие ограниченности ансамбля моделируемых частиц начальным количеством мультимеров N_0. Кроме того, напомним известный факт (см., например, [3]) о том, что статистическая часть погрешности построенных алгоритмов имеет порядок $\mathcal{O}(n^{-1/2})$, где n — количество моделируемых траекторий.

Искомые функционалы оценивались при следующих значениях параметров: $\alpha^* = 1.3$, $\beta^* = 1.1$, $T = 1.2$, $N_0 = 10^2$, $n = 10^6$. $\alpha = k_1 \cdot \alpha^*$, $\beta = k_2 \cdot \beta^*$, где $k_1, k_2 \in \{0.9; 1; 1.1\}$.

Численные результаты показывают, что построенные алгоритмы позволяют получить оценки как функционалов для различных значений параметров (α, β), так и параметрических производных, используя одни и те же траектории марковской цепи.

Таблица 1: Оценка концентрации мономеров $G_{H_1}(T)$.

α	β	Точное решение $u_1(T)$	Оценка ξ	σ	ε
1.3	1.1	$1.429 \cdot 10^{-1}$	$1.442 \cdot 10^{-1}$	$1.0 \cdot 10^{-4}$	0.88
1.3	1.21	$1.328 \cdot 10^{-1}$	$1.339 \cdot 10^{-1}$	$1.2 \cdot 10^{-4}$	0.81
1.3	0.99	$1.539 \cdot 10^{-1}$	$1.553 \cdot 10^{-1}$	$1.6 \cdot 10^{-4}$	0.95
1.43	1.1	$1.340 \cdot 10^{-1}$	$1.352 \cdot 10^{-1}$	$1.0 \cdot 10^{-4}$	0.87
1.43	1.21	$1.247 \cdot 10^{-1}$	$1.258 \cdot 10^{-1}$	$1.4 \cdot 10^{-4}$	0.78
1.43	0.99	$1.441 \cdot 10^{-1}$	$1.454 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{-4}$	0.93
1.17	1.1	$1.527 \cdot 10^{-1}$	$1.541 \cdot 10^{-1}$	$1.5 \cdot 10^{-4}$	0.91
1.17	1.21	$1.416 \cdot 10^{-1}$	$1.428 \cdot 10^{-1}$	$1.1 \cdot 10^{-4}$	0.83
1.17	0.99	$1.648 \cdot 10^{-1}$	$1.665 \cdot 10^{-1}$	$2.8 \cdot 10^{-4}$	1.01

Таблица 2: Оценка концентрации мультимеров $G_{H_\lambda}(T)$.

α	β	Точное решение $\lambda(T)$	Оценка ξ	σ	ε
1.3	1.1	$3.290 \cdot 10^{-1}$	$3.339 \cdot 10^{-1}$	$2.3 \cdot 10^{-4}$	1.50
1.3	1.21	$3.112 \cdot 10^{-1}$	$3.161 \cdot 10^{-1}$	$2.7 \cdot 10^{-4}$	1.55
1.3	0.99	$3.477 \cdot 10^{-1}$	$3.527 \cdot 10^{-1}$	$3.3 \cdot 10^{-4}$	1.44
1.43	1.1	$3.175 \cdot 10^{-1}$	$3.223 \cdot 10^{-1}$	$2.5 \cdot 10^{-4}$	1.54
1.43	1.21	$3.005 \cdot 10^{-1}$	$3.053 \cdot 10^{-1}$	$3.6 \cdot 10^{-4}$	1.59
1.43	0.99	$3.352 \cdot 10^{-1}$	$3.402 \cdot 10^{-1}$	$2.5 \cdot 10^{-4}$	1.47
1.17	1.1	$3.414 \cdot 10^{-1}$	$3.464 \cdot 10^{-1}$	$3.1 \cdot 10^{-4}$	1.47
1.17	1.21	$3.228 \cdot 10^{-1}$	$3.277 \cdot 10^{-1}$	$2.4 \cdot 10^{-4}$	1.52
1.17	0.99	$3.610 \cdot 10^{-1}$	$3.662 \cdot 10^{-1}$	$5.6 \cdot 10^{-4}$	1.45

Таблица 3: Оценка производных $\frac{\partial G_H}{\partial \alpha}(T)$ и $\frac{\partial G_H}{\partial \beta}(T)$ для двух H.

Функционал	Точное решение	Оценка ξ'	σ	ε
$\frac{\partial G_{H_1}}{\partial \alpha}(T)$	$-7.170 \cdot 10^{-2}$	$-7.254 \cdot 10^{-2}$	$5.2 \cdot 10^{-4}$	1.18
$\frac{\partial G_{H_1}}{\partial \beta}(T)$	$-9.589 \cdot 10^{-2}$	$-9.758 \cdot 10^{-2}$	$7.6 \cdot 10^{-4}$	1.76
$\frac{\partial G_{H_\lambda}}{\partial \alpha}(T)$	$-9.198 \cdot 10^{-2}$	$-9.241 \cdot 10^{-2}$	$1.2 \cdot 10^{-3}$	0.46
$\frac{\partial G_{H_\lambda}}{\partial \beta}(T)$	$-1.654 \cdot 10^{-1}$	$-1.661 \cdot 10^{-1}$	$1.7 \cdot 10^{-3}$	0.39

Заключение

Авторами разработаны новые алгоритмы метода Монте — Карло, которые реализуют весовые оценки "по столкновениям" для решения кинетического уравнения Смолуховского. С помощью предложенных алгоритмов возможно вычислять линейные функционалы с различными значениями параметров α и β, а также оценивать их параметрические производные, моделируя один набор траекторий марковской цепи. Эти алгоритмы возможно применять, например, в задачах интерполяции, а также для рандомизированного ветвления траекторий модельного ансамбля коагулирующих частиц.

Список литературы

[1] Бурмистров А.В., Коротченко М.А. Весовые алгоритмы метода Монте — Карло для оценки и параметрического анализа решения кинетического уравнения коагуляции // Сиб. журн. вычисл. математики. 2014. Т. 17, № 2. С. 125–138.

[2] Лушников А.А. Некоторые новые аспекты теории коагуляции // Изв. АН СССР, Физ. атмосферы и океана. 1978. Т. 14, № 10. С. 738–743.

[3] Михайлов Г.А., Войтишек А.В. Численное статистическое моделирование (Метод Монте — Карло). Москва: Издательский центр "Академия", 2006.

[4] Михайлов Г.А., Рогазинский С.В. Весовые методы Монте — Карло для приближенного решения нелинейного уравнения Больцмана // Сиб. мат. журн. 2002. Т. 43, № 3. С. 620–628.

[5] Михайлов Г.А., Рогазинский С.В., Урева Н.М. Весовой метод Монте — Карло для приближенного решения нелинейного уравнения коагуляции // Журн. вычисл. мат. и мат. физики. 2006. Т. 46, № 4. С. 714–725.

[6] Mikhailov G.A. Parametric Estimates by the Monte Carlo Method. VSP, Utrecht, 1999.

[7] Flory P.J. Principles of polymer chemistry. Ithaca, New York: Cornell University Press, 1953.

[8] Spouge J.L. Solutions and critical times for the monodisperse coagulation equation when $c(i, j) = A + B(i + j) + Cij$ // J. Phys. A: Math. Gen. 1983. V. 16, No. 4. P. 767–773.

Александр Васильевич Бурмистров — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
ст. преподаватель Новосибирского государственного университета; e-mail: burm@osmf.sscc.ru;
Мария Андреевна Коротченко — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;e-mail: kmaria@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

КОНТРОЛИРУЕМАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ ГИПЕРСПЕКТРАЛЬНЫХ ДАННЫХ ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ ЗЕМЛИ

А. А. Бучнев, В. П. Пяткин

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 528.852

Рассматривается система классификации с обучением гиперспектральных данных дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ). Оценивается применимость классификатора Байеса для нормально распределенных векторов признаков к обработке этих данных. Описана реализация классификатора спектрально-углового картирования.

Ключевые слова: гиперспектральные данные дистанционного зондирования, классификация с обучением, классификатор Байеса, классификатор спектрально-углового картирования.

Введение

Известно (см., например, Шовенгердт [1]), что непосредственное использование традиционных алгоритмов для обработки данных гиперспектральных сканеров приводит к определенным трудностям, связанным с большой размерностью векторов измерений. Ранее в ИВМиМГ СО РАН совместно с НИЦ «Планета» в рамках создания программного комплекса PlanetaMonitoring по обработке данных дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ) была разработана система классификации с обучением (контролируемой классификации) [2]. Эта система классификации реализует стратегию максимального правдоподобия Байеса для нормально распределенных векторов признаков в классах. Оценки параметров классификатора (векторов средних и ковариационных матриц в классах) получаются на основе обучающих выборок.

Этот классификатор, разработанный для обработки данных ДЗЗ с относительно небольшим количеством спектральных диапазонов (мультиспектральные данные), был достаточно легко адаптирован для обработки гиперспектральных образов, полученных сканерами с высоким спектральным разрешением. Однако такое прямое использование классификатора сопровождается следующими негативными обстоятельствами:

1. Высокие вычислительные затраты, обусловленные большой размерностью векторов признаков N (например, сканер ГСА спутника Ресурс-П № 3 имеет $N = 255$ спектральных диапазона). Расстояние Махалонобиса, используемое для оценки близости векторов признаков к центрам классов, является значением квадратичной формы с весовой матрицей размерности $N \times N$.

2. Требуются большие объемы обучающих данных. Для того, чтобы избежать сингулярностей при вычислении матриц, обратных к ковариационным, минимальный объем обучающих выборок в классах должен равняться $N + 1$ вектору. Известно, что для получения хороших оценок ковариационных матриц в мультиспектральных данных ($N \approx 10$) объем обучающей выборки V в классе должен быть таким, чтобы выполнялось следующее условие для соотношения размерности [3]: $V/N \geq 100$. Ясно, что для выполнения подобного условия в гиперспектальных данных ($N \approx 100$) объем обучающей выборки должен быть увеличен не менее, чем на порядок.

Для преодоления этих затруднений необходимо иметь возможность извлечения из гиперспектральных данных признаков, позволяющих построить набор векторов, размерность которых соответствует размерности мультиспектрального образа.

С этой целью полный набор спектральных диапазонов разбивается на блоки (соседние блоки могут пересекаться), каждый из которых представлен в результирующем векторе признаков одним значением. Это

Работа выполнена частично при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-07-00066) и Программы I.33П Президиума РАН (проект № 0315-2015-0012).

значение может быть: 1) средним по блоку; 2) максимальным значением в блоке; 3) главной компонентой в блоке; 4) центральное значение в блоке.

Кроме того, предоставляется возможность выбора главных компонент исходного набора гиперспектральных векторов данных в соответствии с упорядоченной по убыванию последовательностью собственных чисел ковариационной матрицы. Количество выбираемых главных компонент определяется суммарной дисперсией.

К полученному таким образом мультиспектральному образу в полной мере применимы функции системы контролируемой классификации программного комплекса PlanetaMonitoring (включая функцию постклассификации Vote, известную сейчас как мажоритарный фильтр).

Хотя подобное снижение размерности гиперспектральных образов используется достаточно часто (см., например, [4]), применять его следует с осторожностью из-за возможных потерь полезной информации. В частности, метод главных компонент, являясь линейным преобразованием, может разрушать нелинейности, присутствующие в данных [3].

В последнее время в состав системы контролируемой классификации комплекса PlanetaMonitoring нами включен еще один классификатор: классификатор спектрально-углового картирования [5]. Первоначально разработанный специально для классификации гиперспектральных данных этот классификатор не содержит какой-либо специфики этих данных и может быть использован для классификации и многоспектральных данных. В качестве расстояния $\rho(x, y_i)$ вектора признаков x до прототипа y_i класса i используется угловое расстояние:

$$\rho(x, y_i) = \arccos\left(\frac{x^T y_i}{\|x\| \cdot \|y\|}\right).$$

Вектор x зачисляется в класс, для которого угловое расстояние $\rho(x, y_i)$ является минимальным. В качестве прототипов классов (ссылочных векторов) авторы алгоритма [5] используют библиотеку лабораторных спектров. Мы в своей реализации алгоритма в качестве прототипов классов используем векторы средних, полученных на основе обучающих и контрольных выборок классов. Для работы с обучающими и контрольными полями используется тот же инструментарий, что и для классификатора Байеса [2]. Классификатор работает в двух режимах: тестовом и рабочем. По результатам тестового режима вычисляется вероятность правильной классификации и строится матрица ошибок. Анализируя соответствующие показатели и выполняя, при необходимости, корректировки обучающих выборок классов, можно добиться необходимого уровня правильной классификации. В рабочем режиме классификатор обрабатывает весь набор данных, используя построенные прототипы классов. При этом может использоваться заданное пороговое значение угла α: если для вектора признаков x минимальное значение угла $\min_i \rho(x, y_i) > \alpha$, то этот вектор заносится в класс отклоненных векторов.

Для вычислительных экспериментов использовался один из файлов известного набора данных спектрометра AVIRIS [6]. Размер файла 1848*614, размерность векторов измерений 210. Из этого файла были сформированы два набора векторов признаков размером 1848*614 векторов: один с размерностью векторов признаков 184 (на основе визуального анализа спектральных составляющих векторов измерений) и второй с размерностью векторов признаков 21 (взяты главные компоненты из каждых 10 последовательных спектральных составляющих). Вычисления производились в рамках модели параллельного программирования OpenMP под управлением ОС Windows-10 на компьютере с 4-хядерным процессором i3-2100. В табл. 1 приведены затраты времени в сек. на обработку указанных наборов данных классификаторами Байеса и спектрально-углового картирования в зависимости от числа выделяемых классов.

Таблица 1:

Размерность векторов признаков	Классификатор Байеса		Спектрально-угловой классификатор	
	15 классов	10 классов	15 классов	10 классов
184	170	105.2	2.4	1.6
21	2.5	1.7	0.35	0.24

На представленных ниже рисунках демонстрируются результаты работы классификаторов. На рис. 1 представлено изображение, полученное совмещением спектральных полос с номерами 30, 1 и 4 исходного

набора данных. Рис. 2 — результат, полученный применением классификатора Байеса к набору векторов признаков размерности 184 (после операции постклассификации). Рис. 3 — результат, полученный применением классификатора спектрально-углового картирования к набору векторов признаков размерности 184 (использовалось пороговое значение $\alpha = \pi/18$). Рис. 4 — результат, полученный применением классификатора Байеса к набору векторов признаков размерности 21 (после операции постклассификации). Белым цветом выделен класс отклоненных векторов. Во всех примерах выделялось по 10 классов.



Рис. 1:

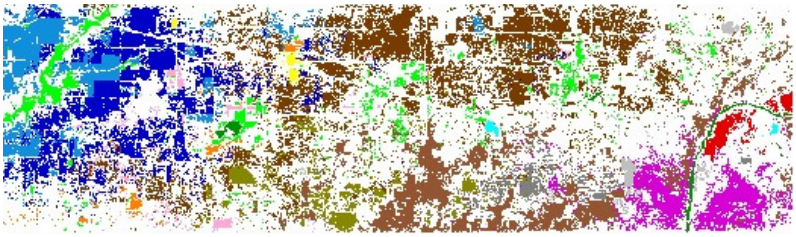


Рис. 2:

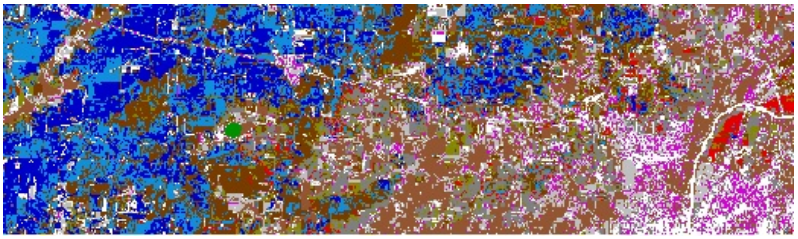


Рис. 3:

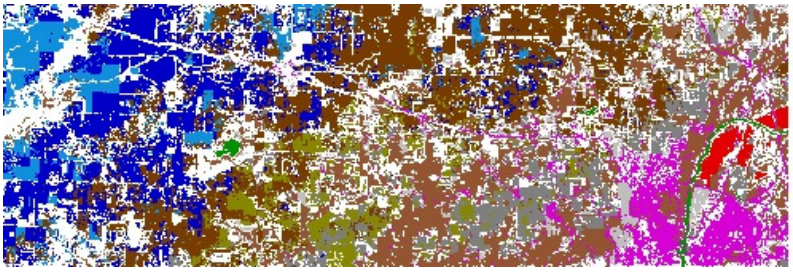


Рис. 4:

Включение технологии контролируемой классификации гиперспектральных данных ДЗЗ в состав программного комплекса PlanetaMonitoring позволяет расширить возможности системы контролируемой классификации комплекса по построению карты тематических классов данных ДЗЗ различного спектрального разрешения.

Список литературы

[1] Шовенгердт Р.А. Дистанционное зондирование. Модели и методы обработки изображений. Пер. с англ. – М.: Техносфера, 2010. – 557 с.

[2] Асмус В.В., Бучнев А.А., Пяткин В.П. Контролируемая классификация данных дистанционного зондирования Земли // Автометрия. – 2008. – № 4. – С. 60–67.

[3] J.P. Marques de Sa. Pattern Recognition. Concepts, Methods and Applications. – Berlin: Springer, 2001. – 318 p.

[4] П.В. Мельников, И.А. Пестунов, С.А. Рылов. Экспериментальное сравнение методов классификации гиперспектральных изображений высокого пространственного разрешения по спектральным и пространственным признакам. // Региональные проблемы дистанционного зондирования Земли: сб. материалов III Междунар. научной конф., 13–16 сент. 2016 г. – Красноярск : СФУ, 2016. – С. 28–33.

[5] Kruse, F. A., A. B. Lefkoff, J. W. Boardman, K. B. Heidebrecht, A. T. Shapiro, P. J. Barloon, and A. F. H. Goetz The Spectral Image Processing System (SIPS) - interactive viualization and analysis of imaging spectrometer data // Remote Sensing of Environment. – 1993. – № 44. – P. 145–163.

[6] https://aviris.jpl.nasa.gov/data/get_aviris_data.html

Алексей Александрович Бучнев — к.т.н., старший научный сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: baa@ooi.sscc.ru;
Валерий Павлович Пяткин — д.т.н., заведующий лабораторией Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: pvp@ooi.sscc.ru.
Дата поступления — 5 мая 2017 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТРЕХМЕРНЫХ ТЕПЛОВЫХ ПОЛЕЙ В ГРУНТЕ ОТ РАЗЛИЧНЫХ ИНЖЕНЕРНЫХ ОБЪЕКТОВ ФУНКЦИОНИРУЮЩИХ В ЗОНЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВЕЧНОЙ МЕРЗЛОТЫ

Н. А. Ваганова[1,2], М. Ю. Филимонов[1,2]

[1] *Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, 620990, Екатеринбург*
[2] *Уральский федеральный университет, 620002, Екатеринбург*

УДК 519.6

Для исследования процесса растепления многолетнемерзлых пород от различных инженерных объектов, функционирующих в Арктических районах, предложена новая трехмерная модель теплового взаимодействия в системе «источник тепла — грунт» с учетом различных физических и климатических факторов, влияющих на распространения тепла. Приведены численные расчеты, иллюстрирующие возможность разработанного комплекса программ для проведения долгосрочных прогнозов по определению изменения границ распространения зон вечной мерзлоты на примере эксплуатации различных технических систем, являющихся источниками тепла, на северных нефтегазовых месторождениях в зонах распространения вечной мерзлоты.

Ключевые слова: вечная мерзлота, задачи тепломассопереноса, добывающие скважины.

Введение

Разработка математических моделей взаимодействия вечной мерзлоты с меняющейся климатической системой, изучение долгосрочного влияния естественных факторов, связанных с деятельностью человека, мониторинг изменения температуры мерзлоты, а также прогнозирование влияния этих изменений на окружающую среду являются актуальными задачами. Действительно, многолетнемерзлые породы (ММП) занимают около 25 % всей суши земного шара. На Аляске эти территории занимают 80 % общей площади, в России — более 60 %, в Канаде — около 50 %. Высокогорные районы также могут относиться к зоне распространения ММП. Например, в Китае эти районы составляют 11 % всей территории, а в Австрии — 2 % . В России запасы подземных льдов криолитозоны, занимающей площадь 10 млн. км^2, составляют около 19000 км^3, что дает право называть вечную мерзлоту подземным оледенением. Эти территории чрезвычайно важны для российской экономики, так как здесь добывается около 93 % российского природного газа и 75 % нефти. Средняя толщина ММП меняется в пределах от 10 до 800 метров, а слагающие ММП породы имеют различные физико-химические свойства, которые могут изменяться по всем направлениям. В летнее время, в результате положительных температур и солнечного излучения, происходит сезонное оттаивание верхнего слоя ММП, в зимнее время наблюдается обратный процесс. Оттаивание насыщенных льдом пород из-за потепления климата, или различных техногенных воздействий, будет сопровождаться просадками земной поверхности и развитием опасных мерзлотных геологических процессов, называемых термокарстом. Различные сценарии изменения климата показывают, что глобальное потепление будет усиливаться в полярных регионах Арктики и может привести к значительной деградации ММП, усиливающейся из-за техногенных воздействий [1, 2]. Для моделирования техногенного воздействия на вечную мерзлоту часто рассматриваются временные промежутки времени 30–40 лет. Такой период времени характерен для оценки влияния теплового воздействия на деградацию вечной мерзлоты при эксплуатации нефтегазовых месторождений, поскольку проектирование и строительство кустовых площадок с добывающими скважинами и другими техническими

Работа выполнена при финансовой поддержке комплексной программы УрО РАН 15–16–1–10 и Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16–01–00401) .

системами 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 25–30 лет эксплуатации одиночной скважины).

Исследование различных пакетов программ и моделей, направленных на решение этой задачи для нефтегазовых месторождений показало, что многие параметры, оказывающие влияние на получение тепловых полей в приповерхностном слое грунта соизмеримом с толщиной слоя вечной мерзлоты, не учитываются комплексно в исходных моделях. К таким параметрам относятся, например, солнечное излучение, сезонное изменение температур, различные виды теплоизоляции добывающих и нагнетательных скважин, наличие инженерных устройств: сезоннодействующих охлаждающих устройств, факельных систем и т.п. Отметим некоторые модели, которые наиболее близки к предлагаемым нашим моделям [3, 4]. Это работы ученых из Канады и США, в которых, как правило, используется одномерное уравнение теплопроводности, но учитываются различные факторы: снежный покров, растительность и др. (подробный обзор таких моделей и программ приведен в работе [5]. При этом не предполагается наличие никаких инженерных систем размещенных в расчетной области. При учете солнечного излучения и наличия снежного покрова считалось, что коротковолновая часть радиации может проникать в снежную толщу на значительную глубину, изменяясь с глубиной по закону Бугера–Ламберта.

В предлагаемой нами трехмерной модели снежный покров, растительность и другие природные факторы учитываются за счет специального итерационного алгоритма вариации некоторых параметров, входящих в нелинейное граничное условие на дневной поверхности грунта. Такой подход позволил разработать комплекс программ, адаптирующийся к конкретному географическому месту, для долгосрочного прогнозирования динамики изменений в вечной мерзлоте от тепловых воздействий эксплуатируемых технических систем. При этом существенно была облегчена задача по заданию исходных данных, которые часто и не могут быть точно определены (например, толщины снежного покрова, изменение свойств снега в зависимости от солнечного излучения и т.п.).

1 Математическая модель и численный метод решения

Обустройство и эксплуатация нефтегазовых месторождений в районах ММП имеет ряд особенностей. В частности, для безопасной эксплуатации скважин, расположенных на специально оборудованных кустовых площадках, необходимо минимизировать распространение тепла в окружающий грунт от скважин и различных работающих инженерных систем.

В данной работе для описания таких нестационарных тепловых полей рассматривается математическая модель распространения тепла в ММП с учетом различных климатических и физических факторов, предложенная в работах [6]–[13]. 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.

На рис. 1 представлена расчетная область в виде параллелепипеда, из которого удалены вертикальная цилиндрическая скважина, или другие области, соответствующие используемым техническим системам. 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.

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: $-L_x \le x \le L_x$, $-Ly \le y \le L_y$, $-L_z \le z \le 0$. 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

разнородных объектов, являющимся 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 $\Omega_i = \Omega_i(x, y, z)$, $i = 1, \ldots, n$. Основные тепловые потоки изображены на рис. 1.

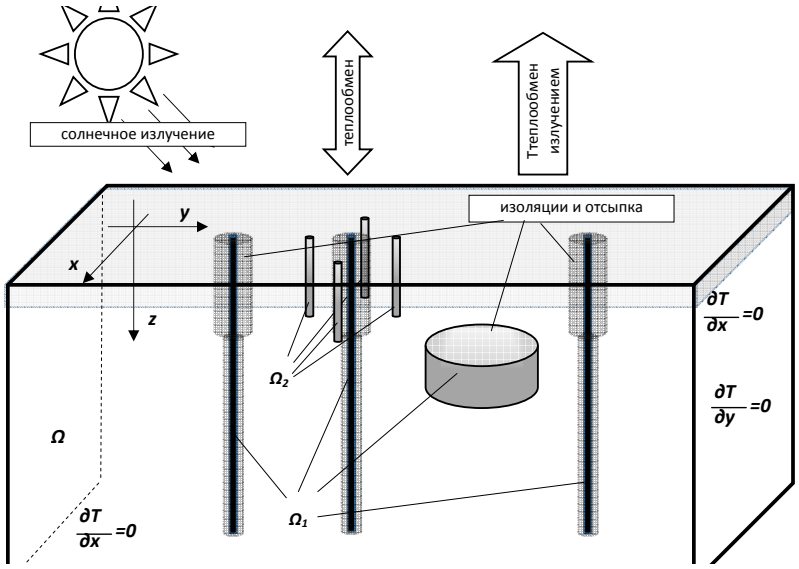


Рис. 1: Расчетная область и основные тепловые потоки

1.1 Основное уравнение

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 [14, 15]. 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

$$\rho\big(c_\nu(T) + k\delta(T - T^*)\big)\frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}\left(\lambda(T)\operatorname{grad} T\right), \tag{1}$$

где ρ — плотность [кг/м^3], T^* — температура фазового перехода [K],

$$c_\nu(T) = \begin{cases} c_1(x,y,z), & T<T^*, \\ c_2(x,y,z), & T>T^*, \end{cases} \text{ удельная теплоемкость [Дж/кг К],}$$

$$\lambda(T) = \begin{cases} \lambda_1(x,y,z), & T<T^*, \\ \lambda_2(x,y,z), & T>T^*, \end{cases} -$$

коэффициент теплопроводности [Вт/м К], $k = k(x, y, z)$ — теплота фазового перехода. Для уравнения (1) в расчетной области Ω задаются начальные

$$T(0, x, y, z) = T_0(x, y, z), \tag{2}$$

и граничные условия

$$\alpha q + b(T_{air} - T_{z=0}) = \varepsilon\sigma(T_{z=0}^4 - T_{air}^4) + \lambda\frac{\partial T}{\partial z}, \tag{3}$$

$$T\Big|_{\Omega_i} = T_i(t), i = 1, \ldots, n, \tag{4}$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=\pm L_x} = \left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_{y=\pm L_y} = \left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{z=\pm L_z} = 0, \tag{5}$$

где T_{air} — температура воздуха, $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}$ $\left[\text{Вт}/(\text{м}^2\text{К}^4)\right]$ — постоянная Стефана–Больцмана, $b = b(t,x,y)$ — коэффициент теплообмена, $\varepsilon = \varepsilon(t,x,y)$ — коэффициент излучения нагретого тела, $q(t)$ — 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.

1.2 Численный метод

Численные методы решения задач по описанию процессов деградации вечной мерзлоты являются в настоящее время наиболее эффективными и универсальными методами исследования. Разработке разностных методов решения краевых задач для уравнения теплопроводности посвящено большое количество работ [16]–[20].

Известно, что разностные методы решения математических задач обеспечивают высокую точность результатов, учитывают большое число параметров и не требуют грубых ограничений и допущений. Однако при этом, как правило, программы расчетов бывают громоздкими, а анализ результатов затруднителен из-за сложности выделения параметров, которые доминируют в полученных решениях. С другой стороны, имеющиеся немногочисленные точные решения или аналитические методы (например, метод специальных рядов [21]–[23]), обычно не могут учесть реальные граничные условия и могут служить лишь для тестирования численных методик. В настоящее время известны следующие разностные методы решения задач типа Стефана: метод ловли фронта в узел разностной сетки, метод выпрямления фронтов, метод сглаживания коэффициентов и схемы сквозного счета. Метод ловли фронта в узел сетки применяется только для одномерных однофронтовых задач, а метод выпрямления фронтов — многофронтовых задач. Характерная особенность этих методов состоит в том, что разностные схемы строятся с явным выделением искомого фронта фазового превращения. Следует отметить, что методы с явным выделением неизвестной границы фазового превращения для случая циклического изменения температуры на границе не подходят, т.к. может быть несколько немонотонно движущихся фронтов, при этом некоторые из них могут сливаться друг с другом или исчезать. Наиболее подходящим для численного решения многомерных прикладных задач типа Стефана, являются методы, основанные на подходе А.Н. Тихонова и А.А. Самарского. Используя этот подход, А.А. Самарский и Б.Д. Моисеенко разработали экономичную схему сквозного счета со сглаживанием разрывных коэффициентов в уравнении теплопроводности по температуре в окрестности фазового превращения [14].

Учет перечисленных выше климатических и технических 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 [24]–[27], но с учетом специфики, связанной с возможными фазовыми переходами в грунте. При этом разработаны основы для реализации параллельных алгоритмов [28] и создана облачная среда для проведения высокопроизводительных удаленных вычислений [29, 30], в том числе и для инженеров, не являющихся специалистами в вычислительной математике.

Отличительной особенностью пакета Wellfrost 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. Этот алгоритм основан на данных о замере температуры в грунте в разведочной скважине в конкретные моменты времени. На рис. 2 представлены распределения температуры в разведочной скважине для конкретного нефтегазового месторождения для двух различных моментов времени: осень и весна. Пусть $T^0(t_0, x_0, y_0, z)$ — начальное распределение температуры по z в вертикальной скважине, и t_0 — это некоторый день от начала года, в который проводятся замеры. Дальнейшей нашей задачей является уточнение параметров, входящих в нели-

нейное краевое условие (3), чтобы на основании решения задачи (1)–(3) получалось следующее соотношение:

$$T^0(t_0, x_0, y_0, z) \approx T(t_0 + 365j, x_0, y_0, z), \quad j = 1, 2, \ldots, J. \tag{6}$$

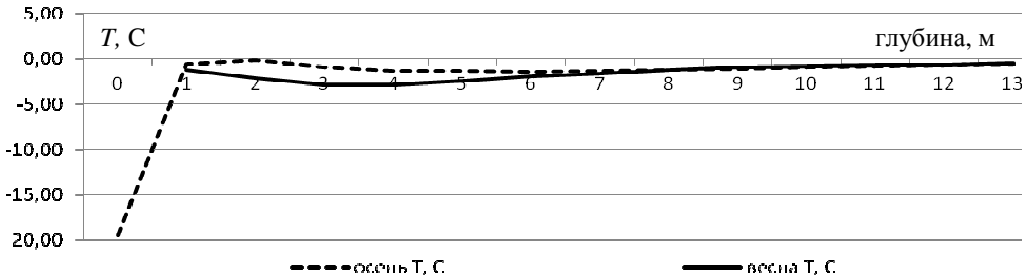


Рис. 2: Распределение температуры в грунте

Т.е. решение задачи (1)–(3) будет периодически повторять (в соответствии с годовым температурным циклом) с некоторым приближением заданное начальное распределение температуры в разведочной скважине $T^0(t_0, x_0, y_0, z)$. Например, как на рис. 2 распределение температуры должно повториться через год, следующей осенью. И чем точнее выполняется соотношение (6) на большем промежутке времени (для большего значения J), тем точнее удаётся определить параметры, входящие в условие (3). Для решения данной задачи разработан специальный итерационный алгоритм. В случае если известно только значение температуры ММП (T_p) ниже слоя сезонного протаивания грунта (желательно на глубине, как показали наши расчёты по исследованию закономерностей промерзания грунта, не менее 10 метров), то можно, пытаясь определить параметры в краевом условии (3), ограничиться получением следующей асимптотики распределения температуры при решении задачи (1)–(3):

$$T(t, x_0, y_0, z) \to T_p, \tag{7}$$

при $z > 10$ метров. Конечно, условие (6) по сравнению с условием (7) является более предпочтительным, поскольку оно соответствует конкретной литологии грунта и климатическим циклам температуры и солнечной радиации.

2 Результаты численных расчетов

Приведем результаты численных расчетов по моделированию тепловых полей в грунте от добывающих скважин, выполненных для конкретного северного нефтегазового месторождения, расположенного в зоне распространения ММП. Для того, чтобы избежать влияния граничных условий (5) на боковых поверхностях расчетной области, параметры L_x и L_y брались достаточно большими (боковые границы области Ω для одиночной скважины были не менее 25 метров от центра скважины).

На рис. 3 представлено движение границы таяния грунта вокруг одиночной скважины в течение 10 лет. Граница инженерных конструкций вокруг скважины обозначена пунктиром. Серым цветом показана зона сезонного оттаивания грунта у дневной поверхности.

На рис. 4 показано изменение радиуса растепления в зависимости от температуры флюида в скважине, заданных климатических условий (левый рисунок) и временем эксплуатации скважины.

Рассмотрим кустовую площадку одного из северных нефтегазовых месторождений с грунтом, являющимся суглинком со следующими параметрами. Теплопроводность мёрзлого грунта — 1,82 Вт/(м К), талого — 1,58 Вт/(м К), объемная теплоемкость мёрзлого грунта — 2130 кДж/(м^3 К), талого — 3140 кДж/(м^3 К), объемная теплота фазового перехода — $1{,}384 \cdot 10^5$ кДж/(м^3 К), температура ММП (температура грунта ниже границы влияния годовых климатических изменений) — $T_p = -0{,}7°C$.

Отсыпка кустовой площадки толщиной 2,5 метра состоит из трех слоев: пеноплекс (толщиной 0,2 м с плотностью 35,0 кг/м^3, теплопроводностью 0,031 Вт/(м К), удельной теплоемкостью 1,53 кДж/(кг К)), песок (толщиной 2,0 м с плотностью 1600 кг/м^3, теплопроводностью 0,47 Вт/(м К) и удельной теплоемкостью 0,84 кДж/(кг К) и бетонная плита сверху (толщиной 0,3 м с плотностью 2500 кг/м^3, теплопроводностью 1,69 Вт/(м К) и удельной теплоемкости 0,84 кДж/(кг К).

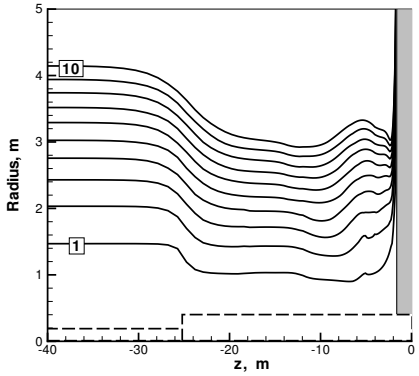


Рис. 3: Радиус растепления

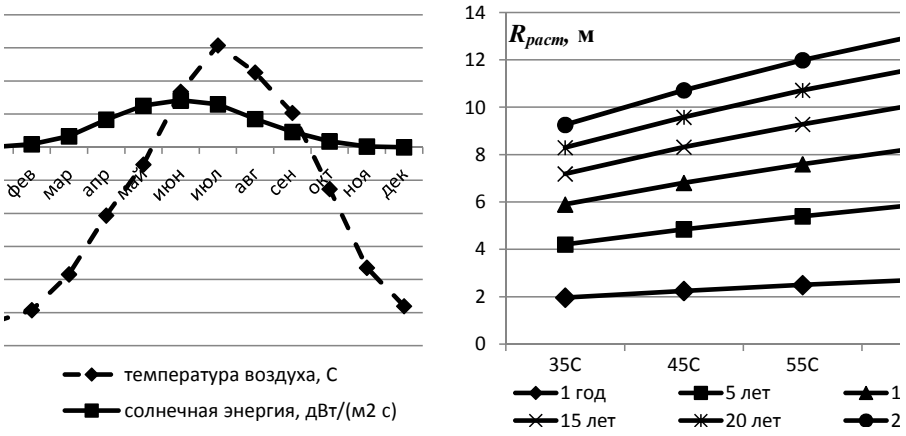


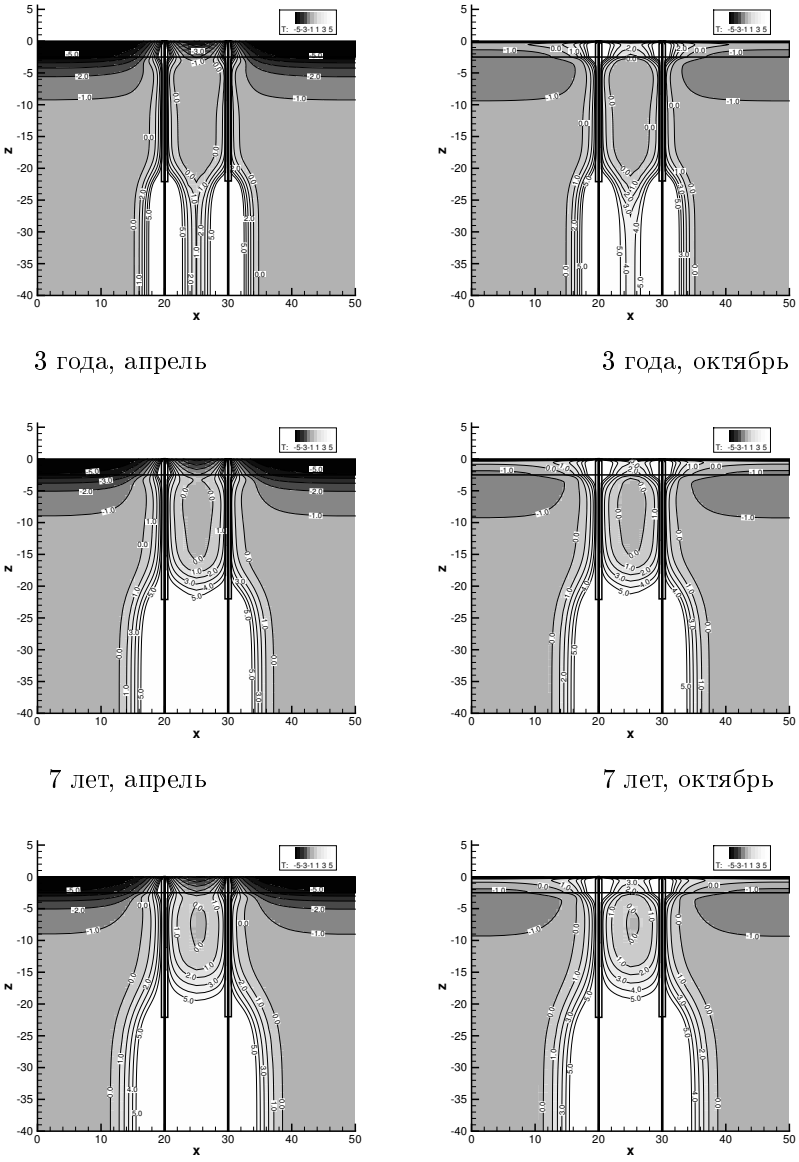
Рис. 4: Зависимость радиуса растепления от температуры флюида в скважине

Рассмотрим на данной кустовой площадке две скважины на расстоянии 10 м друг от друга. Радиус скважин составляет 0,089 м. Температура в скважинах составляет $45°C$. В скважинах имеется дополнительная теплоизоляция. Это цементная оболочка толщиной 0,176 м и верхняя часть скважины до 22 м имеет две дополнительные изоляционные оболочки: до радиуса 0,410 м вставлен слой пеноплекс, до радиуса 0,5 м — цемент. На рис. 5 представлена динамика изменения тепловых полей в грунте от этих двух скважин эксплуатируемых в течении 10 лет.

В ходе численных расчетов проведенных для 11-ти российских северных нефтегазовых месторождений были даны прогнозы изменения границ ММП при обустройстве и различных вариантов эксплуатации инженерных объектов на кустовых площадках. На этапе проектирования кустовых площадок были получены оптимальные параметры теплоизоляционных материалов, даны рекомендации по снижению теплового влияния технических систем на ММП, в том числе и за счет их оптимального размещения на кустовой площадке с целью минимизации площади кустовой площадки, затраты на обустройство которой растут с увеличением ее площади.

Также 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. Кроме этого, были предсказаны температурные изменения в приповерхностном слое грунта для конкретной литологии грунта с функционирующей добывающей скважиной, которые были в последствии подтверждены во время ремонтных работ. В результате чего было принято отказаться от дорогостоящей теплоизоляции пеноплекса, применяемого для теплоизоляции поверхности кустовой площадки.

Точность численных расчетов базового вычислительного модуля Wellfrost, входящего в последующие разрабатываемые программные комплексы для решения задач (1)—(6) для различных инженерных систем, 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.



3 года, апрель 3 года, октябрь

7 лет, апрель 7 лет, октябрь

10 лет, апрель 10 лет, октябрь

Рис. 5: Тепловые поля от двух одинаковых скважин.

Заключение

В работе представлена математическая модель для долгосрочного прогнозирования динамики зоны изменения границ ММП при учете существенных климатических и технических данных эксплуатируемых инженерных систем на кустовых площадках. В частности, учитываются климатические циклы (по температуре и

солнечной радиации), возможный фазовый переход, инженерные сооружения, которыми оснащены добывающие скважины (различные теплоизолирующие материалы), теплоизоляция поверхности рабочей площадки, на которой бурятся скважины (как правило, это бетонные плиты, песок и пеноплекс), различные теплофизические параметры и литология грунта (не только в вертикальной плоскости), различные технические системы кустовых площадок (охлаждающие устройства, факельные системы и т.п.), начальная стадия проведения бурильных работ (до двух недель), когда происходит прохождения верхнего слоя мерзлого грунта бурильным инструментом, влияющим на растепление ММП.

Разработанные пакеты прикладных программ имеют привязку к конкретному географическому месту и при этом учитываются некоторые эмпирические показатели, оказывающие влияние на распространение температурных полей в приповерхностном слое грунта, которые в общем случае отсутствуют, либо могут быть заданы с большой погрешностью.

Список литературы

[1] Nelson F.E., Anisimov O.A. , Shiklomanov N.I. Subsidence risk from thawing permafrost // Nature. 2001. V. 410. P. 889–890.

[2] Nelson F.E., Anisimov O.A., Shiklomanov N.I. Climate Change and Hazard Zonation in the Circum-Arctic Permafrost Regions // Natural Hazards. 2002. V. 26. P. 203–225.

[3] Ваганова Н.А., Филимонов М.Ю. Прогнозирование изменений в вечной мерзлоте и оптимизация эксплуатации инженерных систем // Сибирский журнал чистой и прикладной математики. 2013. Т. 13, № 4. С. 37–42.

[4] Filimonov M., Vaganova N. Numerical Simulation of Technogenic and Climatic Influence on Permafrost. Chapter 5. Advances in Environmental Research. V. 54. NY: Nova Science Publishers. 2017.

[5] Zhang, Y., Chen W., Cihlar J. A process-based model for quantifying the impact of climate change on permafrost thermal regimes // J. Geophys. Res. 2003. V. 108, iss. D22. 4695.

[6] Filimonov M.Y., Vaganova N.A. Simulation of Thermal Fields in the Permafrost With Seasonal Cooling Devices // Proc. ASME. 45158. V. 4: Pipelining in Northern and Offshore Environments; Strain-Based Design; Risk and Reliability; Standards and Regulations 133. 2012. P. 133–141.

[7] Filimonov M.Yu., Vaganova N.A. Simulation of thermal stabilization of soil around various technical systems operating in permafrost // Applied Mathematical Sciences. 2013. V. 7, № 141–144. P. 7151–7160.

[8] Филимонов М.Ю., Ваганова Н.А., Гусарова В.В. Разработка математических моделей и программного обеспечения для описания природных и техногенных процессов в грунте при кустовом способе добычи углеводородов на северных нефтегазовых месторождениях // XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики: сборник трудов (Казань, 20–24 августа 2015г.). Казань: Издательство Казанского (Приволжского) федерального университета, 2015. С. 3916–3918.

[9] Filimonov, M.Yu., Vaganova N.A. Simulation of Technogenic and Climatic Influences in // Lect. Notes Comput. Sci. 2015. V. 9045. P. 178–185.

[10] Vaganova N.A., Filimonov M Yu. Computer simulation of nonstationary thermal fields in design and operation of northern oil and gas fields // AIP Conf. Proc. 2015. V. 1690. № 020016.

[11] Филимонов М.Ю., Ваганова Н.А. Моделирование теплового воздействия от вертикальных факельных установок на вечную мерзлоту // Экология. Экономика. Информатика. Сборник статей. Т. 1. Системный анализ и моделирование экономических и экологических систем. 2015. Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета. 2015. С. 292-299.

[12] Vaganova N.A., Filimonov M.Yu. Different shapes of constructions and their effects on permafrost // AIP Conf. Proc. 2016. V. 1789. 020019

[13] Filimonov M.Yu., Vaganova N.A. Simulation of permafrost changes due to technogenic influences of different engineering constructions used in northern oil and gas fields // Journal of Physics: Conference Series. 2016. V. 754. 112004.

[14] Самарский А.А., Моисеенко Б.Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // ЖВМиМФ. 1965. Т. 5, № 5. С. 816–827.

[15] Samarsky A.A., Vabishchevich P.N. Computational Heat Transfer, V. 2, The Finite Difference Methodology. N. Y.: Chichester, Wiley. 1995.

[16] Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука. 1983.

[17] Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. М.: Наука. 1992.

[18] Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977.

[19] Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука. 1967.

[20] Ковеня В.М., Яненко Н.Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики. Новосибирск: Наука. 1981.

[21] Filimonov M.Yu., Korzunin L.G., Sidorov A.F. Approximate methods for solving nonlinear initial boundary-value problems based on special construction of series // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 1993. Т. 8, № 2. P. 101–126.

[22] Филимонов М.Ю. Применение метода специальных рядов для построения новых классов решений нелинейных уравнений с частными производными // Дифференциальные уравнения. 2003. Т. 39, № 6. С. 801–808.

[23] Филимонов М.Ю. Применение обобщенных систем базисных функций при построении решений нелинейных уравнений с частными производными // Труды института математики и механики УрО РАН. 2007. Т. 13, № 4. С. 138–153.

[24] 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, № 1. С. 11–21.

[25] Башуров Вл.В., Ваганова Н.А., Филимонов М.Ю. Моделирование и расчет нестационарных тепловых полей от заглубленного теплоизолированного трубопровода // В сборнике: Математическое моделирование и краевые задачи. Труды пятой Всероссийской научной конференции с международным участием. Самара: Издательство Самарский государственный технический университет. 2008. С. 28–31.

[26] Башуров Вл.В., Ваганова Н.А., Филимонов М.Ю. Численное моделирование процессов теплообмена в грунте с учетом фильтрации // Вычислительные технологии. 2011. Т. 16, № 4. С. 3–18.

[27] Vaganova N. Mathematical model of testing of pipeline integrity by thermal fields // AIP Conf. Proc. 2014. V. 1631. P. 37–41.

[28] Vaganova N., Filimonov M. Parallel splitting and decomposition method for computations of heat distribution in permafrost // CEUR Workshop Proceedings. 2015. V. 1513. P. 42–49.

[29] Ваганова Н.А., Васев П.А., Гусарова В.В., Игумнов С.Т., Филимонов М.Ю. Использование облачных технологий при моделировании эксплуатации северных нефтегазовых месторождений // Труды Института механики УрО РАН «Проблемы механики и материаловедения». Материалы конференции «Актуальные проблемы математики, механики, информатики». Ижевск, 3–5 марта 2014 г. Ижевск: ИМ УрО РАН. 2014. С. 23–28.

[30] Берсенев А.Ю., Ваганова Н.А., Васёв П.А., Игумнов А.С., Филимонов М.Ю. Кластерные вычисления как сервис на примере задачи моделирования тепловых полей от скважин на северных нефтегазовых месторождениях // Научный сервис в сети Интернет: многообразие суперкомпьютерных миров: сб. тр. Международной конф. Ростов на Дону: ЮФУ. 2014. С. 147–151.

Наталия Анатольевна Ваганова — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН; Уральский федеральный университет;
e-mail: vna@imm.uran.ru;
Михаил Юрьевич Филимонов — д.ф.-м.н., ведущий науч.сотр. Института математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН; Уральский федеральный университет;
e-mail: fmy@imm.uran.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

РЕГУЛЯРИЗИРОВАННОЕ ОБРАЩЕНИЕ ПОЛНЫХ ТЕНЗОРНЫХ МАГНИТНО-ГРАДИЕНТНЫХ ДАННЫХ

Я. Ван[1], Д. В. Лукьяненко[2], А. Г. Ягола[2]

[1] *Институт геологии и геофизики Китайской академии наук, 100029, Пекин, Китай*
[2] *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, 119991, Москва, Россия*

УДК 519.6

Рассматриваются особенности численной реализации решения трехмерной обратной задачи обращения полных тензорных магнитно-градиентных данных, которая моделируется системой трехмерных интегральных уравнений Фредгольма 1-го рода относительно вектор-функций. Для решения этой некорректно поставленной задачи применяется алгоритм, основанный на минимизации функционала Тихонова методом сопряженных градиентов с выбором параметра регуляризации по обобщенному принципу невязки. Эта обратная задача возникает, например, в геофизике для восстановления магнитного поля подземных объектов по результатам измерений на поверхности Земли.

Ключевые слова: магнитостатика, обратные задачи, некорректно поставленные задачи, метод регуляризации.

Введение

Математические модели в магнитостатике, связывающие плотность магнитного момента ограниченного тела и его магнитную индукцию достаточно хорошо известны (например, [1, 2, 3, 4, 5]). Менее известны математические модели магнитостатики, связывающие объёмную (или поверхностную) плотность магнитного момента тела с полным тензором градиентов компонент магнитной индукции (ГКМИ), измеряемым в некоторой удаленной от тела области [6, 7, 8, 9, 10, 11]. Китайским участником работы вместе со своими коллегами из Института геологии и геофизики Китайской академии наук было установлено [13], что тензор градиентов компонент магнитной индукции в таких моделях обладает большей чувствительностью к тонкой структуре распределения магнитного момента, чем сама магнитная индукция. Поэтому измерения тензора ГКМИ представляются более перспективными для интерпретации магнитных полей с помощью решения обратных задач. Модели, включающие тензор ГКМИ, могут быть рассмотрены в различных вариантах: линейных и нелинейных, непрерывных и дискретных, для двумерных и трехмерных магнитных полей. Все эти модели порождают обратные задачи нахождения плотности магнитного момента по тензору ГКМИ в различных постановках задачи. В этой работе рассматривается наиболее перспективная для интерпретации постановка: необходимо обратить полные магнитно-градиентые данные в трёхмерной области с целью восстановления объёмной намагниченности. Подобная обратная задачи магнитостатики описывается операторным уравнениям первого рода, которое в общем случае представляет собой некорректно поставленную задачу. Она может как иметь неединственное решение, так и не иметь классического решения вообще. При этом она, как правило, неустойчива по отношению к ошибкам измерения входных данных (компонент тензора ГКМИ). Эти трудности преодолеваются с помощью применения специальных методов решения таких некорректно поставленных задач — регуляризирующих алгоритмов (РА). Важнейшим классом регуляризирующих алгоритмов является семейство вариационных РА. Наиболее известен из них метод регуляризации А. Н. Тихонова. Часто используется также обобщенный метод невязки (ОМН).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-51-53002-ГФЕН-а). Тестовые расчеты выполнены с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова [12]

В данной работе рассмотрены особенности реализации решения трёхмерной обратной задачи обращения полных тензорных магнитно-градиентных данных.

1 Полный тензор градиентов компонент магнитной индукции (ГКМИ)

Для начала введём понятие полного тензора градиентов компонент магнитной индукции $\mathbf{B}_{tensor}$ (ГКМИ), который в отличие от индукции магнитного поля $\boldsymbol{B}_{field\ dipole}$ (которая имеет 3 компоненты) имеет 9 компонент и может быть записан в следующей матричной форме:

$$\mathbf{B}_{tensor} = [B_{ij}] = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial B_x}{\partial x} & \dfrac{\partial B_x}{\partial y} & \dfrac{\partial B_x}{\partial z} \\ \dfrac{\partial B_y}{\partial x} & \dfrac{\partial B_y}{\partial y} & \dfrac{\partial B_y}{\partial z} \\ \dfrac{\partial B_z}{\partial x} & \dfrac{\partial B_z}{\partial y} & \dfrac{\partial B_z}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{xx} & B_{xy} & B_{xz} \\ B_{yx} & B_{yy} & B_{yz} \\ B_{zx} & B_{zy} & B_{zz} \end{bmatrix},$$

где $\dfrac{\partial B_x}{\partial y} = \dfrac{\partial B_y}{\partial x}$, $\dfrac{\partial B_x}{\partial z} = \dfrac{\partial B_z}{\partial x}$, $\dfrac{\partial B_y}{\partial z} = \dfrac{\partial B_z}{\partial y}$ и $\dfrac{\partial B_x}{\partial x} + \dfrac{\partial B_y}{\partial y} + \dfrac{\partial B_z}{\partial z} = 0.$

2 Трёхмерная модель полных тензорных магнитно-градиентных данных

Уравнение, описывающее магнитное поле $\boldsymbol{B}_{field\ dipole}$, индуцируемое магнитным диполем $\boldsymbol{m}$, имеет вид:

$$\boldsymbol{B}_{field\ dipole} = \frac{\mu_0}{4\pi}\left(\frac{3(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{r}}{r^5} - \frac{\boldsymbol{m}}{r^3}\right),$$

где $\boldsymbol{m} = m_x\boldsymbol{i} + m_y\boldsymbol{j} + m_z\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{r} = (x-x_s)\boldsymbol{i} + (y-y_s)\boldsymbol{j} + (z-z_s)\boldsymbol{k}$, $r = \sqrt{(x-x_s)^2 + (y-y_s)^2 + (z-z_s)^2}$ — расстояние между точкой (x_s, y_s, z_s), которая соответствуют расположению измеряющего поле $\boldsymbol{B}_{field\ dipole}$ триаксиального сенсора, и точкой (x, y, z), в которой расположен магнитный диполь $\boldsymbol{m}$, μ_0 — величина магнитной проницаемости в вакууме.

Преобразовав $\boldsymbol{B}_{field\ dipole}$ к виду

$$\begin{aligned}\boldsymbol{B}_{field\ dipole} &= B_{x\ dipole}\boldsymbol{i} + B_{y\ dipole}\boldsymbol{j} + B_{z\ dipole}\boldsymbol{k} = \\ &= \frac{\mu_0}{4\pi}\left(\left(\frac{3(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})(x-x_s)}{r^5} - \frac{m_x}{r^3}\right)\boldsymbol{i} + \left(\frac{3(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})(y-y_s)}{r^5} - \frac{m_y}{r^3}\right)\boldsymbol{j} + \left(\frac{3(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})(z-z_s)}{r^5} - \frac{m_z}{r^3}\right)\boldsymbol{k}\right)\end{aligned}$$

и переобозначив переменные как $i = x, y, z$ и $p = (p_x, p_y, p_z) = (x_s, y_s, z_s)$, мы можем записать выражения для компонент вектора $\boldsymbol{B}_{field\ dipole}$ в следующем виде:

$$B_{i\ dipole} = \frac{\mu_0}{4\pi}\left(\frac{3(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})(i-p_i)}{r^5} - \frac{m_i}{r^3}\right).$$

Беря производные от $B_{i\ dipole}$ по пространственным переменным $i = x, y, z$ и $j = x, y, z \neq i$, мы можем получить следующие выражения для диагональных и недиагональных элементов тензора градиентов компонент магнитной индукции $\mathbf{B}_{tensor}$ (ГКМИ):

$$\begin{aligned} B_{ii} &= \frac{\mu_0}{4\pi}\left(\frac{6m_i(i-p_i)}{r^5} + \frac{3(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})}{r^5} - \frac{15(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})(i-p_i)(i-p_i)}{r^7}\right), \\ B_{ij} &= \frac{\mu_0}{4\pi}\left(\frac{3m_i(j-p_j)}{r^5} + \frac{3m_j(i-p_i)}{r^5} - \frac{15(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r})(i-p_i)(j-p_j)}{r^7}\right). \end{aligned}$$

Таким образом для всего рассматриваемого объекта, по объёму которого V мы хотим восстановить плотность магнитного момента $\boldsymbol{M}$ ($\boldsymbol{M} = M_x\boldsymbol{i} + M_y\boldsymbol{j} + M_z\boldsymbol{k}$), мы получаем следующие трёхмерные интегральные уравнения Фредгольма 1-го рода:

$$\boldsymbol{B}_{field\ dipole} = \frac{\mu_0}{4\pi}\iiint\limits_V \left(\frac{3(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{r}}{r^5} - \frac{\boldsymbol{M}}{r^3}\right)dv,$$

$$B_{ii} = \frac{\mu_0}{4\pi}\iiint\limits_V \left(\frac{6m_i(i-p_i)}{r^5} + \frac{3(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{r})}{r^5} - \frac{15(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{r})(i-p_i)(i-p_i)}{r^7}\right)dv,$$

$$B_{ij} = \frac{\mu_0}{4\pi}\iiint\limits_V \left(\frac{3m_i(j-p_j)}{r^5} + \frac{3m_j(i-p_i)}{r^5} - \frac{15(\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{r})(i-p_i)(j-p_j)}{r^7}\right)dv,$$

которые могут быть переписаны в виде следующей системы из двух интегральных уравнений Фредгольма 1-го рода:

$$\begin{cases} \boldsymbol{B}_{field\ dipole}(x_s,y_s,z_s) = \dfrac{\mu_0}{4\pi}\iiint\limits_V \mathbf{K}_1(x-x_s,y-y_s,z-z_s)\boldsymbol{M}(x,y,z)dv, \\ \boldsymbol{B}_{tensor\ dipole}(x_s,y_s,z_s) = \dfrac{\mu_0}{4\pi}\iiint\limits_V \mathbf{K}_2(x-x_s,y-y_s,z-z_s)\boldsymbol{M}(x,y,z)dv, \end{cases} \tag{1}$$

где $\boldsymbol{B}_{field\ dipole} = [B_x\ B_y\ B_z]^T$ и $\boldsymbol{B}_{tensor\ dipole} = [B_{xx}\ B_{xy}\ B_{xz}\ B_{yz}\ B_{zz}]^T$, а ядра интегральных уравнений $\mathbf{K}_1$ и $\mathbf{K}_2$ имеют вид

$$\mathbf{K}_1(x-x_s,y-y_s,z-z_s) = \frac{1}{r^5}\begin{bmatrix} 3(x-x_s)^2-r^2 & 3(x-x_s)(y-y_s) & 3(x-x_s)(z-z_s) \\ 3(y-y_s)(x-x_s) & 3(y-y_s)^2-r^2 & 3(y-y_s)(z-z_s) \\ 3(z-z_s)(x-x_s) & 3(z-z_s)(y-y_s) & 3(z-z_s)^2-r^2 \end{bmatrix}$$

и

$$\mathbf{K}_2(x-x_s,y-y_s,z-z_s) = \\ = \frac{3}{r^7}\begin{bmatrix} (x-x_s)[3r^2-5(x-x_s)^2] & (y-y_s)[r^2-5(x-x_s)^2] & (z-z_s)[r^2-5(x-x_s)^2] \\ (y-y_s)[r^2-5(x-x_s)^2] & (x-x_s)[r^2-5(y-y_s)^2] & -5(x-x_s)(y-y_s)(z-z_s) \\ (z-z_s)[r^2-5(x-x_s)^2] & -5(x-x_s)(y-y_s)(z-z_s) & (x-x_s)[r^2-5(z-z_s)^2] \\ -5(x-x_s)(y-y_s)(z-z_s) & (z-z_s)[r^2-5(y-y_s)^2] & (y-y_s)[r^2-5(z-z_s)^2] \\ (x-x_s)[r^2-5(z-z_s)^2] & (y-y_s)[r^2-5(z-z_s)^2] & (z-z_s)[3r^2-5(z-z_s)^2] \end{bmatrix}.$$

Если мы предположим, что $V \subset P = \{(x,y,z):\ L_x \leqslant x \leqslant R_x,\ L_y \leqslant y \leqslant R_y,\ L_z \leqslant z \leqslant R_z\}$ и система сенсорных плоскостей ограничена прямоугольным параллелепипедом $Q = \{(x_s,y_s,z_s) \equiv (s,t,r):\ L_s \leqslant s \leqslant R_s,\ L_t \leqslant t \leqslant R_t,\ L_r \leqslant r \leqslant R_r\}$, мы можем переписать систему (1) в следующем операторном виде

$$\mathbf{A}\boldsymbol{M} = \frac{\mu_0}{4\pi}\int\limits_{L_x}^{R_x}\int\limits_{L_y}^{R_y}\int\limits_{L_z}^{R_z}\mathbf{K}(s,t,r,x,y,z)\boldsymbol{M}(x,y,z)dxdydz = \boldsymbol{B}(s,t,r), \tag{2}$$

где $\boldsymbol{B}(s,t,r)$ и $\boldsymbol{M}(x,y,z)$ — векторные функции: $\boldsymbol{B} = [B_x\ B_y\ B_z\ B_{xx}\ B_{xy}\ B_{xz}\ B_{yz}\ B_{zz}]^T$ и $\boldsymbol{M} = [M_x\ M_y\ M_z]^T$, а ядро $\mathbf{K}(s,t,r,x,y,z)$ является матричной функцией: $\mathbf{K} = [\mathbf{K}_1\ \mathbf{K}_2]^T$ ($\mathbf{K} = [\mathbf{K}_1]^T$ в том случае, если мы хотим провести обращение без исплольнования полного тензора ГКМИ для сравнения двух подходов).

Далее будем предполагать, что $\boldsymbol{M} \in W_2^2(P)$, $\boldsymbol{B} \in L_2(Q)$, а оператор $\mathbf{A}$ с ядром $\mathbf{K}$ непрерывен и однозначен. Нормы правой части уравнения (2) и решения вводятся следующим образом:

$$\|\boldsymbol{B}\|_{L_2} = \sqrt{\|B_x\|_{L_2}^2 + \|B_y\|_{L_2}^2 + \|B_z\|_{L_2}^2 + \|B_{xx}\|_{L_2}^2 + \|B_{xy}\|_{L_2}^2 + \|B_{xz}\|_{L_2}^2 + \|B_{yz}\|_{L_2}^2 + \|B_{zz}\|_{L_2}^2},$$

$$\|\boldsymbol{M}\|_{W_2^2} = \sqrt{\|M_x\|_{W_2^2}^2 + \|M_y\|_{W_2^2}^2 + \|M_z\|_{W_2^2}^2}.$$

Пусть вместо точно известных $\bar{\boldsymbol{B}}$ и оператора $\mathbf{A}$ известны их приближенные значения $\boldsymbol{B}_\delta$ и $\mathbf{A}_h$, такие, что $\|\boldsymbol{B}_\delta - \bar{\boldsymbol{B}}\|_{L_2} \leqslant \delta$, $\|\mathbf{A} - \mathbf{A}_h\|_{W_2^2 \to L_2} \leqslant h$. При выписанных условиях задача является некорректной, для ее

решения необходимо построить регуляризирующий алгоритм. Воспользуемся алгоритмом, основанным на минимизации функционала А. Н. Тихонова

$$F^{\alpha}[\boldsymbol{M}] = \|\mathbf{A}_h \boldsymbol{M} - \boldsymbol{B}_\delta\|^2_{L_2} + \alpha\|\boldsymbol{M}\|^2_{W_2^2}. \tag{3}$$

Для любого $\alpha > 0$ существует единственная экстремаль функционала Тихонова $\boldsymbol{M}^{\alpha}_{\eta}$, $\eta = \{\delta, h\}$, реализующая минимум $F^{\alpha}[\boldsymbol{M}]$. Для выбора параметра регуляризации можно использовать алгоритм конечномерного обобщенного принципа невязки [14, 15]. При выборе параметра $\alpha = \alpha(\eta)$ по обобщенному принципу невязки

$$\rho(\alpha) = \|\mathbf{A}_h \boldsymbol{M}^{\alpha}_{\eta} - \boldsymbol{B}_\delta\|^2_{L_2} - \left(\delta + h\|\boldsymbol{M}^{\alpha}_{\eta}\|_{W_2^2}\right)^2 = 0 \tag{4}$$

$\boldsymbol{M}^{\alpha}_{\eta}$ стремиться при $\eta \to 0$ к точному решению задачи в норме W_2^2, а, следовательно, и равномерно на P.

В качестве метода минимизации функционала А. Н. Тихонова применяется метод сопряженных градиентов.

3 Результаты модельных численных экспериментов

На рисунке 2 представлены результаты обработки как только магнитных данных, так и полных тензорных магнитно-градиентных данных, которые соответствуют модельному решению, изображённому на рисунке 1. Для тестовых расчётов мы использвали область интегрирования [x = 0—1000; y = -1—1; z = -500—0] (м) с сетками $(N_x, N_y, N_z) = (30, 1, 20)$, и две серии измерений 1) [x = 0—1000; y = -10—10; z = 0—2] (м) (что соответствует измерениям «у земли» на высотах 0 и 2 метра в случае, когда нету возможности поднять в воздух измерительное оборудование) и 2) [x = 0—1000; y = -200—200; z = 0—1000] (м) (что соответствует измерения «у земли и в воздухе» на высотах 0 и 1000 метров, когда есть возможность поднять измерительное оборудование на значительную высоту с помощью авиационной техники) с сетками $(N_s, N_t, N_r) = (200, 2, 2)$. Во всех случаях нам необходимо было восстановить 1 800 параметров по 6 400 измерениям. Как видно на приведённых результатах расчётов, использование полного тензора ГКМИ помогает существенно улучшить результаты расчётов, улучшив локализацию в пространстве восстанавливаемых параметров намагниченности.

Заключение

Использование при восстановлении параметров намагниченности полного тензора градиентов компонент магнитной индукции, измеряемого в некоторой удаленной от тела области, существенно улучшает результат решения соответствующих обратных некорректно поставленных обратных задач магнитостатики.

Список литературы

[1] P. G. Lelievre and D. W. Oldenburg Magnetic forward modelling and inversion for high susceptibility // Geophysical Journal International 166 (2006), pp. 76–90.

[2] Y. G. Li and D. W. Oldenburg 3-D inversion of magnetic data // Geophysics 61 (1996), pp. 394–408.

[3] A. Pignatelli, I. Nicolosi and M. Chiappini An alternative 3D inversion method for magnetic anomalies with depth resolution // Annals of Geophysics 49 (2006), pp. 1021–1027.

[4] Lukyanenko D.V., Yagola A.G., Evdokimova N.A. Application of inversion methods in solving ill-posed problems for magnetic parameter identification of steel hull vessel // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2011. V.18, N.9, p. 1013–1029.

[5] Лукьяненко Д.В., Ягола А.Г. Применение многопроцессорных систем для решения трёхмерных интегральных уравнений Фредгольма первого рода для векторных функций // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т.11, N.2, стр. 156–163.

[6] A. Christensen and S. Rajagopalan The magnetic vector and gradient tensor in mineral and oil exploration // Preview 84 (2000), pp. 77.

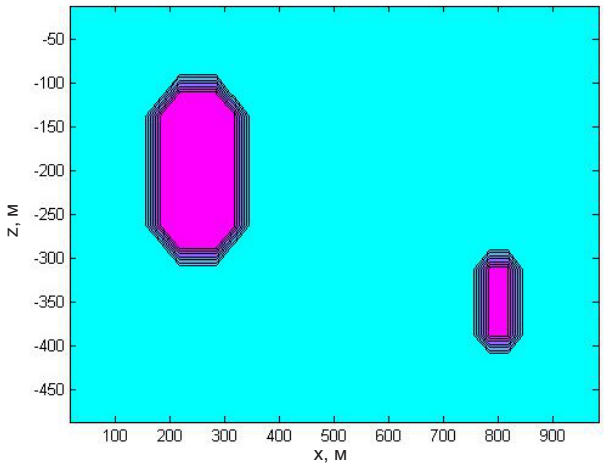


Рис. 1: Модельное решение для модуля вектора $\boldsymbol{M}$ на сетке $(N_x, N_y, N_z) = (30, 1, 20)$.

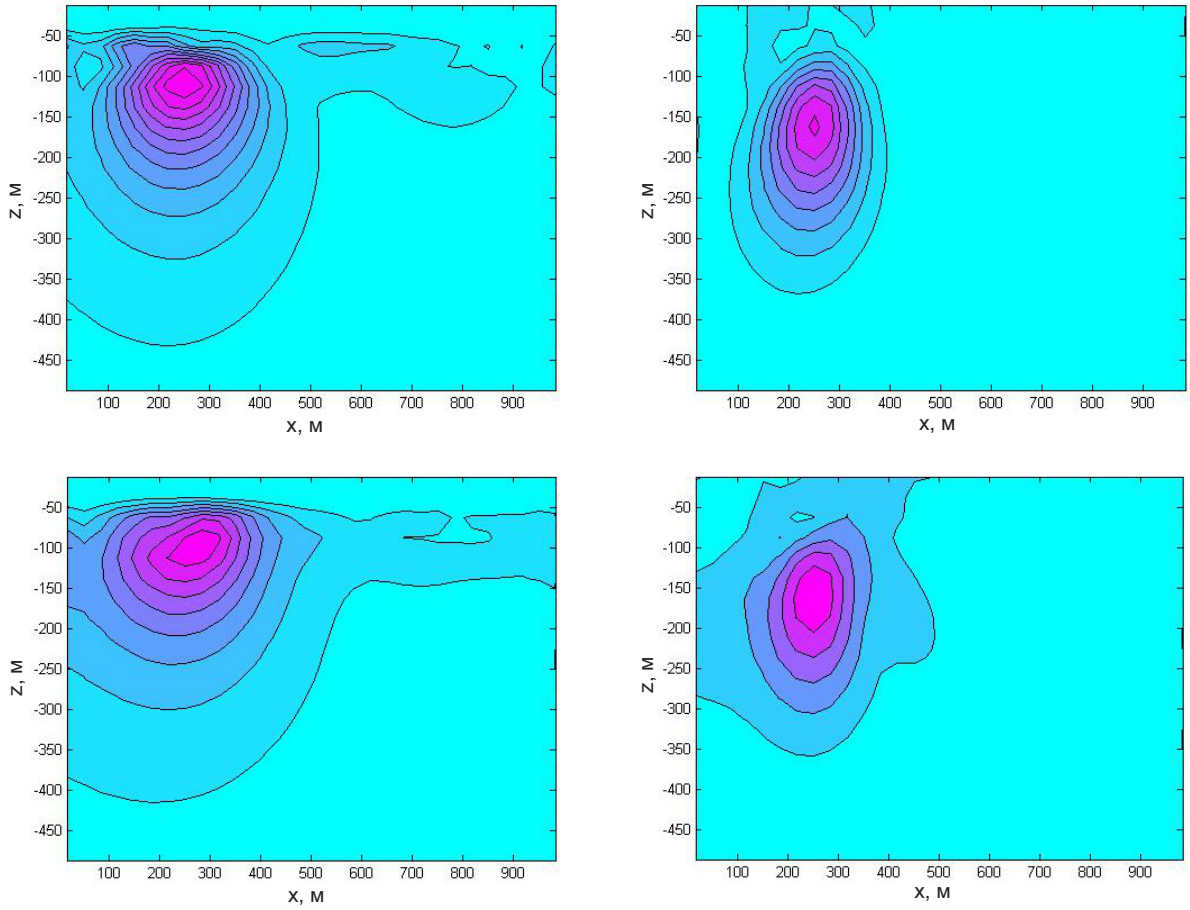


Рис. 2: Результаты расчётов для модельного примера. Левая пара картинок соответствует ситуации, когда все измерения проводились только «у земли», правая пара – измерения производились «у земли и в воздухе». Верхняя пара картинок – при вычислениях использован полный тензор градиентов компонент магнитной индукции (ГКМИ), нижняя пара – классический подход (обрабатывались только результаты измерения индуцированного магнитного поля).

[7] P. Heath, G. Heinson, and S. Greenhalgh Some comments on potential field tensor data // Exploration Geophysics 34 (2003), pp. 57–62.

[8] M. Schiffler, M. Queitsch, R. Stolz, A. Chwala, W. Krech, H.-G. Meyer and N. Kukowski Calibration of SQUID vector magnetometers in full tensor gradiometry systems // Geophys. J. Int. 198 (2014), pp. 954–964.

[9] P. W. Schmidt and D. A. Clark Advantages of measuring the magnetic gradient tensor // Preview 85 (2000), pp. 26–30.

[10] P. W. Schmidt, D. A. Clark, K. E. Leslie, M. Bick, and D. L. Tilbrook GETMAG-a SQUID magnetic tensor gradiometer for mineral and oil exploration // Exploration Geophysics 35 (2004), pp. 297–305.

[11] M. S. Zhdanov, H. Z. Cai and G. A. Wilson 3D inversion of SQUID magnetic tensor data // Geology and Geosciences 1 (2012), pp. 1–5.

[12] 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 N 7, 2012. С. 36–39.

[13] Shuangxi Ji, Yanfei Wang and Anqi Zou Regularizing inversion of susceptibility with projection onto convex set using full tensor magnetic gradient data // Inverse Problems in Science & Engineering. 2016. Т.4, стр. 323–326.

[14] Морозов В.А. О регуляризации некорректно поставленных задач и выборе параметра регуляризации // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1966. 6, N.1. стр. 170—175.

[15] Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990.

[16] Ягола А. Г., Степанова И. Э., Титаренко В. Н., Ван Я. Обратные задачи и методы их решения. Приложения к геофизике. М.: Бином, 2014.

[17] Лукьяненко Д. В., Ягола А. Г. Использование многопроцессорных систем для решения обратных задач, сводящихся к интегральным уравнениям Фредгольма 1-го рода. // Труды Института математики и механики УрО РАН. 2012, т. 18, № 1.

[18] Я. Ван, Д. В. Лукьяненко, А. Г. Ягола. Регуляризированное обращение полных тензорных магнитоградиентных данных // Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии (Электронный научный журнал), 2016, т. 17, № 1, с. 13-20.

[19] D. V. Lukyanenko, A. G. Yagola. Some methods for solving of 3D inverse problem of magnetometry // Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications, 2016, v. 4, N 3, pp. 4-14.

Янфей Ван — PhD, профессор Института геологии и геофизики Китайской академии наук;
e-mail: yfwang@mail.iggcas.ac.cn;
Дмитрий Витальевич Лукьяненко — к.ф.-м.н., доцент кафедры математики физического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова;
e-mail: lukyanenko@physics.msu.ru;
Анатолий Григорьевич Ягола — д.ф.-м.н., профессор кафедры математики физического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова;
e-mail: yagola@physics.msu.ru.
Дата поступления — 29 мая 2017 г.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПРИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЯХ СКВАЖИН

В. В. Васин, Г. Г. Скорик

Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, 620990, Екатеринбург

УДК 517.977

Задача деконволюции, которая возникает при описании гидродинамических процессов в скважине при проведении тестов, формулируется в виде уравнения Вольтерра первого рода с разрывными входными данными (ядро — скорость потока, правая часть — изменение давления), которые характеризуются наличием больших ошибок измерения. Кроме того, решение этого уравнения имеет разномасштабный характер поведения на области определения. В этих условиях традиционные алгоритмы решения уравнения Вольтерра, как правило, не приводят к удовлетворительным результатам. Чтобы решить задачу, мы привлекаем вариационные методы регуляризации и строим функциональный базис (система экспонент), позволяющий учесть в алгоритме все априорные ограничения, известные для искомого решения. Это позволило сформировать семейство приближенных решений, удовлетворяющее условиям гладкости и точности, требуемым для интерпретации скажинных тестов. Формулируются теоремы сходимости приближенных решений и описываются детали численной реализации построенных регуляризующих алгоритмов.

Ключевые слова: задача деконволюции, скважинный тест, тихоновская регуляризация, система экспонент.

Введение

С математической точки зрения задача деконволюции — решение уравнения Вольтерра первого рода [1]

$$Ag \equiv \int_0^t q(t-\tau)g(\tau)\,d\tau = \Delta p(t), \quad 0 \leqslant t \leqslant T, \tag{1}$$

которое возникает при описании гидродинамических процессов, происходящих в скважине при проведении тестов. Уравнение вытекает из принципа Дюамеля, который гласит, что измеряемое изменение давления $\Delta p(t) = p_0 - p(t)$ есть свертка измеряемой скорости потока $q(t)$ жидкости с импульсной функцией $g(t)$ отклика резервуара. Здесь p_0 — начальное давление резервуара (в невозмущенном состоянии), $p(t)$ — давление, измеряемое, например, на поверхности ствола скважины. Искомая функция $g(t)$ подлежит определению из уравнения (1) по измеренным с ошибками функциям $p(t)$ и $q(t)$. Известно, что полученные в результате решения уравнения (1) функции $v(t) = tg(t)$, $w(t) = \int_0^t g(\tau)\,d\tau$ в логарифмической шкале широко используются инженерами-исследователями при идентификации системы скважина-резервуар на основе интерпретации скважинных тестов [2, 3, 4, 5].

Уравнение (1) применительно к скважинным тестам имеет существенную специфику, которая заключается в следующем:

1. Реальные экпериментальные данные $q(t)$, $p(t)$, p_0 содержат большие погрешности (от 5% до 15%);

2. Исходные данные $q(t)$, $p(t)$ и, особенно, решение $g(t)$ могут иметь значительные вариации на малых временных участках (разномасштабность);

3. Функции $q(t)$, $p(t)$ ограничены, но, как правило, разрывны.

В этих условиях традиционные алгоритмы не позволяют построить устойчивое приближенное решение некорректно поставленного уравнения (1), пригодного для адекватной интерпретации скважинных тестов,

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 15-01-00629) и Уральского отделения РАН (проект 15-7-1-3).

чему свидетельствуют многочисленные публикации, посвященные этой проблеме (см. подробные обзоры в [5, 6]).

Одна их возможностей повышения устойчивости метода и улучшения качества решения заключается в использовании в алгоритме дополнительной априорной информации о решении. Эта информация, обычно записываемая в виде некоторых ограничений (равенств, неравенств, включений), позволяет локализовать приближенное решение и повысить ее аппроксимативные свойства. При определенных допущениях на систему скважина-резервуар искомая функция отклика резервуар $g(t)$ удовлетворяет следующей бесконечной системе неравенств [3, 4, 5]:

$$(-1)^k d^k g(t)/dt^k \geqslant 0, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, \quad t \geqslant 0. \tag{2}$$

Необходимо отметить, что во всех работах (см., например, [2, 3, 4, 5, 6, 7] и ссылки в них), посвященных задаче деконволюции (1), привлекались в различных сочетаниях не более трех первых неравенств из (2)

$$g(t) \geqslant 0, \quad dg(t)/dt \leqslant 0, \quad d^2 g(t)/dt^2 \geqslant 0, \tag{3}$$

выражающих важные свойства решения: неотрицательность, монотонность и выпуклость.Так, например, разностные аппроксимации неравенств (3) использовались в [4] при построении алгоритма, основанного на сведении исходной постановки к задаче линейного программирования. Наиболее часто в алгоритмах учитывалось свойство неотрицательности решения. В этой связи следует отметить интересную работу [7], в которой тихоновская регуляризация использовалась не к уравнению (1), а нелинейному уравнению

$$\bar{A}(z) = \int_{\infty}^{\ln t} q(t - e^{\sigma}) e^{z(\sigma)}\, d\sigma = \Delta p(t),$$

полученному из (1) с помощью замены $\sigma = \ln \tau$, $z(\sigma) = \ln(\tau g(\tau))$. Этот подход позволяет не только автоматически учитывать свойство неотрицательности решения, но и несколько нивелировать разномасштабность решения. Также в работе [6] неравенства (3) учитывались при построении алгоритмов на основе вариационных методов, но здесь учет ограничений осуществлялся с помощью разложения решения по системе кусочно-линейных функций, удовлетворяющих конечно-разностным аналогам неравенств (3). Эти методы в численных расчетах дают вполне удовлетворительные результаты, но вследствие кусочно-линейности базисных функций приближенные решения не обладают достаточной гладкостью, что несколько снижает эффективность алгоритмов.

Этот недостаток преодолен в работе [8], где для тех же методов регуляризации искомое решение строилось в виде разложения по системе степенных функций $\{e^{-\lambda_i t},\ \lambda_i \geqslant 0,\ \lambda_i \neq \lambda_j,\ i \neq j\}$. Это позволило построить бесконечно дифференцируемые приближенные решения, удовлетворяющие всем ограничениям (2). При этом основные результаты (теоремы сходимости регуляризованных решений) были получены в предположении, что искомое решение уравнения (1) представимо в форме конечной суммы

$$\hat{g}(t) = \sum_{i=1}^{n} \hat{c}_i e^{-\lambda_i t}, \tag{4}$$

где каждая функция $h_i(t) = e^{-\lambda_i t}$, очевидно, удовлетворяет ограничениям (2). Было показано, что в этом случае для построения приближенного решения уравнения (1) достаточно ограничиться в разложении (4) по системе h_i с неотрицательными коэффициентами $\hat{c}_i$, что автоматически влечет выполнение всей совокупности неравенств (2) для приближенного решения. В данной работе не предполагается, что искомое решение стеснено условием (4), т.е., допускается представление решения в виде бесконечной суммы.

1 Свойства системы экспонент

В теории приближения функций хорошо известна теорема Мюнца [9] об аппроксимации функции полиномами.

Теорема 1 ([9]). *Пусть $0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \ldots$, $\lambda_i \to \infty$, $0 < a < b$. Для того, чтобы для любой функции $f \in C[a, b]$ и любого $\varepsilon > 0$ нашлась линейная комбинация $P_n(x) = \sum_{i=1}^{n} c_i x^{\lambda_i}$ такая, что $\|f - P_n\|_{C[a,b]} < \varepsilon$, необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие*

$$\sum_{i=1}^{\infty} 1/\lambda_i = \infty. \tag{5}$$

В случае отрезка $[0,b]$ *условия* (5) *необходимо и достаточно для замкнутости системы* $1 \cup \{x^{\lambda_i t}\}$, $-1/p < \lambda_1 < \lambda_2 < \ldots$ *на* $[0,b]$ *в метрике пространства* $L_p[0,b]$, $p \geqslant 1$.

Непосредственным следствием Теоремы 1 является следующая лемма.

Лемма 1. *Пусть для функций* $\{h_i(t)\}_{i=0}^{\infty}$, $h_0(t) = 1$, $h_i(t) = e^{-\lambda_i t}$, $0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \ldots$, $\lambda_i \to \infty$, *выполнено условие* (5). *Тогда система функций* $\{h_i(t)\}_{i=0}^{\infty}$, *замкнута в пространстве* $C[0,T]$.

Пусть $-1/p < \lambda_1 < \lambda_2 < \ldots$ *и выполнено условие* (5). *Тогда система функций* $1 \cup \{e^{-\lambda_i t}\}$, $i = 1,2,\ldots$, $t \in [0,T]$, *замкнута в пространстве* $L_p[0,T]$.

Доказательство. Используя замену $x = e^{-t}$, приходим к системе $\{e^{-\lambda_i t}\}$ и утверждению, сформулированному в лемме. □

Из леммы 1 непосредственно следует, что решение уравнения (1) может быть приближено с любой точностью отрезками ряда по системе экспонент $\{e^{-\lambda_i t}\}_{i=0}^{\infty}$ в пространствах $L_p[0,T]$, $C[0,T]$.

Предположим, что решение уравнения (1) представимо в виде ряда по системе $\{e^{-\lambda_i t}\}_{i=0}^{\infty}$

$$\hat{g}(t) = \sum_{i=0}^{\infty} \hat{c}_i e^{-\lambda_i t}, \quad t \in [0,T]. \tag{6}$$

Если ряд (6) допускает почленное дифференцирование, т.е.,

$$\hat{g}^{(k)}(t) = (-1)^k \sum_{i=0}^{\infty} \hat{c}_i \lambda_i^k e^{-\lambda_i t},$$

то при $\hat{c}_i \geqslant 0$ функция $\hat{g}(t)$ удовлетворяет всем априорным ограничениям (2). Как показывается в следующей лемме из абсолютной сходимости ряда $\sum_{i=0}^{\infty} \hat{c}_i < \infty$ и выполнимости априорных ограничений (2) вытекает, что все коэффициенты $\hat{c}_i$ неотрицательны, что позволяет аппроксимировать решение конечными суммами ряда (6) с $\hat{c}_i \geqslant 0$.

Лемма 2. *Пусть функция* $g(t)$ *имеет представление*

$$g(t) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i e^{-\lambda_i t}, \tag{7}$$

где $\lambda_i \geqslant 0$, $\lambda_i \neq \lambda_j$ *при* $i \neq j$, *ряд* $\sum_{i=0}^{\infty} c_i$ *— абсолютно сходящийся и* $g(t)$ *удовлетворяет бесконечной системе априорных неравенств* (2).

Тогда все коэффициенты $c_i \geqslant 0$, $i = 0,1,2,\ldots$.

Таким образом, согласно Лемме 2 приближенное решение для уравнения (1) можно строить в виде конечных сумм ряда (7) с неотрицательными коэффициентами, что автоматически гарантирует выполнение априорных ограничений (2) и упрощает численную реализацию алгоритмов.

З а м е ч а н и е 1. В отличие от теоремы Мюнца в лемме 2 не предполагается выполнение условий

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \ldots, \quad \lambda_i \to \infty, \quad \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{\lambda_i} = \infty.$$

З а м е ч а н и е 2. Если $t \in [\varepsilon, T]$, $\varepsilon > 0$ и $\sum_{i=0}^{\infty} |c_i| < \infty$, то возможно почленное дифференцирование ряда $g(t) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i e^{-\lambda_i t}$, т.е. $g^{(k)}(t) = (-1)^k \sum_{i=0}^{\infty} c_i \lambda_i^k e^{-\lambda_i t}$. Это вытекает из того факта, что

$$\sum_{i=0}^{\infty} c_i \lambda_i^k e^{-\lambda_i t} \leqslant e^{k(\ln(k/\varepsilon)-1)} \sum_{i=0}^{\infty} |c_i|, \quad k = 1,2,\ldots,$$

т.е., ряд из производных равномерно сходится.

2 Метод Тихонова

Для учета априорных ограничений, рассмотрим метод регуляризации Тихонова [10, 11] в следующей форме:

$$\min\{\|A_\nu g - \Delta p_\delta\|^2_{L_2} + \alpha\Omega[g]:\ 0 < \kappa \leqslant g(t) \leqslant d_0,\ 0 \leqslant (-1)^m g^{(m)}(t) \leqslant d_m,\ m = 1, 2, \ldots\} = \Psi^*, \tag{8}$$

где точное решение $\hat{g}(t)$ удовлетворяет ограничениям в задаче (8) и стабилизирующий функционал $\Omega[g]$ имеет вид

$$\Omega[g] = \int_0^T \left[\tau g^{(2)}(t)/g(t) + g^{(1)}/g(t) - (\tau g^{(1)}/g(\tau))^2\right]^2 \frac{d\tau}{\tau}. \tag{9}$$

Аргументацию по поводу того, почему именно в виде (9) целесообразно использовать функционал $\Omega[g]$, можно найти в работе [8]. Введение дополнительного ограничения $0 < \kappa \leqslant g(t)$ связано с тем, что подынтегральное выражение в $\Omega[g]$ содержит слагаемые, имеющие в знаменателе функцию $g(t)$. Поэтому ограниченность снизу для функции $g(t)$ необходима, чтобы гарантировать непрерывность функционала $\Omega[g]$ относительно равномерной сходимости функций и их производных.

Теорема 2. *Пусть уравнение* (1) *имеет единственное решение,* $A, A_\nu:\ L_p[0,T] \to L_2[0,T]$, *выполнены условия аппроксимации*

$$\|q - q_\nu\| \leqslant \nu, \quad \|\Delta p - \Delta p_\delta\| \leqslant \delta, \tag{10}$$

и параметры ν, δ, α *связаны соотношениями*

$$\alpha(\nu, \delta) \to 0, \quad \nu, \delta \to 0.$$

Тогда задача (8) *имеет решение* $g_\alpha(t)$, *возможно неединственное, при этом имеет место соотношения:*

$$\lim_{\nu,\delta\to 0} ||g_{\alpha(\nu,\delta)} - \hat{g}||_{W_p^{(m)}} = 0, \quad m = 0, 1, 2, \ldots.$$

где $\hat{g}(t)$ *— решение уравнения* (1).

3 Конечномерная аппроксимация метода Тихонова

Поставим в соответствие задаче

$$\min\{\|A^\varepsilon_\nu g - \Delta p_\delta\|^2_{L_2} + \alpha\Omega[g]:\ 0 < \kappa \leqslant g(t) \leqslant d_0,\ 0 \leqslant (-1)^m g^{(m)}(t) \leqslant d_m,\ m = 1, 2, \ldots\}, \tag{11}$$

последовательность конечномерных задач

$$\min\left\{\|A^\varepsilon_\nu g - \Delta p_\delta\|^2_{L_2} + \alpha\Omega[g]:\ 0 < \kappa \leqslant g(t) = \sum_{i=0}^n c_i^n e^{-\lambda_i t},\ c_i^n \geqslant 0,\ \sum_{i=0}^n c_i^n \leqslant d_0\right\}, \tag{12}$$

где

$$A^\varepsilon_\nu g \equiv \int_\varepsilon^T q_\nu(t-\tau) g(\tau)\, d\tau = \Delta p_\delta(t).$$

Теорема 3. *Пусть* $A, A^\varepsilon_\nu:\ L_p[0,T] \to L_2[0,T]$, *выполнены условия аппроксимации* (10) *и решение* $g_\alpha(t)$ *задачи* (11) *единственно и представимо в виде*

$$g_\alpha(t) = \sum_{i=0}^\infty c_i^\alpha e^{-\lambda_i t}.$$

Тогда существует решение $\hat{g}^n(t)$ *задачи* (12) *и имеет место сходимость*

$$\lim_{n\to\infty} \|\hat{g}^n - g_\alpha\|_{W_p^{(m)}} = 0, \quad m = 0, 1, 2, \ldots.$$

4 Численный алгоритмы минимизации

При численной реализации метода Тихонова оператор A задачи (1) аппроксимируется матрицей, определяемой формулой

$$(A_{mn}c)_i = \int\limits_0^{t_i} q_\nu^k(t_i-\tau)g^n(\tau)\,d\tau = \sum_{j=0}^{n} c_j \int\limits_0^{t_i} q_\nu^k(t_i-\tau)e^{-\lambda_i\tau}\,d\tau,$$

где $i = 1, 2, \ldots, m$, $c = (c_0, c_1, \ldots, c_n)$, $n = 100$, $q_\nu^k(t)$ — кусочно-линейная функция, которая строится на сетке $\{\tau_i\}_{i=1}^k$ со значениями $\{q_\nu(\tau_i)\}_{i=1}^k$. Параметры λ_i выбираются из условия $e^{-\lambda_i\bar\tau_i} = \gamma$, $i = 1, 2, \ldots, k$, $\lambda_0 = 0$, $\gamma = 0.01$, где $\bar\tau_i$ — равномерная сетка в логарифмической шкале:

$$\ln\bar\tau_i = \ln\bar\tau_1 + \frac{i-1}{n-1}(\ln\bar\tau_n - \ln\bar\tau_1), \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

В качестве численного алгоритма минимизации нелинейной функции $n+1$ переменных используется метод активных ограничений [12, гл. 16, раздел 5] с итерационными шагами на основе регуляризованного метода Ньютона. Кратко опишем основные его этапы.

Перед первым шагом алгоритма множество активных ограничений задается пустым $S = \varnothing$. Также выбирается дополнительный параметр регуляризации $\beta > 0$ и параметр $e > 0$ для условия останова.

Рассмотрим k-й шаг итерации алгоритма.

1. Для текущей точки c^k вычисляются градиент f^k и гессиан H^k минимизируемой функции Ψ в задаче (12). Имеем следующее приближение для фунции Ψ:

$$\Psi(c^k + \Delta c) \approx \Psi(c^k) + \Delta c^T f + \Delta c^T H^k \Delta c.$$

2. Для $i \in S$, т.е. для коэффициентов $c_i = 0$ с активными ограничениями, устанавливаем $\bar f_i^k = 0$, $\bar H_{ij}^k = 0$, $\bar H_{ji}^k = 0$. Для $i, j \notin S$, $\bar f_i^k = f_i^k$, $\bar H_{ij}^k = H_{ij}^k$.

3. Проверяем, является ли оператор $\bar H^k + \beta I$ положительно определенным. Если нет, то удваиваем β до тех пор, пока $\bar H^k + \beta I$ не станет положительно определенным.

4. Находим Δc^k из условия минимума квадратичного функционала $\Delta c^T \bar f^k + \Delta c^T(\bar H^k + \beta I)\Delta c$:

$$\Delta c^k = -(\bar H^k + \beta I)^{-1}\bar f^k.$$

5. Выполняем шаг одномерной минимизации с ограничениями

$$t^k = \arg\min_t \bigl\{\Psi(c^k + t\Delta c^k):\ c_i^k + t\Delta c_i^k \geqslant 0\bigr\}$$
$$c^{k+1} = c^k + t^k\Delta c^k.$$

6. Если $t > 0$ и $\|f^k\| \leqslant e$, то удаляем одно из активных ограничений: $S = S \setminus \{\bar i\}$, где $\bar i = \arg\min\limits_{i\in S}\{f_i^k : f_i^k < 0\}$. Если для всех $i \in S$, $f_i^k \geqslant 0$, то алгоритм завершается и искомая функция строится по найденным коэффициентам: $g(t) = \sum\limits_{i=0}^{n} c_i^{k+1} e^{-\lambda_i t}$.

7. Если $t = 0$, тогда существует такой коэффициент c_i, что $c_i^k = 0$, $\Delta c_i^k < 0$. К множеству активных ограничений добавляем еще одно $S = S \cup \{\bar i\}$, где $\bar i = \arg\min\limits_i \Delta c^k$.

8. Повторяем шаг итерации для c^{k+1} и, возможно, нового набора активных ограничений.

Если функция $q(t)$ известна с большой погрешностью $\|q - q_\nu\| \leqslant \nu$, тогда приходится выполнять коррекцию по $q(t)$ для вычисления $g(t)$ с приемлемой точностью. Как показали численные эксперименты, достаточно 10–20 шагов коррекции $q(t)$. Описание алгоритма коррекции представлено в работах [6, 8].

5 Численные результаты

На рис. 1 модельные данные по давлению и скорости потока, заданные с 5% погрешности. Решение методом Тихонова с коррекцией скорости потока показано на рис. 2.

Другие результаты численных экспериментов можно найти в [6, 8].

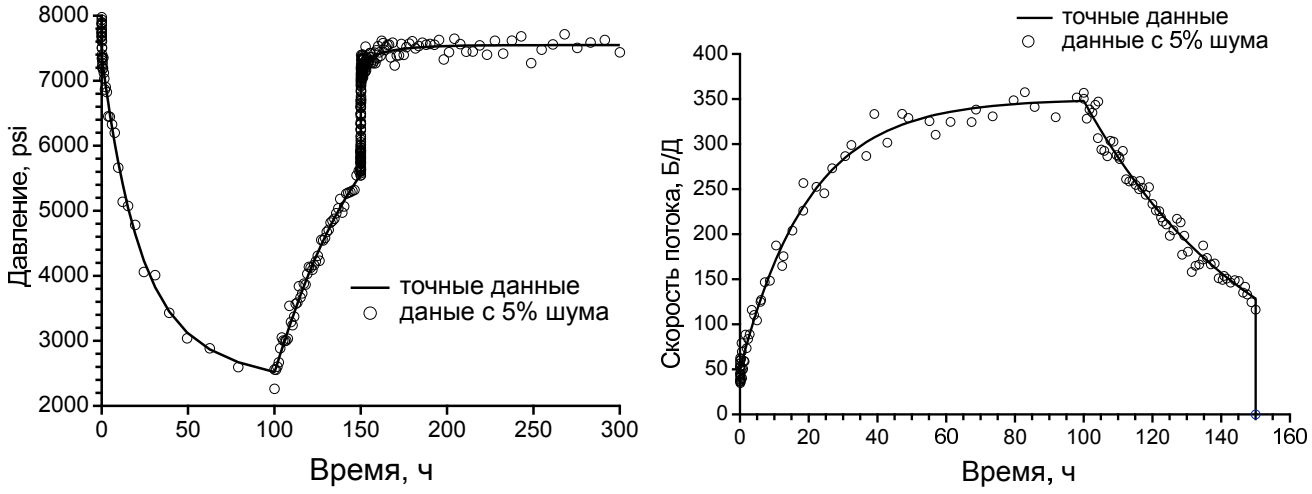


Рис. 1: Модельные данные тестирования скважины

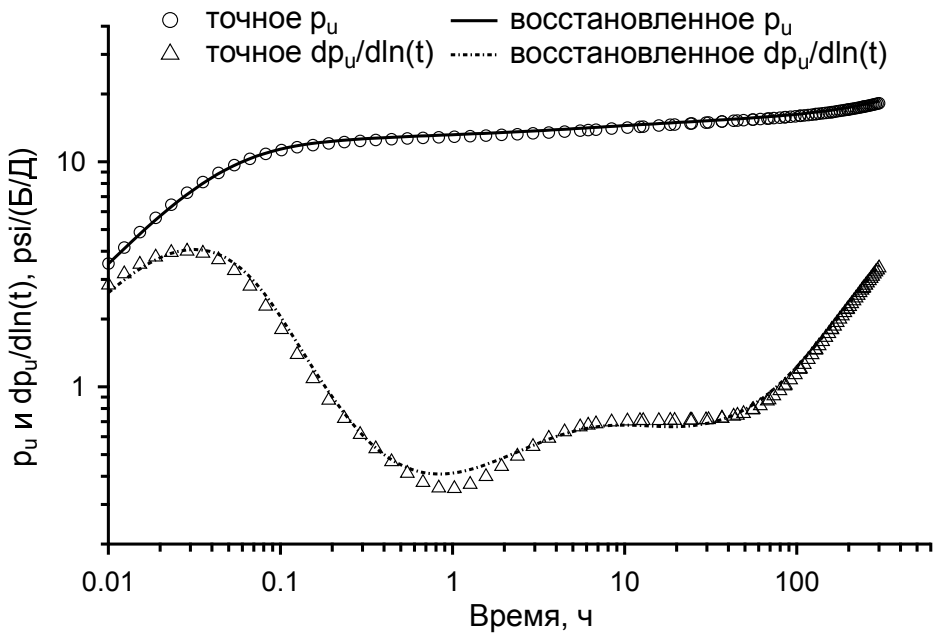


Рис. 2: Восстановленные методом Тихонова $g(t)$, $p_u(t)$ при 5% погрешности в исходных данных

З а м е ч а н и е 3. Задача деконволюции (1) возникает при интерпретации односкважинных тестов. Обобщением этой задачи будет система интегральных уравнений, возникающая при интерпретации многоскважинных тестов. При таком обобщении падение давления $\Delta p_i(t)$ в i-й скважине зависит от скорости потока $q_j(t)$ в соседних скважинах на том же резервуаре:

$$\sum_{j=1}^{n} \int_0^t q_j(t-\tau) g_{ij}(\tau)\, d\tau = \Delta p_i(t), \quad 0 \leqslant t \leqslant T,$$

где $g_{ij}(t)$ — функция отклика i-й скважины на падение давления в j-й. Постановка задачи для многоскважинных тестов и некоторые методы решения представлены в работе [13].

Заключение

В данной работе представлен метод решения задачи деконволюции (1), устойчивый к погрешностям в исходных данных как по давлению, так и по расходу жидкости. При этом построенное приближенные решения удовлетворяют всем априорным ограничениям, заданным в виде бесконечной системы неравенств. Кроме того, полученные в результате решения уравнения функции, ответственные за интерпретацию скважинных тестов при идентификации системы скважина–резервуар, обладают требуемым свойством гладкости. Это достигается благодаря: 1) построению специального базиса, учитывающего априорную информацию о решении; 2) применению дополнительной процедуры коррекции функции скорости потока; 3) использованию неквадратичного стабилизатора в методе регуляризации, учитывающего разномасштабность искомого решения.

Список литературы

[1] Von Everdinger A. F., Hurst W. The application of the Laplace transformation to flow problem in reservoir // Transaction of American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers. 1949. Vol. 186. P. 305–324.

[2] Bourdet D., Ayoub J.A., Pirard Y.M. Use of pressure derivative in well-test interpretation // SPE Formation Evaluation, SPE Paper 12777. 1989. P. 293–302.

[3] Pimonov E. A., Onur M., Kuchuk F. J. A new robust algorithm for solution of pressure/rate deconvolution problem // J. Inv. Ill-Posed Problems. 2009. Vol. 17, Issue. 6. P. 611–627.

[4] Coats K. H., Rapport L. A., McCord J. R., Drews W. P. Determination of Aquifer Influence Functions From Field Data // Transactions of SPE (AIME). 1964. Vol. 231. P. 1417–1424.

[5] Kuchuk F.J., Onur M., Hollander F. Pressure Transient Formation and Well Testing: Convolution, Deconvolution and Nonlinear Estimation. 2010. Amsterdam: Elsevier. 387 p.

[6] Vasin V., Skorik G., Pimonov E., Kuchuk F. New regular algorithms for solution of the convolution problem in well test interpretation // Appl. Math. 2010. Vol. 1, no. 5. P. 387–399.

[7] von Schroeter T., Hollander F., Gringarten A. Deconvolution of well-test data analysis as a nonlinear total least squares problem // SPE J. 2004. Vol. 9, no. 4. P. 375–390.

[8] Vasin V. V., Skorik G. G. Pressure/rate deconvolution problem and reconstruction of solution satisfying to all a priori constraints // Int. Conf. Proc. (8^{th} Intern. Conf. on Inverse Problems in Engineering, 12–15 May, 2014, Krakow, Poland), Eds: I.Szczygiel, A.J. Novak, M. Rojchyk, Gliwice–Krakow, Poland, Inst. Thermal Technology Silesian University of Technology, 2014. P. 343–352.

[9] Müntz H. Über den Approximationssatz von Weierstrass // H. A. Schwarz's Festschrift, Berlin. 1914. P. 303–312.

[10] Тихонов А. Н. О решении некорректно поставленных задачах и методе регуляризации // Докл. АН СССР. 1963. Т. 151, № 3. С. 501–504.

[11] Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. 2-е изд. М.: Наука. 1979. 285 с.

[12] Nocedal J., Wright S. J. Numerical Optimization (2nd ed). Berlin, New York: Springer-Verlag. 2006. 664p.

[13] Cumming J. A., Woof D. A., Whittle I., Gringarten A. C. Multiwell deconvolution // Presented at the SPE Annual Technical Conference and Exhibition, New Orlean, 30 September – 2 October 2013.

Владимир Васильевич Васин — Член-корр. РАН, проф., гл. науч.сотр. Отдела некорректных задач анализа и приложений
Института математики и механики им. Н.Н.Красовского УрО РАН;
e-mail: vasin@imm.uran.ru;
Георгий Григорьевич Скорик — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Отдела некорректных задач анализа и приложений
Института математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН;
e-mail: skorik@imm.uran.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРИНЦИПА ЭКВИРАСПРЕДЕЛЕНИЯ В СТОХАСТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМАХ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

А. В. Войтишек[1,2], Д. А. Прасол[2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.676

В данной работе сформулирован аналог принципа эквираспределения для стохастической сетки. Установлено соответствие между принципом эквираспределения и методом выборки по важности, широко используемом в задачах многомерного численного стохастического интегрирования.

Ключевые слова: адаптивная сетка, принцип эквираспределения, вероятностная плотность распределения, метод выборки по важности.

Введение

При численном решении ряда прикладных задач целесообразно использовать адаптивные сетки, в которых сгущения узлов в подобластях позволяют более эффективно получать приближение решения.

В данной работе обсуждается применение и численная реализация адаптивных сеток в *алгоритмах численного интегрирования*. При этом особое внимание будет уделено решению *многомерных задач*, в которых целесообразно применять *стохастические (вероятностные) алгоритмы построения адаптивных сеток*.

В Разделе 1 приведены рассуждения о том, что в основном принципе построения адаптивных сеток — *принципе эквираспределения* (см., например, [1]) — так называемая *управляющая функция* имеет основные свойства *вероятностной плотности распределения* (см., например, [2]). Сформулирован *вероятностный аналог принципа эквираспределения* (в интегральной форме) для случая, когда управляющая функция в точности является вероятностной плотностью, индуцирующей неупорядоченный адаптивный набор точек (как в *алгоритме выборки по важности* — см., например, [3]). В Разделе 2 приведен краткий анализ использования стохастических адаптивных сеток при построении *квадратурных* и *кубатурных формул* для приближенного вычисления интегралов (см., например, [3, 4]), в том числе, рассмотрены особенности компьютерной реализации упомянутого выше алгоритма выборки по важности. В Заключении сформулированы основные выводы данной работы.

Отметим следующую особенность представления материала в данной работе. Хотя речь здесь идет об алгоритмах, особенно эффективных для *многомерных* задач, ряд принципиальных аналитических рассуждений и рекомендаций в тексте более подробно сделан для *одномерного* случая. Перенос соответствующих суждений на многомерный случай технически не сложен, однако он требует использования тяжеловесных многомерных обозначений и рассуждений, что приводит к затруднениям при восприятии основных идей данной работы.

1 Вероятностный аналог принципа эквираспределения

При построении адаптивных сеток, как правило, реализуется тот или иной вариант *принципа эквираспределения* (см., например, [1]).

Этот принцип связан с построением невырожденного отображения $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{y})$, которое переводит зафиксированную (как правило, равномерную) сетку на *«вычислительной» области* Q в адаптивную сетку на заданной *«физической» области* X, и удовлетворяет соотношению:

$$f(\mathbf{x}(\mathbf{y}))J(\mathbf{y}) \equiv H_1 = \text{const}, \tag{1.1}$$

где $J(\mathbf{y})$ — это якобиан отображения, H_1 — положительная константа, $f(\mathbf{x})$ — специально выбранная ***управляющая функция***, такая, что

$$f(\mathbf{x}) \geq 0 \ \text{ при } \ \mathbf{x} \in X \ \text{ и } \ f(\mathbf{x}) = 0 \ \text{ при } \ \mathbf{x} \notin X. \tag{1.2}$$

На практике, как правило, рассматриваются случаи, когда $X \subseteq \mathbf{R}^d$, а $Q \subseteq \mathbf{R}^s$, где $1 \leq s \leq d$.

В дальнейшем будем полагать, что функция $f(\mathbf{x})$ непрерывна или кусочно-непрерывна, и выполнено соотношение

$$\int f(\mathbf{x})\, d\mathbf{x} = 1. \tag{1.3}$$

Свойствами (1.2), (1.3) обладает, в частности, *вероятностная плотность распределения* $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$ некоторого случайного вектора (d-мерной случайной величины) $\boldsymbol{\xi}$ (см., например, [2]). Но более существенным свойством вероятностной плотности является то, что она определяет «сгущения» выборочных значений (реализаций) $\boldsymbol{\xi}_j$ случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$.

Управляющая функция $f(\mathbf{x})$, обладающая свойствами (1.1) — (1.3), также определяет «сгущения» узлов реализуемой с ее помощью адаптивной сетки.

Покажем это для простейшего одномерного случая, когда $d = 1$ и $\mathbf{x} = x \in X \subset \mathbf{R}$, $\mathbf{y} = y \in Q = [0, 1] \subset \mathbf{R}$.

Построение адаптивной сетки

$$\tilde{X}^{(M)} = \{x_0 < x_1 < x_2 < ... < x_{M-1} < x_M\}; \quad x_j = x(y_j), \quad y_j = j\Delta y, \quad \Delta y = 1/M; \quad j = 0, 1, ..., M,$$

в этом случае связано с рассмотрением частного случая соотношения (1.1):

$$f(x(y))x'_y(y) = H_2 = \text{const},$$

где $x'_y(y)$ обозначает соответствующую производную по переменной y (это в данном случае якобиан отображения $x = x(y)$).

Интегрируя это соотношение на отрезке $[y_j, y_{j+1}]$ и предполагая непрерывность функции $f(x)$ на этом отрезке, получаем

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(z)\, dz = H_2(y_{j+1} - y_j) \tag{1.4}$$

или

$$f(\tilde{x}_j)(x_{j+1} - x_j) = H_3, \ \text{ где } \ \tilde{x}_j \in [x_j, x_{j+1}], \ \ H_3 = H_2\Delta y = \frac{H_2}{M}; \ \ j = 0, 1, ..., M - 1. \tag{1.5}$$

Таким образом, для заданного количества узлов M, для подобластей, в которых функция $f(x)$ велика, длины отрезков $[x_j, x_{j+1}]$ малы.

Учитывая соотношения (1.2), (1.3), (1.5) можно назвать функцию $f(x)$ ***плотностью распределения узлов адаптивной сетки***.

Теперь рассмотрим одномерную неупорядоченную *стохастическую* адаптивную сетку для метода Монте-Карло (см. [3], а также Раздел 2 данной работы)

$$\Xi^{(n)} = \{\xi_1, ..., \xi_n\}, \tag{1.6}$$

где ξ_i — независимые выборочные значения случайной величины ξ, имеющей плотность распределения $f_\xi(z)$.

Рассмотрим также соответствующий аналог левой части соотношения (1.4) (которое можно назвать *интегральной формой принципа эквираспределения для стохастической сетки* (1.6)):

$$I^{(i)} = \int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} f_\xi(z)\, dz = F_\xi(\xi_{i+1}) - F_\xi(\xi_i); \ \ i = 1, ..., n - 1;$$

здесь $F_\xi(x) = \mathbf{P}\{\xi < x\} = \int_{-\infty}^{x} f_\xi(z)\, dz$ — *функция распределения* случайной величины ξ (см., например, [2]).

Хорошо известно (см., например, [3]), что случайная величина $\alpha = F_\xi(\xi)$ имеет равномерное распределение в интервале $(0,1)$.

Таким образом, случайная величина $I^{(i)}$ равна

$$\int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} f_\xi(z)\,dz = \alpha^{(1)} - \alpha^{(2)}, \tag{1.7}$$

для любой плотности распределения $f_\xi(z)$ и любых случайных узлов ξ_i и ξ_{i+1}; здесь $\alpha^{(1)}$ и $\alpha^{(2)}$ независимые *стандартные случайные величины* [3], равномерно распределенные в интервале $(0,1)$.

Используем следующее утверждение.

ЛЕММА (см., например, [2]). *Сумма $\eta^{(1)}+\eta^{(2)}$ двух независимых случайных величин $\eta^{(1)}$ и $\eta^{(2)}$ с плотностями распределения $f^{(1)}(z)$ и $f^{(2)}(z)$ имеет плотность распределения в виде свертки*

$$f_{\eta^{(1)}+\eta^{(2)}}(z) = \left(f_{\eta^{(1)}} * f_{\eta^{(2)}}\right)(z) = \int f^{(1)}(u) f^{(2)}(z-u)\,du. \tag{1.8}$$

Из Леммы несложно получить, что случайная величина $I^{(i)}$ имеет «универсальное» (для различных $i = 1, ..., n-1$) распределение с плотностью

$$f_{I^{(i)}}(z) = f_{\alpha^{(1)}+(-\alpha^{(2)})}(z) = \beta^{(1)}(z) = \begin{cases} 1+z \ \text{ для } \ -1 \le z \le 0, \\ 1-z \ \text{ для } \ 0 \le z \le 1, \\ 0 \ \text{ иначе;} \end{cases} \tag{1.9}$$

здесь $\beta^{(1)}(z)$ — *B-сплайн первого порядка* (или *«функция—крышка»* — см., например, [5]).

Таким образом, соотношение (1.7) можно назвать ***вероятностным аналогом принципа эквираспределения для сетки*** (1.6).

Индукцией по размерности d, используя разложение совместной плотности распределения случайного вектора в произведение условных плотностей (см., например, [2, 3]), можно получить следующий аналог формулы (1.7) для одинаково распределенных (согласно плотности $f(\mathbf{z}) = f\left(z^{(1)}, ..., z^{(d)}\right)$) d-мерных случайных векторов $\boldsymbol{\xi}_1 = \left(\xi_1^{(1)}, ..., \xi_1^{(d)}\right)$ и $\boldsymbol{\xi}_2 = \left(\xi_2^{(1)}, ..., \xi_2^{(d)}\right)$:

$$\int_{\xi_1^{(1)}}^{\xi_2^{(1)}} ... \int_{\xi_1^{(d)}}^{\xi_2^{(d)}} f\left(z^{(1)}, ..., z^{(d)}\right) dz^{(1)} ... dz^{(d)} = \alpha^{(1)} \times ... \times \alpha^{(d)} - \alpha^{(d+1)} \times ... \times \alpha^{(2d)}, \tag{1.10}$$

где $\alpha^{(s)}$; $s = 1, ..., 2d$ — независимые стандартные (равномерно распределенные в интервале $(0,1)$) случайные величины.

Заметим, что формула (1.10) и ее обоснование подтверждает высказанный во Введении тезис о том, что многомерные аналоги полученных в данной работе одномерных результатов (и их обоснование) имеют достаточно громоздкий вид. Такой громоздкий вид будет иметь и многомерный аналог формулы (1.9). Здесь для получения плотности распределения случайной величины из правой части соотношения (1.10) следует использовать известные формулы для суммы (формула (1.8)) и произведения

$$f_{\eta^{(1)}\times\eta^{(2)}}(z) = \int f^{(1)}\left(\frac{z}{u}\right) f^{(2)}(u)\,\frac{du}{|u|}$$

независимых случайных величин $\eta^{(1)}$ и $\eta^{(2)}$ с известными плотностями распределения $f^{(1)}(z)$ и $f^{(2)}(z)$ (см., например, [2]).

2 Использование адаптивных сеток в стохастических алгоритмах численного интегрирования

Рассмотрим задачу приближенного вычисления многократного интерграла

$$I = \int_X g(\mathbf{x})\,d\mathbf{x} = \int_{\mathbf{R}^d} g(\mathbf{x})\,d\mathbf{x} = \int g(\mathbf{x})\,d\mathbf{x}.$$

Известно (см., например, [3, 4]), что для достаточно больших размерностей d (конкретнее, для $d \geq 4$ [3]) наиболее эффективным алгоритмом вычисления интеграла I является *весовой метод Монте-Карло*, основанный на представлении интеграла в виде математического ожидания

$$I = \int \frac{g(\mathbf{x})}{f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})} f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})\, d\mathbf{x} = \mathbf{E}\zeta, \;\; \zeta = \frac{g(\boldsymbol{\xi})}{f_{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi})},$$

где случайный вектор $\boldsymbol{\xi}$ распределен согласно выбираемой плотности $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$, с последующим численным приближением интеграла I согласно *закону больших чисел* (см., например, [2, 3])

$$I \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \zeta_i, \;\; \zeta_i = \frac{g(\boldsymbol{\xi}_i)}{f_{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi}_i)}; \tag{2.1}$$

здесь $\boldsymbol{\xi}_1, ..., \boldsymbol{\xi}_n$ — реализуемые на компьютере выборочные значения случайного вектора $\boldsymbol{\xi}$.

Одним из принципиальных преимуществ метода (2.1) состоит в том, что он допускает корректную аналитическую оптимизацию на основе принципа

«тот алгоритм эффективнее, который позволяет получить заданный уровень погрешности за меньшее время счета»,

в то время как «детерминированные» методы численного интегрирования — квадратурные и кубатурные формулы — сравниваются (не вполне корректно) только по зависимости погрешности от шага сетки (см., например, [4]).

Затраты (время счета) алгоритма (2.1) равны величине

$$s = n \times t, \tag{2.2}$$

где t — среднее время для получения выборочного значения $\zeta_i = g(\boldsymbol{\xi}_i)/f_{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi}_i)$. Как несложно показать (см., например, [3]), при фиксированном уровне погрешности величина (2.2) пропорциональна величине *трудоемкости*

$$S = \mathbf{D}\zeta \times t; \tag{2.3}$$

здесь $\mathbf{D}\zeta$ — дисперсия случайной величины (*«весовой оценки»*) ζ.

В свою очередь, при оптимизации алгоритма (2.1) на основании минимизации величины (2.3) широко используется ***принцип выборки по важности***, состоящий в том, что среди алгоритмов (2.1), имеющих примерно одинаковое среднее время t реализации выборочных значений ζ_i, тот имеет меньшую трудоемкость S из (3.3), для которого

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) \approx H_4 \left|g(\mathbf{x})\right|; \;\; H_4 = \frac{1}{\int \left|g(\mathbf{u})\right| \, d\mathbf{u}}. \tag{2.4}$$

Термин *«выборка по важности»* соответствует английскому термину *«importance sampling»*. Такое название объясняется тем, что если $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$ пропорциональна модулю подынтегральной функции $g(\mathbf{x})$, то в тех частях области X, в которых $|g(\mathbf{x})|$ больше и вклад которых в интеграл I более существенен, будет выбираться больше случайных точек $\{\boldsymbol{\xi}_i\}$.

Таким образом, в алгоритме выборки по важности (2.1), (2.4) реализуется ***адаптивная стохастическая сетка***

$$\Xi^{(n)} = \{\boldsymbol{\xi}_1, ..., \boldsymbol{\xi}_n\}. \tag{2.5}$$

Адаптивность сетки (2.5) определяется, кроме соотношения (2.4), тем, что распределения случайных величин

$$H_4 \int_{\xi_i^{(1)}}^{\xi_j^{(1)}} ... \int_{\xi_i^{(d)}}^{\xi_j^{(d)}} \left| g\left(z^{(1)}, ..., z^{(d)}\right)\right| \, dz^{(1)} ... dz^{(d)},$$

где $\boldsymbol{\xi}_i = \left(\xi_i^{(1)}, ..., \xi_i^{(d)}\right)$, $\boldsymbol{\xi}_j = \left(\xi_j^{(1)}, ..., \xi_j^{(d)}\right)$; $i, j = 1, ..., n$; $i \neq j$, близки к распределению случайной величины (1.10), т. е. приближенно выполнены соответствующие аналоги принципа эквираспределения.

Что касается конкретных алгоритмов компьютерной реализации выборки (2.5), то здесь можно воспользоваться соображениями из Раздела 3.2.4 учебника [3] (более детальное представление этих соображений

содержится в статье [6]). Эти соображения состоят в том, что в качестве плотности $f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x})$ целесообразно использовать приближения модуля подынтегральной функции $g(\mathbf{x})$ вида

$$f_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{x}) = H_5 L_M |g(\mathbf{x})| = H_5 \sum_{j=1}^{M} w_j(\mathbf{g}) \chi_j(\mathbf{x}). \tag{2.6}$$

Здесь $\{\chi_j(\mathbf{x})\}$ — заданные *базисные* функции, согласованные с заданными узловыми точками $\{\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_M\}$, коэффициенты $\{w_j(\mathbf{g})\}$ зависят от значений $\mathbf{g} = (|g(\mathbf{x}_1)|, \ldots, |g(\mathbf{x}_M)|)$, а H_5 — нормирующая константа.

Здесь возникают требования *моделируемости* приближения $L_M|g(\mathbf{x})|$, состоящие в следующем [3, 6]. Из соотношения (2.6) следует, что для численного моделирования адаптивных случайных узлов (2.5) можно использовать алгоритм *метода суперпозиции* (см., например, [3]).

АЛГОРИТМ. *1. Используя один из алгоритмов моделирования целочисленной случайной величины η (см., например,* [3]*) с распределением*

$$\mathbf{P}\{\eta = j\} = p_j, \;\; p_j = \frac{H_5 w_j(\mathbf{g})}{H_6^{(j)}}, \;\; H_6^{(j)} = \int \chi_j(\mathbf{u})\, d\mathbf{u}; \;\; j = 1, ..., M,$$

реализуем выборочное значение $\eta_i = m$; $i = 1, ..., n$.

2. Реализуем выборочное значение $\boldsymbol{\xi}_i$ согласно плотности

$$f_m(\mathbf{x}) = H_6^{(m)} \chi_m(\mathbf{x}); \;\; \mathbf{x} = \left(x^{(1)}, ..., x^{(d)}\right) \in \mathbf{R}^d. \tag{2.7}$$

Для корректной реализации Алгоритма требуется неотрицательность коэффициентов $\{w_j(\mathbf{g})\}$. Кроме того, базисные функции $\{\chi_j(\mathbf{x})\}$ должны быть пропорциональными плотностям распределения случайных векторов вида (2.7), для которых имеются эффективные алгоритмы реализации выборочных значений. Последние два требования определяют моделируемость приближения $L_M|g(\mathbf{x})|$ из соотношения (2.6).

Проведенные в работе [6] исследования известных приближений вида (2.6) показали, что требованиям моделируемости наилучшим образом удовлетворяет *конечно-элементная аппроксимация Стренга—Фикса* [5], базисные функции строятся следующим образом.

Предполагается, что в $\mathbf{R}^d$ задана равномерная прямоугольная сетка с шагом h и каждый узел $\mathbf{x}_j$, используемый в аппроксимации (2.6), можно описать как

$$\mathbf{x}_j = \left(k_{(j)}^{(1)} h, ..., k_{(j)}^{(d)} h\right),$$

где $k_{(j)}^{(s)}$ — целые числа. Соответствующая узлу $\mathbf{x}_j$ базисная функция $\chi_j(\mathbf{x})$ имеет специальный вид

$$\chi_j(\mathbf{x}) = \beta^{(r)}\left(\frac{x^{(1)}}{h} - k_{(j)}^{(1)}\right) \times ... \times \beta^{(r)}\left(\frac{x^{(d)}}{h} - k_{(j)}^{(d)}\right); \tag{2.8}$$

здесь $\beta^{(r)}(z)$ — B-сплайн r-го порядка.

Для базиса Стренга—Фикса (2.8) плотность (2.7), используемая в Алгоритме, имеет вид

$$f_m(\mathbf{x}) = f_m^{(1)}\left(x^{(1)}\right) \times ... \times f_m^{(d)}\left(x^{(d)}\right); \;\; f_m^{(s)}\left(x^{(s)}\right) = \frac{1}{h}\beta^{(r)}\left(\frac{x^{(s)}}{h} - k_{(m)}^{(s)}\right); \;\; s = 1, ..., d,$$

т. е. в данном случае $H_6^{(m)} = h^{-d}$.

Это означает, что при моделировании вектора $\boldsymbol{\xi}_i = \left(\xi_i^{(1)}, ..., \xi_i^{(d)}\right)$ следует учесть, что компоненты $\xi_i^{(s)}$ независимы и моделируются по формуле

$$\xi_i^{(s)} = h\psi_0^{(r)} + k_{(m)}^{(s)} h, \tag{2.9}$$

где $\psi_0^{(r)}$ — выборочное значение случайной величины $\psi^{(r)}$, имеющей плотность распределения $\beta^{(r)}(z)$.

Учитывая рекуррентное определение B-сплайна r-го порядка

$$\beta^{(r)}(z) = \left(\beta^{(r-1)} * \beta^{(0)}\right)(z),$$

где

$$\beta^{(0)}(z) = \begin{cases} 1 \text{ для } -1/2 \le z \le 1/2, \\ 0 \text{ иначе,} \end{cases} \tag{2.10}$$

а также Лемму и то обстоятельство, что функция $\beta^{(0)}(z)$ из (2.10) является плотностью распределения случайной величины $\alpha^{(0)} - 1/2$ (здесь $\alpha^{(0)}$ — стандартная случайная величина), несложно обосновать моделирующую формулу

$$\psi_0^{(r)} = \left(\alpha_0 - \frac{1}{2}\right) + \left(\alpha_1 - \frac{1}{2}\right) + ... + \left(\alpha_r - \frac{1}{2}\right) = \alpha_0 + \alpha_1 + ... + \alpha_r - \frac{r+1}{2}. \tag{2.11}$$

Что касается практического применения Алгоритма с формулами (2.9), (2.11), то случай $r = 0$ (кусочно-постоянное приближение (2.6)) подробно рассмотрен в работе [7].

Трудности использования «гладких» приближений (2.6), (2.8) (для достаточно больших r) представлены в диссертации [8] (в частности, подробно рассмотрен случай кубических сплайнов для $r = 3$). Эти трудности связаны, в частности, с вычислением коэффициентов $\{w_j(\mathbf{g})\}$, дающих высокий порядок аппроксимации $L_M|g(\mathbf{x})|$ (здесь может нарушаться требование положительности этих коэффициентов).

В работе [6] нами показано, что наиболее эффективным является применение т. н. *мультилинейного приближения* (2.6) с базисными функциями (2.8) и сплайнами первого порядка (1.8).

Особо отметим, что в практических вычислениях вместо формулы (2.11), которая для случая $r = 1$ имеет вид

$$\psi_0 = \alpha_1 + \alpha_2 - 1,$$

целесообразно использовать обоснованную в Разделе 1 данной работы более экономичную формулу

$$\psi_0 = \alpha_1 - \alpha_2 \tag{2.12}$$

(см. соотношение (1.9)).

Для развития теории и приложений конструктивных алгоритмов выборки по важности целесообразны дополнительные исследования моделируемых базисов, отличных от конечных элементов (2.8). Особую роль здесь играет построение экономичных реализаций соответствующих алгоритмов с целью их включения в геометрические вычислительные модули (подобно тому, как это сделано в работе [7]).

Заключение

Перечислим основные результаты данной работы.

1. Получен вероятностный аналог принципа эквираспределения — см. соотношения (1.7), (1.9), (1.10).

2. Показано, что метод выборки по важности, широко используемый в задачах многомерного численного стохастического интегрирования, связан с формированием сетки (2.5), адаптивной в том смысле, что плотность распределения узлов пропорциональна модулю подынтегральной функции.

3. Приведен конструктивный алгоритм метода суперпозиции с конкретным аппроксимационным базисом (2.8) и с эффективными (экономичными) моделирующими формулами (2.9), (2.12).

Заметим также, что в нашей работе [9] предложен подход к выбору плотности распределения адаптивных узлов в стохастическом итерационном алгоритме построения адаптивных сеток (схеме Т. Кохонена [10]), используемом в задаче численного приближения функций, и на простом примере показана эффективность этого подхода.

Список литературы

[1] Хакимзянов Г. С., Шокин Ю. И. Разностные схемы на адаптивных сетках. Ч. 1, 2. Новосибирск: НГУ, 2009.

[2] Боровков А. А. Теория вероятностей. М.: Наука, 1986. 432 с.

[3] Михайлов Г. А., Войтишек А. В. Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. М.: Изд. центр «Академия», 2006. 368 с.

[4] Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. Т. 1. М.: Государственное издательство физико-математической литературы. 1959. 464 с.

[5] Марчук Г. И., Агошков В. И. Введение в проекционно-сеточные методы. М.: Наука, 1981. 416 с.

[6] Voytishek A. V., Kablukova E. G. Using the approximation functional bases in Monte Carlo methods // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2003. V. 18, № 6. P. 521–542.

[7] Бессмельцев М. В., Войтишек А. В. Модификации геометрических программных модулей, связанные с построением моделируемых вероятностных плотностей // Вычислительные технологии. 2011. Т. 16, № 4. С. 19–36.

[8] Милосердов В. В. Дискретно-стохастические численные алгоритмы со сплайн-восполнениями. Новосибирск, 2006 (Дисс. на соиск. уч. степени канд. физ.-матем. наук: 01.01.07 — вычислительная математика / НГУ). 83 с.

[9] Войтишек А. В., Прасол Д. А. О выборе плотностей распределения узлов адаптивных сеток в стохастических алгоритмах многомерного интегрирования и приближения функций // Вычислительные технологии. 2017. Т. 22, № 1. С. 3–16.

[10] Kohonen T. Self-Organizing Maps. Springer-Verlag, 2001. 502 p.

Антон Вацлавович Войтишек — д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: vav@osmf.sscc.ru;
Денис Александрович Прасол — студент Новосибирского государственного университета;
e-mail: duohuc.1993@inbox.ru.
Дата поступления — 10 мая 2017 г.

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ЧИСЛЕННОГО ПРОГНОЗА ОБЛЕДЕНЕНИЯ

М. А. Волкова[1], Н. К. Барашкова[1], И. В. Кужевская[1],
Л.И. Кижнер[1], А. В. Старченко[1,2], А. А. Барт[1]

[1] *Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050, Томск*
[2] *Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, 634055, Томск*

УДК 551.509.54+ 519.6

В статье представлены результаты оперативного прогнозирования зон потенциального обледенения воздушных судов на основе использования гидродинамического моделирования состояния пограничного слоя над аэродромом Томск. В результате исследования рассмотренные прогностические алгоритмы были ранжированы по степени их успешности применения в статистической интерпретации. Наиболее перспективным алгоритмом для прогноза обледенения воздушных судов признан алгоритм К. Годске.

Ключевые слова: мезомасштабная модель, PP-концепция, постпроцессинг.

Введение

Оперативные численные модели прогноза погоды, как правило, не предсказывают в явном виде важных для практики авиационной метеорологии величин и явлений, в частности обледенения воздушных судов. В постпроцессинге модельных переменных прогностические показатели рассчитываются с помощью статистических методов [1]. Статистическая интерпретация результатов численного прогноза является необходимым этапом при получении прогностической продукции. Использование этого этапа численного прогноза стало актуальным после того как прогноз полей давления в тропосфере стал устойчиво достигать приемлемого уровня оправдываемости. С тех пор началась разработка объективных методов интерпретации гидродинамических прогнозов в терминах элементов погоды [2]. Существует несколько концепций применения статистических методов для разработки и интерпретации результатов моделирования. Современные методы статистического анализа и прогноза погоды и опасных ее явлений допускают применение двух концепций — в одной используется статистики «идеального» прогноза (Perfect Prognos Methods — PP), в другой — прогнозы конкретных гидродинамических моделей (Model Output Statistics Methods — MOS). Данные концепции идентичны по используемому статистическому аппарату и различаются способами формирования обучающих выборок. В нашей работе использовалась методология PP-концепции, которая предполагает получение устойчивых оценок диагностических (синхронных и асинхронных) связей между рассматриваемыми элементами или явлениями погоды и значениями ряда характеристик атмосферы, определяемых по фактическим данным на архивном материале. Выявленные диагностические соотношения, например, в виде уравнений регрессии, дискриминантных функций переносятся на связи между элементами погоды и прогностическими переменными, которые снимаются с прогностических карт, рассчитанных с помощью той или иной гидродинамической модели.

Достоинства PP-концепции: статистические зависимости строятся на основе архивных данных за большой период метеорологических наблюдений; качество прогнозов элементов и явлений погоды автоматически повышается при улучшении качества используемых гидродинамических моделей; не требуется пересчета уравнений статистических зависимостей при внедрении в практику новой гидродинамической модели.

Недостатки PP-концепции: основным методическим недостатком является то, что в ней не учитываются ошибки конкретной гидродинамической модели, из которой при оперативном использовании берутся значения предикторов. Статистические зависимости выстраиваются на фактическом материале, а при

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Администрации Томской области в рамках научного проекта проекта 16-41-700178 р_а.

оперативном использовании полученные связи в «чистом» виде переносятся на прогностические поля, из которых выбираются необходимые предикторы для прогноза метеорологических величин и явлений погоды. При этом допускается, что прогностические поля отражают те же особенности пространственно-временного распределения метеорологических величин и условий циркуляции, что и фактические.

В нашей работе представлены результаты статистической интерпретации прогностической продукции гидродинамических моделей для численного прогноза опасного для авиации явления — обледенения. В качестве физико-статистических зависимостей были привлечены алгоритм К. Годске [3], дискриминантная функция Гидрометцентра РФ [3] и количественные интервалы температуры воздуха и относительной влажности, предложенные NCEP (National Centers for Environmental Prediction, USA) [4].

1 Численный метод

Мезомасштабная модель TSU-NM3 на основе выходной продукции глобальной модели Гидрометцентра РФ ПЛАВ [5] (за срок 00 ВСВ на уровнях 1000, 925 и 850 гПа), выдает прогноз составляющих скорости ветра и температурно-влажностных характеристик на 29 уровнях (от 9,7 м до 2500 м) в пограничном слое атмосферы в районе аэродрома Томск. Некоторые из основных особенностей и опций модели TSU-NM3, используемой для прогноза обледенения, перечислены в [6].

На основе результатов численного прогноза этих величин с использованием физико-статистических зависимостей (разработанных в рамках PP-концепции) прогнозируются зоны обледенения с часовой дискретностью, которые представляют собой, на сегодняшний момент, текстовые файлы. Выходные данные модели TSU-NM3 представляют собой часовой профиль компонент скорости ветра (U, V, W, м/с), температурно-влажностных характеристик (T, °C; Qair, кг/кг и др.), и, непосредственно, показателей наличия/отсутствия обледенения по методу Годске, методу NCEP и по значениям дискриминантной функции L850.

В дальнейшем будем использовать следующие обозначения полей: $H(M)$ — значение высоты поверхности над уровнем моря, м; $ZPHYS(M)$ — высота над поверхностью Земли, м; U — долготная компонента скорости, м/с; V — широтная компонента скорости, м/с; W — вертикальная компонента скорости, м/с; T — температура воздуха, °C; $Qair$ — удельная влажность воздуха, кг/кг; $QRAIN$ — содержание дождевой влаги в атмосфере, кг/кг; $QCLOUD$ — содержание облачной влаги в атмосфере, кг/кг; $Td(C)$ — температура точки росы, °C; $Godske$ — параметр Годске: $T + 8 \cdot (T - Td)$, если он < 0, то прогнозируется обледенение; $icing$ — параметр $(0 \vee 1)$, характеризующий обледенение по Годске. Если $icing = 1$, то обледенение прогнозируется на данном уровне; $L850$ — дискриминантная функция для прогноза обледенения, разработанная Гидрометцентром РФ. Если $L850 < 0$, то прогнозируется обледенение на высоте $H850 \pm 500$ м; $H850$ — высота, на которой рассматривается дискриминантная функция, м; $iUSA$ — параметр $(0 \vee 1)$, характеризующий обледенение самолета по методике, разработанной в NCEP. Если $iUSA = 1$, то обледенение прогнозируется на данном уровне; RH — относительная влажность воздуха, %.

Апробация мезомасштабной модели для прогноза обледенения воздушных судов [6, 7] и статистическая интерпретация результатов проводилась на основе базы данных бортовой погоды PIREPs (pilot reports) о случаях обледенения в районе аэродрома Томск (в радиусе до 150 км) с 2011 по 2015 год. В этот период наблюдалось 276 дней с обледенением. Наибольшее число дней было зафиксировано в октябре и декабре — 32,3 и 32,9 %, соответственно. Чаще всего наблюдалось обледенение умеренной интенсивности (136 дней) и слабой (125 дней), дни с сильным обледенением (15 дней) регистрировались с октября по май.

Использование мезомасштабной модели TSU-NM3 позволяет получить прогностические значения характеристик элементов погоды/предикторов, используемых при прогнозе зон обледенения воздушных судов в пограничном слое атмосферы в районе аэродрома Томск с заблаговременностью до 40 часов.

2 Результаты

В качестве типичного примера продемонстрируем результаты модельных расчетов для двух дней 10 и 11 марта 2015 года (рис. 1).

По информации бортовой погоды (PIREPs) с 10 часов UTC 10 марта до 12 часов UTC 11 марта было зафиксировано обледенение (слабое, в облаках) в слое от 600 до 3000 м. Согласно данным [8] 10.03.2015 в 08.34 UTC вертолет Robinson R-44 потерпел аварию в районе примерно 45–50 км от Новосибирска. По предварительным данным, причиной аварии стало обледенение воздушного судна.

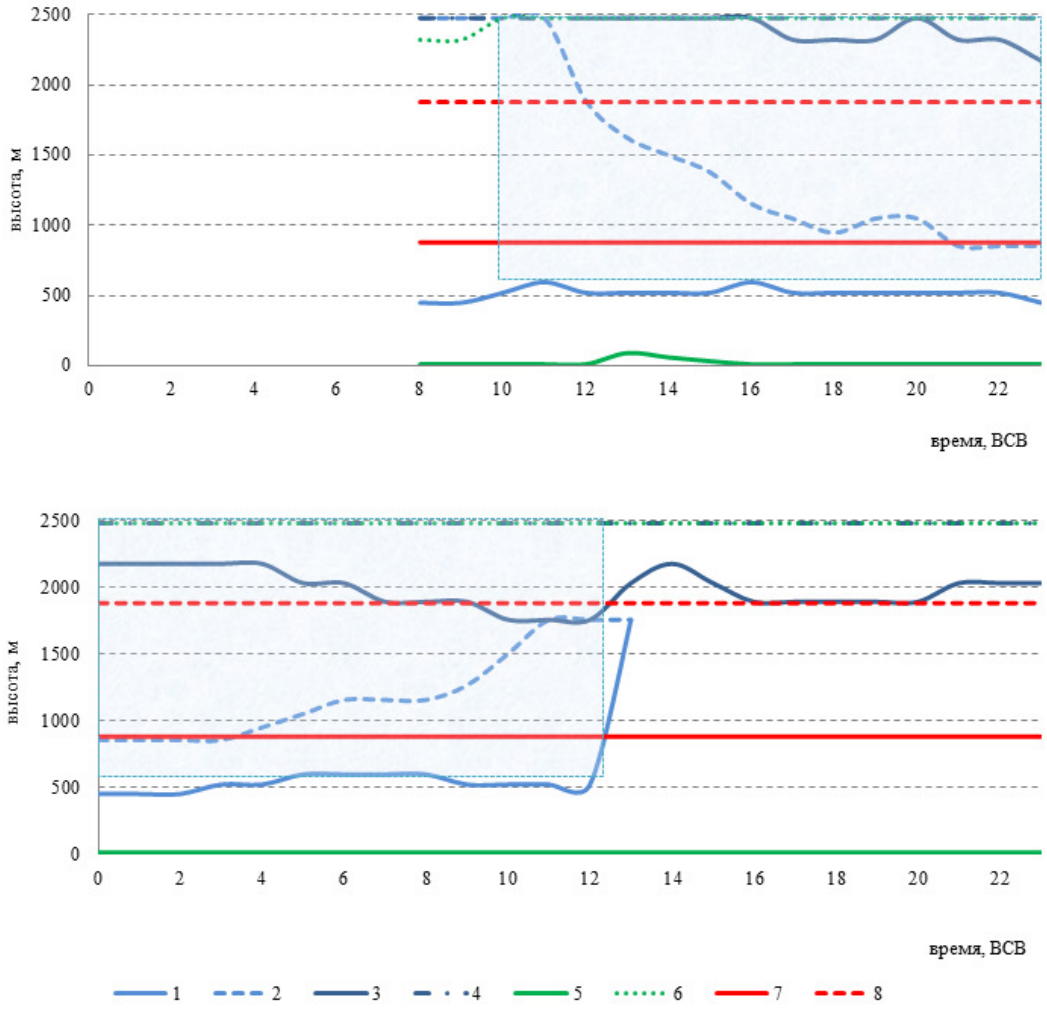


Рис. 1: Результаты моделирования за 10 и 11 марта 2015 года. Нижняя (1) и верхняя (2) граница первого слоя обледенения по методу Годске, нижняя (3) и верхняя (4) граница второго слоя обледенения по методу Годске, нижняя (5) и верхняя (6) граница слоя обледенения по методу NCEP, нижняя (7) и верхняя (8) граница слоя обледенения по методу Гидрометцентра РФ, выделенный блок — зона обледенения согласно данным бортовой погоды.

В этот период времени юго-восток Западной Сибири находился в передней теплой части барической ложбины глубокого малоподвижного циклона с центром над Новой Землей. Наблюдалась адвекция теплого и влажного воздуха в системе фронтов окклюзии. Наблюдалась облачность 8 октантов, преимущественно слоисто-кучевых (Stratocumulus) и кучево-дождевых форм (Cumulonimbus), временами осадки в виде ливневого снега. Приземная температура воздуха отмечалась в диапазоне от $-7,7$ до $+0,7$ °C, а также высокая относительная влажность (80–95%). Рассмотренная ситуация характеризует наиболее часто встречающееся условия образования обледенения при переходе от морозной погоды к оттепели.

Проведенные расчеты показали, что модель успешно спрогнозировала обледенение по всем трем рассматриваемым алгоритмам. Согласно алгоритма NCEP, обледенение прогнозировалось в течение обоих суток практически во всем слое от поверхности земли до высоты 2500 м. Исключение составляют несколько часовых сроков 10 марта, когда в срок 8–9 ч. ВСВ верхняя граница слоя обледенения находилась на уровне 2323 м, а нижняя граница слоя поднималась до уровня 89 м (в срок 13 ч. ВСВ). Метод Гидрометцентра РФ показал зону прогнозируемого обледенения в слое 880–1880 м (высота 850 гПа ±500 м) на протяжении всего прогностического периода (с 8 ч. 10.03.2015 до 23 ч. ВСВ 11.03.2015). Данные расчетов модели TSU-NM3

отражают наличие обледенения и по алгоритму К.Годске в течение рассматриваемого периода. Показано, что две прогнозируемые зоны с обледенением имеют сложную пространственно-временную конфигурацию. Наблюдается почти полное совпадение нижней границы фактического и прогнозируемого обледенения, при этом модель дает расслоение по вертикали, но это данные бортовой погоды уже не отражают. Следует отметить, что 10 марта 2015 г. модель прогнозирует обледенение и на время зафиксированной аварии вертолета под Новосибирском. При этом факт обледенения не подтвержден информацией PIREPs в районе аэродрома Томск, который находится в пределах 150 км от места падения вертолета.

Для проверки качества прогноза обледенения проведен сравнительный анализ фактических случаев обледенения и модельных прогнозов для 36 дней с фактическим обледенением и без него для расчетных сроков 08, 12, 18 и 24 часа ВСВ. Для оценки качества используемых статистических алгоритмов и успешности прогнозов зон обледенения были использованы стандартные оценки, принятые в прогностической практике [1, 9]: оправдываемость прогнозов наличия и отсутствия явления, предупрежденность наличия и отсутствия явления, общая оправдываемость, критерий надежности Н.А. Багрова, критерий Пирса-Обухова.

Значения критериев указывают на удовлетворительную степень верификации модели. По всем трем алгоритмам расчета общая оправдываемость на сроки 08 и 12 ч. составила до 87,5 % (метод Годске); на расчетное время 24 ч общая оправдываемость уменьшается до 47–63 %. Оправдываемость прогноза отсутствия явления и предупрежденность факта наличия явления равная 100 % по методу NCEP свидетельствует об отсутствии неоправдавшихся прогнозов отсутствия явления. Наиболее низкие значения предупрежденности факта отсутствия явления с использованием критериев температуры и относительной влажности, предложенных NCEP, связаны с завышением числа случаев неоправдавшихся прогнозов наличия явления, когда явление прогнозировалось, но не наблюдалось. Таким образом, алгоритм NCEP «перестраховывается» и прогнозирует обледенение в большинстве рассмотренных дней и сроков. Это связано с используемым в методе достаточно широким диапазоном температуры и влажности ($-16°C \leq T \leq 0°C$ и $RH \geq 63\%$), способствующим обледенению. Данный диапазон является преобладающим в пограничном слое в холодном периоде года в районе исследования.

Таблица 1: Результаты оценки качества модельных прогнозов

	Алгоритм прогноза											
	Годске				Гидрометцентр				NCEP			
Заблаговременность, ч	2	6	12	18	2	6	12	18	2	6	12	18
Срок прогноза, ч ВСВ	08	12	18	24	08	12	18	24	08	12	18	24
Оправдываемость прогноза наличия явления	80	88,9	46,7	43,8	66,7	68	37,5	38,1	67,9	58,1	34,5	41,4
Оправдываемость прогноза отсутствия явления	75	85,7	76,5	0,5	80	85,7	75	0,7	100,0	100,0	66,7	90.0
Предупрежденность факта наличия явления	84,2	88,9	63,6	58,3	94,7	94,4	81,8	66,7	100,0	100,0	90,9	100,0
Предупрежденность факта отсутствия явления	69,2	85,7	81,3	55,0	30,8	42,9	28,6	35,0	30,8	7,1	9,5	15,0
Общая оправдываемость	78,1	87,5	62,5	56,3	68,8	71,9	46,9	46,9	71,9	59,4	37,5	46,9
Критерий надежности Н.А. Багрова	0,35	0,75	0,35	0,13	0,28	0,39	0,08	0,01	0,35	0,1	0,03	0,12
Критерий Пирси-Обухова	0,53	0,75	0,14	0,1	0,26	0,37	0,1	0,0	0,3	0,1	0,0	0,2

Оценка качества модели с применением критериев Багрова и Пирса-Обухова показала, что рассматри-

ваемые алгоритмы имеют практическую значимость для прогноза с заблаговременностью не более 6 часов. Полученные оценки качества прогнозов указывают на перспективность использования алгоритма Годске, тогда как методы Гидрометцентра и NCEP требуют уточнения коэффициентов и критериев для территории прогноза. Вместе с тем, оценка успешности модельных прогнозов напрямую зависит не только от успешности моделей (ПЛАВ и TSU-NM3), но и от количества и качества источников первичной информации (бортовой погоды). Очевидно, что увеличение количества источников информации о фактах обледенения будет способствовать повышению объективности оценки качества модели. Таким образом, методика прогноза обледенения воздушных судов на основе выходной продукции численной модели TSU-NM3 показала возможность ее практического применения в оперативной работе. Она может быть положена в основу регионального метода прогноза обледенения воздушных судов.

Заключение

Особенности сформированной базы данных позволили применить концепцию PP (Perfect Prognos Methods) статистической интерпретации результатов численного прогноза элементов погоды с учетом полученных в мировой практике статистических зависимостей (алгоритмов) для прогноза обледенения воздушных судов. В результате исследования рассмотренные алгоритмы были ранжированы по степени их успешности применения в статистической интерпретации. Наиболее перспективным алгоритмом для прогноза обледенения воздушных судов нами обоснован алгоритм К. Годске. В дискриминантной функции Гидрометцентра РФ требуется уточнение ее коэффициентов с учетом региональных особенностей. Алгоритм, предложенный NCEP (National Centers for Environmental Prediction, USA) и разработанный на основе применения количественных интервалов температуры воздуха и относительной влажности «перестраховывается» и прогнозирует обледенение в большинстве рассмотренных дней и сроков, что делает данный метод прогноза экономически не целесообразным. Используемый в алгоритме диапазон температуры и влажности ($-16°C \leq T \leq 0°C$ и $RH \geq 63\%$), способствующий обледенению и относящийся к общему случаю, может быть уточнен, исходя из вида облачности и уровня в пограничном слое [1].

Список литературы

[1] Шакина Н.П., Иванова А.Р. Прогнозирование метеорологических условий для авиации. М.: Триада ЛТД, 2016.

[2] Барашкова Н.К., Кижнер Л.И., Кужевская И.В. Атмосферные процессы: динамика, численный анализ, моделирование: Учебное пособие. Томск: Томский государственный университет, 2010.

[3] Руководство по прогнозированию метеорологических условий для авиации (ред. Абрамович К.Г., Васильев А.А.), Л.: Гидрометеоиздат, 1985.

[4] Schultz P., Politovich M. K. Toward the improvement of aircraft icing forecasts for the continental United States Weather and Forecasting. 1992. V. 7, iss. 9, P. 491–500.

[5] Tolstykh, M.A., “Semi-Lagrangian high-resolution atmospheric model for numerical weather prediction //Russian Meteorology and Hydrology. 2001. V. 4, P.1–9.

[6] Volkova M.A., Starchenko A.V., Kuzhevskaya I. V., Bart A.A., Kizhner L. I., Barashkova N. K. Forecast of icing zones using possibilities of hydrodynamic simulation for the atmospheric boundary layer // Proceedings of SPIE 10035, 22nd International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics, 1003567. 2016. doi: 10.1117/12.2249019

[7] Sitnikov G.I., Starchenko A.V., Terenteva M.V., Barashkova N.K., Volkova M.A., Kuzhevskaia I.V., Kizhner L.I. Forecast of extreme weather conditions that promote aircraft icing during take-off or landing // Proceedings of SPIE, 21nd International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics 2015. Vol. 9680, 96806T.

[8] Авиационные происшествия и инциденты за 2012-2015 // www.aviamettelecom.ru. 2015. URL: http:// www.aviamettelecom.ru (дата обращения: 10.06.2016).

[9] Collaboration for Australian Weather and Climate Research (CAWCR) // CAWCR. 2015. URL: http://www.cawcr.gov.au/projects/verification/ (дата обращения: 14.05.2016).

Марина Александровна Волкова — к.г.н., доцент кафедры метеорологии и климатологии Томского государственного университета;
e-mail: mv2101@mail.ru;
Надежда Константиновна Барашкова — к.г.н., доцент кафедры метеорологии и климатологии Томского государственного университета;
e-mail: nkbar@sibmail.com;
Ирина Валерьевна Кужевская — к.г.н., доцент кафедры метеорологии и климатологии Томского государственного университета;
e-mail: ivk@ggf.tsu.ru;
Любовь Ильинична Кижнер — к.г.н., доцент кафедры метеорологии и климатологии Томского государственного университета;
e-mail:kdm@mail.tsu.ru;
Александр Васильевич Старченко — д.ф.-м.н., декан Механико-математического факультета Томского государственного университета;
e-mail: starch@math.tsu.ru;
Андрей Андреевич Барт — к.ф.-м.н., доцент кафедры вычислительной математики и компьютерного моделирования Томского государственного университета;
e-mail: bart@math.tsu.ru.
Дата поступления — 22 мая 2017 г.

АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ ТОКА И ФОРМА ЯДРА ЧАСТИЦЫ В МЕТОДЕ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ

В. А. Вшивков, Е. А. Генрих

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.688

В работе рассматривается вопрос зависимости точности численного решения методом частиц в ячейках от формы модельных частиц и алгоритма расчета токов на примере решения задачи взаимодействия электронного пучка с плазмой. Реализовано несколько алгоритмов вычисления токов и несколько разных форм ядра модельных частиц.

Ключевые слова: уравнение Власова, уравнения Максвелла, метод частиц-в-ячейках, FDTD-схема, сетка Yee.

Введение

Метод частиц в ячейках, зарекомендовавший себя как удобный и простой инструмент для моделирования сложных нелинейных процессов, широко применяется при решении задач физики плазмы. Но численные шумы, являющиеся неотъемлемой частью метода частиц, способны приводить к развитию нефизических неустойчивостей, подавляющих физические процессы. Один из возможных путей решения данной проблемы — увеличение количества частиц. С развитием параллельных компьютерных технологий этот вариант становится более доступным. Но остается ряд задач, проблему шумов в которых сложно решить одним лишь увеличением вычислительных мощностей. Сюда относится в том числе и задача плазменно-пучкового взаимодействия в кинетической постановке, представляющая интерес для широкого круга приложений. Второй путь решения проблемы шумов — использование ядер частиц повышенной гладкости, схем более высокого порядка точности, использование методов адаптивного изменения количества и масс частиц и т. д. Это усложняет алгоритм, лишает метод частиц ряда его преимуществ и не всегда дает ощутимый результат. Поэтому актуальным является вопрос выбора оптимальных численных алгоритмов при решении конкретной задачи.

1 Основные уравнения

Бесстолкновительная высокотемпературная плазма описывается кинетическим уравнением Власова для функции распределения частиц и системой уравнений Максвелла для полей [1]:

$$\frac{\partial f_{i,e}}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f_{i,e}}{\partial \mathbf{r}} + q_{i,e}(\mathbf{E} + [\mathbf{v}, \mathbf{B}])\frac{\partial f_{i,e}}{\partial \mathbf{v}} = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \operatorname{rot}\mathbf{B} - \mathbf{j}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\operatorname{rot}\mathbf{E}, \tag{3}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = \rho, \tag{4}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{B} = \mathbf{0}. \tag{5}$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (код проекта 16-11-10028).

Индексами i и e помечены величины, относящиеся к ионам и электронам; $q_e = -1, \quad q_i = m_e/m_i$; $f_{i,e}(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ — функция распределения частиц; $m_{i,e}, \mathbf{p_{i,e}}, \mathbf{r_{i,e}}$ — масса, импульс, положение иона или электрона; $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$ — напряженности электрического и магнитного полей. Для перехода к безразмерному виду в качестве единиц использовались следующие базовые величины: скорость света $c = 3 \cdot 10^{10}$ см/с; масса электрона $m_e = 9,1 \cdot 10^{-28}$ г; плотность плазмы $n_0 = 10^{14}$ см $^{-3}$ время $t = \omega_{pe}^{-1}$, где плазменная электронная частота $\omega_{pe} = 5,6 \cdot 10^{11}\text{с}^{-1}$.

2 Используемые численные методы

Для решения системы уравнений (1)–(5) используем классическую схему метода частиц в ячейках для уравнения Власова в сочетании с FDTD-схемой решения уравнений Максвелла на сетке Yee [3]–[4]. Плазма представляется набором модельных частиц, которые имеют конечные размеры. Форма частицы задается функцией ядра $R(x)$. Наиболее часто используют модельные частицы в виде сплайнов. Сплайн 1-го порядка или линейная интеполяция дает частицу формы PIC

$$R(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{h}\left(1 - \dfrac{|x|}{h}\right), & |x| \le h, \\ 0, & |x| > h. \end{cases} \tag{6}$$

При использовании такой функции ядра частица раздает свои характеристики, такие как масса и заряд, в два соседних узла. Сплайн второго порядка — параболическое ядро частицы (Parab). Здесь задействовано уже три узла сетки. Также возможно использовать и другие симметричные (а в некоторых случаях и несимметричные) функции с конечным носителем. В общем виде в трехмерном случае симметричные ядра представляются в виде $R(x, y, z) = R(x)R(y)R(z)$.

Траектории движения частиц являются характеристиками уравнения Власова

$$\frac{d\mathbf{p_{i,e}}}{dt} = q_{i,e}(\mathbf{E} + [\mathbf{v}, \mathbf{B}]), \quad \frac{\mathbf{dr_{i,e}}}{\mathbf{dt}} = \mathbf{v_{i,e}}, \quad \mathbf{p_{i,e}} = \frac{\mathbf{v_{i,e}}}{\sqrt{\mathbf{1 - v_{i,e}^2}}}.$$

Для решения данной системы используется схема с перешагиванием

$$\frac{\mathbf{p}_\alpha^{m+1/2} - \mathbf{p}_\alpha^{m-1/2}}{\tau} = q_{i,e}\left(\mathbf{E}^m + \left[\frac{\mathbf{v}_\alpha^{m+1/2} + \mathbf{v}_\alpha^{m-1/2}}{2}, \mathbf{B}^m\right]\right),$$

$$\frac{\mathbf{r}_\alpha^{m+1} - \mathbf{r}_\alpha^{m}}{\tau} = \mathbf{v}_\alpha^{m+1/2}.$$

Здесь α — номер частицы.

Компоненты электрического и магнитного полей сдвинуты друг относительно друга на полшага и в трехмерной постановке задаются в следующих узлах

$$\begin{aligned} &\mathbf{B}^{m+1/2} = (B^1_{i+1/2,j,l}, B^2_{i,j+1/2,l}, B^3_{i,j,l+1/2})^{m+1/2}, \\ &\mathbf{E}^{m} = (E^1_{i,j+1/2,l+1/2}, E^2_{i+1/2,j,l+1/2}, E^3_{i+1/2,j+1/2,l})^{m}, \\ &\mathbf{j}^{m+1/2} = (j^1_{i,j+1/2,l+1/2}, j^2_{i+1/2,j,l+1/2}, j^3_{i+1/2,j+1/2,l})^{m+1}, \\ &\rho^m = \rho^m_{i+1/2,j+1/2,l+1/2}. \end{aligned}$$

Плотность заряда вычисляется по положениям частиц $\mathbf{r}_\alpha = (x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha)$

$$\rho^m_{i+1/2,j+1/2,l+1/2} = \sum_\alpha q_\alpha R(x_{i+1/2} - x_\alpha) R(y_{j+1/2} - y_\alpha) R(z_{l+1/2} - z_\alpha)). \tag{7}$$

Разностные операторы rot_h и div_h на такой сетке имеют следующий вид (в индексах опустим 1/2)

$$\mathrm{rot}_h \mathbf{H} = \left(\frac{H^3_{i,j,l} - H^3_{i,j-1,l}}{h_y} - \frac{H^2_{i,j,l} - H^2_{i,j,l-1}}{h_z}, \frac{H^1_{i,j,l} - H^1_{i,j,l-1}}{h_z} - \frac{H^3_{i,j,l} - H^3_{i-1,j,l}}{h_x}, \right.$$
$$\left. \frac{H^2_{i,j,l} - H^2_{i-1,j,l}}{h_x} - \frac{H^1_{i,j,l} - H^1_{i,j-1,l}}{h_y} \right),$$
$$\mathrm{div}_h \mathbf{H} = \frac{H^1_{i+1,j,l} - H^1_{i,j-1,l}}{h_x} + \frac{H^2_{i,j+1,l} - H^2_{i,j,l}}{h_y} + \frac{H^3_{i,j,l+1} - H^3_{i,j,l}}{h_z}.$$

FDTD-схема для уравнений Максвелла на сетке Yee имеет следующий вид

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{B}^{m+1/2} - \mathbf{B}^{m-1/2}}{\tau} &= -\mathrm{rot}_h \mathbf{E}^m, \\ \frac{\mathbf{E}^{m+1} - \mathbf{E}^m}{\tau} &= \mathrm{rot}_h \mathbf{B}^{m+1/2} - \mathbf{j}^{m+1/2}. \end{aligned} \tag{8}$$

Эта схема имеет порядок аппроксимации $O(\tau^2 + h^2)$.

3 Алгоритмы вычисления тока

В описанной схеме численно решаются только два уравнения из полной системы уравнений Максвелла. Известно, что если в начальный момент времени $\mathrm{div}_h \mathbf{B}^0 = 0$, а токи вычисляются таким образом, что выполнено уравнение неразрывности

$$\frac{\rho^{m+1} - \rho^m}{\tau} + \mathrm{div}_h \mathbf{j}^{m+1/2} = 0, \tag{9}$$

то разностные аналоги уравнений (4) и (5) выполняются в описанной схеме автоматически. Для того, чтобы удовлетворить этим условиям, необходимо либо токи вычислять согласованно, либо следить за накапливающейся ошибкой и вносить корректировки. Методы с корректировками в данной работе не рассматриваются. Рассмотрим наиболее часто используемые методы вычисления тока.

- Первым исторически возник самый простой в реализации алгоритм вычисления тока — **суммирование**. Здесь $\mathbf{j}^m_i = \sum_\alpha q_\alpha R(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_\alpha)$, i — номер узла сетки, α — номер частицы. Он не является согласованным, уравнение неразрывности не выполняется автоматически.

  Следующие алгоритмы основаны на идее вычисления тока по плотности из уравнения неразрывности.

- **Схема Виласенора — Бунемана** [5] — траектория частицы за шаг по времени считается прямой линией, которая разбивается границами ячеек. Считаются вклады в ток от каждого отрезка траектории. Алгоритм сложный, содержит операторы “if”, рассматривать его не будем.

- **Схема Зигзаг** [6]–[7] — траектория частицы разбивается на части границами ячейки. Считается, что траектория частицы — ломаная линия, проходящая из начального положения частицы в конечное через узлы сетки. В литературе выписаны явным образом формулы для вычисления компонент тока в двумерной и трехмерной постановке для частицы с формой ядра PIC. Недостаток метода — при желании использовать другую форму частицы, необходимо выводить формулы для нового ядра.

- **Схема Есиркепова** [8] — в двумерной постановке частица как бы разбивается на две части, которые двигаются по x и y каждая. Т.к. каждая частица двигантся только по одному направлению, вклад в ток считать легко. Основное преимущество этого метода заключается в том, что его легко адаптировать для ядер модельных частиц произвольной формы. Недостаток — по времени он более затратен, чем схема зигзаг, где формулы выписаны явным образом.

Схема Есиркепова с модельной частицей в форме PIC дает тот же результат, что и Схема зигзаг с PIC-ядром. Поэтому в тестовых расчетах Схема зигзаг не представлена отдельно. Проводится сравнение Схемы Изигрепова с PIC-ядром, параболическим ядром и суммирование с PIC и параболическим ядрами.

4 Результаты расчетов

В качестве теста рассматривается развитие плазменно-пучковой неустойчивости в трехмерной постановке. Расчетная область $x \in [0, L], \quad y, z \in [0, L_\perp]$. В начальный момент времени область заполнена водородной плазмой и электронами пучка. Частицы распределены по области равномерно, начальная средняя скорость пучка направлена по x и равна $v_0 = 0.2$. Задаются n_b — плотности пучка, $n_e = 1 - n_b$ — плотность электронов плазмы, температура пучка T_b и электронов плазмы T_e; температура ионов нулевая $T_i = 0$. Начальное распределение частиц по скоростям максвелловское с плотностью распределения

$$f(v) = \frac{1}{\Delta v\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(v - v_0)^2}{2\Delta v^2}\right).$$

Δv — разброс частиц по скоростям ($T_b = \Delta v^2$), v_0 — средняя скорость пучка. Средняя скорость ионов и электронов фона нулевая. Граничные условия по всем направлениям для всех функций периодические.

В расчетах моделируется развитие одной отдельно взятой неустойчивой моды в гидродинамическом режиме развития неустойчивости ($(k\Delta v \ll \gamma)$). Длина области в направлении x выбрана равной одной длине рассматриваемой плазменной волны, $L_y = L_z = L_\perp = 4h_x$. В область большого инкремента попадает только основная мода с $k_x = 2\pi/L$, $k_y = k_z = 0$. Эта волна и характеризующий ее инкремент γ и воспроизводятся в расчетах.

Физические параметры модели: отношение плотности пучка к плотности плазмы $n_b/n_0 = 2 \cdot 10^{-3}$, разброс электронов пучка по скоростям $\Delta v/v_0 = 0.035$, длина области $L = 1.2566$. При заданных параметрах величина аналитического значения инкремента на линейной стадии развития неустойчивости $\gamma = 0.0722$ [9]. Параметры численной модели: сетка по пространству 50x4x4, шаг по времени $\tau = 0.01$. lp число частиц в одной ячейке.

Обозначим sum_PIC и sum_Parab — Схема суммирования с соответствующими ядрами, j_PIC и j_Parab — Схема Есиркепова с соответствующими ядрами. Как показали расчеты при использовани Схемы суммирования (с числом модельных частиц $lp = 4...40$) величина ошибки выполнения уравнения неразрывности в норме $\mathbf{L}_2$ за все время расчета имеет порядок $\left\| \frac{\rho^{m+1} - \rho^m}{\tau} + \mathrm{div}_h \mathbf{j}^{m+1/2} \right\|_2 \sim 10^{15}$, в норме $\mathbf{L}_{max} \sim 10^{12}$, что в наших расчетах считается машинным нулем. Таким образом уровень ошибки как для схем с «выполнением уравнения неразрывности», так и для суммирования — на уровне счетной погрешности.

На рис. 1 показан темп роста энергии электрического поля и значение инкремента γ для $lp = 40$. Нас интересует только линейная стадия развития неустойчивости и значение максимума численного инкремента на ней. Численный инкремент получен по энергии электрического поля (W). На линейной стадии она нарастает по экспоненте, $W \propto e^{2\gamma t}$. Соответственно численный инкремент неустойчивости $\gamma = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\ln(W)$. На рисунке пунктирной линией показано аналитическое значение инкремента на линейной стадии развития неустойчивости. Видно, что счетный инкремент вначале не совпадает с аналитическим. Это связано с эффектом саморазогрева модельной плазмы. Далее счетный инкремент достигает величины близкой к аналитическому значению. После неустойчивость выходит из линейного режима, наступает стадия насыщения неустойчивости и инкремент, соответственно, уже не совпадает с инкрементом линейной стадии. Как было показано ранее в [10], уровень саморазогрева уменьшается с увеличением числа частиц и линейный инкремент все больше сходится к аналитическому. Там же освещены вопросы сходимости и достаточного количества частиц.

Из рисунка видно, что Схема суммирования с PIC-ядром дает значение инкремента схожее со Схемой Есиркепова с более сложным параболическим ядром. При этом график, полученный по Схеме суммирования более гладкий. Хуже всего показала Себя схема Есиркепова с PIC-ядром. Использование более гладких ядер для каждого из методов позволяет получать лучший результат. Таким образом можно заключить, что использование более сложного метода вычисления тока не дает преимуществ. Для получения большей точности в нашей задаче достаточно использовать для вычисления тока суммирование с более гладким ядром.

Заключение

Сравнение результатов, полученных с использованием Схемы суммирования и Схемы Есиркепова (с PIC и параболическим ядром) показало, что Схема суммирования с ядром низшего порядка дает такой же результат, как и Схема Есиркепова с ядром более высокого порядка. При этом Схема суммирования проста

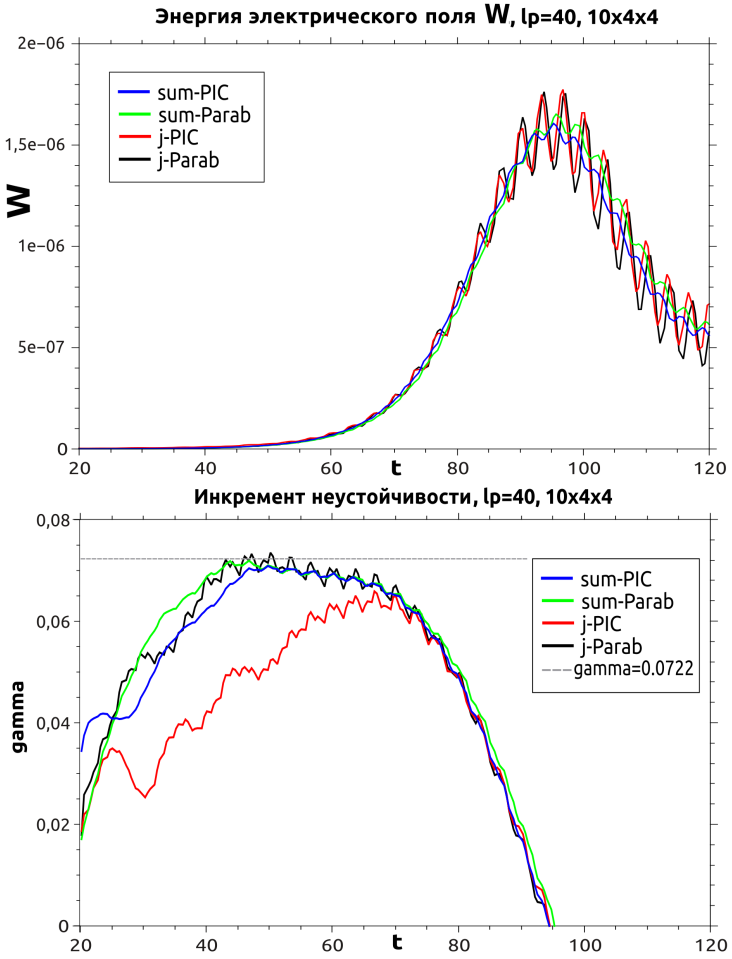


Рис. 1: Энергия электрического поля и инкремент пучковой неустойчивости в зависимости от времени. Сетка 50x4x4, lp=40.

в реализации, легко адаптируется под любую форму ядра частицы, экономит время вычислений, и на нашей задаче она с хорошей точностью удовлетворяет уравнению неразрывности. Таким образом нет необходимости усложнять алгоритм вычисления тока, достаточно использовать более простой метод и контролировать ошибку вычисления уравнения неразрывности.

Список литературы

[1] Кролл Н., Трайвелпис А. Основы физики плазмы. М.: Мир. 1975.

[2] Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А. Численные методы "частицы-в-ячейках". Новосибирск, Наука. 2000.

[3] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир. 1987.

[4] Kane Yee Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 1966. V. 14. iss. 3. P. 302–307.

[5] J.Villasenor, O.Buneman Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solver. // Computer Physics Communications 69 (1992) 306–316

[6] Вшивков В.А., Вшивков К.В., Дудникова Г.И. Алгоритмы решения задачи взаимодействия лазерного импульса с плазмой // Вычислительные технологии. 2001. Т. 6, № 2. С. 47–63.

[7] Umeda T., Omura Y., Tominaga T., Matsumoto H. A new charge conservation method in electromagnetic particle-in-cell simulations. // Computer Physics Communications. 2003. V. 156. P. 73–85.

[8] Esirkepov T.Zh. Exact charge conservation scheme for Particle-in-Cell simulations with an arbitrary form-factor.// Computer Physics Communications. 2001. V. 135. Iss. 2. P. 144–153.

[9] Лотов К.В., Тимофеев И.В. Переходный режим одномерной двухпотоковой неустойчивости // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2008. Т. 3, вып. 1. С. 62–65.

[10] Lotov K.V., Timofeev I.V., Mesyats E.A., Snytnikov A.V., Vshivkov V.A. Note on quantitatively correct simulations of the kinetic beam-plasma instability // Physics of Plasmas, AIP Publishing LLC 22, 024502. 2015.

Вшивков Виталий Андреевич — д.ф.-м.н., зав. лабораторией Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: vsh@ssd.sscc.ru;
Генрих Екатерина Александровна — к.ф.-м.н., научный сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: mesyats@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ ОПТИЧЕСКИХ ВИХРЕЙ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ПУЧКА СВЕТА ЧЕРЕЗ СЛОЙ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

Р. В. Галёв[1], А. Н. Кудрявцев[1,2], С. И. Трашкеев[3,4]

[1] *Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[3] *Институт лазерной физики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[4] *Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.63, 537.874, 537.876

В работе проведено численное моделирование прохождение пучка света через анизотропную жидкокристаллическую среду. Уравнения Максвелла решались методом FDTD на расчетных сетках, насчитывавших до $6 \cdot 10^8$ узлов. Моделировалось распространение основной моды HE_{11} волоконного световода через слой нематического жидкого кристалла, заполняющего поперечный зазор в оптоволокне и содержащий дисклинацию. Была изучена зависимость генерируемого углового момента от толщины слоя и силы дисклинации, найдены параметры системы, при которых генерация закрученных пучков света происходит наиболее эффективным образом.

Ключевые слова: жидкие кристаллы, угловой момент электромагнитного излучения, уравнения Максвелла, численное моделирование.

Введение

Получение, изучение и использование «оптических вихрей», то есть пучков света с винтовыми дислокациями волнового фронта является одним из наиболее быстро развивающихся направлений современной оптики [1]. Такие пучки, несущие в дополнение к обычному спиновому моменту фотонов также дополнительный орбитальный угловой момент, находят приложения в самых разнообразных областях науки и техники, от микроскопии и манипуляции микроскопическими объектами до повышения скорости передачи информации и обработки изображений астрономических объектов [2, 3].

Одним из эффективных методов генерации оптических вихрей может служить взаимодействие света с анизотропными, в частности жидкокристаллическими средами. Преимуществом использования жидкокристаллических сред является возможность динамического изменения параметров выходного пучка с помощью малых внешних электромагнитных, механических, тепловых и др. воздействий на жидкий кристалл [4]. Перспективной представляется разработка для этих целей миниатюрной интегральной волоконно-оптической системы, включающей нематический жидкий кристалл (НЖК),

Создание подобной системы и определение ее оптимальных параметров может быть существенно облегчено предварительным численным моделированием. Результаты такого численного моделирования, имевшего своей целью исследование того, как толщина слоя НЖК и особенности ориентационного порядка молекул НЖК внутри слоя влияют на угловой момент прошедшего через слой пучка лазерного излучения, и представлены в данной статье.

1 Интегральная волоконно-оптическая система

В настоящее время в Институте лазерной физики СО РАН проводятся экспериментальные исследования свойств волоконно-оптической системы (рис. 1). Между двумя торцами оптоволокна, разведенными на рас-

стояние $\Delta h = 10 \div 500$ мкм, помещен НЖК (NLC). По оптоволокну распространяется пучок излучения с длиной волны $\lambda = 1480$ нм от волоконного лазера с мощностью до 0.4 Вт. Измеряются характеристики излучения, прошедшего через слой НЖК.

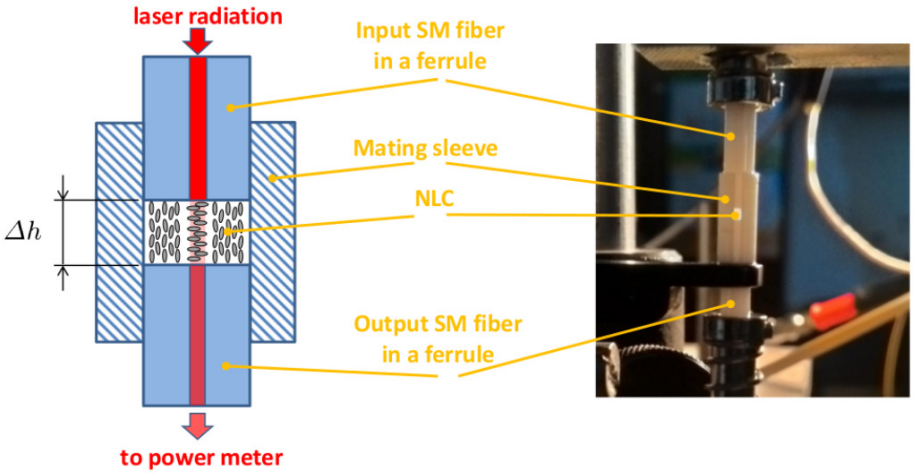


Рис. 1: Схема и внешний вид экспериментальной установки

2 Уравнения Максвелла для НЖК

Миниатюрные размеры системы, сравнимые с длиной волны электромагнитного излучения определяют необходимость моделирования на основе полных уравнений Максвелла. При численном моделировании интегрируются по времени уравнения

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H} - \mathbf{j}, \qquad \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}, \qquad \text{где} \quad \mathbf{D} = \hat{\varepsilon}\mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \hat{\mu}\mathbf{H}. \tag{1}$$

Рассматриваются немагнитные и непроводящие среды, в силу чего тензор магнитной проницаемости $\hat{\mu}$ является единичным, а вектор $\mathbf{j}$ обозначает стороннюю плотность тока, которая может быть использована в численном расчете для генерации падающего пучка электромагнитного излучения.

Анизотропные свойства НЖК при наиболее простом и распространенном подходе [5, 6] описываются директором $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{r})$ — единичным вектором, чье направление совпадает с преимущественной ориентацией молекул среды в данной точке. Директор определяется с точностью до знака, так что векторы $\mathbf{n}$ и $-\mathbf{n}$ отвечают одному и тому же ориентационному состоянию.

Диэлектрические свойства НЖК среды характеризуются двумя константами $\varepsilon_\parallel$, $\varepsilon_\perp$, диэлектрическими проницаемостями соответственно вдоль и поперек направления директора. Компоненты тензора диэлектрической проницаемости $\hat{\varepsilon}_{ij}$ выражаются через $\varepsilon_\parallel$, $\varepsilon_\perp$ и компоненты директора как

$$\hat{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon_\perp \delta_{ij} + (\varepsilon_\parallel - \varepsilon_\perp)\, n_i n_j. \tag{2}$$

В настоящей работе при моделировании пространственное распределение $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ и $\varepsilon_\parallel$, $\varepsilon_\perp$ полагаются известным. Предполагается также, что $\hat{\varepsilon}$ не зависит от $\mathbf{E}$, так что нелинейные эффекты отсутствуют. Очевидно, что это приближение справедливо, если интенсивность падающей волны не очень велика.

3 Поле директора и сила дисклинации

Направление директора на твердых стенках, ограничивающих объем НЖК, может быть задано путем соответствующей обработки стенок или с помощью другого внешнего воздействия. При этом поле директора внутри объема может включать особые точки, линии или поверхности, в которых направление вектора $\mathbf{n}$ не определено. Эти дефекты кристаллической структуры называются дисклинациями [5]. Поверхностные дисклинации, как привило, неустойчивы [6]. Линейные дисклинации, являющиеся широко распространенным

элементом ориентационной структуры НЖК, обязаны либо оканчиваться на стенках, либо представлять собой замкнутую линию. Поскольку противоположные направления директора отвечают одному и тому же ориентационному состоянию, то $\hat{\varepsilon}_{ij}(\mathbf{n}) = \hat{\varepsilon}_{ij}(-\mathbf{n})$, и вектор $\mathbf{n}$ при обходе замкнутого контура, охватывающего линейную дисклинацию, может совершать как целое, так и полуцелое число оборотов вокруг произвольной оси. Это число оборотов называется «силой дисклинации» s. Сила дисклинации s для конкретной линейной дисклинации не зависит от контура, охватывающего дисклинацию [5, 6] и является ее характеристикой.

Распределение вектора $\mathbf{n}$ вблизи линейной дисклинации должно удовлетворять условию минимума свободной энергии НЖК [6]. В плоскости Ω, перпендикулярной линейной дисклинации γ, полярный угол θ между радиус-вектором $\mathbf{r}$, проведенным из точки пересечения с дисклинацией O, и каким-нибудь выбранным на плоскости радиус-вектором $\mathbf{r}_0$, линейно связан с углом φ между директором $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ и радиус-вектором $\mathbf{r}_0$ (рис. 2):

$$\varphi = s \cdot \theta + \varphi_0. \tag{3}$$

Величина φ_0 значительно влияет на вид распределения $\mathbf{n}$, и, вообще говоря, может меняться при движении вдоль дисклинации. Примеры распределений $\mathbf{n}$ в плоскости Ω при некоторых значениях s, φ_0 представлены на рис. 3.

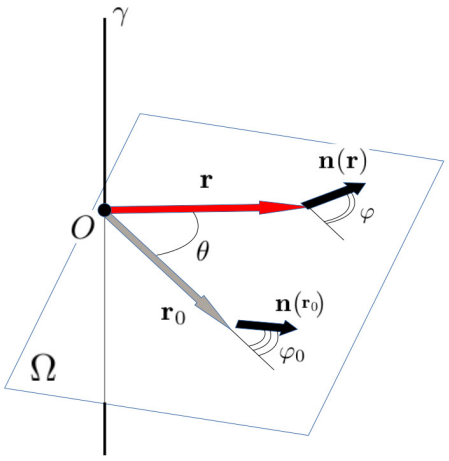


Рис. 2: Обозначения, используемые при описании поля директора

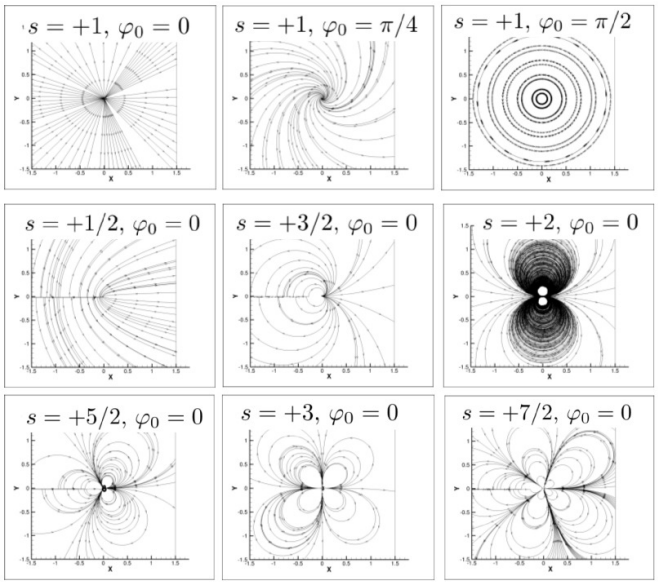


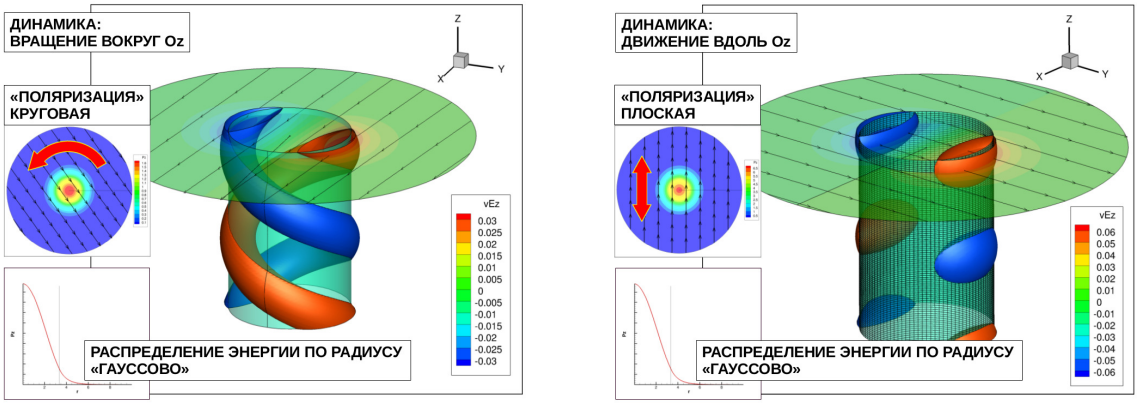
Рис. 3: Распределения директора в окрестности дисклинации при различных значениях s и φ_0

4 Угловой момент пучка электромагнитного излучения

Оптоволокно круглого сечения, используемое в экспериментальной волоконно-оптической системе (рис. 1), состоит из сердцевины и оболочки, имеющих различные показатели преломления. Аналитическое решение уравнений Максвелла, описывающее распределение и распространение электромагнитного поля в оптоволокне, представляется в виде дискретного набора собственных мод оптоволокна [7].

В соответствии с экспериментальными условиями, при моделировании, в качестве падающего пучка электромагнитного излучения, использовалась либо мода HE_{11} (рис. 4а), либо суперпозиция двух мод, отличающихся направлением вращения, $HE_{11} + HE_{-11}$ (рис. 4б).

Предметом исследования является момент импульса, который приобретает пучок лазерного излучения, проходя через слой анизотропной среды. Важность этой величины заключается в том, что при взаимодействии с материальной средой, в частности с малыми частицами, момент импульса может быть передан им, приводя к появлению действующего на них вращающего момента [8].



а) б)

Рис. 4: Мгновенное распределение E_z (изоповерхность), поле вектора Пойнтинга в поперечной плоскости и радиальное распределение средней по периоду плотности энергии для моды HE_{11} (а) и суммы двух мод с противоположным вращением $HE_{11}+HE_{-11}$ (б). Вертикальный цилиндр соответствует границе сердцевины оптоволокна

В работе вычисляется линейная плотность $l_z(z)$ для z-компоненты L_z момента импульса $\mathbf{L}$ электромагнитного поля пучка: $dL_z = l_z dz$. Она определяется формулой:

$$l_z(z) = \iint\limits_{-\infty}^{+\infty} [\mathbf{r} \times \mathbf{g}]_z \, dxdy = \iint\limits_{-\infty}^{+\infty} [xg_y - yg_x] \, dxdy, \tag{4}$$

где $\mathbf{g} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ — объемная плотность импульса поля.

В изотропной среде l_z не зависит от z в силу закона сохранения момента импульса. В анизотропной среде момент импульса электромагнитного поля не обязательно сохраняется, поскольку может происходить обмен угловым моментом между полем и средой.

5 Численный метод решения уравнений Максвелла и параметры расчетов

Для численного решения уравнений Максвелла (1) используется широко распространенный метод FDTD (Finite-Difference Time-Domain) [9]. FDTD представляет собой явную центральноразностную схему второго порядка точности на шахматной (разнесенной) сетке, в которой различные компоненты электромагнитного поля хранятся в различных точках вычислительного шаблона. Кроме того электрическое и магнитное поля определяются в различные моменты времени, разнесенные на половину временного шага Δt. Схема FDTD для наиболее общей анизотропной среды описан, например, в [10].

Входящий пучок лазерного излучения генерируется путем задания плотности стороннего тока $\mathbf{j}$ в некоторой плоскости. На границах вычислительной области ставятся неотражающие граничные условия, реализованные методом PML (Perfectly Matched Layer) [9].

Численный код распараллеливается с использованием геометрической декомпозиции расчетной области. Для передачи данных между узлами вычислительного кластера используется библиотека MPI (Message Passing Interface).

Выполнена серия расчетов взаимодействия пучка лазерного излучения, распространяющегося по оптоволокну со слоем НЖК толщины Δh, заполняющим цилиндрическую полость и содержащим линейную дисклинацию силы s, совпадающую с осью оптоволокна (рис. 5). Постоянными для всех расчетов остаются параметры оптоволокна и параметры НЖК (таб. 1, через λ обозначена длина волны в вакууме).

Каждый расчет отличается значением толщины слоя Δh, которая менялась в пределах от 0 до 10λ с шагом 0.2λ, силой дисклинации $s = 1 \div 7/2$, изменяемой с шагом $1/2$ при постоянной $\varphi_0 = 0$ (рис. 3) и видом входящего излучения: либо одна мода оптоволокна (рис. 4а), либо сумма двух мод (рис. 4б).

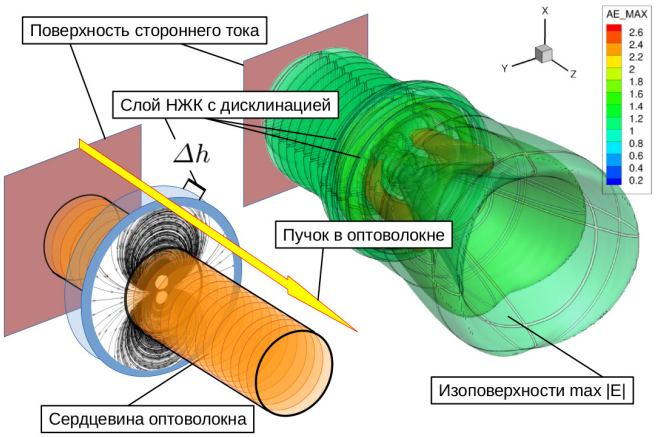


Рис. 5: Прохождение пучка лазерного излучения через слой НЖК

Таблица 1: Постоянные параметры расчетов

Величина	Значение
Диэлектрическая проницаемость сердцевины оптоволокна, ε_1	$= 2.1556$
Диэлектрическая проницаемость оболочки оптоволокна, ε_2	$= 2.1400$
Радиус сердцевины оптоволокна, a	$= 3.33\ \lambda$
Продольная диэлектрическая проницаемость НЖК, $\varepsilon_\parallel$	$= 2.8224$
Поперечная диэлектрическая проницаемость НЖК, $\varepsilon_\perp$	$= 2.2801$

Расчеты проводились на вычислительном кластере Новосибирского государственного университета. Пространственная сетка составляла $6 \cdot 10^8$ узлов. Использовалось 180 процессоров и 185 Гб оперативной памяти.

Отметим, что в работе [11] проводились численные расчеты взаимодействия гауссова пучка с НЖК в подобной геометрии, однако поведение углового момента излучения там не исследовалось.

6 Результаты расчетов

Расчеты показывают, что пучок электромагнитного излучения, проходя через слой НЖК с неоднородным полем ориентации, преобразуется достаточно сложным образом. Общим для различных случаев является то, что плотность излучения после взаимодействия с НЖК увеличивается на периферии, одновременно уменьшаясь вблизи оси (см. рис. 5).

Характеристики прошедшего пучка определялись в некоторой плоскости $z = z_0$, расположенной за полостью, на определенном расстоянии от нее. Вычислялось усредненное по периоду колебаний распределение вектора Пойнтинга $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = \mathrm{Re}[\hat{\mathbf{E}}^* \times \hat{\mathbf{H}}]/2$ в данной плоскости. Здесь $\hat{\mathbf{E}}$, $\hat{\mathbf{H}}$ — комплексные амплитуды гармонического по времени электромагнитного поля, звездочкой обозначена комплексно сопряженная величина. Вектор Пойнтинга в используемых нами безразмерных обозначениях, в которых скорость света в вакууме принята за единицу, численно совпадает с плотностью импульса электромагнитного поля $\mathbf{g}$. Полученное распределение использовалось для вычисления усредненной по времени линейной плотности углового момента $\langle l_z(z) \rangle$. Поскольку часть энергии излучения отражается от торцевых стенок полости, полученная линейная плотность нормировалась на поток энергии прошедшего излучения вдоль оси z. Таким образом, результирующей величиной являлась lp_z — усредненная по периоду колебаний линейая плотность момента импульса, приходящаяся на единицу переносимой энергии:

$$lp_z(z) = \iint\limits_{-\infty}^{+\infty} \left[x \langle S_y \rangle - y \langle S_x \rangle \right] dxdy \Big/ \iint\limits_{-\infty}^{+\infty} \langle S_z \rangle \, dxdy. \tag{5}$$

На рис. 6 показана зависимость $lp_z(z_0)$ от Δh для различных сил дисклинации s (каждая точка соответствует отдельному расчету). Величина lp_z для падающего пучка при этом равнялась 0.109.

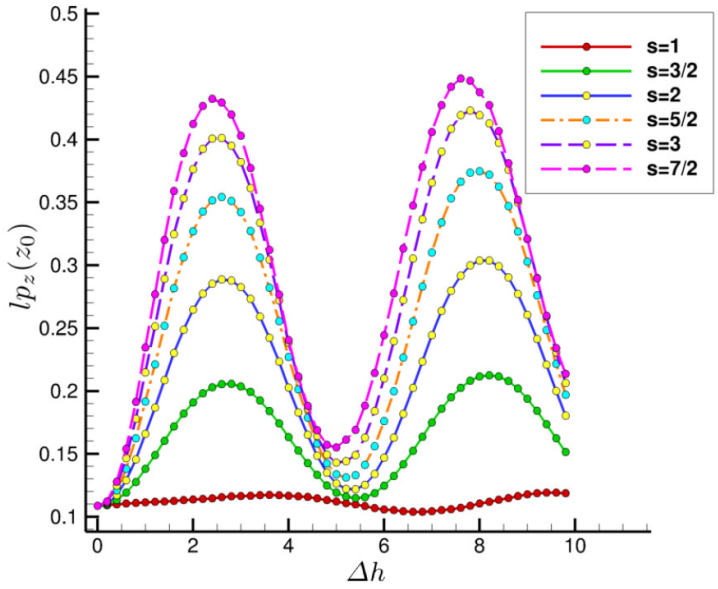


Рис. 6: Зависимость $lp_z(z_0)$ от Δh при входящем излучении в виде моды HE_{11}

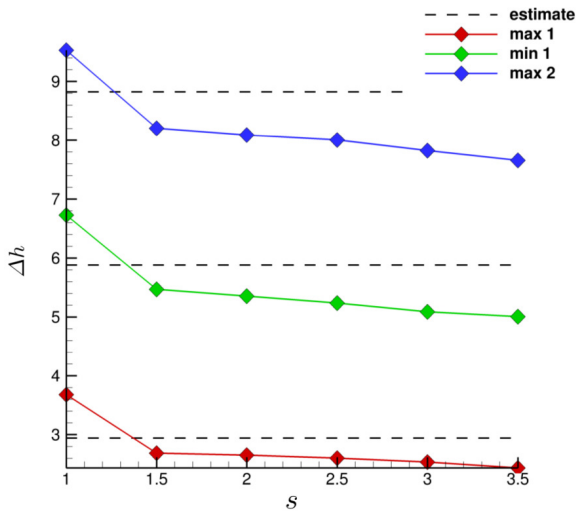


Рис. 7: Сравнение оценочных Δh с вычисленными Δh для экстремальных величин $lp_z(z_0)$ при различных s

Из рис. 6 видно, что величина приобретенного углового момента немонотонно зависит от толщины слоя НЖК. Зависимость содержит максимумы и минимумы, причем максимальное и минимальное значение lp_z могут отличаться в несколько раз. Величина максимумов растёт с увеличением силы дисклинации: в то время как при $s = 1$ величина lp_z может оказаться меньше исходной, при $s = 7/2$ ее максимальное значение превышает исходную величину примерно в 4 раза. Величина второго максимума оказывается несколько большей, чем величина первого. Это, вероятно, объясняется отмеченным выше эффектом перераспределения плотности излучения в пучке, приводящим к росту плотности на периферии пучка.

Толщины слоя НЖК, при которых наблюдаются максимумы и минимумы lp_z зависят от силы дисклинации — рис. 7. Расстояние между максимумами и минимумами может быть оценено аналитически, если пренебречь неоднородностью поля директора и считать НЖК просто пластиной из двоякопреломляющего материала, а падающий пучок заменить плоской волной. Это приводит к формуле

$$\delta h = \frac{\lambda/2}{\sqrt{\varepsilon_\parallel} - \sqrt{\varepsilon_\perp}} = 2.941\lambda. \tag{6}$$

Первый и второй максимумы соответствуют $\Delta h = \delta h$ и $3\,\delta h$, первый минимум — $\Delta h = 2\,\delta h$. Эти значения показаны на рис. 7 пунктирными линиями.

В случае, когда падающий пучок представлял суперпозицию двух мод с равным нулю суммарным угловым моментом, прохождение через слой НЖК не приводило к появлению ненулевого момента: величина lp_z в этом случае всюду оставалась равной нулю.

Заключение

Путем численного решения уравнений Максвелла было показано, что прохождение пучка лазерного излучения через слой НЖК, содержащий дисклинацию, может приводить к существенному увеличению углового момента электромагнитного излучения. Данный эффект может быть использован для получения пучков света с высокими значениями момента импульса («оптических вихрей»). При этом падающий пучок уже должен обладать отличным от нуля угловым моментом: появление момента у первоначально не закрученного пучка не наблюдалось (по крайней мере, в случае когда дисклинация совпадает с осью пучка). Величина

генерируемого углового момента растет с увеличением силы дисклинации. Зависимость углового момента пучка от толщины слоя НЖК имеет немонотонный характер, с почти периодическими минимумами и максимумами. Значения максимального и минимального генерируемого момента могут отличаться друг от друга в несколько раз.

Список литературы

[1] Franke-Arnold S., Allen L. Padgett M. Advances in optical angular momentum // Laser & Photon Rev. 2008. V. 2, No. 4. P. 299–313.

[2] Yao A. M., Padgett M. J. Orbital angular momentum: origins, behavior and applications // Adv. Opt. Photon. 2011. V. 3, iss. 2. P. 161–204.

[3] Ritsch-Marte M. Orbital angular momentum light in microscopy // Phil. Trans. R. Soc. A. 2017. V. 375. 20150437.

[4] Karimi E. , Piccirillo B., Nagali E., Marrucci L., and Santamato E. Efficient generation and sorting of orbital angular momentum eigenmodes of light by thermally tuned q-plates // Appl. Phys. Lett. 2009. V. 94. 231124.

[5] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. 5-е изд. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003.

[6] Де Жен П. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977.

[7] Никольский В.В., Никольская Т.И. Электродинамика и распространение радиоволн. 3-е изд. М.: Наука, 1989.

[8] Allen L., Beijersbergen M.W., Spreeuw R.J.C., and Woerdman J. P. Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre-Gaussian laser modes // Phys. Rev. A. 1992. V. 45, No. 11. P. 8185–8189.

[9] Taflove A., Johnson S.G., Oskooi A. Advances in FDTD Computational Electrodynamics: Photonics and Nanotechnology. Boston, MA et al.: Artech House, Inc., 2013.

[10] Schneider J. and Hudson S. The finite-difference time-domain method applied to anisotropic material // IEEE Trans. Antennas Propag. 1993. V. 41. P. 994–999.

[11] Čančula M., Ravnik M.,Žumer S. Generation of vector beams with liquid crystal disclination lines // Phys. Rev. E. 2014. V. 90. 022503.

Роман Владимирович Галёв — мл. науч.сотр. Института теоретической и прикладной механики им С. А. Христиановича СО РАН;
e-mail: galev@itam.nsc.ru;
Алексей Николаевич Кудрявцев — д.ф.-м.н., ст. науч. сотр. Института теоретической и прикладной механики им С. А. Христиановича СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: alex@itam.nsc.ru;
Сергей Иванович Трашкеев — к.ф.-м.н., ст. науч. сотр. Института лазерной физики СО РАН; Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН;
e-mail: sitrskv@mail.ru.
Дата поступления — 10 мая 2017 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУХФАЗНОЙ БЕСКОНЕЧНОЛИНЕЙНОЙ СИСТЕМЫ МАССОВОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ СЛУЧАЙНОГО ОБЪЕМА С ВХОДЯЩИМ ПРОСТЕЙШИМ ПОТОКОМ

А. А. Галилейская, Е. Ю. Лисовская

Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050, Томск

УДК 519.872

В работе рассматривается двухфазная система массового обслуживания с неограниченным числом приборов. Заявки поступают на первую фазу системы в соответствии с простейшим потоком, после завершения обслуживания на первой фазе каждая заявка переходит на вторую фазу. Каждая заявка имеет некоторый пакет данных (объем заявки). Время обслуживания не зависит от объема заявки. В работе получена характеристическая функция распределения вероятностей числа заявок на фазах и их суммарного объема.

Ключевые слова: двухфазная бесконечнолинейная система массового обсдуживания, требования случайного объема, простейший поток.

Введение

При моделировании работы современных технических систем, например, загрузки каналов передачи данных в сети [3], в качестве математической модели имеют применение системы массового обслуживания (СМО) требований случайного объема [1, 9].

СМО требований случайного объема так же позволяют решать задачи проектирования экономических и информационных процессов. В первых под объемом заявки понимаются денежные средства, которые клиент вносит на счет в банке. Во вторых объектом преобразования является информация, поступающая в виде сообщений случайного размера. Кроме того, задача исследования таких систем, как было замечено в работах [10, 11], играет важную роль при моделировании технических устройств, где необходимо рассчитать достаточный объем буфера для хранения данных.

В работах [6, 7] рассматривается СМО требований случайного объема вида $M/GI/\infty$. Для такой системы получена характеристическая функция двумерного распределения вероятностей числа заявок в системе и их суммарного объема.

Многофазные СМО [2] являются моделями, представляющими последовательную обработку заявок. Такая СМО представляет собой линейную последовательность из систем обслуживания, называемых фазами обслуживания.

Аналитические результаты для характеристик суммарного объема требований в многофазных системах ранее не были получены. Цель данной работы исследование суммарного объема требований на фазах в системе $M/(GI/\infty)^2$.

1 Постановка задачи

Рассмотрим двухфазную СМО с неограниченным числом приборов, на вход которой поступает простейший поток заявок с параметром λ. Предполагаем, что каждое требование характеризуется некоторым случайным объёмом $v > 0$, $G(y) = P\{v > y\}$ — функция распределения случайной величины v. Объемы различных

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-31-00292.

требований независимы. Продолжительность обслуживания заявок на первой фазе имеет произвольную функцию распределения, одинаковую для всех приборов, которую обозначим $B_1(x)$, и на второй фазе — $B_2(x)$. После обслуживания на первой фазе заявка с тем же объемом переходит на вторую фазу, после обслуживания на второй фазе заявка покидает систему и «уносит» с собой свой объем.

Пусть $i_k(t)$ — число заявок на k-ой фазе в момент времени t, $V_k(t)$ — суммарный объем заявок на k-ой фазе в момент времени t, где $k = 1, 2$ — номер фазы.

Поставим задачу нахождения характеристик четырехмерного случайного процесса $\{i_1(t), V_1(t), i_2(t), V_2(t)\}$. Отметим, что исследуемый процесс не является марковским. Поэтому для его исследования будем использовать метод динамического просеивания [8].

Изобразим три параллельных оси времени, пронумерованных от 0 до 2 (Рисунок 1). Ось под номером 0 будет отображать события входящего потока, ось под номером 1 будет соответствовать первому просеянному потоку, ось под номером 2 — второму. Пусть имеется набор функций $S_1(t)$, $S_2(t)$, значения которых лежат в диапазоне $[0, 1]$ и обладают свойством $S_1(t) + S_2(t) \leq 1$ для любых t.

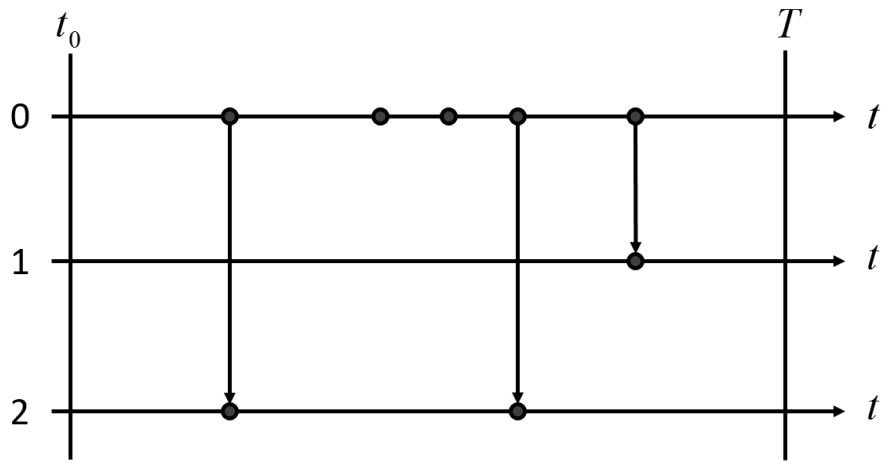


Рис. 1: Просеивание заявок входящего потока

Событие входящего потока может просеяться только на одну из осей 1 или 2. Вероятность того, что заявка входящего потока, поступившая в систему в момент времени $t > t_0$ к моменту времени T не закончит обслуживание на первой фазе, то есть просеется на ось 1 равна $S_1(t) = 1 - B_1(T - t)$. Вероятность того, что заявка входящего потока, поступившая в систему в момент времени $t > t_0$ к моменту времени T закончит обслуживание на первой фазе и не закончит на второй, то есть просеется на ось 2 равна $S_2(t) = B_1(T - t) - B_2^*(T - t)$, где $B_2^*(\tau) = (B_1 * B_2)(\tau)$ — свертка функций распределения $B_1(x)$, $B_2(x)$ длительности обслуживания на фазах системы. Причем заявка может не просеяться ни на одну из фаз с вероятностью $S_0(t) = 1 - S_1(t) - S_2(t)$, то есть к моменту времени T заявка закончит обслуживание на обеих фазах и покинет систему.

Обозначим через $n_k(t)$ — число событий, наступивших на k-ой оси просеянного потока до момента t, $W_k(t)$ — суммарный объем просеянных заявок на k-ю ось.

Как показано в [5], многомерное распределение вероятностей числа заявок на стадиях системы в момент времени T совпадает с многомерным распределением вероятностей числа просеянных заявок на соответствующие оси:

$$P\{i_1(T) = m_1, i_2(T) = m_2\} = P\{n_1(T) = m_1, n_2(T) = m_2\}$$

для любых $m_1, m_2 = 0, 1, 2, \ldots$. Нетрудно показать, что для исследуемого процесса $\{i_1(t), V_1(t), i_2(t), V_2(t)\}$ справедливо:

$$P\{i_1(T) = m_1, V_1(T) < z_1, i_2(T) = m_2, V_2(T) < z_2\} =$$
$$= P\{n_1(T) = m_1, W_1(T) < z_1, n_2(T) = m_2, W_2(T) < z_2\} \quad (1)$$

для любых $m_1, m_2 = 0, 1, 2, \ldots$ и $z_1, z_2 > 0$. Будем использовать равенство (1) для исследования процесса $\{i_1(t), V_1(t), i_2(t), V_2(t)\}$ с помощью исследования процесса $\{n_1(t), W_1(t), n_2(t), W_2(t)\}$.

2 Система дифференциальных уравнений Колмогорова

Введем обозначение для распределения вероятностей двумерного Марковского процесса $P(n_1, w_1, n_2, w_2, t) = P\{n_1(t) = n_1, W_1(t) < w_1, n_2(t) = n_2, W_2(t) < w_2\}$. Для этого распределения составим Δt-методом прямую систему дифференциальных уравнений Колмогорова. По формуле полной вероятности получим:

$$P(n_1, z_1, n_2, z_2, t + \Delta t) = P(n_1, z_1, n_2, z_2, t)(1 - \lambda\Delta t) + P(n_1, z_1, n_2, z_2, t)(1 - S_1(t) - S_2(t))$$
$$+\lambda\Delta t S_1(t) \int_0^{z_1} P(n_1 - 1, z_1 - y, n_2, z_2, t)\, dG(y) + \lambda\Delta t S_2(t) \int_0^{z_2} P(n_1, z_1, n_2 - 1, z_2 - y, t)\, dG(y) + o(\Delta t) \quad (2)$$

при этом будем считать, что

$$P(n_1, z_1, n_2, z_2, t_0) = \begin{cases} 1, & n_1 = z_1 = n_2 = z_2 = 0, \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Из (2) получаем систему дифференциальных уравнений Колмогорова

$$\frac{\partial P(n_1, z_1, n_2, z_2, t)}{\partial t} = \lambda \left[S_1(t) \left(\int_0^{z_1} P(n_1 - 1, z_1 - y, n_2, z_2, t)\, dG(y) - P(n_1, z_1, n_2, z_2, t) \right) + \right.$$
$$\left. + S_2(t) \left(\int_0^{z_2} P(n_1, z_1, n_2 - 1, z_2 - y, t)\, dG(y) - P(n_1, z_1, n_2, z_2, t) \right) \right]. \quad (3)$$

3 Характеристическая функция

Введем характеристическую функция вида:

$$h(u_1, \alpha_1, u_2, \alpha_2, t) = \sum_{n_1=0}^{\infty} e^{ju_1 n_1} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_1 z_1} \sum_{n_2=0}^{\infty} e^{ju_2 n_2} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_2 z_2} P(n_1, dz_1, n_2, dz_2, t),$$

где $j = \sqrt{-1}$.

Учитывая, что

$$e^{ju_1} \sum_{n_1=1}^{\infty} e^{ju_1(n_1-1)} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_1 y} e^{j\alpha_1(z_1-y)} \sum_{n_2=0}^{\infty} e^{ju_2 n_2} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_2 z_2} \int_0^{z_1} P(n_1 - 1, d(z_1 - y), n_2, dz_2)\, dG(y) =$$
$$= e^{ju_1} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_1 y} \sum_{n_1=1}^{\infty} e^{ju_1(n_1-1)} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_1(z_1-y)} \sum_{n_2=0}^{\infty} e^{ju_2 n_2} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_2 z_2} P(n_1 - 1, d(z_1 - y), n_2, dz_2)\, dG(y) =$$
$$= e^{ju_1} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_1 y} h(u_1, \alpha_1, u_2, \alpha_2, t)\, dG(y) = e^{ju_1} G^*(\alpha_1)\, h(u_1, \alpha_1, u_2, \alpha_2, t)$$

и

$$e^{ju_2} \sum_{n_1=0}^{\infty} e^{ju_1 n_1} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_1 z_1} \sum_{n_2=1}^{\infty} e^{ju_2(n_2-1)} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_2 y} e^{j\alpha_2(z_2-y)} \int_0^{z_2} P(n_1, dz_1, n_2 - 1, d(z_2 - y))\, dG(y) =$$
$$= e^{ju_2} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_2 y} \sum_{n_1=0}^{\infty} e^{ju_1 n_1} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_1 z_1} \sum_{n_2=1}^{\infty} e^{ju_2(n_2-1)} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_2(z_2-y)} P(n_1, dz_1, n_2 - 1, d(z_2 - y))\, dG(y) =$$
$$= e^{ju_2} \int_0^{\infty} e^{j\alpha_2 y} h(u_1, \alpha_1, u_2, \alpha_2, t)\, dG(y) = e^{ju_2} G^*(\alpha_2)\, h(u_1, \alpha_1, u_2, \alpha_2, t),$$

где

$$G^*(\alpha) = \int_0^\infty e^{j\alpha y} dG(y),$$

можно записать следующую систему уравнений:

$$\frac{\partial h(u_1, \alpha_1, u_2, \alpha_2, t)}{\partial t} = \lambda h(u_1, \alpha_1, u_2, \alpha_2, t) \left[S_1(t) \left(e^{ju_1} G^*(\alpha_1) - 1 \right) + S_2(t) \left(e^{ju_2} G^*(\alpha_2) - 1 \right) \right]. \quad (4)$$

Найдем решение диффиренциального уравнения (4):

$$\frac{dh(u_1, \alpha_1, u_2, \alpha_2, t)}{h(u_1, \alpha_1, u_2, \alpha_2, t)} = \lambda \left[S_1(t) \left(e^{ju_1} G^*(\alpha_1) - 1 \right) + S_2(t) \left(e^{ju_2} G^*(\alpha_2) - 1 \right) \right] dt,$$

очевидно, оно имеет вид:

$$h(u_1, \alpha_1, u_2, \alpha_2, t) = \exp \left\{ \lambda \left[\left(e^{ju_1} G^*(\alpha_1) - 1 \right) \int_{t_0}^{t} S_1(\tau) d\tau + \left(e^{ju_2} G^*(\alpha_2) - 1 \right) \int_{t_0}^{t} S_2(\tau) d\tau \right] \right\}.$$

Полагая $t = T$ и $t_0 \to -\infty$ для характеристической функции четырехмерного процесса $\{i_1(t), V_1(t), i_2(t), V_2(t)\}$ в стационарном режиме получим:

$$h(u_1, \alpha_1, u_2, \alpha_2) = \exp \left\{ \lambda \left[\left(e^{ju_1} G^*(\alpha_1) - 1 \right) b_1 + \left(e^{ju_2} G^*(\alpha_2) - 1 \right) b_2 \right] \right\},$$

где

$$b_1 = \int_0^\infty (1 - B_1(\tau)) d\tau,$$

$$b_2 = \int_0^\infty \left(B_1(\tau) - \int_0^\tau B_2(\tau - y) dB_1(y) \right) d\tau.$$

Аналогично, для двумерного процесса суммарного объема заявок на фазах $\{V_1(t), V_2(t)\}$ характеристическая функция распределения вероятностей в стационарном режиме имеет вид:

$$h(\alpha_1, \alpha_2) = \exp \left\{ \lambda b_1 (G^*(\alpha_1) - 1) + \lambda b_2 (G^*(\alpha_2) - 1) \right\},$$

которая совпадает с [4].

Заключение

В работе рассмотрена двухфазная система массового обслуживания с неограниченным числом приборов на фазах. Заявки поступают на первую фазу системы в соответствии с простейшим потоком, после завершения обслуживания на первой фазе каждая заявка переходит на вторую фазу. Каждая заявка имеет некоторый пакет данных (объем заявки). Время обслуживания не зависит от объема заявки. В работе получена характеристическая функция распределения вероятностей числа заявок на фазах и их суммарного объема.

Список литературы

[1] Morozov E.V., Potakhina L.V. Speed-Up estimation of a system with random volume customers // Распределенные компьютерные и телекоммуникационные сети: управление, вычисление, связь (DCCN-2016) материалы Девятнадцатой международной научной конференции: в 3 томах. Под общей редакцией В.М. Вишневского и К.Е. Самуйлова. 2016. С. 334–336.

[2] Reich E. Waiting Times When Queues are in Tandem // Annals of Mathematical Statistics. 1957. V. 28, Iss. 3, P. 768–773.

[3] Вихрова О.Г., Сопин Э.С. Анализ показателей качества сети LTE с помощью систем массового обслуживания с ограниченным ресурсом и случайными требованиями // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2015. Т. 2. № 11. С. 185–191.

[4] Галилейская А.А. Характеристическая функция распределения вероятностей суммарного объема заявок в двухфазной системе массового обслуживания с простейшим входящим потоком // Материалы 55-й Международной научной студенческой конференции МНСК-2017: Математика / Новосиб. гос. ун-т. – Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2017. с. 105.

[5] Грачев В.В., Моисеев А.Н., Назаров А.А., Ямпольский В.З. Многофазная модель массового обслуживания системы распределенной обработки данных // Доклады Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники. 2012. Т. 2. № 2 (26). С. 248–251.

[6] Лисовская Е.Ю. Характеристическая функция распределения вероятностей суммарного объема заявок в системе $M/GI/\infty$ // Материалы 54-й Международной научной студенческой конференции МНСК-2016 Новосибирский государственный университет. 2016. С. 108.

[7] Лисовская Е.Ю., Моисеева С.П. Исследование суммарного объема требований в бесконечнолинейной системе массового обслуживания вида $M/GI/\infty$ // Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем материалы Всероссийской конференции с международным участием. Российский университет дружбы народов. 2016. С. 28–30.

[8] Моисеев А.Н., Назаров А.А. Бесконечнолинейные системы и сети массового обслуживания. Томск: Изд-во НТЛ, 2015.

[9] Наумов В.А., Самуйлов К.Е., Самуйлов А.К. О суммарном объеме ресурсов, занимаемых обслуживаемыми заявками // Автоматика и телемеханика. 2016. № 8. С. 125–132.

[10] Тихоненко О.М. Моделирование процессов и систем обработки информации : курс лекций. Минск : БГУ, 2008.

[11] Тихоненко О.М Системы обслуживании требований случайной длины с ограничениями // Автоматика и телемеханика., 1991, № 10, С. 126–134.

Анастасия Александровна Галилейская — студент Национальноого исследовательского Томского государственного университета;
e-mail: lusta.nastya@mail.ru;
Екатерина Юрьевна Лисовская — аспирант Национальноого исследовательского Томского государственного университета;
e-mail: ekaterina_lisovs@mail.ru.
Дата поступления — 12 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛЯНИЯ ТОРМОЗНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ПОГЛОЩЕНИЕ АЛЬФВЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ ДИССИПАТИВНОЙ ПЛАЗМОЙ

М. Б. Гавриков, А. А. Таюрский

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 125047, Москва

УДК 533.95

В работе рассмотрена задача о затухании альфвеновской волны, падающей на границу с диссипативной плазмой. В качестве диссипаций учитывались гидродинамические вязкости и теплопроводности электронов и ионов, магнитная вязкость, релаксация температур, потери на тормозное излучение. Поскольку, как показали исследования, затухание происходит на длинах порядка скиновых, на которых МГД уравнения не применимы, то в основу исследований положены уравнения двухжидкостной электромагнитной гидродинамики с полным учётом инерции электронов. Была предложена неявная разностная схема численного расчёта плоских течений двухжидкостной плазмы. Проведённые исследования позволили установить зависимость затухания от частоты альфвеновской волны и электронной теплопроводности и вязкости. Выполненные исследования учитывали как тормозное, так и синхротронное излучение. Обнаружены квазистационарный режим затухания альфвеновской волны диссипативной плазмой и эффект запирания альфвеновской волны в диссипативной плазме.

Ключевые слова: электромагнитная гидродинамика, альфвеновская волна, вязкость и теплопроводность электронов и ионов, тормозное излучение.

Введение

Как известно [1], магнитогидродинамическая плазма допускает поперечные синусоидальные колебания, распространяющиеся вдоль магнитного поля, в которых термодинамические параметры и продольные компоненты векторных величин не возмущаются. Такие волны впервые, в 1942 г., были обнаружены Х. Альфвеном и названы альфвеновскими. Принципиально важно, что альфвеновские волны конечной амплитуды являются точными решениями уравнений классической магнитной гидродинамики (МГД) [2], что позволяет детально изучить их трансформацию вследствие различных физических факторов — диссипаций, неоднородностей плазмы и т.д.

Приложением альфвеновских волн, побудившим настоящее исследование, является предложенный в [3] механизм разогрева солнечной короны до температуры в несколько миллионов градусов как результата затухания в плазме солнечной короны альфвеновских волн, генерируемых в нижних значительно более холодных солнечных слоях. В этой связи в настоящей работе изучается механизм нелинейного пространственного поглощения альфвеновских волн вследствие плазменных диссипаций (омическое сопротивление плазмы, гидродинамические вязкости и теплопроводности электронов и ионов, обмен энергией между плазменными компонентами) с учётом тормозного излучения плазмы на базе численного решения уравнений гидродинамики электронов и ионов — уравнений Брагинского [4, 5] — в предположении квазинейтральности плазмы. В этом случае уравнения Брагинского замыкаются усечённой системой уравнений электродинамики Максвелла для квазистационарного электромагнитного поля, а полученная система уравнений плазмодинамики редуцируется [6, 7, 8] без потери математического и физического содержания к одножидкостной форме — уравнениям электромагнитной гидродинамики (ЭМГД).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 15-01-03085, 16-31-00302).

Задача о нелинейном пространственном поглощении плоской альфвеновской волны диссипативной плазмой без учёта тормозного излучения была рассмотрена авторами в [9], где было установлено, что в данном исследовании плазму можно считать несжимаемой, что позволяет использовать упрощённые уравнения несжимаемой ЭМГД.

Как показали исследования, синхротронное излучения незначительно влияет на поглощение альфвеновской волны по сравнению с тормозным излучением, поэтому, главным образом, учитывались потери вследствие тормозного излучения.

1 Система ЭМГД-уравнений

Для несжимаемой плазмы ЭМГД-система имеет вид:

$$\begin{gathered}
\mathrm{div}\mathbf{U}=0,\quad \rho=\mathrm{const},\quad \frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t}+\frac{1}{\rho}\mathrm{Div}\Pi=\frac{1}{\rho}\mathrm{Div}\mathrm{P},\\
\mathbf{E}+\frac{c^2\lambda_+\lambda_-}{4\pi\rho}\mathrm{rotrot}\mathbf{E}=\frac{\mathbf{j}}{\sigma}-\frac{1}{c}[\mathbf{U},\mathbf{H}]+\frac{1}{\rho}\mathrm{Div}\mathrm{W},\\
\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{H}}{\partial t}+\mathrm{rot}\mathbf{E}=0,\quad \mathrm{div}\mathbf{E}=0,\quad \mathbf{j}=\frac{c}{4\pi}\mathrm{rot}\mathbf{H},\quad \mathrm{div}\mathbf{H}=0,
\end{gathered}\tag{1}$$

где тензоры плотности потока импульса Π, вязких напряжений P и "холловских слагаемых" W имеют вид:

$$\begin{gathered}
\Pi=\Pi^h+\Pi^p+\Pi^c,\quad \mathrm{P}=\Pi_*^{(c)}+\Pi^{(U)}\\
\mathrm{W}=(\lambda_--\lambda_+)(\Pi^p+\Pi^c)+(\lambda_-p_+-\lambda_+\mathrm{p}_-)\mathrm{I}_3+\lambda_+\lambda_-(\mathbf{jU}+\mathbf{Uj})-\Pi_*^{(U)}-\Pi^{(c)}\\
\Pi^h=\rho\mathbf{UU}+p_\Sigma\mathrm{I}_3,\ \Pi^p=\frac{H^2}{8\pi}\mathrm{I}_3-\frac{\mathbf{HH}}{4\pi},\ \Pi^c=\lambda_+\lambda_-\frac{\mathbf{jj}}{\rho}
\end{gathered}\tag{2}$$

Здесь и ниже индексы $\pm$ относятся к параметрам ионов и электронов, $\lambda_\pm=m_\pm/e_\pm$, $\lambda_\Sigma=\lambda_++\lambda_-$, $p_\Sigma=p_++p_-$, $m_\Sigma=m_++m_-$, $\rho=\rho_++\rho_-$, $\mathbf{U}=(\rho_+\mathbf{v}_++\rho_-\mathbf{v}_-)/\rho$, I_3 — единичный трёхмерный тензор, σ — проводимость плазмы. Тензоры вязких напряжений с учётом несжимаемости плазмы равны:

$$\Pi^{(U)}=2\mu_\Sigma\mathrm{D}^U,\ \Pi_*^{(U)}=2\mu_*\mathrm{D}^U,\ \Pi^{(c)}=2\mu^*\mathrm{D}^c,\ \Pi_*^{(c)}=2\mu_*\mathrm{D}^c,\ \Pi_\pm=2\mu_\pm\mathrm{D}_\pm,\tag{3}$$

где $\mathrm{D}^U=\mathrm{def}\mathbf{U}$, $\mathrm{D}^c=\mathrm{def}(\mathbf{j}/\rho)$, $\mathrm{D}_\pm=\mathrm{def}\mathbf{v}_\pm$ — тензоры деформаций, $\mu_\Sigma=\mu_++\mu_-$, $\mu_*=\lambda_-\mu_+-\lambda_+\mu_-$, $\mu^*=\lambda_-^2\mu_++\lambda_+^2\mu_-$, $\mu_\pm$ — гидродинамические вязкости электронов и ионов. При этом вторые вязкости электронов и ионов считаются равными нулю.

По решению системы (1)–(3) гидродинамические параметры электронов и ионов вычисляются через ρ, $\mathbf{U}$, $\mathbf{j}$ по формулам:

$$\mathbf{v}_\pm=\mathbf{U}\pm\frac{\lambda_\mp}{\rho}\mathbf{j},\ \rho_\pm=\frac{\lambda_\pm}{\lambda_\Sigma}\rho\tag{4}$$

Уравнения для температур [10]

$$\rho_\pm c_p^\pm\left[\frac{\partial T_\pm}{\partial t}+\mathrm{div}T_\pm\mathbf{v}_\pm\right]=\mathrm{div}\left(\chi_\pm\nabla T_\pm\right)+\mathrm{tr}\left(\Pi_\pm\mathrm{D}_\pm\right)+\frac{m_\mp}{m_\Sigma}\frac{j^2}{\sigma}\pm b\left(T_--T_+\right)-p_T^\pm,\tag{5}$$

где $c_p=T\left(\partial S/\partial T\right)_p$ — теплоёмкость при постоянном давлении, $\chi_\pm$ — теплопроводности электронов и ионов, $Q=\pm b\left(T_--T_+\right)$ — тепло, передаваемое компонентами плазмы друг другу при упругих столкновениях, $p_T^\pm$ — потери на тормозное излучение электронов и ионов. Для идеального политропного газа с общим показателем адиабаты γ имеем $c_p=k/((\gamma-1)m)=\mathrm{const}$, где k — постоянная Больцмана, m — масса частицы газа. Именно этим случаем мы ниже ограничимся, считая $c_p^\pm=k/\left((\gamma-1)\,m_\pm\right)$.

С учётом зависимостей σ, $\mu_\pm$, $\chi_\pm$, b, $p_T^\pm$ от остальных параметров плазмы, прежде всего температур $T_\pm$, приводимых ниже, уравнения (1)–(5) дают замкнутую определённую систему уравнений относительно величин $p_\pm$, $T_\pm$, $\mathbf{U}$, $\mathbf{H}$, $\mathbf{E}$.

Коэффициенты переноса $\mu_\pm$, $\chi_\pm$, σ, b содержатся в [9].

Тормозное излучение вычислялось по формулам [11, 12]: $p_T^+ = 0$,

$$p_T^- = p_T = \frac{32\sqrt{\pi}}{3^{3/2}} (\alpha a_0)^3 \frac{m_e e^4}{\hbar^3} E_H \left(\frac{kT_e}{E_H}\right)^{1/2} Z^2 n_i n_e \ \left(\text{Вт}/\text{см}^3\right),$$

где $\alpha = e^2/(\hbar c)$, $a_0 = r_0/\alpha^2$, $r_0 = \dfrac{e^2}{m_e c^2}$ — классический электронный радиус, $E_H = \dfrac{e^2}{2a_0}$, $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-27}$эрг $\cdot$ сек — постоянная Планка, $k = 1.38 \cdot 10^{-16}$эрг/$^\circ K$ — постоянная Больцмана. Отсюда имеем:

$$p_T = \frac{32\sqrt{\pi}}{3^{3/2}} 10^7 \cdot \frac{e^6}{c^3 m_e^{3/2} \hbar} \sqrt{kT_e} Z^2 n_i n_e \ \left(\frac{\text{эрг}}{\text{сек} \cdot \text{см}^3}\right),$$

где T_e измеряется в $^\circ K$, а n_i, n_e в см$^{-3}$.

2 Альфвеновские волны в ЭМГД

В бездиссипативном случае с учётом плоской геометрии плоские альфвеновские волны являются точными решениями ЭМГД-уравнений. В [9] было показано, что в указанном случае ЭМГД-уравнения имеют точные решения вида:

$$U_\perp = u(t)e^{i\kappa x},\ H_\perp = h(t)e^{i\kappa x},\ E_\perp = e(t)e^{i\kappa x},\ T_\pm = \text{const},\ \rho = \text{const},\ \mathrm{U}_x = 0$$

где $\kappa > 0$ — произвольное и использованы комплексные обозначения $U_\perp = U_y + iU_z$, $H_\perp = H_y + iH_z$, $E_\perp = E_y + iE_z$. При этом $H_x = \text{const}$, а $e(t)$ выражается в явном виде через $u(t)$ и $h(t)$:

$$e(t) = \left(\frac{iH_x}{c}u(t) + \frac{i\kappa\Lambda \mathrm{v}_A}{\omega_p}h(t)\right) \Big/ \left(1 + r^2\right), \quad r = \frac{\kappa c}{\omega_p}, \quad \Lambda = \sqrt{\frac{\lambda_+}{\lambda_-}} - \sqrt{\frac{\lambda_-}{\lambda_+}}, \quad \mathrm{v}_A = \frac{H_x}{\sqrt{4\pi\rho}}.$$

Функции $u(t)$, $h(t)$ имеют вид:

$$u(t) = C_1 e^{i\omega_+ t} + C_2 e^{i\omega_- t}, \quad h(t) = \frac{(4\pi\rho)^{1/2}}{\kappa \mathrm{v}_A}\{C_1\omega_+ e^{i\omega_+ t} + C_2\omega_- e^{i\omega_- t}\}.$$

Здесь $\omega_p = (4\pi\rho)^{1/2} (\lambda_+\lambda_-)^{-1/2}$ — плазменная частота, а C_1, C_2 — произвольные комплексные константы. Поперечная компонента плотности тока $j_\perp = j_y + ij_z$ также изменяется по закону $j_\perp = j(t)e^{i\kappa x}$, а $j_x = 0$, где $j(t) = -\dfrac{\kappa c}{4\pi}h(t)$. Наконец,

$$\omega_\pm = \omega_\pm(\kappa) = \frac{\kappa \mathrm{v}_A}{2}\left\{\frac{r\Lambda}{1+r^2} \pm \left[\frac{r^2\Lambda^2}{(1+r^2)^2} + \frac{4}{1+r^2}\right]^{1/2}\right\}.$$

Когда κ меняется от 0 до $+\infty$ частоты $\omega_\pm(\kappa)$ изменяются в диапазоне $-\omega_c^+ < \omega < \omega_c^-$ для $H_x > 0$ и $-\omega_c^- < \omega < \omega_c^+$ для $H_x < 0$. В длинноволновом пределе $r \le 1$ имеем $\omega_\pm(\kappa) \sim \pm\kappa \mathrm{v}_A$ и полученное решение переходит в классическую альфвеновскую волну.

3 Постановка задачи о пространственном поглощении

Пусть плоская альфвеновская волна, бегущая слева направо в области $x < 0$, набегает на границу $x = 0$ диссипативной плазмы, заполняющей полупространство $x > 0$. Дальнейшее распространение альфвеновской волны в области $x > 0$ сопряжено с её поглощением, которое и является предметом изучения. Ниже рассматривается случай $H_x < 0$. Плазма в области $x > 0$ считается замагниченной, покоящейся, однородной и изотермической. Таким образом, в начальный момент времени в области $x > 0$ имеем:

$$U_\perp|_{t=0} = 0, \quad U_x|_{t=0} = 0, \quad T_\pm|_{t=0} = T^0, \quad \rho|_{t=0} = \text{const}, \quad H_\perp|_{t=0} = 0,$$

где константа ρ и продольное магнитное поле $H_x = \text{const}$ такие же, как и в области $x < 0$, откуда набегает альфвеновская волна.

Значения параметров диссипативной плазмы на границе $x = 0$ совпадают со значениями на границе $x = 0$ параметров альфвеновской волны. На бесконечности параметры диссипативной плазмы совпадают с параметрами невозмущённой плазмы.

Запишем систему (1)–(5) в безразмерном виде в случае плоской симметрии ($\partial/\partial y = \partial/\partial z = 0$), используя обозначения $U = U_\perp = U_y + iU_z$, $H = H_\perp = H_y + iH_z$, $E = E_\perp = E_y + iE_z$, $j = j_\perp = j_y + ij_z$

$$\rho\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(H_x H - \mu_\Sigma\frac{\partial U}{\partial x} - \xi\mu_*\frac{\partial}{\partial x}\frac{j}{\rho}\right) = 0,$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} + i\frac{\partial E}{\partial x} = 0, \quad j = i\frac{\partial H}{\partial x},$$

$$E - \frac{\xi^2}{\rho}\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = \xi\zeta\frac{j}{\sigma} + iH_x U + \frac{\xi}{\rho}\frac{\partial}{\partial x}\left[\Lambda H_x H - \mu_*\frac{\partial U}{\partial x} - \xi\mu^*\frac{\partial}{\partial x}\frac{j}{\rho}\right],$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial T_+}{\partial t} &= \frac{2Z(\gamma-1)}{\rho}\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(\chi_+\frac{\partial T_+}{\partial x}\right) + \frac{m_-}{m_\Sigma}\frac{\xi\zeta}{\sigma}|j|^2 + \frac{\zeta}{\xi}C_0\rho^2\frac{T_- - T_+}{T_-^{3/2}} + \right.\\ &\left. + \frac{T_+^{5/2}}{R_+}\left[\left|\frac{\partial U}{\partial x}\right|^2 + \frac{\lambda_-}{\lambda_+}\frac{\xi^2}{\rho^2}\left|\frac{\partial j}{\partial x}\right|^2 + 2\frac{\xi}{\rho}\sqrt{\frac{\lambda_-}{\lambda_+}}\mathrm{Re}\left(\frac{\partial U}{\partial x}\overline{\frac{\partial j}{\partial x}}\right)\right]\right\},\end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial T_-}{\partial t} &= \frac{2(\gamma-1)}{\rho}\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(\chi_-\frac{\partial T_-}{\partial x}\right) + \frac{m_+}{m_\Sigma}\frac{\xi\zeta}{\sigma}|j|^2 + \frac{\zeta}{\xi}C_0\rho^2\frac{T_+ - T_-}{T_-^{3/2}} + \right.\\ &\left. + \frac{T_-^{5/2}}{R_-}\left[\left|\frac{\partial U}{\partial x}\right|^2 + \frac{\lambda_+}{\lambda_-}\frac{\xi^2}{\rho^2}\left|\frac{\partial j}{\partial x}\right|^2 - 2\frac{\xi}{\rho}\sqrt{\frac{\lambda_+}{\lambda_-}}\mathrm{Re}\left(\frac{\partial U}{\partial x}\overline{\frac{\partial j}{\partial x}}\right)\right]\right\} - \frac{\xi_T}{\xi}(\gamma-1)Z^2\rho T_-^{1/2},\end{aligned}$$

где формулы для μ_Σ, μ_*, μ^*, σ, $\chi_\pm$ содержатся в [9]. Наконец, ξ, ζ, ξ_T — числа подобия, равные

$$\xi = \frac{\ell_c}{L_0} = \frac{c\sqrt{\lambda_+\lambda_-}}{\sqrt{4\pi\rho_0}L_0}, \quad \zeta = \frac{(4\pi\rho_0)^{5/2}}{H_0^4}\cdot\frac{ce^3}{m_i^2}LZ^3\left(1 + Z\frac{m_e}{m_i}\right)^{-3/2},$$

$$\xi_T = \frac{\rho_0^{3/2}}{H_0^2}\frac{10^7 e^5}{c^2\hbar m_i m_e}\frac{64\sqrt{\pi}}{3^{3/2}}\left(1 + Z\frac{m_e}{m_i}\right)^{-3/2},$$

где $\ell_c = c/\omega_p$ — скиновая длина, L_0, ρ_0, H_0 и т.д. — характерные масштабы длины, плотности, напряжённости магнитного поля и т.д. При обезразмеривании считалось $t_0 = L_0/\mathrm{v}_0$, $\mathrm{v}_0 = \mathrm{v}_A = H_0/\sqrt{4\pi\rho_0}$, $E_0 = \mathrm{v}_0 H_0/c$, $j_0 = cH_0/(4\pi L_0)$, $T_0 = v_A^2\lambda_\Sigma e/(2k)$.

Итак, требуется решить начально-краевую задачу для системы (6) на полупрямой $x \geq 0$ с безразмерным начальным условием

$$U|_{t=0} = 0, \quad H|_{t=0} = 0, \quad E|_{t=0} = 0, \quad T_\pm|_{t=0} = T^0, \quad x \geq 0, \tag{7}$$

а при $x = 0$ и $x = +\infty$ безразмерными краевыми условиями:

$$U|_{x=0} = U_0 e^{i\omega t}, \quad H|_{x=0} = \frac{\rho U_0\omega}{\kappa H_x}e^{i\omega t}, \quad j|_{x=0} = -\frac{\rho U_0\omega}{H_x}e^{i\omega t},$$

$$E|_{x=0} = \frac{iU_0}{1+\kappa^2\xi^2}\left(H_x + \xi\Lambda\omega\right)e^{i\omega t} = \frac{iU_0}{H_x}\left(H_x^2 + H_x\Lambda\xi\omega - \xi^2\omega^2\right)e^{i\omega t}, \tag{8}$$

$$U|_{x=+\infty} = 0, \quad H|_{x=+\infty} = 0, \quad E|_{x=+\infty} = 0, \quad j|_{x=+\infty} = 0, \quad T_\pm|_{x=+\infty} = T^0,$$

В безразмерном виде зависимость волнового числа от частоты представляется следующим образом

$$\kappa = \kappa(\omega) = \frac{|\omega|\sqrt{\rho}}{\sqrt{H_x^2 + H_x\Lambda\xi\omega - \xi^2\omega^2}}.$$

4 Численный метод решения задачи о пространственном поглощении

Рассмотрим неявную разностную схему численного решения задачи (6)–(8). Счётная область — отрезок $[0, L]$ с достаточно большим L, в котором выбраны две сетки узлов $x_\kappa = \kappa h$, $0 \le \kappa \le N$, $x_{\kappa+1/2} = (\kappa + 1/2)h$, $0 \le \kappa < N$, $h = L/N$. В целых узлах аппроксимируются величины j, U, E, в дробных — H, $T_\pm$. Переход с нижнего на верхний временной слой $T^0_\pm$, U^0, $H^0 \to T^1_\pm$, U^1, H^1 за время τ, $t \to t + \tau$, реализуется неявной разностной схемой, указанной в [9] с дополнением членов для тормозного излучения

$$p^+_{T,k+1/2} = 0, \quad p^-_{T,k+1/2} = \frac{\xi_T}{\xi}(\gamma - 1)\rho \left(T^0_{-,\kappa+1/2}\right)^{1/2}, \quad 0 \le k < N.$$

Шаг τ выбирается из условия устойчивости

$$\tau = kh/U_{\text{эфф}}, \quad U_{\text{эфф}} = \max_{0 \le \kappa < N} \left(\left| H^0_{\kappa+1/2} \right|^2 /\rho + T^0_{+,\kappa+1/2} + T^0_{-,\kappa+1/2} \right)^{1/2},$$

где $0 < k < 1$ — коэффициент запаса, подбираемый экспериментально.

5 Результаты

Ниже приведены некоторые результаты расчётов для $\rho_0 = 10^{-12}$ г/см^3, $H_0 = 1$ Гс, $Z = 1$, тогда $\zeta = 3 \cdot 10^3$, $\xi_T = 3$, скиновая длина $\ell_c = c/\omega_p \approx 1$ см. Учитывая мелкомасштабные процессы поглощения полагаем $L_0 = \ell_c$, тогда $\xi = 1$. Для указанных параметров фоновой диссипативной плазмы альфвеновская скорость $\mathrm{v}_A = H_0/\sqrt{4\pi\rho_0} = 2.8 \cdot 10^5$ см/сек, $t_0 = L_0/\mathrm{v}_A = c\sqrt{\lambda_+\lambda_-}/H_0 = 3.45 \cdot 10^{-6}$ сек, $T_0 \approx 10^3\ ^\circ K$.

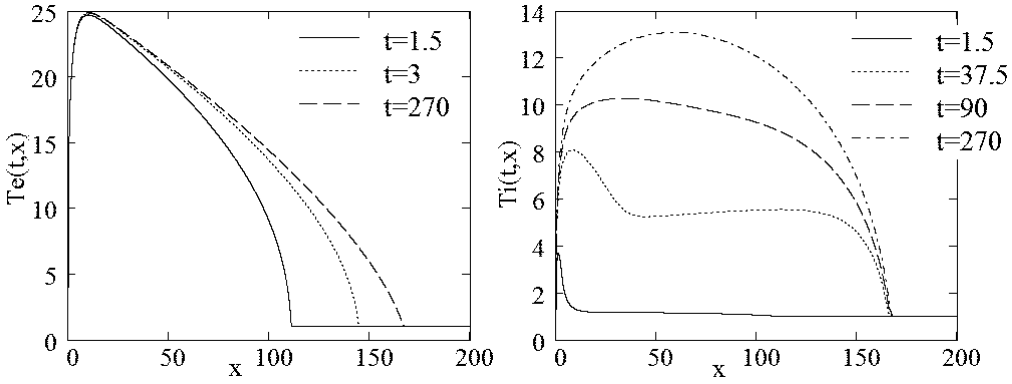


Рис. 1: Распределение температур электронов и ионов в различные моменты времени для амплитуды $U_0 = 1$

Заключение

На основе проведённых расчётов можно отметить два эффекта. Во-первых, это эффект запирания альфвеновской волны в конечной области, дальше которой проникновения не происходит (Рис. 1). При этом факт конечности области запирания обусловлен двухжидкостной механикой плазмы и тесно связанной с ней возможностью учёта мелкомасштабной, порядка скиновой длины ℓ_c, динамики. Область может быть увеличена за счёт увеличения амплитуды альфвеновской волны U_0, а также ослаблении тормозного облучения. Во-вторых, параметры поглощаемой альфвеновской волны с течением времени выходят на квазистационарный режим, что означает установление со временем профилей температур $T_\pm$ электронов и ионов и амплитуд электромагнитного поля и поперечной скорости (Рис. 2). Из полученных результатов можно сделать вывод, что плазму солнечной короны можно разогреть до нескольких миллионов градусов за счёт поглощения альфвеновских волн, падающих на её границу. Степень разогрева зависит от амплитуды падающей волны и параметров солнечной короны.

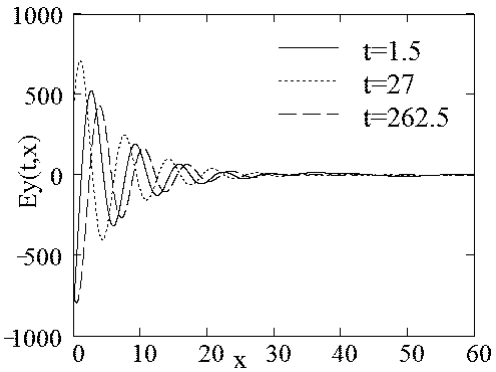


Рис. 2: Распределение напряжённости электрического поля в различные моменты времени для амплитуды $U_0 = 1$

Список литературы

[1] Альфвен Х. Космическая электродинамика. — М.: ИЛ, 1952.

[2] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. — М.: Наука, 1982.

[3] Scott W. McIntosh, Bart Pe Pontien, Marts Carlsson, Viggo Hansteen, Paul Boerner & Marsel Goossens. Alfvenic waves with sufficient energy to power the quiet solar corona and fast solar wind // Nature, 2011, v. 475, p. 478–480.

[4] Брагинский С.И. Явления переноса в плазме / Вопросы теории плазмы. Под ред. М.А. Леонтовича. — М.: Госатомиздат, 1963, вып. 1, с. 183–272.

[5] Днестровский Ю.Н., Костомаров Д.П. Математическое моделирование плазмы — М.: Наука, 1993, 336 с.

[6] Гавриков М.Б. Основные уравнения двухжидкостной магнитной гидродинамики. Ч. I. Препринт №59, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2006, 28 с.

[7] Гавриков М.Б., Таюрский А.А. Влияние инерции электронов на течение несжимаемой плазмы в плоском канале // Математическое моделирование, 2012, т. 24, № 9, с. 79–96.

[8] M.B. Gavrikov and A.A. Taiurskii, Electron inertia effect on incompressible plasma flow in a planar channel, J. Plasma Phys. (2015), vol. 81, 495810506, doi:10.1017/S0022377815000720.

[9] Гавриков М.Б., Таюрский А.А Пространственное нелинейное затухание альфвеновских волн в диссипативной плазме // Математическое моделирование, 2013, т. 25, № 8, с. 65–79.

[10] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.6. Гидродинамика. — М.: Наука, 1986.

[11] Грим Г. Процессы излучения в плазме / В сб. Основы физики плазмы. Т. 1 — М.: Энергоатомиздат, 1983, 641 с.

[12] Чукбар К.В. Лекции по явлениям переноса в плазме: Учебное пособие / — Долгопрудный: Издательский дом “Интеллект”, 2008. — 256 с.

Михаил Борисович Гавриков — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН;
e-mail: mbgavrikov@yandex.ru;
Алексей Александрович Таюрский — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН;
e-mail: tayurskiy2001@mail.ru.
Дата поступления — 29 мая 2017 г.

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ГЕОФИЗИЧЕСКОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ

А. В. Глазунов[1,2], Е. В. Мортиков[2,1], В. Н. Лыкосов[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики РАН, 119991, Москва*

[2] *Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ имени М.В. Ломоносова, 119234, Москва*

УДК 551.511.61

Представлены вычислительные технологии расчета турбулентных течений в пограничных слоях атмосферы и океана, основанные на двух подходах: прямом численном моделировании и вихреразрешающем моделировании. Модели разработаны в Институте вычислительной математики РАН и Научно-исследовательском вычислительном центре МГУ имени М.В. Ломоносова, основаны на оригинальных методах численного решения уравнений гидродинамики и на новых подходах к построению "подсеточных" замыканий. Они имеют эффективную параллельную реализацию, позволяющую использовать гетерогенную архитектуру современных суперкомпьютеров. Демонстрируются результаты по решению ряда задач, иллюстрирующих применение разработанных моделей и направленных на уточнение существующих и на построение перспективных параметризаций турбулентных процессов в моделях крупномасштабной циркуляции атмосферы и океана.
Ключевые слова: Турбулентность в атмосфере, прямое численное моделирование, DNS, вихреразрешающее моделирование, LES, лагранжев перенос частиц, параллельные вычисления.

Введение

Подходы к численному моделированию турбулентности обычно обобщают в три группы, различающиеся по степени детализации вихрей, описываемых явным образом: 1) DNS-модели (прямое численное моделирование — решение дискретного аналога дифференциальных уравнений Навье–Стокса); 2) LES-модели (вихреразрешающее моделирование — относительно крупные вихри воспроизводятся явно, а влияние мелкомасштабной турбулентности учитывается параметрически); 3) RANS-модели (модели, основанные на Рейнольдсовском осреднении всей вихревой динамики).

Современные суперкомпьютеры позволяют интегрировать гидродинамические модели с количеством узлов сетки, достигающим величины 10^9–10^{11}. Это дает возможность при помощи DNS-моделей рассчитывать простые турбулентные течения при очень больших числах Рейнольдса (см., например, [8]). Однако, упомянутые расчеты требуют огромного количества вычислительных ресурсов и могут использоваться только как дополнительный инструмент для изучения турбулентности в пограничных слоях атмосферы и океана.

Геофизические задачи по расчету турбулентности в областях сложной формы имеют свою специфику, связанную с меньшими требованиями к детализации геометрии объектов, но с повышенными требованиями к корректному учету влияния стратификации и эффектов вращения Земли. Кроме того, эти задачи характеризуются необходимостью получения обобщающих статистических закономерностей, что требует продолжительных и массовых расчетов. Предпочтительными оказываются LES-модели, обладающие меньшей точностью воспроизведения турбулентной динамики, но позволяющие параметрически учитывать свойства подстилающей поверхности, включающие в себя описание процессов конденсации и испарения влаги и модели радиационных притоков тепла.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 15-05-03911 и 16-05-01094; разработка численных моделей и расчеты переноса лагранжевых частиц (раздел 2.1)) и Российского научного фонда (номер гранта 17-17-01210; новые расчеты турбулентности при больших числах Ричардсона (раздел 1.1) и моделирование движения льда в стратифицированной жидкости (раздел 1.2)).

DNS- и LES- модели используются для совместных расчетов эйлеровой динамики течения и траекторий лагранжевых частиц (см., например, [10] и обзор современной литературы по данной теме в этой статье). Отдельную задачу требующую модификации лагранжевых подсеточных моделей составляет перенос тяжелых частиц, обладающих инерцией и взаимодействующих с турбулентным течением.

В Институте вычислительной математики РАН и Научно-исследовательском вычислительном центре МГУ имени М.В. Ломоносова разработаны следующие численные модели:
1. DNS-модель [5, 6]. Преимуществами данной модели являются: эффективная реализация на современных вычислительных системах, включающая возможность расчетов с применением GPU; использование метода погруженной границы для моделирования обтекания объектов на регулярных сетках; возможность моделирования стратифицированных турбулентных течений и течений в непериодической расчетной области.
2. LES-модель ИВМ РАН [1]. В данной модели используется смешанное локализованное динамическое замыкание для «подсеточной/подфильтровой» турбулентности и численная схема высокого порядка точности. Такое сочетание схемы и замыкания повышает эффективное пространственное разрешение модели и позволяет достоверно воспроизводить статистики мелкомасштабной турбулентности при различных режимах стратификации в АПС (см. [1, 2, 3]). Модель содержит блок расчета траекторий лагранжевых частиц [13].
Ниже приводится краткое описание этих моделей и демонстрируются примеры их применения для исследования свойств геофизической турбулентности.

1 Прямое численное моделирование

В DNS модели рассматривается полная система уравнений Навье–Стокса в приближении Буссинеска, которая дополняется уравнениями переноса скалярных величин (температуры, солености). Уравнение движения в безразмерном виде представляются следующим образом:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re}\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + F_i^e, \qquad \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \tag{1}$$

где u_i — компоненты вектора скорости, p — давление, F_i^e представляет собой сумму внешних сил (например, силы Кориолиса и силы плавучести).

Численный метод решения системы уравнений (1) основан на использовании консервативных конечно-разностных схем 2-го и 4-го порядка точности для пространственной дискретизации на прямоугольных сетках. Для повышения локального разрешения допускается измельчение шага сетки вдоль каждой из координат. Для аппроксимации по времени используется явная схема Адамса–Башфорта 2-го порядка. При численном решении уравнения Пуассона применяется стабилизированный метод бисопряженных градиентов и геометрический многосеточный метод с V циклом в качестве предобуславливателя. Метод погруженной границы [4] для задания граничных условий на криволинейных и подвижных границах не требует покрытия области криволинейными сетками или введения координатных преобразований и позволяет рассматривать задачи в областях со сложной геометрией при дискретизации уравнений на ортогональных сетках простой структуры. Программная реализация модели основана на трехмерной пространственной декомпозиции области и использовании функций библиотек MPI-OpenMP для распараллеливания вычислений и организации обменов. Допускается выполнение расчетов на графических процессорах с помощью технологии CUDA [5]. Сочетание численных методов и эффективность их программной реализации позволяет моделировать течения при больших числах Рейнольдса.

1.1 Моделирование течения Куэтта при устойчивой стратификации

Параметризации турбулентных процессов в устойчиво стратифицированных пограничных слоях атмосферы и океана, как правило, подразумевают наличие критического градиентного числа Ричардсона Ri_g, при котором турбулентность и перемешивание подавляются, что согласуется с оценками в рамках линейной теории устойчивости Майлса. Вместе с тем, данные натурных измерений, лабораторные исследования и результаты численного моделирования свидетельствуют о том, что турбулентность может поддерживаться в сдвиговых течениях даже в условиях сильной стратификации [15]. Режим “слабой” сверхкритической турбулентности характеризуется линейной зависимостью турбулентного числа Прандтля Pr_τ от Ri_g. Механизмы подавления или поддержания турбулентности при сильно устойчивой стратификации могут быть изучены при помощи DNS-моделирования.

Были проведены расчеты турбулентного устойчиво-стратифицированного течения Куэтта с числами Рейнольдса $\mathrm{Re} = U_0 H/\nu$, лежащими в диапазоне от $\mathrm{Re} = 5.2 \times 10^3$ до $\mathrm{Re} = 10^5$ (здесь: U_0 - разница скоростей между стенками, H - высота канала). Наиболее подробная сетка состояла из ~ 200 млн. ячеек, а в расчетах было задействовано до 2048 процессорных ядер суперкомпьютеров МСЦ РАН и СКЦ МГУ. Балковое число Ричардсона $\mathrm{Ri} = g\frac{T_2-T_1}{T_1}\frac{H}{U_0^2}$, где T_1, T_2 — температура на нижней и верхней стенках канала, последовательно увеличивалось вплоть до ламинаризации потока по достижении некоторого $\mathrm{Ri} = \mathrm{Ri}_c(\mathrm{Re})$. В расчетах были получены реализации турбулентного режима при сильной устойчивости (при $\mathrm{Ri}_g(z = H/2) \sim 0.2$). Такую турбулентность удалось воспроизвести за счет увеличения поперечного размера расчетной области. При этом, течение характеризуется выраженной перемежаемостью (см. рис. 1, на котором видны турбулентные и ламинарные подобласти). Структура течения связана с формированием вторичных циркуляций (см. рис. 1б, где они изображены схематически на фоне средней поперечной компоненты скорости). Поперечный размер этих циркуляций увеличивается с усилением устойчивости. Представленнные вычисления показывают, что турбулентность может поддерживаться при бóльших значениях числа Ri, чем это считалось раннее (см. DNS-расчеты [9], в которых при маленьком размере вычислительной области блокируется формирование вторичных вихрей и, как следствие, не происходит последующего перехода к перемежаемому режиму). На рисунке 1(в,г) приведена зависимость Ri_g и Pr_τ от балкового числа Ричардсона при числе

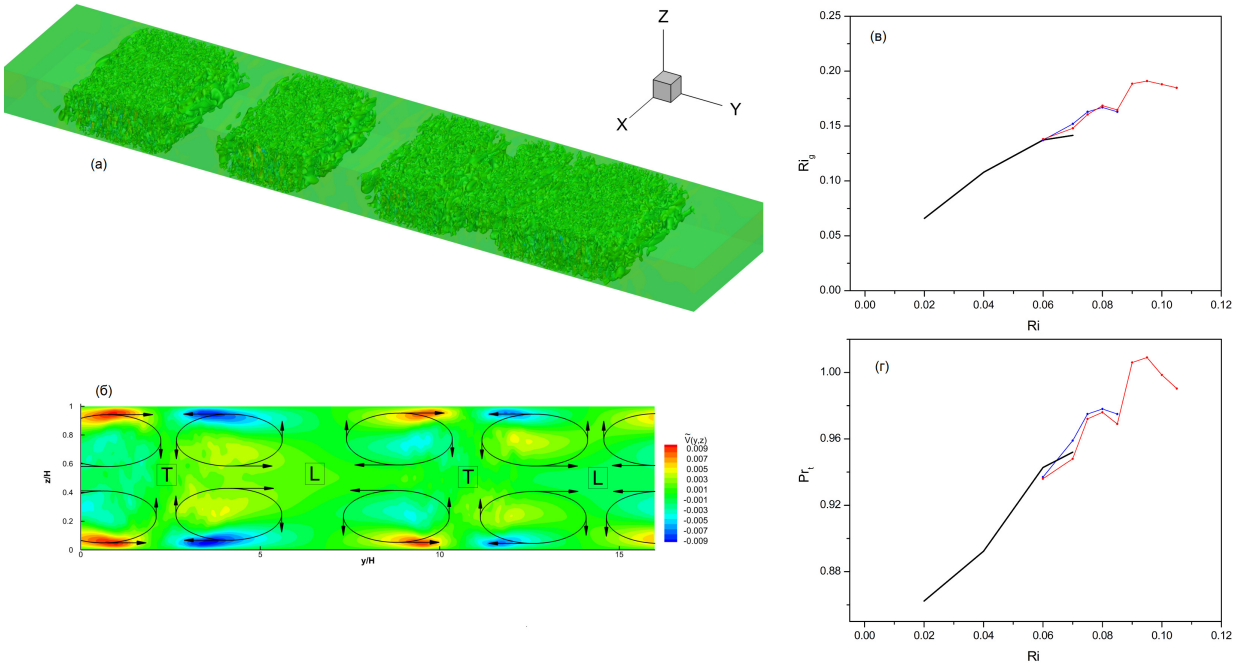


Рис. 1: (а) изоповерхности мгновенной вертикальной компоненты скорости; (б) осредненная поперечная компонента скорости $\tilde{v}(y,z)$: L — область ламинарного течения, T — область турбулентного течения; (в, г) зависимость Ri_g и Pr_τ от балкового числа Ричардсона при $\mathrm{Re} = 2 \times 10^4$ и последовательном увеличении поперечного размера области.

Рейнольдса $\mathrm{Re} = 2 \times 10^4$. Увеличение размера области и, как следствие, явное воспроизведение крупномасштабных вторичных циркуляций, позволяет поддерживать турбулентность даже при относительно малых числах Рейнольдса.

1.2 Моделирование движения льда в стратифицированной жидкости

В районах интенсивного торошения льда в Арктике пространственная частота подводных ледяных килей, имеющих глубину 5–10 метров, может достигать значений до 10–15 килей на километр. Эти кили создают существенное сопротивление дрейфу льда, что необходимо учитывать при построении крупномасштабных численных моделей циркуляции океана в полярных регионах. Ряд параметризаций сопротивления формы торосов (например, [14]) учитывает влияние следа, формируемого килями, расположенными вверх по течению. Однако, в таких параметризациях среда считается однородной и влияние волновых процессов на

сопротивление льда не учитывается. В работе [6] проведено прямое численное моделирование движения одиночного ледяного киля в однородной и стратифицированной жидкости. Установлена общая форма зависимости силы сопротивления от числа Фруда Fr, содержащая выраженные точки максимума и минимума. Показано, что стратификация существенно влияет, как на силу сопротивления, так и на структуру течения вблизи препятствия. Максимум силы сопротивления при движении киля связан с генерацией стационарного (относительно тороса) волнового возмущения, подавляющего отрыв потока.

В настоящей работе рассматривается движение группы ледяных килей в однородной и стратифицированной жидкости при последовательном увеличении расстояния между торосами. Показано, что в стратифицированной и однородной жидкостях эффекты затенения потока близлежащими ледяными килями существенно отличаются между собой. В частности, значимые изменения в структуре потока и величине силы сопротивления наблюдаются при условиях по числу Фруда (Fr ~ 0.6), соответствующих локальному максимуму силы сопротивления в экспериментах для одиночного тороса. На временах $T \sim L/U_0$ (где U_0 — скорость движения льда, L — расстояние между килями) для торосов, вниз по течению от которых расположено препятствие в виде следующего ледяного киля, образование турбулентной струи блокируется, а волновое возмущение подавляется. Данный эффект приводит к резкому уменьшению силы сопротивления до значений сопоставимых с силой сопротивления в однородной жидкости. Таким образом, структура турбулентного потока в перемешанном слое подо льдом, волновые возмущения и величина силы сопротивления формы могут в значительной степени определяться пространственным распределением ледяных торосов.

2 Вихреразрешающее моделирование и лагранжев перенос частиц

Уравнения LES-модели являются результатом применения пространственного фильтра $F_{\overline{\Delta}}(u_i) \equiv \overline{u}_i$ к системе уравнений Навье–Стокса (1), дополненной уравнениями переноса скалярных величин (полей концентрации примесей, потенциальной температуры и влажности воздуха). Тензор "подсеточных/подфильтровых" напряжений $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{u_i}\ \overline{u_j}$ параметризован при помощи смешанной модели:

$$\tau_{ij}^{\mathrm{mix}} = \tau_{ij}^{\mathrm{smag}} + \tau_{ij}^{\mathrm{ssm}} = -2(C_{\mathrm{s}}\overline{\Delta})^2|\overline{S}|\overline{S}_{ij} + (\overline{\overline{u_i}\ \overline{u_j}} - \overline{\overline{u_i}}\ \overline{\overline{u_j}}). \tag{2}$$

где $\overline{S}_{ij}$ — тензор скоростей деформации, вычисленный по фильтрованному полю скорости, C_s — безразмерный коэффициент, зависящий от координат и определяемый динамически на каждом шаге по времени [1]. Процедура вычисления коэффициентов $X(\vec{x},t) = (C_{\mathrm{s}}\overline{\Delta})^2$, ответственных за диссипацию кинетической энергии, сводится к минимизации функционала $\Psi(X) = \int_\Omega \varepsilon_{ij}(\vec{x})\ \varepsilon_{ij}(\vec{x})d\vec{x}$, где Ω — расчетная область, а ε_{ij} — ошибка в переопределенной системе уравнений:

$$\widehat{(XM_{ij}^{\tau})} - \alpha^2 X(M_{ij}^{T}) = L_{ij} - H_{ij} + \varepsilon_{ij}. \tag{3}$$

Здесь M_{ij}^T, M_{ij}^τ, L_{ij} и H_{ij} тензоры, получаемые в результате подстановки смешанной модели (2) в тождество Германо [11]: $T_{ij} - \widehat{\tau_{ij}} = \widehat{\overline{u_i}\ \overline{u_j}} - \widehat{\overline{u_i}}\ \widehat{\overline{u_j}}$, где T_{ij} — подсеточные/подфильтровые турбулентные напряжения для сглаженного поля скорости $\widehat{\overline{\vec{u}}}$, полученного последовательным применением базового $F_{\overline{\Delta}}$ и тестового $F_{\widehat{\Delta}}$ пространственных фильтров. Подробности численной реализации и описание метода поиска обобщенного решения системы (3) представлены в работах [1, 13]

Лагранжева скорость безынерционной частицы $\vec{u}^p$ и координата частицы $\vec{x}^p$ в LES-модели вычисляются по формулам: $u_i^p = \overline{u}_i^{(p)} + u''^p_i$, $\mathrm{d}x_i^p = u_i^p \mathrm{d}t$, где $\overline{u}_i^{(p)}$ — интерполяция фильтрованной скорости в позицию частицы. Мелкомасштабные флуктуации u''^p_i лагранжевой скорости параметризуются дополнительно, в частности, при помощи стохастических моделей. LES-модель ИВМ РАН содержит набор параметризаций подсеточной/подфильтровой лагранжевой динамики, включающий:
(i) стохастические модели первого порядка, основанные на решении обобщенного уравнения Ланжевена:

$$\mathrm{d}u''^p_i = a_i(\vec{x}^p, \vec{u}^p, t)\mathrm{d}t + b_{ij}(\vec{x}^p, \vec{u}^p, t)\xi_i^p, \tag{4}$$

где ξ_i^p — дельта-коррелированный (обычно Гауссов) случайный шум с дисперсией dt, а a_i и b_{ij} — функции, зависящие от эйлеровых статистических характеристик турбулентности и лагранжевой скорости частиц;
(ii) стохастическую модель нулевого порядка, в которой на каждом шаге по времени задается случайное смещение частицы $\vec{x}''$, определяемое коэффициентом подсеточной диффузии $K_{\mathrm{s}}^{\mathrm{subgr}}$:

$$\mathrm{d}x_i^p = \overline{u}_i^{(p)}\mathrm{d}t + x''^p_i = \overline{u}_i^{(p)}\mathrm{d}t + \frac{\partial K_{\mathrm{s}}^{\mathrm{subgr}(p)}}{\partial x_i}\mathrm{d}t + \sqrt{2K_{\mathrm{s}}^{\mathrm{subgr}(p)}}\xi_i^p; \tag{5}$$

(iii) детерминистическую "подфильтровую" модель, использующую свойства LES-модели с явной фильтрацией, позволяющие реконструировать значительную часть мелкомасштабных пульсаций скорости, применяя оператор обратный базовому фильтру LES-модели $F_{\overline{\Delta}}$:

$$u_i{}^p = \left(F_{\overline{\Delta}}^{-1}\overline{u}_i\right)^{(p)}, \qquad F_{\overline{\Delta}}^{-1} \approx F_n^{-1} = \sum_{k=0}^{n}(I - F_{\overline{\Delta}})^k. \tag{6}$$

В работе [13] были протестированы различные подходы к построению "подфильтровых" моделей динамики трассеров и показано, что модель (6) во многих случаях достаточна для определения статистических характеристик лагранжева переноса на достаточно больших пространственных и временных масштабах. При этом не привлекаются стохастические модели, требующие значительных вычислительных затрат.

Лагранжев перенос тяжелых частиц осуществляется с учетом эффектов инерции и гравитационного оседания:

$$\mathrm{d}u_i^p = \left(\frac{3}{4}\frac{C_D}{d_p}\frac{\rho_f}{\rho_p}\left|\vec{u}^f - \vec{u}^p\right|(u_i^f - u_i^p) - \delta_{i3}g\right)\mathrm{d}t, \qquad u_i^f = \overline{u}_i^{(p)} + u''^{(p)}_i, \tag{7}$$

где коэффициент сопротивления C_D зависит от числа Рейнольдса $Re_p = d_p\left|\vec{u}^f - \vec{u}^p\right|/\nu_f$, определенного по диаметру частицы d_p и относительной скорости. Скорость жидкости в позиции частицы u_i^f включает в себя мелкомасштабные флуктуации $u''^{(p)}_i$, вычисленные с помощью стохастической модели (4). В модели предусмотрено обратное влияние частиц на турбулентность, для чего в уравнения движения добавляется сила F_f^p, пропорциональная по величине и противоположная по знаку силе сопротивления, действующей на частицу.

2.1 LES-расчеты атмосферной турбулентности и лагранжева переноса частиц

а) Вычисление футпринтов (функций влияния) потоков скаляров

При интерпретации натурных пульсационных измерений турбулентного обмена теплом, влагой и газовыми примесями между атмосферой и подстилающей поверхностью возникает задача установления связи между поверхностным потоком $F_{\mathrm{s}}(x, y, z = 0)$ и турбулентным потоком $F_{\mathrm{s}}(x_M, y_M, z_M) =< s'w' >$, измеряемым на некотором удалении от земли. Это особенно актуально для измерений над неоднородными поверхностями. Данная задача формализуется при помощи введения функции "футпринта" f_{s}, такой что:

$$F_{\mathrm{s}}(x_M, y_M, z_M) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f_{\mathrm{s}}(x, y, x_M, y_M, z_M)F_{\mathrm{s}}(x, y, 0)\mathrm{d}x\mathrm{d}y.$$

LES-модели, содержащие блок переноса лагранжевых трассеров, позволяют определить функцию f_{s} без привлечения существенных упрощений и полуэмпирических гипотез. На рис. 2 представлены результаты моделирования турбулентного течения над неоднородным ландшафтом, имитирующим лесное озеро небольшого размера (см. [12]). Суммарное количество частиц в расчете достигает величины $\sim 10^9$ (рис. 2а). Вычисления производятся на 256-ти узлах суперкомпьютера с распределенной памятью "Ломоносов". Данного количества трассеров достаточно для оценки функции "футпринта" f_{s} (см. рис. 2г,д,е), что позволяет соотнести измеряемый поток с его значениями на выбранном участке поверхности "озера" и помогает правильно организовать дизайн натурных измерений и обработку их результатов.

б) Перенос тяжелых частиц и исследование взаимодействия взвеси и турбулентности

Проведены расчеты турбулентного течения Пуазейля со взвешенными частицами. Получены результаты качественно согласующиеся с данными наблюдений и теоретическими представлениями о динамике взвеси в приземном слое. В частности, модель воспроизводит степенную зависимость концентрации взвеси от высоты [7]. Получены распределения частиц взвеси по размерам близкие к наблюдаемым гамма-распределениям. Обнаружено, что совместные эффекты инерции частиц и их гравитационного оседания приводят к формированию логнормальных распределений концентрации взвеси. Рассмотрены факторы, влияющие на возможность взвеси частиц воздействовать на турбулентность и приводить к изменению потока импульса на подстилающей поверхности за счет эффектов стратификации двухфазной жидкости и инерции трассеров.

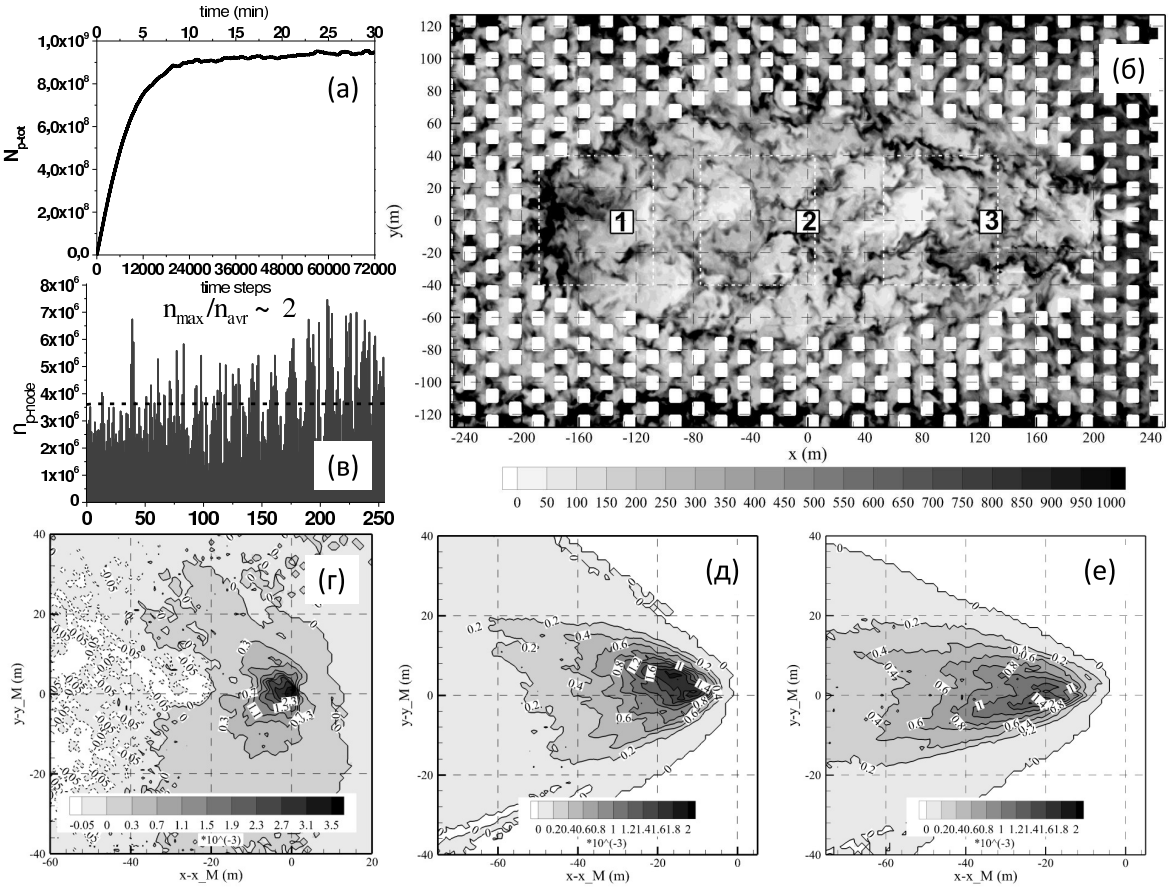


Рис. 2: (а) суммарное количество лагранжевых частиц в расчете N_{p-tot} в зависимости от времени интегрирования; (б) мгновенное количество частиц в каждой ячейке сетки модели (третий расчетный слой от поверхности); (в) распределение вычислительной нагрузки между процессорами, n_{p-node} — количество частиц в каждой области декомпозиции при параллельных вычислениях; (г,д,е) футпринты $f_s(x - x_M, y - y_M, z_M)$ для трех точек измерений, помеченных на рис. 2б квадратиками с цифрами 1,2 и 3 для высоты датчика $z_M = 3$м.

Заключение

На основе прямого численного моделирования выполнено исследование структуры турбулентного течения Куэтта при сильно устойчивой стратификации. Показано, что перемежающаяся турбулентность может поддерживаться при числах Ричардсона, превышающих известные ранее оценки. Проведено исследование стратифицированного потока под торошенным льдом. Показано, что структура турбулентного потока в перемешанном слое подо льдом, волновые возмущения и величина волновой компоненты силы сопротивления в значительной степени определяются пространственным распределением ледяных торосов. Выполнено вихреразрешающее моделирование турбулентных течений в пограничном слое атмосферы над неоднородной подстилающей поверхностью совместно с лагранжевым расчетом переноса частиц. Построены оценки области влияния (функции «футпринта») поверхностного потока скаляра на пульсационные измерения, проводимые на удалении от поверхности Земли, в пограничном слое атмосферы. Проведены расчеты турбулентного переноса инерционных частиц, взаимодействующих с турбулентным потоком воздуха (природным аналогом является, в частности, снежная поземка).

Список литературы

[1] Глазунов А.В. Вихреразрешающее моделирование турбулентности с использованием смешанного динамического локализованного замыкания. Часть 1. Формулировка задачи, описание модели и диагности-

ческие численные тесты. Часть 2. Численные эксперименты; моделирование турбулентности в канале с шероховатыми границами // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2009. Т. 45. № 1.

[2] Глазунов А.В. Численное моделирование устойчиво- стратифицированных турбулентных течений над поверхностью городского типа. Спектры и масштабы, параметризация профилей температуры и скорости // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2014. Т. 50, № 4. С. 406–419.

[3] Глазунов А.В., Дымников В.П. Пространственные спектры и характерные горизонтальные масштабы флуктуаций температуры и скорости в конвективном пограничном слое атмосеры // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2013. Т. 49, № 1. С. 37–61.

[4] Мортиков Е.В. Применение метода погруженной границы для решения системы уравнений Навье–Стокса в областях сложной конфигурации // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т. 11, № 1. С. 32–42.

[5] Мортиков Е.В. Применение графических процессоров для численного моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости в областях сложной конфигурации метода погруженной границы // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т. 13, № 1. С. 177–191.

[6] Мортиков Е.В. Численное моделирование движения ледяного киля в стратифицированной жидкости // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2016. Т. 52, № 1. С. 120–128.

[7] Barenblatt G. I., Golitsyn G. S. Local structure of mature dust storms // J. Atmos. Sci. 1974. V. 31, N 7. P. 1917–1933.

[8] Bernardini M., Pirozzoli S., Orlandi P. Velocity statistics in turbulent channel flow up to Re_τ =4000 // J. Fluid Mech. 2014. V. 742. P. 171–191.

[9] Deusebio E., Caulfield C.P., Taylor J.R. The intermittency boundary in stratified plane Couette flow // J. Fluid Mech. 2015. V. 781. P. 298–329.

[10] Finn J. R., Li M., Apte S. V. Particle based modelling and simulation of natural sand dynamics in the wave bottom boundary layer // J. Fluid Mech. 2016. V. 796. P. 340–385.

[11] Germano M., Piomelli U., Moin P., Cabot W. H. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model // Phys. Fluids A: Fluid Dynamics. 1991. V. 3, N 7. P. 1760–1765.

[12] Glazunov A.V., Stepanenko V.M. Large-eddy simulation of stratified turbulent flows over heterogeneous landscapes //Izv., Atmos. Ocean. Phys. 2015. V. 51, N 4. P. 351–361.

[13] Glazunov A., Rannik U., Stepanenko V., Lykosov V., Auvinen M., Vesala T., Mammarella I. Large-eddy simulation and stochastic modeling of Lagrangian particles for footprint determination in the stable boundary layer // Geosci. Model Dev. 2016. V. 9, N 9. P 2925–2949.

[14] Lu P., Li Z., Cheng B., Leppäranta M. A parameterization of the ice-ocean drag coefficient // J. Geophys. Res. 2011. V. 116, N C7, C07019.

[15] Zilitinkevich S.S., Elperin T., Kleeorin N., Rogachevskii I., Esau I. A hierarchy of energy- and flux-budget (EFB) turbulence closure models for stably-stratified geophysical flows // Boundary-Layer Meteorol. 2013. V. 146. P. 341–373.

Андрей Васильевич Глазунов — д.ф.-м.н., вед. науч.сотр. Института вычислительной математики РАН, вед. математик Научно-исследовательского вычислительного центра МГУ им. М.В. Ломоносова;
e-mail: and.glas@gmail.com;
Евгений Валерьевич Мортиков — к.ф.-м.н., науч.сотр. Научно-исследовательского вычислительного центра МГУ имени М.В. Ломоносова;
e-mail: evgeny.mortikov@gmail.com;
Василий Николаевич Лыкосов — член-корреспондент РАН, д.ф.м.н., гл.науч.сотр. Института вычислительной математики РАН, зав. лабораторией Научно-исследовательского вычислительного центра МГУ имени М.В. Ломоносова;
e-mail: lykossov@yandex.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ИНТЕГРАЛЬНЫЙ ПОДХОД К РАЗРАБОТКЕ АЛГОРИТМИЧЕСКОГО И ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ЭКЗАФЛОПСНЫХ СУПЕРЭВМ: НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Б. М. Глинский, И. Г. Черных, И. М. Куликов, А. В. Снытников, А. Ф. Сапетина, Д. В. Винс

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 004.421, 004.942

Данная работа посвящена применению интегрального подхода к решению вычислительно-сложных задач сейсмики, астрофизики, физики плазмы. Предлагаемый интегральный подход — это методология разработки алгоритмического и программного обеспечения для суперкомпьютеров экзафлопсного уровня, содержащий три связанных этапа: первый этап определяется со-дизайном, под которым мы понимаем адаптацию вычислительного алгоритма и математического метода под архитектуру суперкомпьютера на всех этапах разработки программы; на втором предполагается создание упреждающего алгоритмического и программного обеспечения для наиболее перспективных экзафлопсных суперкомпьютеров на основе имитационного моделирования с целью адаптации алгоритмов под заданную архитектуру суперкомпьютера; третий этап связан с оценкой энергоэффективности алгоритма при различных реализациях на данной архитектуре, либо на различных архитектурах.

Ключевые слова: интегральный подход, со-дизайн, агентное моделирование, энергоэффективность алгоритмов, высокопроизводительные вычисления.

Введение

Современный этап развития суперкомпьютеров характеризуется появлением множества проектов по созданию экзафлопсного суперкомпьютера. До сих пор разработки в данной области проводились различными командами разработчиков в США. Работы в этом направлении проводятся, например, национальными лабораториями Министерства энергетики США: Sandia и Oak Ridge. Существуют аналогичные программы и в Европе: семь европейских стран подписали декларацию Joint Project EuroHPC, направленную на создание сверхсовременного суперкомпьютера. В Японии (RIKEN) сборка и установка такого суперкомпьютера уже началась.

Существует множество международных проектов по разработке системного и прикладного программного обеспечения для экзафлопсных суперкомпьютеров с участием США, стран Европейского Союза, Японии, Китая, России (IESP, G8 EXASCALE, CRESTA и т.д.).В работах [1, 2, 3] приводится обзор различных подходов к разработке научного программного обеспечения для экзафлопсных суперкомпьютеров. В [4] перечислены проблемы, типичные для экзафлопсных систем, а также различные методы решения данных проблем. Следует отметить, что численные алгоритмы разрабатываются медленнее, чем аппаратные средства, поэтому на первом этапе использования экзафлопсных суперкомпьютеров для решения физических задач будут применяться существующие алгоритмы и программы.

В данной работе мы предлагаем использование интегрированного подхода к разработке алгоритмов и программного обеспечения для суперкомпьютеров пета- и экзафлопсного класса[5], который содержит три связанных этапа.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-07-00434, код проекта 16-29-15120, код проекта 15-01-00508), гранта Президента РФ (код проекта МК – 1445.2017.9).

Первый этап определяется со-дизайном, под которым мы понимаем адаптацию вычислительного алгоритма и математического метода под архитектуру суперкомпьютера на всех этапах разработки программы. Понятие со-дизайна в контексте математического моделирования физических процессов понимается как построение физико-математической модели явления, численного метода, параллельного алгоритма и его программной реализации, эффективно использующей архитектуру суперкомпьютера. При таком подходе актуальным становится сравнение не только методов решения задачи, но и сравнение физических и математических постановок задачи, с целью создания наиболее эффективной реализации на выбранной вычислительной архитектуре.

На втором этапе предполагается создание упреждающего алгоритмического и программного обеспечения для наиболее перспективных экзафлопсных суперкомпьютеров на основе имитационного моделирования с целью адаптации алгоритмов под заданную архитектуру суперкомпьютера. Основной исследуемый параметр эффективности вычислительного алгоритма при его исполнении на высокопроизводительных суперкомпьютерах — это его масштабируемость. Для сеточных методов численного моделирования критерием масштабируемости является неизменность времени расчета алгоритма при прямо пропорциональном количеству вычислительных узлов увеличении расчетной области. Для моделирования исполнения параллельных программ на большом количестве ядер используется мультиагентный подход [6]. Для исследуемых алгоритмов создаются агенты, имитирующие поведение вычислительных узлов при выполнении соответствующих алгоритмов. Эти агенты, имитируя поведение вычислительных узлов, моделируют вычисления для каждой из задач и отправку данных соседям. Более подробно процесс имитации исполнения программ описан в [7].

Третий этап связан с оценкой энергоэффективности алгоритма при различных реализациях под одну или несколько архитектур. Под энергоэффективностью научных программ в сфере высокопроизводительных вычислений мы понимаем: наиболее эффективное использование каждого ядра процессора или ускорителя вычислений; минимизацию обменов данными между вычислительными узлами; хорошую балансировку программ. Минимизация обменов данными позволяет уменьшить время простоя ядер процессоров или ускорителей. Хорошая балансировка программы позволить равномерно нагрузить вычислительную систему. В случае хорошей балансировки программы и стабильной балансировки узлов мы можем сделать набор прогонов программы, который показывает соотношение между потреблением энергии и использованием ядер. Самые энергоэффективные алгоритмы показывают наилучшие значения FLOPS per Watts (Joules / sec). Для тестирования энергоэффективности с помощью инструментария CUDA 7.5 был использован графический процессор Nvidia Tesla K40M.

1 Применение со-дизайна для решения различных физических задач

1.1 Численное моделирование распространения упругих волн в неоднородных трехмерных средах.

Численное моделирование распространения упругих волн в неоднородных трехмерных сложно построенных средах является сложной задачей с точки зрения вычислений, что требует использования эффективных методов распараллеливания и масштабирования алгоритмов. Нередко рельеф реальных геофизических объектов не позволяет установить площадную систему наблюдения. Поэтому для построения трехмерных моделей таких объектов требуется решение обратной задачи путем решения набора прямых задач: при разных значениях упругих параметров гетерогенной среды; при различных геометриях объектов, составляющих модель.

В контексте со-дизайна мы провели сравнение разработанных параллельных реализаций решений задачи динамической теории упругости, записанных в терминах скоростей смещения и напряжения и в терминах смещений, для суперкомпьютеров, оснащенных графическими картами. В качестве области моделирования рассматривается изотропная трехмерная неоднородная упругая сложно построенная среда, представляющая из себя параллелепипед, одна из сторон которого является свободной поверхностью. На этапе выбора численного метода наиболее «гибким» и широко распространенным методом решения задачи динамической теории упругости является метод конечных разностей. Для численного решения уравнений в терминах скоростей смещения и напряжения мы используем известную разностную схему Верье на сдвинутых сетках [9]. Вычисление разностных коэффициентов в этой схеме основано на интегральных законах сохранения. Для решения задачи в терминах смещений мы используем аналогичную схему на сдвинутых сетках [10].

В качестве инструментов распараллеливания программного обеспечения мы выбрали CUDA и MPI. Этап адаптации к архитектуре гибридного кластера, оснащенного графическими процессорами, проводился оди-

наковыми способами для обоих подходов для корректности сравнения [10]. Для распараллеливания мы проводим декомпозицию вычислительной области на слои вдоль одной из осей координат. Каждый слой вычисляется на отдельном узле, где он подразделяется на подслои вдоль другой координатной оси в соответствии с количеством графических ускорителей на узле. Данные передаются между узлами с использованием соответствующих неблокирующих асинхронных функций обменов MPI и асинхронных функций копирования CUDA. Отметим, что данные для обмена имеют одинаковый размер в обоих подходах.

Численные эксперименты показали, что время вычисления смещений и время вычисления скоростей смещения и напряжений при равном числе узлов примерно одинаковы, несмотря на то, что расчет смещений выполняется с большим количеством операций с плавающей запятой на каждом временном шаге. При этом для такого расчета требуется почти в два раза меньше памяти на графических картах. На основе полученных результатов мы отдаем предпочтение подходу, основанному на расчете смещений.

Результаты численного моделирования усеченной модели вулкана Эльбрус представлены на рис. 1. Узнать больше о геофизической модели вулкана и результатах численных экспериментов можно в [11].

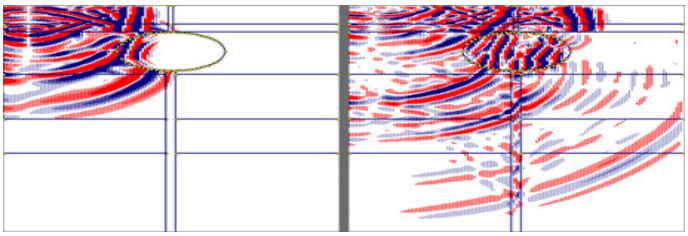


Рис. 1: Результаты численного моделирования усеченной модели вулкана Эльбрус. Снимки волнового поля для компоненты u вектора скоростей смещения представлены в плоскости Oxz в разные моменты времени.

1.2 Многокомпонентная гидродинамическая модель столкновения галактик.

В работе рассматривается многокомпонентная гидродинамическая модель столкновения галактик, учитывающая химиодинамику молекулярного водорода и процессы охлаждения и нагревания. На первом этапе со-дизайна определяется доминантный процесс – гидродинамика, описываемая гиперболиеческими уравнениями. Численный метод решения уравнений гидродинамики основан на комбинации метода разделения операторов, метода Годунова с модификацией осреднения по Рое и кусочно-параболическом метода на локальном шаблоне вычислений. Переопределенная система позволяет гарантировать неубывание энтропии и производить минимизацию дисбаланса энергий с помощью корректировки вектора скорости. Подробное описание численного метода можно найти в [12].

Код AstroPhi основан на описанных методах. Для его реализации используется архитектура ускорителей Intel Xeon Phi. Для моделирования используется прототип инженерной архитектуры RSC PetaStream с 8 узлами с 64 ускорителем Intel Xeon Phi 7120D. Наши тесты показывают, что 10% общего времени моделирования тратится на операции отправки/получения MPI/OpenMP. Это значение подходит для массивно-параллельных систем.

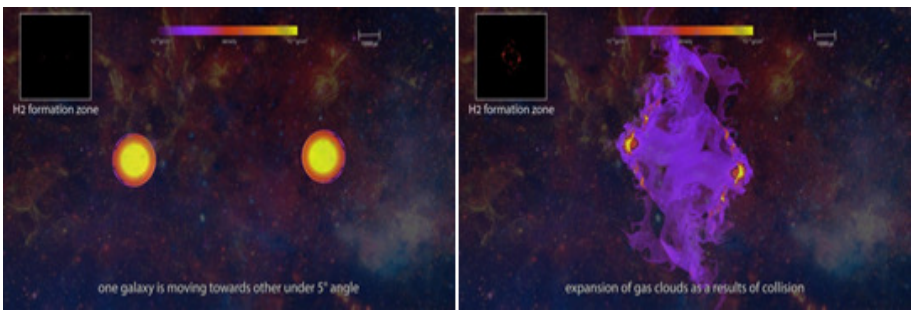


Рис. 2: Химодинамика столкновения галактик: начальная стадия (слева), разлет газовых облаков после столкновения и зона образования молекулярного водорода (справа).

На рисунке 2 показан разлет двух газовых облаков после столкновения галактик. Одна галактика пролегает через другую с образованием двух газовых облаков и зоны образования молекулярного водорода после удара.

1.3 Взаимодействие мощного электронного пучка с плазмой.

Одной из наиболее интересных проблем в физике высокотемпературной плазмы является резонансное взаимодействие мощного электронного пучка с плазмой.

В настоящей работе используется следующая физическая постановка задачи.

$$\frac{\partial f_{i,e}}{\partial t} + \mathbf{v}\frac{\partial f_{i,e}}{\partial \mathbf{r}} + q_{i,e}(\mathbf{E} + [\mathbf{v}, \mathbf{B}])\frac{\partial f_{i,e}}{\partial \mathbf{v}} = 0, \tag{1}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \nabla \times \mathbf{B} - \mathbf{j}, \qquad \nabla \mathbf{E} = \rho \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= -\nabla \times \mathbf{E}, \qquad \nabla \mathbf{B} = \mathbf{0} \end{aligned} \tag{2}$$

Трехмерное пространство моделирования имеет форму куба. Внутри этой области присутствует модельная плазма. Модельные частицы плазмы распределены равномерно внутри области. Плотность и температура электронов плазмы задается пользователем. Температура ионов считается равной нулю. Электроны пучка также равномерно распределены вдоль области.

Проведено трехмерное кинетическое исследование релаксационных процессов, вызванное распространением электронного пучка в высокотемпературной плазме с использованием системы уравнений Власова-Максвелла.

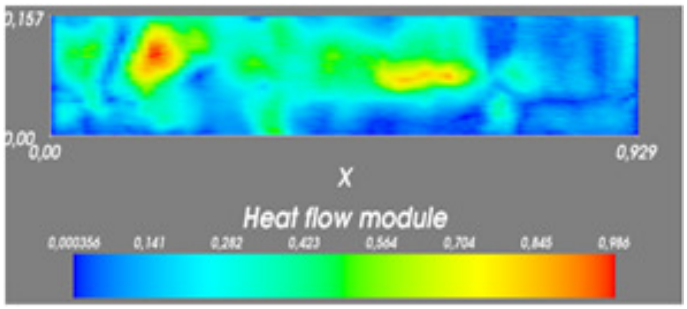


Рис. 3: Моделировнаие теплового потока в плазме после релаксации пучка.

В данном случае со-дизайн начинается на этапе физического рассмотрения проблемы.

- Отсутствие значительных модуляций плотности позволяет не использовать динамическую балансировку нагрузки.
- Следующим этапом является разработка численного метода. Здесь был выбран метод FDTD, который обеспечивает локальность памяти.
- На этапе выбора архитектуры суперкомпьютера учитываются особенности метода частиц в ячейках.
- На этапе выбора инструментов разработки программного обеспечения со-дизайн заключается в следующем. Для метода частиц в ячейках весьма эффективным является использование технологии CUDA. CUDA дает возможность использовать максимальное количество параллельных процессов и получать максимальную производительность.
- Последний этап со-дизайна — адаптация алгоритма к архитектуре графического процессора. Для этого был осуществлен переход от хранения всех модельных частиц в виде одного большого массива к хранеию частиц в виде массивов или списков по ячейкам сетки, что дает значительный прирост производительности.

Эффективность распараллеливания составляет более 90% для 500 узлов. Результаты выполнения полученного кода представлены на рисунке 3

2 Масштабируемость исследуемых алгоритмов

Для исследования масштабируемости параллельных алгоритмов был проведен модельный эксперимент по их исполнению на большом числе вычислительных ядер.

Исходные данные для исследования масштабируемости геофизического кода с помощью имитационной модели получены на кластере НКС-30Т+GPU ЦКП ССКЦ СО РАН для двух подходов к решению задачи. Результаты моделирования представлены на рисунке 4. По результатам моделирования можно сделать несколько выводов: так как схема взаимодействия для обоих подходов (в смещениях и в напряжениях) по сути одна, то их масштабируемость отличается незначительно; исследуемые алгоритмы подходят для исполнения на большом числе вычислительных ядер.

Исходные данные для исследования масштабируемости астрофизического кода с помощью имитационной модели получены на кластере НКС-30Т ЦКП ССКЦ СО РАН и МСЦ, произведено моделирование вычислений данного алгоритма для большого количества ядер (на узлах с Intel Xeon E5-2697 до 5632 узлов, 67 584 ядра; на узлах с GPU Nvidia Kepler до 1024 узлов, 1 048 576 ядер; на узлах с Intel Xeon Phi 7110 до 4096 узлов, 245 760–983 040 ядер) Результаты моделирования представлены на рисунке 5. Из представленного графика можно сделать выводы, что время исполнения алгоритма растет несущественно (около 20%) для 5120 вычислительных узлов и лучшую масштабируемость показали вычислительные узлы с ускорителями Nvidia Kepler K40 и Intel Xeon Phi (native mode).

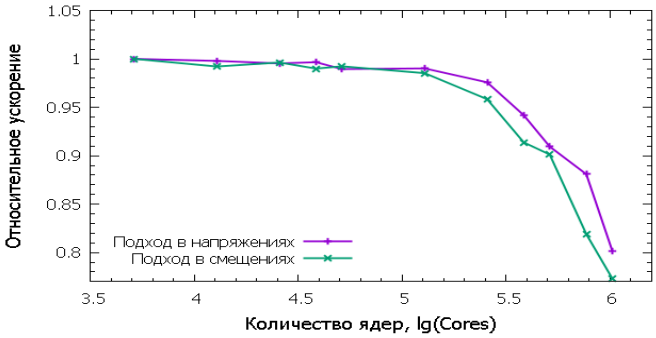


Рис. 4: Исследование масштабируемости геофизического кода для двух подходов к решению(горизонтальная ось – в логарифмическом масштабе).

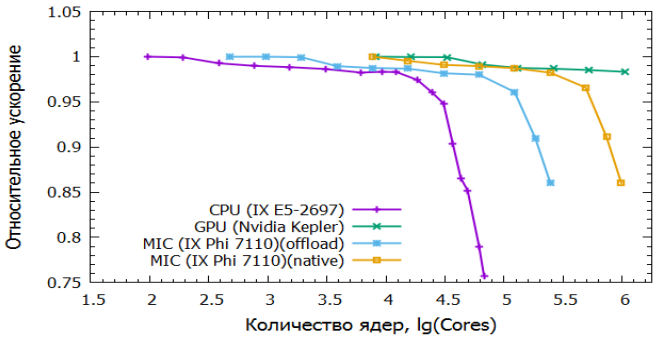


Рис. 5: Исследование масштабируемости астрофизического кода на различных архитектурах (горизонтальная ось – в логарифмическом масштабе).

Исходные данные для исследования масштабируемости кода физики плазмы с помощью имитационной модели получены на кластере НКС-30Т ЦКП ССКЦ СО РАН и МСЦ МФЦ, произведено моделирование вычислений данного алгоритма для большого количества ядер M (на узлах с Intel Xeon E5-2697 до 3072 узлов, 36 864 ядра; на узлах с GPU Nvidia Tesla 2090M до 1536 узлов, 786 432 ядер; на узлах с Nvidia Kepler K40 до 1536 узлов, 4.4 миллиона ядер). На Рис. 6 представлены результаты имитационного моделирования кода физики плазмы. Выводы: существенное увеличение коммуникационных взаимодействий увеличивает

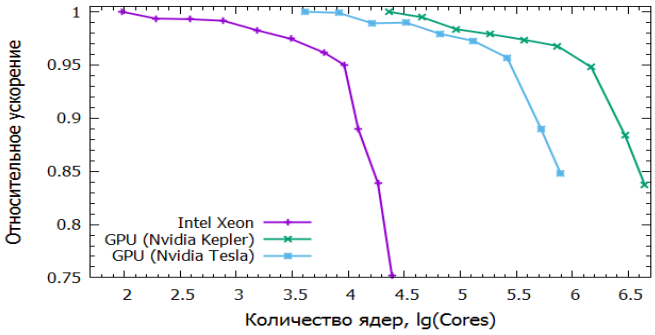


Рис. 6: Исследование масштабируемости кода физики плазмы на различных архитектурах (горизонтальная ось – в логарифмическом масштабе).

на 58% время выполнения кода для 3072 вычислительных узлов с Intel Xeon CPUs и код физики плазмы хорошо масштабируется на вычислительных узлах с ускорителями Nvidia Kepler K40 GPUs.

3 Исследование энергоэффективности алгоритмов

Для нашего астрофизического кода нам удалось уменьшить время MPI операций до 7–8 % от общего времени выполнения программы и добиться уровня разбалансировки процессов не более 2–3% между всеми нитями процессов. Такие показатели позволили получить 75% эффективность (weak scalability) распараллеливания на 224 Intel Xeon Phi (более 50K ядер).

Применяя этот же подход для кода физики плазмы была получена 92 % эффективность распараллеливания на 500 Tesla GPUs (более 250K ядер).

Принимая во внимание особенности геофизического кода, мы достигли энергогэффективности 9 GFLOPS/Вт и 12 GFLOPS/Вт для решения задачи в напряжениях и в смещениях соответственно на Nvidia Tesla K40M GPU. Мы также достигли энергоэффективности 4,3 GFLOPS/Вт и 4,5 GFLOPS/Вт для тех же подходов на Nvidia Tesla 2090M GPU без изменения исходного кода.

Заключение

В этой статье предлагается комплексный подход к разработке алгоритмов и программного обеспечения для решения физических задач, требующих большого объема вычислений. В контексте со-дизайна мы провели сравнение разработанных параллельных реализаций решения задачи динамической теории упругости, записанной в разных постановках для гибридных кластеров, оснащенных графическими картами. Метод Годунова с модификацией усреднения по Рою и кусочно-параболический метод на локальном трафарете был выбран из нескольких разных подходов к решению астрофизической задачи. Аналогичный подход был применен и для проблемы физики плазмы. Масштабируемость полученных алгоритмов была проверена с использованием системы моделирования AGNES[8]. В нашем случае в процессе моделирования можно определить оптимальное количество ядер для конкретной архитектуры. Это позволяет исследовать масштабируемость алгоритма, не прибегая к прямым трудоемким вычислениям. Энергоэффективность алгоритма для геофизической задачи была рассмотрена на суперкомпьютерах, оснащенных графическими процессорами Tesla 2090M и K40M.

В результате был разработан набор параллельных программ для решения физических задач на основе описанного подхода. Он способен выполнять 3D-моделирование в приемлемое время, при условии достаточности ресурсов

Список литературы

[1] Reed D.A., Dongarra J.: Exascale computing and big data. Comm. of the ACM 58 (7), 56–68 (2015).

[2] Keyes D.E.: Exaflop/s: The why and the how. C.R. Mechanique 339, 70–77 (2011).

[3] Asanovic K., Bodik R., Demmel J., Keaveny T., Keutzer K., Kubiatowicz J., Morgan N., Patterson D., Sen K., Wawrzynek J., Wessel D., Yelick K.: A view of the parallel computing landscape. Comm. ACM. 52, 56–67 (2009).

[4] Sterling T.: Achieving scalability in the presence of asynchrony for exascale computing. Adv. In Parall. Comp 24, 104–117 (2013).

[5] Б.М. Глинский, И.В. Куликов, А.В. Снытников, И.Г. Черных, Д.В. Винс Многоуровневый подход к разработке алгоритмического и программного обеспечения экзафлопсных суперЭВМ // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. – 2015. Т.16, №4, – С. 543–556.

[6] Wooldridge M.: Introduction to MultiAgent Systems. JOHN WILEY & SONS, LTD, England (2002).

[7] Kulikov, I., Chernykh, I., Glinsky, B., Weins, D., Shmelev, A. Astrophysics simulation on RSC massively parallel architecture //Proc. 2015 IEEE/ACM 15th Int. Symposium on Cluster, Cloud, and Grid Computing, CCGrid 2015. IEEE Press, 2015.1131–1134.

[8] Podkorytov D., Rodionov A., Choo H.: Agent-based Simulation System AGNES for Networks Modeling: Review and Researching. In: Proc. of the 6th Int. Conference on Ubiquitous Information Management and Communication (ACM ICUIMC 2012), ISBN 978-1-4503-1172-4, pp. 115. ACM (2012).

[9] Bihn M., Weiland T.: A Stable Discretization Scheme for the Simulation of Elastic Waves. In: Proceedings of the 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics (IMACS 1997). vol. 2, pp. 75–80. Berlin (1997) .

[10] Sapetina A.F.: Supercomputer-aided comparison of the efficiency of using different mathematical statements of the 3D geophysical problem. The Bulletin of NCC. Series: Numerical Analysis 18, 1–9 (2016).

[11] Glinskii B.M., Martynov V.N., Sapetina A.F.: 3D Modeling of Seismic Wave Fields in a Medium Specific to Volcanic Structures. Yakutian Mathematical Journal. 22(3), 84–98 (2015).

[12] Kulikov I., E. Vorobyov E.: Journal of Computational Physics. 317, 318–346 (2016).

Глинский Борис Михайлович — д.т.н., зав. лаборатории Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: gbm@sscc.ru;
Черных Игорь Геннадьевич — к.ф.-м.н., ст.науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: chernykh@parbz.sscc.ru;
Куликов Игорь Михайлович — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: kulikov@ssd.sscc.ru;
Снытников Алексей Владимирович — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: snytav@ssd.sscc.ru;
Сапетина Анна Федоровна — инженер Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: afsapetina@gmail.com;
Винс Дмитрий Владимирович — к.т.н., мл.науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: vins@sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

КОМПАКТНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ — СТОКСА НА НЕРАВНОМЕРНЫХ СЕТКАХ

А. С. Глуховский[2], В. И. Паасонен[1,2]

[1] *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.6

Для успешного численного исследования течений вязкой несжимаемой жидкости с областями быстрого изменения в пограничных слоях представляется полезным повышать порядок точности разностных схем или использовать неравномерную сетку, сгущающуюся в зонах больших градиентов. В данной работе совмещаются оба этих подхода в комплексе, т. е. применяется компактная схема второго порядка точности на неравномерной сетке. Проведены сравнения результатов расчетов с данными других авторов на стандартной тестовой задаче о течении в каверне со скользящей крышкой.

Ключевые слова: компактная схема, течение в каверне, неравномерная сетка.

1 Разностная схема

Рассматривается система уравнений Навье — Стокса стационарного течения вязкой несжимаемой жидкости

$$\begin{cases} (u\omega)_x + (v\omega)_y = \mu(\omega_{xx} + \omega_{yy}), \\ \psi_{xx} + \psi_{yy} = \omega, \end{cases} \tag{1}$$

где ψ — функция тока, ω — вихрь скорости, а $u = \psi_y$ и $v = -\psi_x$ — компоненты скорости.

Пусть область покрыта прямоугольной сеткой, неравномерной по обеим переменным. Определим операторы разностных аппроксимаций первой и второй производной:

$$\Delta = \frac{h_-\Delta_+ + h_+\Delta_-}{s}, \quad \Lambda = \frac{\Delta_+ - \Delta_-}{s/2}, \tag{2}$$

где h_-, h_+ — шаги слева и справа от узла сетки, $s = h_- + h_+$ — их сумма, а Δ_+ и Δ_- — операторы односторонних разделенных разностей. Разностные операторы и параметры условимся снабжать индексами x и y, определяющими координатные направления.

Если аппроксимировать производные в системе (1) разностными отношениями типа (2), то получится схема первого порядка аппроксимации, в которой главные члены погрешности содержат третьи производные искомых функций. Выражая их из продолженной системы уравнений и аппроксимируя полученные слагаемые разностными отношениями, а затем учитывая их в исходной схеме с обратным знаком, получим компактную схему второго порядка аппроксимации. В ней первое уравнение системы аппроксимируется разностным уравнением

$$\mu B\omega = D_x(u\omega) + D_y(v\omega), \tag{3}$$

где для краткости введены обозначения

$$D_x = (E + \frac{d_y}{3}\Delta_y)\Delta_x + \frac{d_x}{3}\Lambda_x, \qquad D_y = (E + \frac{d_x}{3}\Delta_x)\Delta_y + \frac{d_y}{3}\Lambda_y,$$

$$B = (E + \frac{d_y}{3}\Delta_y)\Lambda_x + (E + \frac{d_x}{3}\Delta_x)\Lambda_y,$$

а уравнение для вихря аппроксимируется разностным уравнением

$$\Omega\psi = \Sigma\omega, \tag{4}$$

где

$$\Omega = \Lambda_x + \Lambda_y + \frac{d_y}{3}\Delta_y\Lambda_x + \frac{d_x}{3}\Delta_x\Lambda_y, \qquad \Sigma = E + \frac{d_y}{3}\Delta_y + \frac{d_x}{3}\Delta_x.$$

В результате получилась компактная разностная схема (3), (4), которая аппроксимирует (ψ, ω) — систему уравнений Навье — Стокса (1) со вторым порядком на произвольной неравномерной сетке. Она действительна компактная, так как ее шаблон не выступает за пределы трех узлов в каждом направлении.

Для решения стационарной краевой задачи будем использовать итерационный метод универсального алгоритма с факторизованным оператором.

Итерационная формула для (3) записывается в виде

$$A_xA_y\frac{\omega^{n+1} - \omega^n}{\tau} = \mu B\omega^n - D_x(u\omega^n) - D_y(v\omega^n), \tag{5}$$

где

$$A_x = E + \alpha\tau\Delta_x uE - \mu\alpha\tau\Lambda_x, \qquad A_y = E + \alpha\tau\Delta_y vE - \mu\alpha\tau\Lambda_y.$$

Здесь τ, α — итерационные параметры, а компоненты скорости u и v берутся с нижнего слоя.

Аналогично получим факторизованную итерационную схему для (4) :

$$C_xC_y\frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\tau} = \Omega\psi^n - \Sigma\omega^n, \tag{6}$$

где

$$C_x = (E - \alpha\tau\Lambda_x), \qquad C_y = (E - \alpha\tau\Lambda_y).$$

Для реализации итерационной схемы (5), (6) необходимо поставить граничные условия. Специфика схемы требует по одному граничному условию для ψ и ω, тогда как в дифференциальной задаче поставлено два условия для ψ (функция тока и ее нормальная производная) и ни одного для ω. Поэтому для ω граничные условия обычно ставятся по методу, предложенному Вудсом. В данной работе использовалось обобщение формулы Вудса для неравномерной сетки. Например, на участке границы, перпендикулярной к x, вторую производную ψ_{yy} по касательной можно считать известной, и для вычисления вихря на границе остается аккуратно аппроксимировать вторую производную по нормали. Ее определим в виде выражения

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\Big|_\Gamma = \sum_{i=0}^{s}\alpha_i\psi(x_i) - \beta\frac{\partial\psi}{\partial x}\Big|_\Gamma, \tag{7}$$

неопределенные коэффициенты α_i, β которого выбираются так, чтобы обеспечить порядок точности s. Для этого разложим $\psi(x_i)$ в ряд Тейлора в точке границы x_0, и приравняв коэффициенты при производных одного порядка в левой и правой частях получим линейную систему уравнений для коэффициентов, которая решается явно методом Крамера:

$$\alpha_k = \frac{\prod_{i=1}^{s} y_i}{y_k^3\prod_{l\neq k}(y_l - y_k)}, \qquad y_i = x_i - x_0, \qquad k \neq 0,$$

$$\alpha_0 = -\sum_{i=1}^{s}\alpha_i, \quad \beta = \sum_{i=1}^{s}\alpha_i y_i.$$

2 Результаты

В качестве тестового решения используем решение задачи о течении вязкой жидкости в каверне с движущейся верхней крышкой. В этом решении присутствуют вихри различной интенсивности, количество, конфигурация и свойства которых зависят от числа Рейнольдса. Эта задача очень популярна для изучения свойств численных методов, и на данный момент опубликовано большое количество работ, в которых она решается.

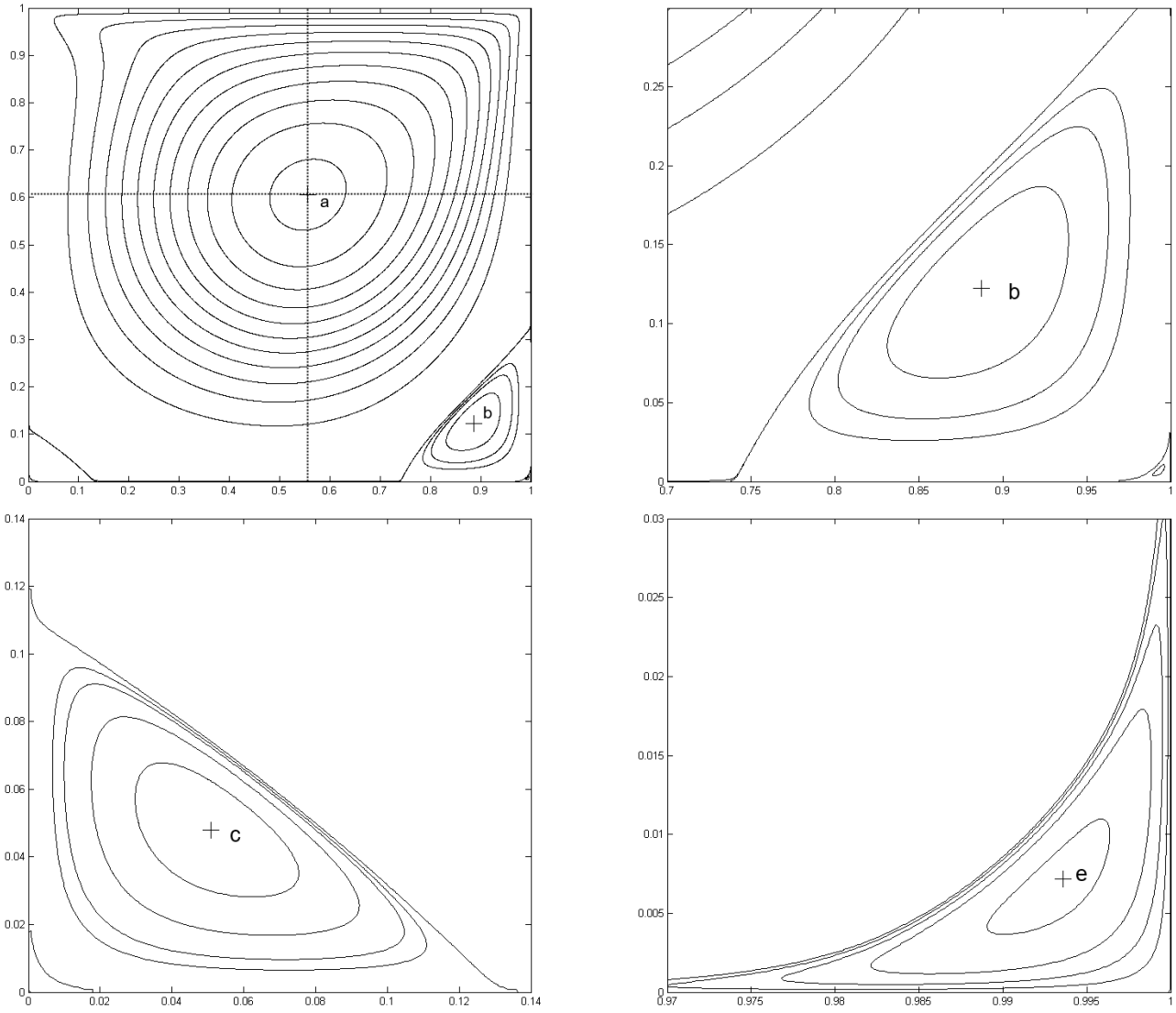


Рис. 1: Линии тока в каверне при $Re = 400$ и их детализированные фрагменты.

Таблица 1: Численные характеристики вихрей в каверне при $Re = 400$.

i	a	b	c	e
Работа [1], сетка 640×640.				
ψ_i	-0.1141	$6.462 \cdot 10^{-4}$	$1.445 \cdot 10^{-5}$	$-1.146 \cdot 10^{-8}$
x_i	0.5539	0.8852	0.0516	0.9929
y_i	0.6055	0.1219	0.0469	0.0072
Эта работа, сетка 61×61.				
ψ_i	-0.1132	$6.379 \cdot 10^{-4}$	$1.403 \cdot 10^{-5}$	$-1.346 \cdot 10^{-8}$
x_i	0.5554	0.8871	0.0513	0.9930
y_i	0.6062	0.1220	0.0473	0.0066

На рис. 1 изображена картина линий тока и ее фрагменты при $Re = 400$. В работе использованы обозначения для вихрей, предложенные в работе [1]. Знаком «+» обозначаются центры вихрей, и каждому из них присваивается свой буквенный индекс.

В табл. 1 приведены координаты центров вихрей (x_i, y_i), представленных на графиках, и значения функ-

ции тока $\psi(x_i, y_i)$ в них.

На рис. 1 пунктирной линией отмечены сечения $x = 0.5569$ и $y = 0.6081$, в которых построены эпюры, изображенные на рис. 2, которые иллюстрируют сходимость при увеличении числа узлов. При дальнейшем увеличении числа узлов результаты визуально становятся неразличимыми.

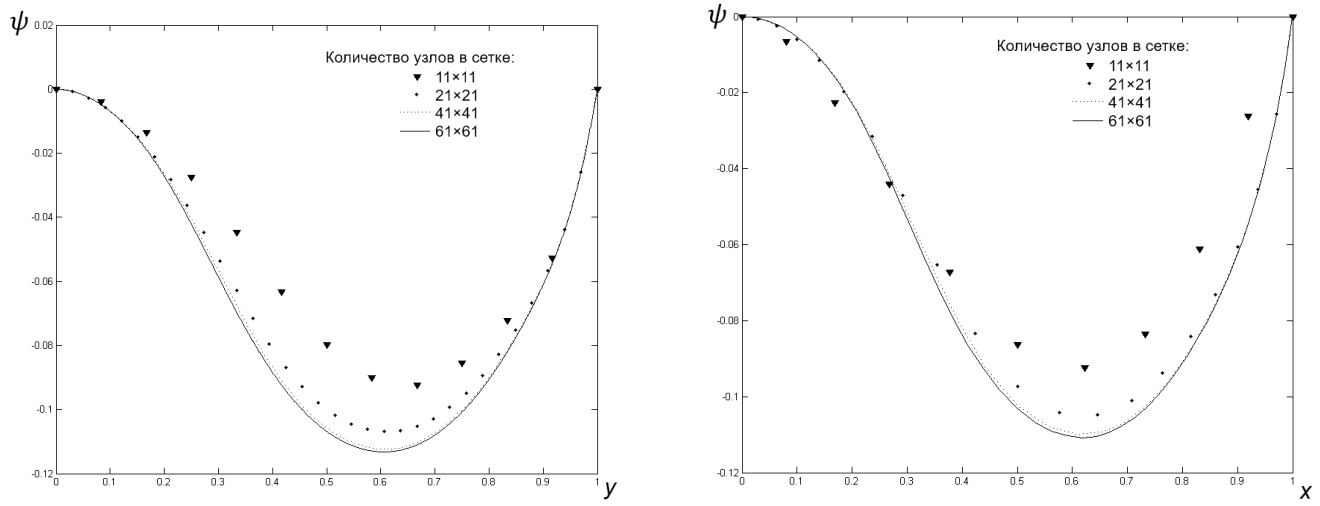


Рис. 2: Эпюры функции тока ψ, вычисленной на последовательности сгущающихся сеток.

Аналогичный смысл, но для числа Рейнольдса $Re = 7500$, имеют рис. 3 и табл. 2.

Таблица 2: Численные характеристики вихрей в каверне при $Re = 7500$.

i	a	b	c	d	e
Работа [1], сетка 640×640.					
ψ_i	-0.1182	$3.139 \cdot 10^{-3}$	$1.493 \cdot 10^{-3}$	$2.003 \cdot 10^{-3}$	$-2.033 \cdot 10^{-5}$
x_i	0.5136	0.7916	0.0649	0.0664	0.9533
y_i	0.5322	0.0656	0.1520	0.9120	0.0402
Эта работа, сетка 61×61.					
ψ_i	-0.1132	$3 \cdot 10^{-3}$	$1.03 \cdot 10^{-3}$	$1.72 \cdot 10^{-3}$	$-1.78 \cdot 10^{-5}$
x_i	0.5235	0.8272	0.0646	0.0667	0.9631
y_i	0.5275	0.0768	0.1521	0.9121	0.0324

Подобное сравнение часто используется для исследования свойств численного метода и может достоверно показать, удовлетворяет ли разностная схема требованиям точности. В этой работе результаты численного эксперимента сопоставлены с большим количеством результатов, полученных другими авторами [1, 2, 3, 4, 5].

В табл. 3 представлены характерные значения компонент скорости течения в каверне u_{min}, v_{min} и v_{max} полученные для разных чисел Рейнольдса. Величины v_{min} и v_{max} — это минимальное и максимальное значение компоненты скорости v, вычисленные на горизонтальной средней линии каверны. Величина u_{min} — это минимальное значение скорости на вертикальной средней линии каверны, а y_{min} — это координата по y, при которой достигается u_{min}.

Сравнение с результатами других авторов свидетельствуют о том, что схема достаточно достоверно показывает картину течений для различных чисел Рейнольдса.

Сетка 61×61, на которой получены расчеты, существенно более грубая, чем сетка 640×640, использованная в работе [1], но несмотря на такое большое различие численные результаты, в том числе в области возвратных вихрей, довольно близки. На наш взгляд, это связано с тем, что в [1] используется кусочно-равномерная сетка со ступенчатой детализацией сетки по мере приближения к углам области. Поэтому в окрестности углов метод работает прекрасно, а области вблизи середин границ квадрата детализацией не охвачены. В нашем методе, напротив, сетка сгущается в окрестности всех твердых поверхностей.

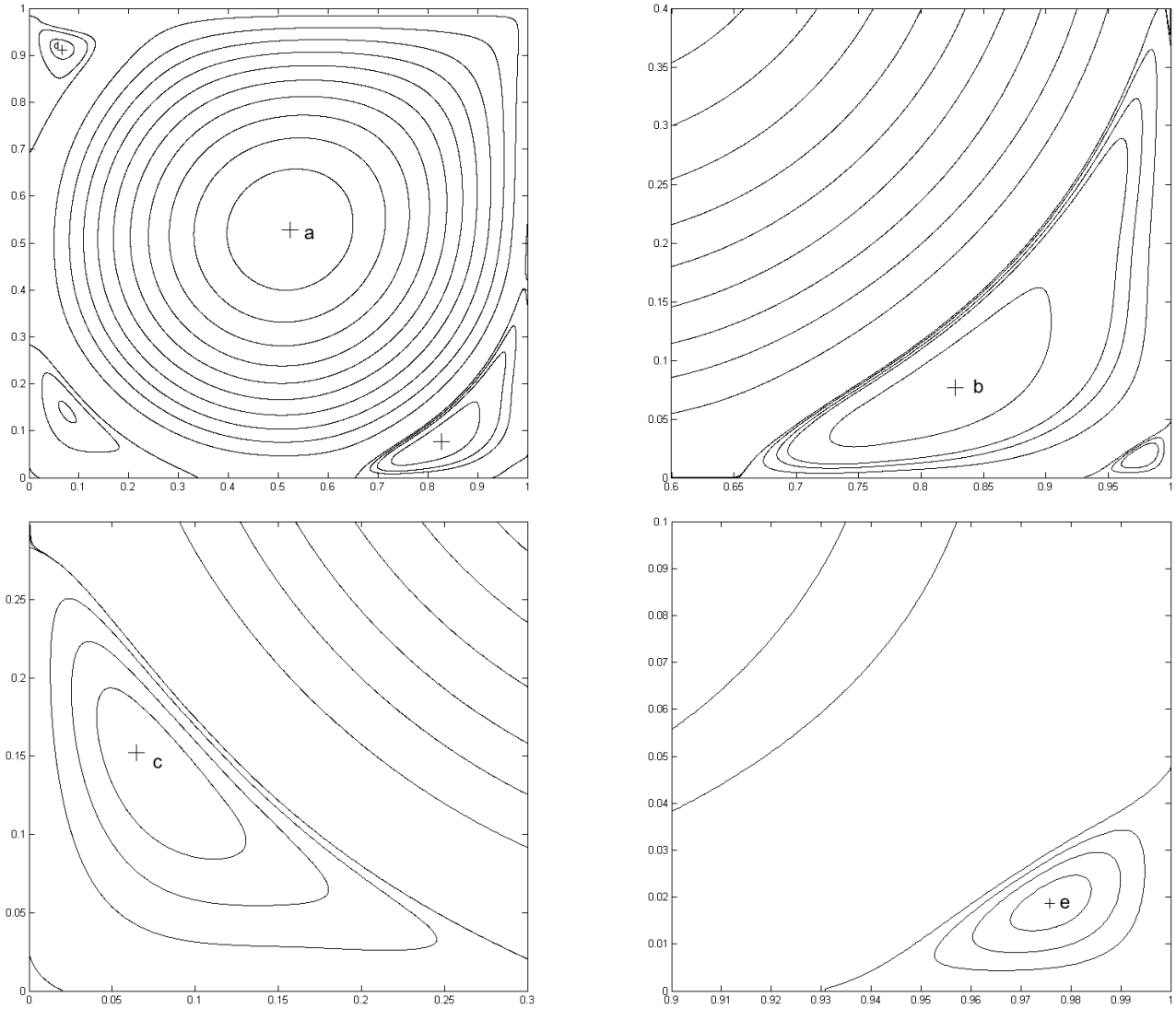


Рис. 3: Линии тока в каверне при $Re = 7500$ и их детализированные фрагменты.

Таким образом, предложен и реализован метод численного исследования течений жидкости, который заключается в сочетании схем повышенного порядка аппроксимации и неравномерных сеток. Численными экспериментами показано, что схема описывает течение в каверне на уровне лучших известных методов, позволяя при этом существенно экономить на числе узлов сетки.

Таблица 3: Характерные значения компонент скорости течения в каверне.

Метод	Сетка	u_{min}	y_{min}	v_{min}	v_{max}
$Re = 1$					
Работа [2]	80×80	-0.20777	0.5390625	-0.18483	0.18408
Работа [1]	640×640	-0.20755	0.53594	-0.18476	0.18394
Эта работа	21×21	-0.20223	0.53000	-0.18012	0.17935
Эта работа	41×41	-0.2061	0.53482	-0.1834	0.1826
Эта работа	51×51	-0.2065	0.53484	-0.1838	0.1831
$Re = 100$					
Работа [3]	129×129	-0.21090	0.4531	-0.24533	0.17527
Работа [4]	96×96	-0.2140424	0.4581	-0.2538030	0.1795728
Работа [1]	640×640	-0.21412	0.45781	-0.2593	0.17968
Работа [2]	160×160	-0.21412	0.4609375	-0.25391	0.17968
Эта работа	21×21	-0.19982	0.45833	-0.24184	0.1701
Эта работа	41×41	-0.20793	0.4590	-0.2491	0.1756
Эта работа	61×61	-0.2107	0.4586	-0.2509	0.1772
$Re = 400$					
Работа [3]	129×129	-0.32726	0.2813	-0.44993	0.30203
Работа [1]	640×640	-0.32903	0.27969	-0.45439	0.30421
Работа [2]	80×80	-0.32947	0.28125	-0.45466	0.30464
Эта работа	21×21	-0.2784	0.2942	-0.3958	0.2624
Эта работа	41×41	-0.3158	0.2862	-0.4399	0.2930
Эта работа	61×61	-0.3229	0.2845	-0.4476	0.2988
$Re = 1000$					
Работа [3]	129×129	-0.38289	0.1719	-0.51550	0.37095
Работа [1]	1280×1280	-0.38893	0.17171	-0.52744	0.3737
Работа [4]	160×160	-0.38857	0.1717	-0.52708	0.37694
Работа [5]	601×601	-0.3869	0.18	-0.5263	0.3756
Работа [2]	160×160	-0.38907	0.171875	-0.52692	0.37745
Эта работа	21×21	-0.2917	0.2077	-0.4070	0.2875
Эта работа	41×41	-0.3653	0.1790	-0.4974	0.3555
Эта работа	61×61	-0.3747	0.1773	-0.5098	0.3641
$Re = 7500$					
Работа [3]	129×129	-0.43590	0.0625	-0.55216	0.44030
Работа [1]	1280×1280	-0.44876	0.06036	-0.57455	0.44970
Работа [5]	601×601	-0.4491	0.06	-0.5550	0.4495
Эта работа	21×21	-0.3545	0.5489	-0.5274	0.4036
Эта работа	41×41	-0.4008	0.5732	-0.5430	0.4320
Эта работа	61×61	-0.4338	0.0598	-0.5640	0.4480

Список литературы

[1] Исаев В.И., Шапеев. В.П. Развитие метода коллокаций и наименьших квадратов // Труды Института математики и механики УрО РАН. 2008. Т. 14, № 1. С. 52–58.

[2] Shapeev V.P., Semin L.G., Belyaev V.V. The collocation and least squares method for numerical solution of Navier — Stokes equations // Proc. of the Steklov Inst. of Math. Suppl. 2. 2003. P. S115–S137.

[3] Ghia U., Ghia K.N., Shin C.T. High-re solutions for incompressible flow using the Navier — Stokes equations and a multigrid method // J. Comput. Phys. 1982. №. 48. P. 387–411.

[4] Botella O., Peyret R. Benchmark spectral results on the lid-driven cavity flow // Computers & Fluids. 1998. Vol. 27, № 4. P. 421–433.

[5] Erturk E., Corke T.C., Gokcol C. Numerical solutions of 2-D steady incompressible driven cavity flow at high Reynolds numbers // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 2005. № 48. P. 747–774.

Артем Сергеевич Глуховский — студент
Новосибирского государственного университета;
e-mail: artemg1995@gmail.com.
Виктор Иванович Паасонен — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр.
Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: paas@ict.nsc.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

УСЛОВИЯ СУЩЕСТВОВАНИЯ УСТОЙЧИВОГО ЦИКЛА В ОДНОЙ МОДЕЛИ ГЕННОЙ СЕТИ

В. П. Голубятников[1,2]

[1] *Институт математики им. С.Л.Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 517.745.82

Для нелинейной динамической системы, моделирующей простейший молекулярный репрессилятор и несимметричной относительно циклической перестановки переменных получены достаточные условия существования устойчивого цикла в ее фазовом портрете.

Ключевые слова: Нелинейная динамическая система, модели генных сетей, фазовый портрет, циклы, устойчивость.

Введение

В задачах биоинформатики, связанных с моделированием кольцевых генных сетей рассматриваются нелинейные динамические системы

$$\begin{cases} \dfrac{dm_1}{dt} = -k_1 m_1 + F_1(P_3); & \dfrac{dP_1}{dt} = \mu_1 m_1 - \beta_1 P_1; \\ \dfrac{dm_2}{dt} = -k_2 m_2 + F_2(P_1); & \dfrac{dP_2}{dt} = \mu_2 m_2 - \beta_2 P_2; \\ \dfrac{dm_3}{dt} = -k_3 m_3 + F_3(P_2); & \dfrac{dP_3}{dt} = \mu_3 m_3 - \beta_3 P_3. \end{cases} \tag{1}$$

Здесь нелинейные слагаемые $F_j(P)$ представлены положительными строго монотонно убывающими функциями неотрицательного аргумента, описывающими отрицательные обратные связи; k_j, μ_j, β_j — положительные параметры, характеризующие динамику биохимических процессов в моделируемой генной сети. Всюду в дальнейшем будем предполагать, что все параметры систем положительны, $j = 1, 2, 3$, и что если $j = 1$, то $j - 1 = 3$.

В случае $\mu_j = \beta_j$ эта система изучалась нами в работе [1], где были получены условия существования по крайней мере одного цикла в ее фазовом портрете.

В симметричном безразмерном случае, когда $k_1 = k_2 = k_3 = 1$, $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3$, $\mu_j = \beta_j$ и $F_1(P) = F_2(P) = F_3(P) = F(P) \equiv \alpha(1 + P^\gamma)^{-1} + \alpha_0$, система (1) была предложена в [6] для описания динамики функционирования кольцевой генной сети, связывающей три белка с концентрациями $P_1(t)$, $P_2(t)$, $P_3(t)$, которые репрессируют друг друга по циклу, и соответствующие мРНК с концентрациями $m_1(t)$, $m_2(t)$, $m_3(t)$. Такая шестимерная динамическая система инвариантна относительно циклических замен пар переменных $(m_1, P_1) \Rightarrow (m_2, P_2) \Rightarrow (m_3, P_3) \Rightarrow (m_1, P_1)$, что было использовано в [7] при изучении симметричных моделей генных сетей.

В работе [4] аналогичные симметричные системы произвольных размерностей изучались с целью рассчета кольцевых электрических сетей, состоящих из идентичных однонаправленно связанных RLC-контуров.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 15.01.00745).

1 Существование цикла

Целью настоящей работы является установление достаточных условий существования по крайней мере одного устойчивого цикла в инвариантной области следующей динамической системы (2), полученной из системы (1) линейной заменой переменных. Для начала же рассмотрим вопрос о существовании хоть какого-нибудь цикла в ее фазовом портрете; условия существования устойчивого цикла будут изучаться в следующем разделе.

В несимметричном случае системы, аналогичные (1), рассматривались в заметке [8], где в качестве нелинейных слагаемых F_j использовались также и монотонно возрастающие функции. Следуя приведенным там рассуждениям, совершим линейное преобразование $P_j = \mu_j p_j$, $F_j(P_{j-1}) = f_j(p_{j-1})$, после чего система (1) принимает более простой вид:

$$\begin{cases} \dfrac{dm_1}{dt} = -k_1 m_1 + f_1(p_3); & \dfrac{dp_1}{dt} = m_1 - \beta_1 p_1; \\ \dfrac{dm_2}{dt} = -k_2 m_2 + f_2(p_1); & \dfrac{dp_2}{dt} = m_2 - \beta_2 p_2; \\ \dfrac{dm_3}{dt} = -k_3 m_3 + f_3(p_2); & \dfrac{dp_3}{dt} = m_3 - \beta_3 p_3. \end{cases} \tag{2}$$

Введем обозначения: $Q = [0, A_1] \times [0, B_1] \times [0, A_2] \times [0, B_2] \times [0, A_3] \times [0, B_3]$, $A_j = f_j(0)/k_j$, и $B_j = A_j/\beta_j$. Так же, как и в предыдущих наших работах [3, 5], где изучались аналогичные динамические системы других размерностей, можно проверить, что параллелепипед Q, лежащий в положительном октанте $\mathbb{R}^6_+$, является инвариантной областью динамической системы (2); все траектории, начинающиеся в нем при $t = 0$, остаются в Q при всех положительных t.

Координаты каждой стационарной точки системы (2) удовлетворяют уравнениям $\mu_j m_j = \beta_j p_j$ и

$$k_1 m_1 = f_1\left(\frac{f_3(\frac{f_2(m_1/\beta_1)}{\beta_2 k_2})}{\beta_3 k_3}\right);$$

в последнем уравнении левая часть возрастает, а правая является композицией трех монотонно убывающих функций, т.е. монотонно убывает с ростом m_1. Значит это уравнение имеет единственное решение, и поэтому стационарная точка S_0 системы (2) существует и единственна. Пусть $S_0 = (m_1^0; p_1^0; m_2^0; p_2^0; m_3^0; p_3^0)$ — ее координаты. Обозначим через $(-q_j)$ производную $df_j(p)/dp$ монотонно убывающей функции f_j, вычисленную при $p = p_{j-1}^0$, здесь $q_j > 0$.

Для описания комбинаторной структуры фазового портрета системы (2), следуя [1, 3, 5], где аналогичные построения проводились для других динамических систем, разобьем инвариантную область Q плоскостями, $m_j = m_j^0$, $p_j = p_j^0$, проходящими через точку S_0. Обозначим полученные блоки разбиения бинарными индексами:

$$\mathcal{E} = \{\varepsilon_1\varepsilon_2\varepsilon_3\varepsilon_4\varepsilon_5\varepsilon_6\} = \left\{\mathbf{X} \in Q \mid m_1 \gtrless_{\varepsilon_1} m_1^0;\ p_1 \gtrless_{\varepsilon_2} p_1^0;\ m_2 \gtrless_{\varepsilon_3} m_2^0;\ p_2 \gtrless_{\varepsilon_4} p_2^0;\ m_3 \gtrless_{\varepsilon_5} m_3^0;\ p_3 \gtrless_{\varepsilon_6} p_3^0,\ \right\}. \tag{3}$$

Здесь $\mathbf{X} = (m_1, p_1, m_2, p_2, m_3, p_3)$, все индексы ε_1, ε_2, ε_3, ε_4, ε_5, ε_6 принадлежат двухэлементному множеству $\{0, 1\}$, символ $\gtrless_0$ означает $\leq$, а символ $\gtrless_1$ означает $\geq$.

Так же, как в [1], проверка знаков компонент вектора скорости $d\mathbf{X}/dt$ показывает, что для любых двух соседних блоков $\mathcal{E}_1$ и $\mathcal{E}_2$ разбиения (3), имеющих общую пятимерную грань $\mathcal{E}_1 \cap \mathcal{E}_2$, траектории всех точек этой грани переходят только в один из этих двух блоков — либо из блока $\mathcal{E}_1$ в $\mathcal{E}_2$, т.е. $\mathcal{E}_1 \to \mathcal{E}_2$, либо наоборот: $\mathcal{E}_2 \to \mathcal{E}_1$.

Для описания поведения траекторий динамической системы (2) в окрестности ее стационарной точки S_0 рассмотрим матрицу M_0 ее линеаризации в этой точке:

$$M_0 = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -q_1 \\ 1 & -\beta_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -q_2 & -k_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\beta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -q_3 & -k_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -\beta_3 \end{pmatrix}.$$

Ее определитель имеет в своем стандартном выражении всего два ненулевых слагаемых — произведение диагональных элементов и произведение $a^6 := q_1q_2q_3$ недиагональных элементов, поэтому характеристический многочлен матрицы M_0 может быть представлен в виде

$$P(\lambda) = (k_1 + \lambda)(k_2 + \lambda)(k_3 + \lambda)(\beta_1 + \lambda)(\beta_2 + \lambda)(\beta_3 + \lambda) + a^6.$$

Диаграмма (4) показывает, по каким двенадцати блокам разбиения (3) могут проходить циклы динамических систем (1) и (2).

$$\begin{array}{ccccccc}
\{110011\} & \longrightarrow & \{010011\} & \longrightarrow & \{000011\} & \longrightarrow & \{001011\} \\
\uparrow & & & & & & \downarrow \\
\{110010\} & & & & & & \{001111\} \\
\uparrow & & & & & & \downarrow \\
\{110000\} & & & & & & \{001101\} \\
\uparrow & & & & & & \downarrow \\
\{110100\} & \longleftarrow & \{111100\} & \longleftarrow & \{101100\} & \longleftarrow & \{001100\}
\end{array} \tag{4}$$

Обозначим через W объединение всех двенадцати блоков, перечисленных в диаграмме (4). Следующие утверждения доказываются в точности так же, как их аналоги, установленные в [1] для системы (1) в случае $\beta_j = \mu_j$.

Лемма. *При достаточно больших значениях параметра a характеристический многочлен $P(\lambda)$ имеет ровно два комплексных корня с положительными вещественными частями и четыре комплексных корня с отрицательными вещественными частями.*

Теорема 1. *Если характеристический многочлен матрицы M_0 имеет два корня с положительными вещественными частями и четыре корня с отрицательными вещественными частями, то динамическая система* (2) *имеет по крайней мере один цикл, содержащийся в области W, и проходящий по ней в соответствии с диаграммой* (4).

2 Существование устойчивого цикла

В этом разделе в рассуждениях об существовании устойчивого цикла системы (2) мы ограничимся описанием "частично симметричного" случая $k_1 = k_2 = k_3 = k$. Все остальные параметры β_j, а также монотонно убывающие гладкие функции f_j, как и в [1], будут полагаться произвольными, вообще говоря неравными друг другу.

Следуя Смиту (см. [9], а также [5]), представим динамическую систему (2) в виде:

$$\dot{X} = A \cdot X + \Phi(X), \tag{5}$$

где все нелинейные слагаемые правых частей системы (2) (а также некоторые ее линейные слагаемые) содержатся во втором слагаемом $\Phi(X)$, вектор-функция $X(t)$ имеет координаты $(m_1, p_1, m_2, p_2, m_3, p_3)$, и матрица A имеет постоянные коэффициенты. Именно, пусть $A = -kE + \eta\Delta$, η — некоторый положительный параметр и

$$\Phi = \begin{pmatrix} f_1(p_3) + \eta p_3; \\ m_1(1-\eta) + p_1(k - \beta_1); \\ f_2(p_1) + \eta p_1; \\ m_2(1-\eta) + p_2(k - \beta_2); \\ f_3(p_2) + \eta p_2; \\ m_3(1-\eta) + p_3(k - \beta_3); \end{pmatrix}, \qquad \Delta = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Обозначим через Φ' матрицу Якоби отображения $\Phi : \mathbb{R}^6_+ \to \mathbb{R}^6$ и через $\chi(z) := (zE - A)^{-1}$ — переходную матрицу для матрицы A, см. [9]; здесь z — комплексное число. Пусть $\theta(\mathrm{x}) := \sup_\omega ||\chi(\mathrm{i}\,\omega - \mathrm{x})||$ для $-\infty < \omega < \infty$, $\mathrm{x} > 0$. В работе [9] было установлено, что

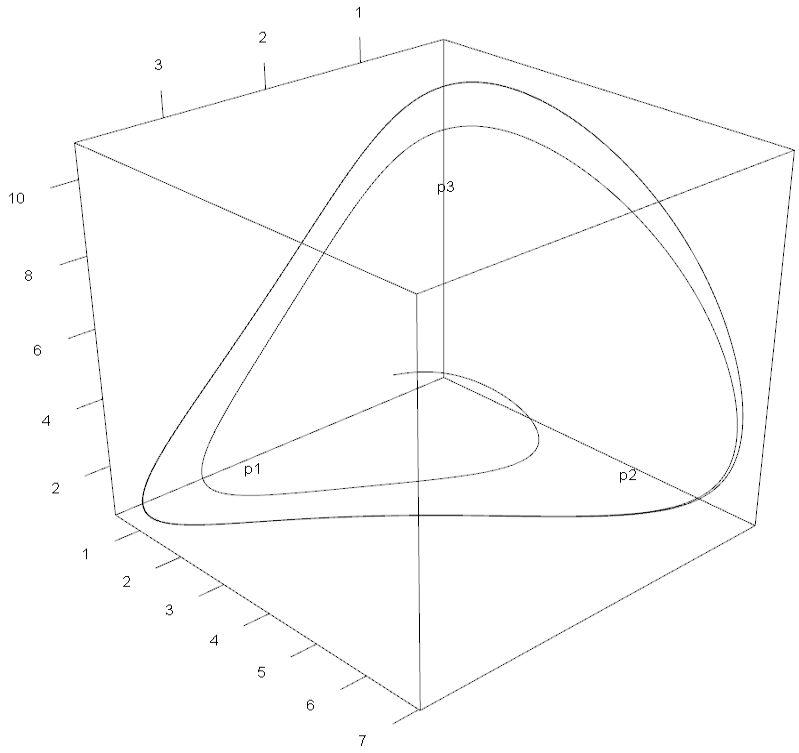


Рис. 1: Проекция траектории и ее предельного цикла системы (2) на плоскость переменных p_1, p_2, p_3 (М.В.Казанцев)

Если у динамической системы (5) *матрица* A *имеет в точности два собственных числа* $\lambda_{1,2}$, *у которых вещественные части больше, чем* $-\rho$, *где* $\rho > 0$, *и в инвариантной области* W *этой системы выполняется неравенство*

$$||\Phi'|| < \theta(\rho)^{-1}, \tag{6}$$

то система (5) *имеет по крайней мере один устойчивый цикл в области* W.

Условие существования устойчивого цикла динамической системы (2) в области W, которое мы сформулируем ниже, будет следовать из условия (6). Несложные, но громоздкие вычисления показывают, что симметричная матрица $\Phi' \cdot (\Phi')^{\perp}$, определяющая квадрат нормы матрицы Якоби Φ', разбивается на три блока:

$$B_1 = \begin{pmatrix} (f_1'+\eta)^2 & (f_1'+\eta)(k-\beta_3) \\ (f_1'+\eta)(k-\beta_3) & (k-\beta_3)^2+(1-\eta)^2 \end{pmatrix},$$

$$B_2 = \begin{pmatrix} (f_2'+\eta)^2 & (f_2'+\eta)(k-\beta_1) \\ (f_2'+\eta)(k-\beta_1) & (k-\beta_1)^2+(1-\eta)^2 \end{pmatrix}, \quad B_3 = \begin{pmatrix} (f_3'+\eta)^2 & (f_3'+\eta)(k-\beta_2) \\ (f_3'+\eta)(k-\beta_2) & (k-\beta_2)^2+(1-\eta)^2 \end{pmatrix},$$

соответствующие парам координатных осей (Om_1, Op_3), (Om_2, Op_1) и (Om_3, Op_2) в фазовом портрете $\mathbb{R}^6$. Таким образом

$$||\Phi'||^2 = \max_j\{||B_j||\}.$$

Нетрудно проверить, что пары корней характеристического многочлена $(k+\lambda(A))^6 + \eta^6 = 0$ матрицы A, у которых вещественные части максимальны, имеют вид $\lambda_{1,2} = -k + \eta\sqrt{3}/2 \pm \eta\, i/2$, у остальных его корней вещественные части меньше или равны $-k$, и поэтому в качестве параметра ρ можно выбрать любое число γk, где $0 < \gamma < 1$.

Матрица Δ в ортогональном базисе $e_1 = (1,0,1,0,1,0)$, $e_2 = (0,1,0,1,0,1)$, $e_3 = (2,\sqrt{3},-1,0,-1,-\sqrt{3})$, $e_4 = (0,-1,\sqrt{3},2,-\sqrt{3},-1)$, $e_5 = (2,-\sqrt{3},-1,\,0,-1,\sqrt{3})$, $e_6 = (0,-1,-\sqrt{3},2,\sqrt{3},-1)$ распадается на три двумерных блока:

$\Delta e_1 = e_2, \quad \Delta e_2 = -e_1; \quad 2\Delta e_3 = \sqrt{3}e_3 - e_4, \quad 2\Delta e_4 = e_3 + \sqrt{3}e_4; \quad 2\Delta e_5 = -\sqrt{3}e_5 - e_6, \quad 2\Delta e_6 = e_5 - \sqrt{3}e_6.$

Отсюда следует, что переходная матрица $(i\omega - \rho)E - A = (i\omega + k - \rho)E - \eta\Delta$ также распадается на три аналогичных блока

$$H_{1,2} = \begin{pmatrix} i\omega + k - \rho & \eta \\ -\eta & i\omega + k - \rho \end{pmatrix}, \qquad H_{3,4} = \begin{pmatrix} i\omega + k - \rho - \eta\sqrt{3}/2 & \eta/2 \\ -\eta/2 & i\omega + k - \rho - \eta\sqrt{3}/2 \end{pmatrix},$$

$$H_{5,6} = \begin{pmatrix} i\omega + k - \rho + \eta\sqrt{3}/2 & \eta/2 \\ -\eta/2 & i\omega + k - \rho + \eta\sqrt{3}/2 \end{pmatrix}.$$

Для нахождения $\theta(\rho)^{-1}$ надо вычислить $\inf_\omega$ минимального квадрата нормы каждого из этих трех блоков и выбрать из них наименьший. Имеем:

$||H_{1,2}||^2 = (k-\rho)^2 + \max(\omega \pm \eta)^2, \qquad ||H_{3,4}||^2 = [(k-\rho) - \eta\sqrt{3}/2]^2 + \max(\omega \pm \eta/2)^2,$
$||H_{5,6}||^2 = [(k-\rho) + \eta\sqrt{3}/2]^2 + \max(\omega \pm \eta/2)^2.$

Таким образом мы получаем основной результат настоящей работы:

Теорема 2. *Если $k_1 = k_2 = k_3$, и в инвариантной области W при некотором положительном η выполняется неравенство*

$$\min_j ||H_{2j-1,2j}||^2 > \max_s ||B_s||, \quad j, s = 1, 2, 3,$$

то система (2) имеет по крайней мере один устойчивый цикл в области W.

В полностью несимметричном случае $k_1 \neq k_2 \neq k_3 \neq k_1$, для которого аналог теоремы 1 был установлен в [1], матрица $(i\omega - \rho)E - A$ на двумерные блоки не распадается, и тогда проверка условия (6) становится громоздкой.

Вопросы единственности циклов в фазовых портретах динамических систем (1) и (2) остаются открытыми. У подобных полностью симметричных динамических систем бóльших размерностей количество циклов может оказаться довольно большим, оно растет с ростом их размерностей и зависит также от значений их параметров, см. [2, 3].

3 Результаты вычислительных экспериментов

М.В. Казанцевым был проведен ряд численных экспериментов с траекториями и циклами рассматриваемых динамических систем; результаты приведены в https://maxim-kazantsev.shinyapps.io/ElowitzLeibler/, см. также [1].

В частности, на рис. 1 показана проекция траектории системы (2) и ее предельного цикла на плоскость переменных p_1, p_2, p_3 в $\mathbb{R}^6$; значения использованных параметров этой системы перечислены в указанном ресурсе и в [1].

Заключение

Автор выражают искреннюю благодарность Н.Б. Аюповой за полезные обсуждения и М.В. Казанцеву за проведение серии численных экспериментов.

Список литературы

[1] Акиньшин А.А., Аюпова Н.Б., Голубятников В.П., Казанцев М.В. Геометрия фазового портрета одной генной сети // Труды 12-й Международной Азиатской школы-семинара "Проблемы оптимизации сложных систем". Новосибирск, ИВМ и МГ СО РАН, 12 – 16 декабря 2016, С. 18–24.

[2] Акиньшин А.А. Бифуркация Андронова–Хопфа для некоторых нелинейных уравнений с запаздыванием // Сибирский журнал индустриальной математики. 2013. Т. 16 ,N 3, С. 3–15.

[3] Акиньшин А.А., Голубятников В.П. Циклы в симметричных динамических системах // Вестник НГУ. 2012. Серия: Математика, механика, информатика. Т. 12, N 2, С. 3–12.

[4] Глызин С.Д., Колесов А.Ю., Розов Н.Х. Явление буферности в кольцевых цепочках однонаправленно связанных генераторов // Известия РАН, серия математическая. 2014. Т. 78, N 4. С. 73–108.

[5] Голубятников В.П., Голубятников И.В., Лихошвай В.А. О существовании и устойчивости циклов в пятимерных моделях генных сетей // Сибирский журнал вычислительной математики. 2010. Т. 13, N 4. С. 403–411.

[6] Elowitz M.B., Leibler S. A synthetic oscillatory network of transcriptional regulators // Nature. 2000. V. 403. P. 335–338.

[7] Колесов А.Ю., Розов Н.Х., Садовничий В.А. Периодические решения типа бегущих волн в кольцевых генных сетях // Известия РАН, серия математическая. 2016. Т. 80, N 3. С. 67–94.

[8] Samad H.El, Del Vecchio D., Khammash M. Repressilators and Promotilators: Loop dynamics in gene regulatory networks // Proc. American Control Conference, 2005, p, 4405–4410.

[9] Smith R. A. Orbital stability for ordinary differential equations // Journal of differential equations. 1987. V. 69, p. 265–287.

Владимир Петрович Голубятников — д.ф.-м.н., гл. науч.сотр.
Институт математики им. С.Л.Соболева СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: vladimir.golubyatnikov1@fulbrightmail.org.
Дата поступления — 12 апреля 2017 г.

МЕЗОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТМОСФЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРЕ ТГУ СКИФ CYBERIA

В. П. Горбатенко[1], А. В. Старченко[1,2,3]

[1] *Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050, Томск*

[2] *Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН, 634055, Томск*

[3] *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 551.509

Аннотация. Представляются работы по мезомасштабному моделированию атмосферных процессов на суперкомпьютере ТГУ СКИФ Cyberia: уровня загрязнения воздуха в г. Томск по ряду показателей, прогнозу обледенения самолетов над аэропортом г.Томск с заблаговременностью до 36 часов, прогнозу развития мезомасштабной конвекции и грозы, прогнозу осадков и метеорологической дальности видимости с привлечением численных расчетов по мезомасштабной модели. Для реализации большинства алгоритмов была использована модернизированная мезомасштабная метеорологическая модель TSU-NM3. Для моделирования конвекции и количества выпавших осадков использовалась модель WRF.

Ключевые слова: суперкомпьютер СКИФ Cyberia, моделирование атмосферных процессов.

Введение

Проблема предсказания погоды и климата на основе численного моделирования является центральной среди многочисленных задач, связанных с исследованием как климатической системы Земли в целом, так и отдельных компонентов на разных временных масштабах. К настоящему времени предложен ряд математических моделей для решения задач прогноза погоды и климата и численных алгоритмов для их решения.

Однако, уравнения гидротермодинамики, описывающие атмосферные процессы, сложны, и актуальной задачей остается необходимость разработки новых алгоритмов, способных с большей точностью решить широкий спектр задач динамической метеорологии и прогноза погоды. Построение качественных алгоритмов решения таких задач способствует решению проблемы аппроксимации уравнений гидротермодинамики атмосферных процессов и устойчивости полученных разностных схем, которые являются основными ориентирами при создании новых численных алгоритмов.

Целью настоящей работы является представление мезомасштабных моделей атмосферного пограничного слоя с высоким разрешением, созданных для улучшения прогноза ряда опасных явлений погоды и состояния атмосферы Сибирского региона.

Математические модели для численного решения рассматриваемых задач опираются на использование многомерных нестационарных уравнений динамической метеорологии для полей компонент скорости, температуры, влажности. В мезомасштабной метеорологической модели TSU-NM3 учитывается коротковолновый и длинноволновый радиационный перенос тепла, турбулентный обмен, образование облачной и дождевой влаги. Численное решение задач выполнялось на высокопроизводительной многопроцессорной вычислительной технике с использованием технологий параллельного программирования OpenMP и MPI. Статистическая интерпретация результатов численного прогноза погоды и опасных явлений погоды осуществлена с использованием методов математической статистики: регрессионный, дискриминантный анализ (расчет синхронных связей между прогностическими полями, полученными по модели, и элементами погоды).

Методика выполнения работы базируется на использовании метода конечных разностей и метода конечного объема, явных и неявных разностных схем. При разработке параллельных алгоритмов для численного решения дифференциальных уравнений на суперкомпьютере ТГУ СКИФ CYBERIA применяется принцип

декомпозиции сеточной области, метод красно-черного упорядочивания узлов сетки, стандарты параллельного программирования Message Passing Interface и OpenMP.

Качество прогнозов состояния атмосферы — важнейшая характеристика, которая определяет способность прогнозов отвечать требованиям потребителя: полнота, достоверность, своевременность, удобство представления и использования. Качество прогнозов обеспечивается применением эффективных прогностических моделей, соблюдением процедур подготовки прогнозов, использованием однотипных методик и рассчитываемых характеристик для оценки прогнозов. Для проверки результатов моделирования, представленных в настоящей работе, использованы наблюдения, проводимые с помощью как существующей приборной базы в аэропорту Томска, на гидрометеорологической станции Томск, Институте оптики атмосферы СО РАН (ТОР-станция), так и профилемеров, лидаров, акустических датчиков.

1 Моделирование переноса примесей

При моделировании переноса примеси с использованием фотохимической модели исследуемая территория разбита на 104 квадратов размерами $0,5 \times 0,5$ км, из которых чуть более 1500 приходится на Томск. Оставшаяся часть приходится на окрестности Томска. При моделировании используются данные о рельефе и категориях землепользования (24 категории USGS) с пространственным разрешением 30" (секунд). Рассчитанные метеопараметры включают следующие характеристики: значения температуры воздуха, удельной влажности, атмосферного давления, зональной и меридиональной составляющих скорости ветра, направление ветра на 30 уровнях, сгущающихся при приближении к поверхности земли, накопленные суммы осадков, облачность. Данные представлены в цифровом виде для каждого узла квадрата для каждого уровня за определенный момент времени. Фотохимическая модель позволяет рассчитать выбросы 17-ти различных веществ: пыль, сажа, CO, SO2, NO2, NO, CH2O, C6H5OH, CH, C7H8, C8H10, CH3OH и других. Уровень загрязнения (содержание примесей) рассчитывается в ppb (10^{-9} значения величины). Результаты расчетов по модели могут быть представлены в виде цифровых данных по площади за отдельные моменты времени, а также для отдельных точек в виде изменения во времени содержания различных примесей.

В процессе работы, исходя из современных представлений о характеристиках состояния атмосферы и уровня загрязнения с учетом погрешностей приборов, а также возможностей математических моделей, было проведено сравнение расчетов по модели TSU NM3 температуры воздуха на уровне 2 м, относительной влажности, скорости ветра, температуры точки росы. Оценка фотохимической модели выполнена построением графических зависимостей изменения во времени различных примесей для точек, соответствующих пунктам наблюдений. Изменения содержания примесей дается на основе рассчитываемых по фотохимической модели и по фактическим данным. Соотношения позволяют оценить соответствие расчетов фактическим значениям [1, 2].

Результаты моделирования переноса примесей:

При отсутствии опасных концентраций загрязняющих веществ прогностические кривые всех загрязняющих веществ совпали с реальными кривыми по наблюдениям на ТОР-станции.

Результаты расчетов хорошо отражают влияние метеорологических условий и в первую очередь стратификации температуры атмосферы. Вертикальные профили температуры в районе центральной части г. Томск и в районе аэропорта Богашево, расстояние между которыми составляет 24 км принципиальных отличий в видах стратификации температуры и в ее значениях не имеют. Можно лишь отметить наличие некоторых расхождений в прогностическом профиле в ночные и утренние часы в одном из экспериментов для октября [3].

Достаточно хорошо моделируются увеличение концентрации озона в дневное время, увеличение содержания примесей и индекса загрязнения после 18 часов. Однако фотохимическая модель несколько завышает содержание озона и диоксида азота. При этом модель детально отражает содержание различных примесей по времени и в пространстве, фиксируя их изменения.

Кроме того, модель подтверждает наличие острова тепла в нижнем слое над исследуемой территорией, толщина которого составляет 100–200 м при небольшой интенсивности ($1 - 2^{\circ}$C).

К достоинствам результатов следует отнести большую детализацию расчетов состояния атмосферы и содержания примесей во времени и пространстве [4].

2 Эксперименты с метеорологической дальностью видимости

Прогноз метеорологической дальности видимости (МДВ) осуществлялся для случаев ухудшения прозрачности атмосферы в условиях: 1) тумана и дымки и 2) при дожде. В первом случае моделировались значения МДВ на фоне малоградиентного барического поля и фронта окклюзии. Наблюдалась облачная погода с прояснениями, небольшой дождь, местами умеренный, днем гроза. В районе Томска отмечались дым, дымка, туман, обусловленные пожарами и конденсацией водяного пара при понижении температуры в ночные и утренние часы. Влагосодержание воздуха при этом увеличилось за счет выпадения осадков [5, 6].

Во втором случае на фоне пониженного давления и прохождения атмосферных фронтов наблюдалась облачная погода с прояснениями, небольшие, местами умеренные, дожди, ливни.

Исходя из физических закономерностей и имеющихся методик метеорологическая дальность видимости в тумане зависит от его водности, а в дожде — от интенсивности. В качестве прогностических характеристик использованы рассчитываемая по модели характеристика водности — содержание облачной влаги в атмосфере, а интенсивность дождя оценивалась как модельная величина — скорость выпадения осадков.

При прогнозе видимости в тумане и дымке фактическая и прогностическая МДВ различаются как по величине (модель уменьшает МДВ по сравнению с фактической), так и по времени регистрации (запаздывание примерно 2 часа и удлинение периода минимальных значений видимости). Возможная причина отклонений обусловлена погрешностями модели в прогнозе температурно-влажностных характеристик. Тем не менее полученный результат расчета МДВ следует признать как вполне обнадеживающий. Для получения количественных показателей необходим набор достаточного числа случаев. Видимость в дожде прогнозировалась от 1000 м в начале дождя до 190 в его конце, что соответствует физическим представлениям о значениях метеорологической дальности видимости в дожде. Получено, что фактическая МДВ была несколько выше спрогнозированной.

Опыт применения модели для прогноза видимости показывает перспективность ее использования при формировании достаточного количества числа модельных расчетов.

3 Эксперименты с обледенением воздушных судов

Оценка прогнозов была выполнена за отдельные дни в октябре — ноябре 2014–2015 гг., так как в эти месяцы обледенение воздушных судов отмечается наиболее часто. Погодные условия в это время схожи: отрицательная температура воздуха (от 0 до -16°C), высокая влажность, наличие облаков и (или) осадков. Оценка прогнозов была проведена для температуры воздуха, температуры точки росы и относительной влажности.

На основе мезомасштабной метеорологической модели TSU-NM3B выполнены прогнозы метеоусловий, способствующих обледенению воздушных судов в атмосферном пограничном слое [7, 8, 9, 10]. В качестве критериев возможности обледенения самолета при взлете или посадке использовались формула Годске, основанная на расчете температуры насыщения надо льдом, метод NCEP и статистический метод Гидрометцентра РФ. Результаты численного прогноза сравнивались с реальными наблюдениями в атмосферном пограничном слое в районе аэропорта Богашево (Томск). Предложенная на основе выходной продукции численной модели TSU-NM3 методика прогноза обледенения воздушных судов показала свою эффективность и может быть положена в основу разработки регионального метода прогноза зон обледенения.

Выполненные оценки успешности модельного прогноза температуры, влажности воздуха и скорости ветра при разных погодных условиях указывают на примерно одинаковые погрешности для разных пунктов территории.

В пределах рассматриваемого периода прогноза (до 40 ч) погрешности не зависят от срока прогноза. Отмечена тенденция завышения температуры и занижения относительной влажности воздуха в дневное и вечернее время. Для температуры и влажности воздуха знак систематической ошибки может изменяться при разных погодных условиях. Скорость ветра несущественно завышается моделью.

Показатели погрешностей модельного прогноза зависят от характера погоды. Наилучшие результаты получены при условиях, способствующих обледенению, т.е. небольших отрицательных температурах и повышенной влажности в осенне-зимний период. Качество прогноза в таких ситуациях лучше, чем для существующих региональных моделей. При погодных условиях, характеризующихся выпадением осадков, появлением тумана, качество модели TSU NM3 сопоставимо с моделями, используемыми в настоящее время в оперативной практике прогнозов погоды. Наибольшие погрешности прогнозирования температуры воздуха отмечены в условиях слабого ветра.

По статистической интерпретации результатов численного прогноза погоды и опасных явлений погоды, в частности, обледенения воздушных судов, использовалась методология PP-концепции. В качестве физико-статистических зависимостей были привлечены алгоритм Годске, дискриминантная функция Гидрометцентра РФ количественные интервалы температуры воздуха и относительной влажности, предложенные NCEP (National Centers for Environmental Prediction, USA).

Проведенные расчеты показали, что, в целом, мезомасштабная модель хорошо предсказывает развитие метеорологических условий, а качество прогностической продукции модели TSU NM3 в неблагоприятных метеорологических условиях для авиации и других отраслей хозяйства можно признать достаточно хорошим, что указывает на возможность использования модели для обслуживания соответствующих потребителей.

4 Определение пространственной локализации конвективных кластеров

В настоящее время прогноз динамики и пространственной локализации развитых конвективных кластеров имеет важнейшее значение для территорий, слабо освещенных данными наземных наблюдений. К числу опасных проявлений конвективной деятельности относят сильные грозы, град, шквалы, смерчи, которые обладают огромной разрушительной силой, наносят значительный материальный ущерб различным отраслям хозяйства и нередко приводят к гибели людей. Признаки, по которым в атмосфере Земли можно выявить зоны неустойчивости и наличие опасных конвективных явлений, изложены в [11]. В рамках настоящих исследований была предпринята попытка WRF моделирования пространственного положения одного их конвективных кластеров, продуцировавшего грозу и град. Положение кластера оценивалось по индексу неустойчивости TOTL, верифицирование границ конвекции произведено с использованием данных спектрорадиометра MODIS, установленного на спутнике TERRA [12, 13]. Модель основана на численном решении системы уравнений гидротермодинамики атмосферы. Было показано, что она дает удовлетворительные результаты при прогнозе метеорологических параметров. В качестве начальных и граничных условий в модели WRF использовались результаты численного прогноза по глобальной модели ПЛАВ ГУ Гидрометцентр России Выходная продукция модели WRF — ежечасные прогностические поля метеовеличин. Для моделирования был выбран конкретный случай образования опасного конвективного явления на территории Кемеровской области, которое не было спрогнозировано практикуемыми методами. Моделировалось поле распределения индекса неустойчивости TOTL, содержащего значения температуры и влажности воздуха на заданных уровнях. Критерием развития явления служат пороговые значения индексов неустойчивости, определенные для вероятностей 50%, 70% и 90%[14, 15]. Например значения индекса TOTL>50°C свидетельствуют о высокой вероятности развития грозы и града в анализируемый период. Получено, что результаты расчета глобальной модели ПЛАВ достаточно хорошо выделяют зону со значениями индекса TOTL>50°, однако зона конвективной активности по площади несколько больше, чем получено по данным данными MOD07_L2. Тем не менее, можно отметить, что приведенный пример иллюстрирует перспективу использования космических снимков в совокупности с численным моделированием погоды, который позволит успешнее прогнозировать динамику и пространственную локализацию развитых конвективных кластеров для территории Западной Сибири.

Заключение

Применение для Сибирского региона мезомасштабных моделей атмосферного пограничного слоя с высоким разрешением, созданных для улучшения прогноза ряда опасных явлений погоды и состояния атмосферы, показало:

1. Расчеты по модели TSUNM3 предсказывают для г. Томска в осенний период наличие острова тепла небольшой мощности, суточное изменение концентрации озона, совпадающее с наблюдениями ТОР станции ИОА СО РАН, существенное влияние вертикальной стратификации приземного слоя атмосферы на уровень загрязнения воздуха при слабом ветре, перспективность применения модели для прогнозирования метеорологической дальности видимости и обледенения воздушных аппаратов на взлете и посадке.

2. Расчеты по модели WRF в сочетании с информацией, получаемой из космических снимков, могут применяться для прогнозирования динамики и пространственной локализации развитых конвективных кластеров для территории Западной Сибири.

Список литературы

[1] Starchenko A. V., Bart A. A., Kizhner L. I., Barashkova N. K., Volkova M. A., Zhuravlev G. G., Kuzhevskaya I. V., Terenteva M. V. Analysis of observations and results of numerical modeling of meteorological parameters and atmospheric air pollution under weakwind conditions in the city of Tomsk // Proc. SPIE 9680, 21st International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics, 96806Z (November 19, 2015). P. 1–7.

[2] Старченко А. В., Барт А. А., Кижнер Л. И., Барашкова Н. К., Волкова М. А., Журавлев Г. Г., Кужевская И. В., Терентьева М. В. Анализ наблюдений и численного моделирования метеорологических условий и загрязнения атмосферного воздуха в условиях слабого ветра в Томске // Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы: Тезисы докладов XXI Международного симпозиума. — Томск: Изд-во ИОА СО РАН, 2015. — С.11–14.

[3] Akhmetshina A. S., Kizhner L. I., Kuzhevskaia I. V., Bart A. A., Zuev V. V., Shelekhov A. P. Using WRF mesoscale model to restore temperature profile in atmosphere boundary layer in Tomsk // Proc. SPIE 9680, 21st International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics, 968069 (November 19, 2015). P. 1–5.

[4] Кижнер Л.И., Барашкова Н.К., Ахметшина А.С., Барт А.А., Поляков Д.В. Оценка точности численных прогнозов метеорологических условий в районе г. Томска с использованием модели WRF // Вестник Томского государственного университетата. 2013, № 375, С. 174–178.

[5] Старченко А.В., Барашкова Н.К., Кижнер Л.И., Волкова М.А., Кужевская И.В., Барт А.А. О прогнозируемости метеорологической дальности видимости с использованием мезомасштабных моделей высокого разрешения. // Материалы XXII Международного симпозиума «Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы», Томск: Издательство ИОА СО РАН, 2016. D376–D380.

[6] Starchenko A., Barashkova N., Kizhner L., Volkova M., Kuzhevskaya I., Bart A. Meteorological optical range predictability with the use of high resolution mesoscale models // 22nd International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics. Proc. of SPIE Vol. 10035, 100356X-1-100356X-5.

[7] Волкова М.А., Старченко А.В., Барт А.А., Кужевская И.В., Кижнер Л.И., Барашкова Н.К., Новаева Г.А. Обледенение в пограничном слое атмосферы: условия формирования и прогноз. // Материалы XXII Международного симпозиума «Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы», Томск: Издательство ИОА СО РАН, 2016, D31–D34.

[8] Volkova M.A., Starchenko A.V., Kuzhevskaya I.V., Bart A.A., Kizhner L.I., Barashkova N.K. Forecast of icing zones using possibilities of hydrodynamic simulation for the atmospheric boundary layer // 22nd International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics. Proc. of SPIE Vol. 10035, 1003567-1-1003567-7.

[9] Sitnikov G. I., Starchenko A. V., Terenteva M. V., Barashkova N. K., Volkova M. A., Kuzhevskaia I. V., Kizhner L. I. Forecast of Extreme Weather Conditions that Promote Aircraft Icing During Take-off or Landing // Proc. SPIE 9680, 21st International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics, 96806T (November 19, 2015). P. 1–7.

[10] Kizhner L. I., Barashkova N. K., Akhmetshina A. S., Bart A. A., Starchenko A. V. Forecast of precipitation in the area of Bogashevo airport using the WRF model // Atmospheric and Oceanic Optics, March 2014, Volume 27, Issue 2, pp 187–194.

[11] Горбатенко В.П., Кречетова С.Ю., Беликова М.Ю., Нечепуренко О.Е. Сравнение индексов неустойчивости атмосферы, восстанавливаемых по данным радиозондирования и спектрорадиометра MODIS в дни с грозами, над территорией Западной Сибири. //Метеорология и гидрология. 2015. № 5. С. 10–19.

[12] Nechepurenko O.E., Gorbatenko V.P, Bart A. A, Belikova M.Yu.. The forecast of the spatial position of convective cells using a data by global SL-AV NWP model // Proc. SPIE 10035, 22nd International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics, 100356N (November 29, 2016); 100356N-1-100356N-5.

[13] Горбатенко В.П., Нечепуренко О.Е., Барт А.А., Беликова М.Ю. Прогноз пространственной локализации конвективных кластеров по данным глобальной модели прогноза ПЛАВ // Материалы XXII Международного симпозиума «Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы», Томск: Издательство ИОА СО РАН, 2016. С. D11–D14.

[14] D.A. Konstantinova, V.P. Gorbatenko. Threshold values of characteristics of atmosphere instability during thunderstorms// Proc. SPIE 10035, 22nd International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics, 100356Q (November 29, 2016) 100356Q-1- 100356Q-6.

[15] Д.А. Константинова, В.П. Горбатенко. Пороговые значения термодинамических характеристик атмосферы при различных конвективных явлениях. // Материалы XXII Международного симпозиума «Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы», Томск: Издательство ИОА СО РАН, 2016. D436-D438.

Горбатенко Валентина Петровна — д.г.н., заведующий кафедрой метеорологии и климатологии Томского государственного университета;
e-mail: vpgor@ggf.tsu.ru;
Александр Васильевич Старченко — д.ф.-м.н., декан Механико-математического факультета Томского государственного университета;
e-mail: starch@math.tsu.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

БИКРИТЕРИАЛЬНЫЙ ГЛОБАЛЬНЫЙ ПОИСК В ЗАДАЧЕ ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССА ФЛОТАЦИИ МЕДНО-МОЛИБДЕНОВЫХ РУД

Т. В. Груздева, А. В. Ушаков

Институт динамики систем и теории управления имени В. М. Матросова СО РАН, 664033, Иркутск

УДК 519.853.4

К решению задачи оптимизации процесса пенной флотации медно-молибденовых руд предлагается новый подход, основанный на теории глобального поиска для невыпуклых задач с d.c. функциями, методе точного штрафа и методе главного критерия. Цель состоит в поиске оптимальных значений параметров процесса, приводящих к максимальному содержанию меди в концентрате и одновременно к максимальному ее извлечению при заданных технологических ограничениях. Разработанная методика нахождения приближенного множества Парето в бикритериальной задаче основана на решении серии подзадач с d.c. ограничением. Поиск оптимальных решений невыпуклых подзадач состоит из двух основных этапов: локального поиска и основанных на условиях глобальной оптимальности процедур выхода из локальных решений. Эффективность предложенного подхода продемонстрирована на одной модели процесса флотации на СПГОК «Эрдэнэт» (Монголия).

Ключевые слова: невыпуклая оптимизация, d.c. программирование, точный штраф, метод главного критерия, множество Парето, локальный поиск, глобальный поиск.

Введение

Обогащение руды представляет собой сложный промышленный процесс, направленный на первичную обработку руд с целью извлечения ценных минералов. Флотация является одним из основных методов обогащения полезных ископаемых. Цель процесса состоит в отделении ценных минералов от пустой породы и повышении их концентрации (производство концентрата), чтобы сделать последующий процесс извлечения минералов экономически более выгодным [1].

Изучению и моделированию производственных процессов, связанных с переработкой минерального сырья, посвящено множество публикаций (см. обзор в [1, 2]). Подавляющее большинство оптимизационных моделей — это задачи смешанного целочисленного программирования с целевыми функциями, оптимизирующими экономические или металлургические показатели. Такие задачи, как правило, являются невыпуклыми, и для их решения чаще всего применяют различные коммерческие решатели, такие как BARON, CONOPT, LINDOGLOBAL, OSL2 и т. д. Однако, как было отмечено в [3], ввиду сложности постановок найденные решения не всегда гарантированно оказываются глобально оптимальными.

Дополнительную сложность в решение реальных задач вносит многокритериальность их постановок, когда необходимо максимизировать (минимизировать) несколько производственных показателей одновременно с учетом некоторых технологических ограничений. В связи с этим большую популярность приобрели многокритериальные генетические и эволюционные алгоритмы (см., например, [4, 5]), основным недостатком которых является невозможность найти хорошую аппроксимацию множества Парето-оптимальных решений [6].

В настоящей работе предлагается новый подход к решению задачи оптимизации процесса флотации, основанный на теории глобального поиска для задач с функциями, представимыми в виде разности двух выпуклых функций (d.c. функциями) [8, 9], методе точного штрафа [10] и методе главного критерия [11, 12]. Бикритериальная задача состоит в поиске оптимальных значений параметров, приводящих к достижению двух

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (код проекта 15-11-20015).

целей: максимизации процента содержания меди в концентрате и максимизации извлечения меди из произведенного концентрата при заданных технологических ограничениях. Насколько нам известно, современные методы оптимизации используются для повышения эффективности флотационного процесса впервые в данной работе, поскольку, как отмечено в [3], высокая сложность возникающих на производстве невыпуклых задач не позволяет найти глобальное решение с помощью стандартных методов выпуклого программирования.

Разработанная методика нахождения приближенного множества Парето в бикритериальной задаче основана на решении серии вспомогательных задач с невыпуклой целевой функцией и невыпуклым ограничением. Поиск оптимальных решений задач d.c. программирования состоит из двух основных этапов: локального поиска и основанных на условиях глобальной оптимальности [8, 9] процедур выхода из локальных решений. Эффективность предложенного подхода продемонстрирована на решении задачи оптимизации реального процесса первичной флотации медно-молибденовых руд на СПГОК «Эрдэнэт» (Монголия).

1 Постановка задачи

Математическая модель процесса пенной флотации была построена на основе 5000 данных реального производственного процесса на СПГОК «Эрдэнэт» (подробнее см. [7]). В качестве независимых переменных были выбраны следующие параметры флотационного процесса: x_1 и x_2 — количество флотореагентов AeroMix и ВК-901, соответственно (в граммах на тонну); x_3 — расход пенообразователя МІВК (в граммах на тонну); x_4 — содержание флотореагентов "-74 micrometer grain class" в сепараторе (в % от массы); x_5 — общий вес меди в руде (в % от массы); x_6 и x_7 — общее содержание в руде первичной и окисленной меди, соответственно (в % от массы). Заметим, что содержание меди в руде (в том числе первичной и окисленной) может варьироваться, поэтому эти параметры также были выбраны в качестве независимых переменных.

На основе обработанных и нормализованных данных методами регрессионного анализа были построены [7] две квадратичные функции: $\phi_1(x)$ описывает зависимость от переменных $x_1, \ldots, x_7$ процента содержания меди в коллективном концентрате, $\phi_2(x)$ — процента извлечения меди из концентрата:

$$\phi_1(x) = \langle x, A_1 x\rangle + \langle b^1, x\rangle + 3.351, \qquad \phi_2(x) = \langle x, A_2 x\rangle + \langle b^2, x\rangle + 0.317, \tag{1}$$

где

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0.129 & 0.046 & -0.081 & -0.061 & 0.109 & 0.893 & 0.128 \\ 0.000 & -0.061 & 0.134 & 0.317 & -0.073 & 0.018 & 0.045 \\ -0.081 & 0.000 & 0.324 & 0.301 & 0.038 & -4.877 & -0.097 \\ 0.622 & 0.317 & -0.739 & -0.569 & 1.148 & 2.851 & 0.085 \\ 0.109 & -0.073 & 0.038 & 0.000 & 0.451 & 0.243 & 0.469 \\ -0.629 & 0.018 & 4.797 & -1.790 & 0.243 & 0.202 & -0.741 \\ 0.128 & 0.045 & -0.097 & 0.085 & 0.000 & 0.815 & 0.036 \end{pmatrix}$$

$b^1 = -(1.063,\ 0.654,\ 0.018,\ 0.852,\ 2.305,\ 1.763,\ 0.628)$,

$$A_2 = \begin{pmatrix} -0.033 & 0.002 & 0.054 & -1.901 & -0.189 & -1.012 & 0.020 \\ 0.000 & -0.037 & 0.067 & -0.075 & -0.061 & 0.019 & -0.058 \\ 0.054 & 0.000 & -0.384 & 2.154 & 0.316 & 0.244 & 0.012 \\ 1.270 & -0.075 & -1.700 & -0.134 & -0.196 & 0.084 & 0.067 \\ -0.189 & -0.061 & 0.316 & 0.000 & 0.074 & -0.109 & 0.023 \\ 0.862 & 0.019 & -0.203 & -0.171 & -0.109 & 0.168 & -2.244 \\ 0.020 & -0.058 & 0.012 & 0.067 & 0.000 & 2.081 & 0.024 \end{pmatrix}$$

$b^2 = (0.917,\ 0.235,\ -0.374,\ 0.617,\ 0.100,\ 0.149,\ -0.118)$.

Нетрудно видеть, что матрицы A_1 и A_2 не являются симметричными. Они также не являются и положительно определенными, поскольку имеют следующие собственные значения:

$$\lambda^1_{1,2} = 0.27 \pm 5.46i,\ \lambda^1_3 = -0.63,\ \lambda^1_4 = 0.59,\ \lambda^1_5 = -0.01,\ \lambda^1_{6,7} = 0.02 \pm 0.11i;$$

$$\lambda^2_{1,2} = -0.09 \pm 2.73i,\ \lambda^2_{3,4} = -0.03 \pm 2.00i,\ \lambda^2_5 = -0.13,\ \lambda^2_6 = -0.05,\ \lambda^2_7 = 0.09.$$

Поэтому соответствующие квадратичные функции $\phi_1(\cdot)$ и $\phi_2(\cdot)$ оказываются невыпуклыми, и каждую из них можно представить в виде разности двух выпуклых функций (в виде d.c.).

Рассмотрим далее следующую бикритериальную задачу d.c. программирования:

$$\left.\begin{array}{c}\phi_1(x) = \langle x, A_1 x\rangle + \langle b^1, x\rangle + 3.351 \uparrow \max,\\ \phi_2(x) = \langle x, A_2 x\rangle + \langle b^2, x\rangle + 0.317 \uparrow \max,\\ x \in \Pi,\end{array}\right\} \qquad (\mathcal{BP})$$

где допустимое множество Π представляет собой нормализованную форму технологических ограничений на переменные параллелепипедного вида:

$$\begin{array}{c}\Pi = \{x \in \mathbb{R}^7 :\ 0.41 \le x_1 \le 1,\ 0 \le x_2 \le 1,\ 0.57 \le x_3 \le 1,\ 0.72 \le x_4 \le 1,\\ 0.63 \le x_5 \le 1,\ 0.42 \le x_6 \le 1,\ 0.17 \le x_7 \le 1\}.\end{array} \qquad (2)$$

Далее, следуя методу главного критерия [11, 12], который основан на сведении $(\mathcal{BP})$ к задаче с одним выбранным главным критерием, в то время как другой критерий добавляется в задачу в виде ограничения с некоторым параметром, принимающим значения в пространстве критериев, будем рассматривать две следующие задачи d.c. программирования:

$$\left.\begin{array}{c}\phi_1(x) \uparrow \max,\ \ x \in \Pi,\\ \phi_2(x) \ge \varepsilon_2;\end{array}\right\} \qquad (\mathcal{P}_1(\varepsilon_2)) \qquad\qquad \left.\begin{array}{c}\phi_2(x) \uparrow \max,\ \ x \in \Pi,\\ \phi_1(x) \ge \varepsilon_1.\end{array}\right\} \qquad (\mathcal{P}_2(\varepsilon_1))$$

Любое глобально оптимальное решение подзадач $(\mathcal{P}_1(\varepsilon_2))$ или $(\mathcal{P}_2(\varepsilon_1))$ является слабо эффективной точкой (точкой Слейтера) в задаче $(\mathcal{BP})$ [12]. Если такое решение единственно, то оно оптимально по Парето. Таким образом, решая серии задач с d.c. ограничением с различными значениями параметров $\varepsilon_1 > 0$ ($\varepsilon_2 > 0$), можно найти аппроксимацию множества слабо эффективных решений, а следовательно, и аппроксимацию множества точек, оптимальных по Парето. И поскольку каждая Парето-оптимальная точка является единственным глобальным решением любой из подзадач $(\mathcal{P}_1(\varepsilon_2))$ или $(\mathcal{P}_2(\varepsilon_1))$ [12] при некоторых значениях ε_1, ε_2, то достаточно рассмотреть, например, только задачу $(\mathcal{P}_1(\varepsilon_2))$.

В следующем разделе будет представлен основанный на условиях глобальной оптимальности [9] метод решения задач с d.c. целевой функцией и d.c. ограничением.

2 Локальный и глобальный поиск

Для применения стратегии глобального поиска [8, 9, 13, 14] в процессе решения серии невыпуклых задач необходимо, прежде всего, построить явное d.c. представление невыпуклых функций $\phi_1(\cdot)$ и $\phi_2(\cdot)$. Поскольку функции квадратичные, нетрудно представить их в виде разностей двух выпуклых функций, используя, например, прием из [13].

Далее для удобства изложения представим $(\mathcal{P}_1(\varepsilon_2))$ как задачу минимизации следующего вида:

$$\left.\begin{array}{c}-\phi_1(x) = g_1(x) - h_1(x) \downarrow \min,\ \ x \in \Pi,\\ -\phi_2(x) = g_2(x) - h_2(x) + \varepsilon_2 \le 0,\end{array}\right\} \qquad (\mathcal{P})$$

где $g_l(x) = \langle x, A_l^g x\rangle - \langle b^l, x\rangle - c_l$, $h_l(x) = \langle x, A_l^h x\rangle$, $l = 1, 2$, выпуклые функции ($A_j = A_j^h - A_j^g$, $j = 1, 2$).

Первым этапом решения задачи $(\mathcal{P})$ в соответствии с теорией глобального поиска является поиск локальных решений специальным методом локального поиска для общей задачи d.c. оптимизации [15]. Его основная идея заключается в линеаризации в текущей точке функции $h_1(\cdot)$, которая определяет базовую невыпуклость задачи $(\mathcal{P})$, и затем минимизации выпуклой аппроксимации целевой функции на выпуклом множестве, полученном заменой невыпуклого ограничения его линеаризацией.

Предположим, что задана допустимая начальная точка $x^0 \in \Pi$, и после нескольких последовательных итераций метода найдена точка $x^s \in \Pi$, $s \in \{1, 2, \ldots\}$. Линеаризованная (в точке x^s) задача (выпуклого квадратичного программирования) может быть записана следующим образом:

$$\left.\begin{array}{c}g_1(x) - \langle \nabla h_1(x^s), x\rangle \downarrow \min\limits_x,\quad x \in \Pi,\\ g_2(x) - \langle \nabla h_2(x^s), x - x^s\rangle - h_2(x^s) + \varepsilon_2 \le 0.\end{array}\right\} \qquad (\mathcal{PL}_s)$$

Решая последовательность линеаризованных задач $(\mathcal{PL}_s)$ пока не выполнится критерий останова [15]

$$\phi_1(x^{s+1}) - \phi_1(x^s) \le \frac{\tau}{2} \qquad (3)$$

с заданной точностью τ, получим локальное решение $x^s =: z$ задачи $(\mathcal{P})$.

Далее возникает необходимость построения процедуры, позволяющей улучшить точку, полученную на этапе локального поиска. Для построения такой процедуры рассмотрим следующую вспомогательную задачу со штрафным параметром σ [8]:

$$\theta_\sigma(x) = g_1(x) - h_1(x) + \sigma \max\{0; g_2(x) - h_2(x) + \varepsilon_2\} \downarrow \min, \quad x \in \Pi.$$

Заметим, что целевая функция $\theta_\sigma(\cdot)$ может быть также представлена в виде разности двух выпуклых функций. Действительно, поскольку $\max\{0; g_2(x) - h_2(x) + \varepsilon_2\} = \max\{g_2(x) + \varepsilon_2; h_2(x)\} - h_2(x)$,

$$\theta_\sigma(x) = G_\sigma(x) - H_\sigma(x),$$
$$G_\sigma(x) = g_1(x) + \sigma \max\{g_2(x) + \varepsilon_2; h_2(x)\}, \quad H_\sigma(x) = h_1(x) + \sigma h_2(x).$$

Согласно теории глобального поиска [8, 9, 13, 14] процедура выхода из точки локального минимума может быть представлена в виде цепочки следующих операций:

1) построить аппроксимацию поверхности уровня выпуклой функции $H_\sigma(\cdot)$, аккумулирующей невыпуклость в задаче $(\mathcal{P})$;

2) решить линеаризованные (в каждой точке v построенной аппроксимации) задачи вида

$$g_1(x) + \sigma \max\{g_2(x) + \varepsilon_2; h_2(x)\} - \langle \nabla h_1(v) + \sigma \nabla h_2(v), x\rangle \downarrow \min_x, \quad x \in \Pi; \tag{4}$$

3) выполнить локальный поиск, выбирая в качестве стартовых точек решения линеаризованных задач (4).

Заметим, что целевая функция в (4) не является гладкой, что может создать дополнительные трудности при ее решении, однако введением новой дополнительной переменной t в линеаризованную задачу (4) можно избежать этой негладкости следующим образом:

$$\left.\begin{array}{c} g_1(x) - \langle \nabla h_1(v) + \sigma \nabla h_2(v), x\rangle + \sigma t \downarrow \min\limits_{(x,t)}, \quad x \in \Pi,\ t \in \mathbb{R}, \\ g_2(x) + \varepsilon_2 \le t, \quad h_2(x) \le t. \end{array}\right\} \tag{5}$$

Задачи (4) и (5) являются эквивалентными [16].

Нетрудно видеть, что задача (5) выпукла, и может быть решена, как и задача $(\mathcal{PL}_s)$, любым подходящим методом выпуклой оптимизации или пакетом прикладных программ. (В настоящей работе для решения выпуклых задач использован IBM ILOG CPLEX 12.6.2.*)

При построении аппроксимации поверхности уровня выпуклой функции $H_\sigma(\cdot)$ использован стандартный набор базисных векторов $e^i, \ i = 1, \ldots, n$ пространства $\mathbb{R}^n$, так что точки, лежащие на поверхности уровня $H_\sigma(x) = \beta - \zeta$ для каждой пары (β, ζ), где β — параметр, определяющий поверхность уровня (см. условия оптимальности [8, 9, 13, 14]), а $\zeta = \theta_\sigma(z) = -\phi_1(z)$, строились по следующему правилу [13, 14, 17, 18, 19, 20]:

$$v^i = \mu_i e^i, \quad i = 1, \ldots, n, \tag{6}$$

где $\mu_i^{1,2} = \pm\sqrt{\dfrac{\beta - \zeta}{A_1^h(i,i) + \sigma A_2^h(i,i)}}$, а $A_j^h(i,i)$ — диагональный элемент матрицы A_j^h, $j = 1, 2$.

Далее представим схему поиска глобальных решений задачи $(\mathcal{P})$. В качестве параметра штрафа σ можно использовать множитель Лагранжа, соответствующий текущей точке $z^k, \ k \in \{1, 2, \ldots\}$.

Шаг 1. Специальным методом локального поиска найти локальное решение z^k задачи $(\mathcal{P})$.

Шаг 2. Положить $\beta_k = G_\sigma(z^k)$, $\zeta_k = \theta_\sigma(z^k)$.

Шаг 3. Построить аппроксимацию $R_k(\beta) = \{v^1, \ldots, v^n \mid H_\sigma(v^i) = \beta_k + \zeta_k, \ i = 1, \ldots, n\}$.

Шаг 4. Найти приближенное решение $\bar{u}^i$ линеаризованной задачи (4) такое, что

$$G_\sigma(\bar{u}^i) - \langle \nabla H_\sigma(v^i), \bar{u}^i\rangle - \delta_k \le \inf_x\{G_\sigma(x) - \langle \nabla H_\sigma(v^i), x\rangle\}.$$

Шаг 5. Начиная с точек $\bar{u}^i$, методом локального поиска найти новые локальные решения u^i.

Шаг 6. Выбрать точку $u^j : \ \phi_1(u^j) \ge \max\limits_{i=1,\ldots,n} \phi_1(u^i)$.

Шаг 7. Если $\phi_1(u^j) > \phi_1(z^k)$, то $z_{k+1} := u^j, \ k = k + 1$ и вернуться на Шаг 2.

Шаг 8. Если $\phi_1(u^j) \le \phi_1(z^k)$, то выбрать новое значение $\beta : \ \inf(G_\sigma, \Pi) \le \beta \le \sup(G_\sigma, \Pi)$ и вернуться на Шаг 3.

Таким образом, варьируя параметр ε_2 и решая серию задач d.c. программирования $(\mathcal{P}_1(\varepsilon_2))$, можно получить аппроксимацию всего множества точек, оптимальных по Парето в бикритериальной задаче $(\mathcal{BP})$.

*http://www-01.ibm.com/software/commerce/optimization/cplex-optimizer/

3 Результаты вычислительного эксперимента

Следуя теории решения многокритериальных задач [12], прежде всего, посредством решения соответствующих невыпуклых (d.c.) задач оптимизации были найдены эталонные точки:
— идеальная точка $(\Phi_1^I, \Phi_2^I) = (23.504, 97.486)$, где $\Phi_l^I = \max\limits_{x\in\Pi} \phi_l(x),\ \ l = 1, 2;$
— надир $(\Phi_1^{nad}, \Phi_2^{nad}) = (17.616, 67.984)$, где $\Phi_l^{nad} = \left\{ \max\limits_{x\in\Pi} \phi_l(x) :\ \Phi_j^I = \phi_j(x) \right\},\ \ l, j = 1, 2.$

Таким образом, (Φ_1^I, Φ_2^{nad}) и (Φ_1^{nad}, Φ_2^I) задают нижнюю и верхнюю границы значений Парето-оптимальных решений относительно соответствующих критериев, т.е. максимально и минимально возможного процента содержания меди в концентрате и процента ее извлечения. Отметим, что разница между нижней и верхней границами по содержанию меди в концентрате составляет 25.05%, в то время как по извлечению меди из концентрата — 30.26%, т. е. цели в бикритериальной задаче $(\mathcal{BP})$ сильно противоречат друг другу.

Метод построения аппроксимации множества Парето, основанный решении серии вспомогательных d.c. задач алгоритмом глобального поиска, стартует с точки (Φ_1^I, Φ_2^{nad}), что соответствует технологическим условиям, приводящим к максимально возможной концентрации меди. Затем при увеличении значения параметра в задаче $(\mathcal{P}_1(\varepsilon_2))$ ограничение на извлечение меди из концентрата начинает влиять на ее содержание в концентрате (на максимальное значение целевой функции), тем самым определяются новые параметры процесса флотации. И последней точкой, найденной предлагаемым методом, оказывается противоположная точка (Φ_1^{nad}, Φ_2^I), которая соответствует параметрам процесса, приводящим к максимально возможному извлечению меди из концентрата.

Качество аппроксимации множества точек, оптимальных по Парето, зависит от размера шага, с которым изменяется параметр ε_2 в задаче $(\mathcal{P}_1(\varepsilon_2))$, поэтому в вычислительных экспериментах было выбрано два значения шага по ε_2: 0.5% (см. рис. 1) и 0.3% (см. рис. 2).

На рис. 1 и 2 ось x соответствует изменению критерия $\phi_2(\cdot)$ (процент извлечения меди из концентрата), а ось y — критерия $\phi_1(\cdot)$ (процент содержания меди в полученном концентрате).

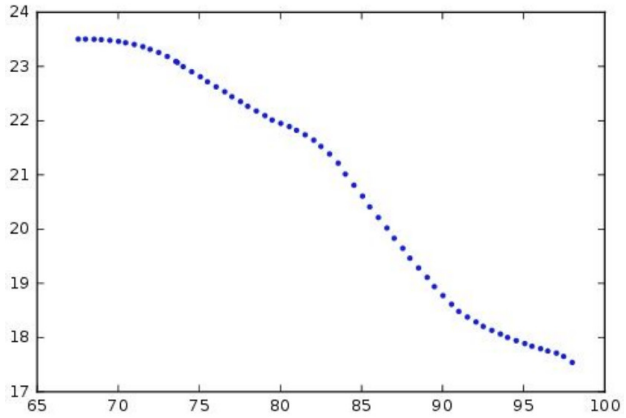


Рис. 1: Аппроксимация множества Парето из 63 точек.

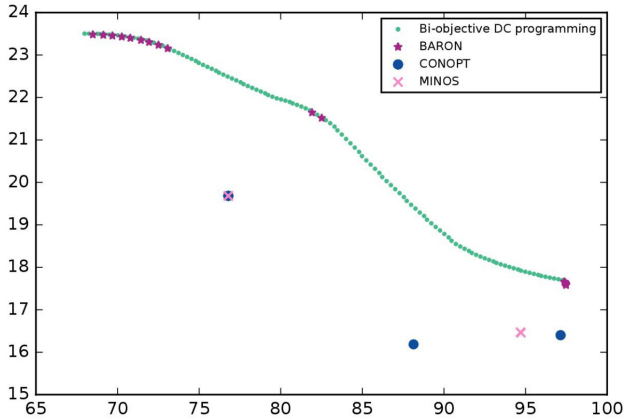


Рис. 2: Аппроксимация множества Парето из 118 точек. Сравнение с решателями BARON, MINOS и CONOPT.

Проведено сравнение эффективности предлагаемого подхода с одним из самых известных методов решения задач многокритериальной оптимизации — методом взвешенных сумм. С этой целью задача $(\mathcal{BP})$ была преобразована в задачу максимизации выпуклой комбинации двух целевых функций $\phi_1(\cdot)$ и $\phi_2(\cdot)$:

$$\alpha\phi_1(x) + (1-\alpha)\phi_2(x) \uparrow \max, x \in \Pi, \tag{7}$$

где $\alpha \in (0, 1)$. Отметим, что задача (7) представляет собой максимизацию невыпуклой квадратичной функции размерности $n = 7$ на выпуклом множестве простой структуры, которая может быть решена любым подходящим пакетом прикладных программ (для сравнения были выбраны BARON, CONOPT, MINOS). Были рассмотрены два варианта взвешенных сумм с $\alpha \in \{0.1, 0.2, 0.3, \ldots, 0.9\}$ для пакетов MINOS и CONOPT и $\alpha \in \{0.05, 0.1, 0.15, \ldots, 0.95\}$ в случае выбора пакета BARON. Результаты сравнения представлены на рис. 2

вместе с приближенными решениями, оптимальными по Парето, найденными разработанным в настоящей статье методом (Bi-objective DC programming).

По рис. 2 можно видеть, что все решения задачи (7), найденные MINOS и CONOPT, доминируются точками, полученными предложенным методом. С другой стороны, для всех весов α BARON нашел различные приближенные оптимальные по Парето решения, которые, в свою очередь, неравномерно распределены по границе Парето и лежат на выпуклой оболочке Парето-фронта. Интересно также, что метод взвешенных сумм не обнаружил оптимальную по Парето точку, соответствующую (Φ_1^I, Φ_2^{nad}) (максимально возможному содержанию меди в концентрате), при этом решение, соответствующее точке (Φ_1^{nad}, Φ_2^I) указанным методом было найдено.

Заключение

В настоящей работе предпринята первая попытка применения теории и методов d.c. программирования для решения бикритериальной пикладной задачи, направленной на повышение производительности и эффективности процесса флотации. В основе предлагаемого подхода лежат метод главного критерия решения многокритериальных задач, теория глобального поиска для невыпуклых задач с d.c. функциями и метод точного штрафа.

Несмотря на то, что применение подхода описано для бикритериальной невыпуклой квадратичной задачи, его легко можно адаптировать к любым, возникающим на практике, задачам с двумя невыпуклыми (d.c.) целевыми функциями. Например, могут быть рассмотрены задачи, оптимизирующие некоторые показатели экономической эффективности, включающие эффект масштаба.

Применение предложенного подхода продемонстрировано на решении задачи оптимизации реального процесса первичной флотации медно-молибденовых руд на СПГОК «Эрдэнэт» (Монголия). Анализ, проведенный специалистами предприятия, показал, что найденные решения удовлетворяют всем технологическим требованиям и ограничениям производства.

Список литературы

[1] Advanced Control and Supervision of Mineral Processing Plants, ser. Advances in Industrial Control. London: Springer-Verlag, 2010.

[2] Hodouin D., Methods for automatic control, observation, and optimization in mineral processing plants // Journal of Process Control, special Issue on Automation in Mining, Minerals and Metal Processing. 2011. V. 21, iss. 2, P. 211–225.

[3] Jamett N., Cisternas L. A., Vielma J. P., Solution strategies to the stochastic design of mineral flotation plants // Chemical Engineering Science. 2015. V. 134, P. 850–860.

[4] Pirouzan D., Yahyaei M., Banisi S. Pareto based optimization of flotation cells configuration using an oriented genetic algorithm // International Journal of Mineral Processing. 2014. V. 126, P. 107–116.

[5] Barrozo M. A. S., Lobato F. S. Multi-objective optimization of column flotation of an igneous phosphate ore // International Journal of Mineral Processing. 2016. V. 146, P. 82–89.

[6] Rao R. V. Teaching Learning Based Optimization Algorithm: And Its Engineering Applications. Cham: Springer, 2016.

[7] Enkhbat R., Gruzdeva T. V., Barkova M. V. D.c. programming approach for solving an applied ore-processing problem // Journal of Industrial and Management Optimization. 2017. to appear.

[8] Strekalovsky A. S. Global optimality conditions in nonconvex optimization // Journal of Optimization Theory and Applications. 2017. DOI: 10.1007/s10957-016-0998-7.

[9] Strekalovsky A. S. On solving optimization problems with hidden nonconvex structures. In: Optimization in Science and Engineering. New York: Springer, 2014, P. 465–502.

[10] Pillo G. D. Exact Penalty Methods. In: Algorithms for Continuous Optimization. Dordrecht: Springer, 1994, P. 209–253.

[11] Подиновский В.В., Ногин В.Д. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач. М.: Наука, 1982. 344 с.

[12] Miettinen K. Nonlinear Multiobjective Optimization. Boston: Kluwer, 1999.

[13] Стрекаловский А. С. Элементы невыпуклой оптимизации. Новосибирск: Наука, 2003.

[14] Груздева Т. В., Стрекаловский А. С. Задачи о клике и невыпуклая оптимизация. Новосибирск: Наука, 2014.

[15] Стрекаловский А.С. On local search in d.c. optimization problems // Applied Mathematics and Computation. 2015. V. 255, P. 73–83.

[16] Nocedal J., Wright S.J. Numerical Optimization. New York: Springer, 2006.

[17] Груздева Т.В., Стрекаловский А.С., Орлов А.В., Дружинина О.В. Негладкие задачи минимизации разности двух выпуклых функций // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. 2011. Т. 12, № 1, С. 384–396.

[18] Gruzdeva T.V. On a continuous approach for the maximum weighted clique problem // Journal of Global Optimization. 2013. V. 56, P. 971–981.

[19] Груздева Т.В. Задача сферической бинарной отделимости // Известия Иркутского государственного университета. Серия: Математика. 2012. Т. 5, № 3, С. 18–31.

[20] Стрекаловский А.С., Кузнецова А.А., Яковлева Т.В. О численном решении задач невыпуклой оптимизации // Сибирский журнал вычислительной математики. 2001. Т. 4. № 2. С. 185–199.

Татьяна Владимировна Груздева — к.ф.-м.н., ст. науч. сотр. Института динамики систем и теории управления имени В. М. Матросова СО РАН;
e-mail: gruzdeva@icc.ru;
Антон Владимирович Ушаков — к.ф.-м.н., мл. науч. сотр. Института динамики систем и теории управления имени В. М. Матросова СО РАН;
e-mail: aushakov@icc.ru.
Дата поступления — 17 мая 2017 г.

СРАВНЕНИЕ БЛИЗКИХ СИМВОЛЬНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ

В. Д. Гусев, Л. А. Мирошниченко, Т. Н. Титкова

Институт математики им. С.Л.Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 004.93

Во многих приложениях, связанных с анализом символьных последовательностей (текстов) произвольной языковой природы, встречаются объекты, похожие друг на друга (разные переводы одного и того же произведения, кодирующие последовательности родственных генов, распевы песнопения в разных гласах и др.). Традиционно используемые меры близости оказываются в таких случаях малоинформативными. Представляет интерес не количественная оценка близости, как правило, высокая, а детали, позволяющие различать близкие последовательности. В работе рассматриваются методы выявления таких различий. В качестве признаков, характеризующих определенный класс последовательностей, используются цепочки символов (фрагменты текстов), присутствующие в обучающих последовательностях одного из классов, но отсутствующие в других. Рассматриваются как L-граммы (фрагменты фиксированной длины L), так и фрагменты произвольной длины со специфическими структурными особенностями. Изложение иллюстрируется примерами анализа геномов вируса клещевого энцефалита с близкими последовательностями, относящимися, тем не менее, к разным классам.

Ключевые слова: символьные последовательности (тексты), меры близости, L-граммы, периодичности, фракталоподобные структуры, комбинированные структуры.

Введение

Символьные последовательности встречаются в различных областях знания: математике, информатике, биологии, лингвистике, музыке. Для сравнения последовательностей в первом приближении можно использовать такие признаки как размер алфавита, частоту встречаемости символов и т.п. В общем случае для сравнения последовательностей и их классификации используются меры близости, выбор которых осуществляется на основе операций, характерных для конкретной предметной области. На уровне слов естественного языка, такими операциями являются замены, вставки, пропуски отдельных символов, приводящие к ошибке или изменению смысла слова. Те же операции характеризуют эволюцию ДНК-последовательностей. На уровне предложений возможны вставки и устранения отдельных слов или их комбинаций (например, причастных оборотов), синонимичные замены, перестановки, часто демонстрирующие «игру слов» («лучше обед без аппетита, чем аппетит без обеда» — М. Жванецкий) и т.д. На хромосомном уровне основными эволюционными событиями являются крупноблочные перестройки: инверсии и транспозиции. Специфическими операциями для музыкальных произведений являются секвентные переносы и заполнение интервалов.

Значительный интерес представляют меры близости, применимые на разных иерархических уровнях. Общий подход для конструирования таких мер, восходящий к работам Колмогорова [1], основан на оценке сложности перевода одной последовательности в другую с использованием фиксированного набора операций, допустимых на конкретном уровне. Примерами такого рода мер являются редакционное расстояние и относительная сложность [2].

В случае близких последовательностей исследователя может интересовать не столько расстояние между ними, сколько детали (признаки), отличающие одну последовательность от другой или один класс последовательностей от другого. К таким признакам можно отнести фрагменты, присутствующие в одном классе текстов и отсутствующие в остальных. В работе рассматриваются фрагменты фиксированной длины (L-граммы) и произвольной, характеризующиеся скоплениями разных повторов. Подход иллюстрируется на подборке геномов вируса клещевого энцефалита. Отслеживаются две линии классификации этих последовательностей: по принадлежности их к одному из четырех генотипов и по степени вирулентности.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-07-00812).

1 Сравнение текстов путем выделения «характерных» фрагментов

1.1 *L*-граммный подход к представлению текстов

Пусть Σ — конечное множество символов (алфавит); $T = t_1 t_2 \dots t_N$ — последовательность символов (текст), составленный из элементов Σ ($t_i \in \Sigma, 1 \le i \le N$); $N = |T|$ — длина текста; $T[i:j] = t_i t_{i+1} \dots t_j$ — фрагмент текста, включающий элементы с i-го по j-й ($1 \le i \le j \le N$). L-граммой называется фрагмент текста $T[i : i + L - 1] (1 \le i \le N - L + 1)$, содержащий ровно L символов. Количество различных L-грамм в T обозначим через $M_L(T)$ ($M_L(T) \le N - L + 1$), а частоту встречаемости k-й ($1 \le k \le M_L(T)$) L-граммы — через F_k.

L-граммная частотная характеристика текста T есть совокупность элементов $\Phi_L(T) = \{\phi_{L1}, \phi_{L2}, \dots, \phi_{LML}\}$, где каждый элемент $\phi_{Lk} (1 \le k \le M_L)$ есть пара: «k–я L-грамма; F_k». Полный L-граммный спектр текста T [3] есть множество $\Phi(T) = \{\Phi_1(T), \Phi_2(T), \dots, \Phi_{L\max}(T)\}$, т.е. совокупность L-граммных характеристик для $1 \le L \le L_{\max}(T)$, где $L_{\max}(T)$ — длина максимального повтора в тексте.

L-граммная частотная характеристика *группы текстов* $\Pi = \{T_1, T_2, \dots T_m\}$ есть совокупность L-грамм, представленных в текстах $\{T_1, T_2, \dots T_m\}$ с указанием частот их встречаемости и распределения по отдельным текстам: $\Phi_L(\Pi) = \{\phi_{L,1}(\Pi), \phi_{L,2}(\Pi), \dots \phi_{L,M_L}(\Pi)\}$, где каждый элемент $\phi_{L,i}$ ($1 \le i \le M_L(\Pi)$) есть четвёрка: «i–я L-грамма x_i ; $F_\Pi(x_i)$ — число текстов из Π, в которых представлена x_i; $F_\Sigma(x_i)$ — абсолютная суммарная частота встречаемости x_i в Π; вектор числа вхождений x_i в каждый из текстов подборки Π: $\overline{F}(x_i) = \{F_1(x_i), F_2(x_i), \dots F_m(x_i)\}$». Совокупность L-граммных характеристик $\Phi(\Pi) = \{\Phi_1(\Pi), \Phi_2(\Pi), \dots, \Phi_{L_{\max}}(\Pi)\}$, где $L_{\max} = L_{\max}(\Pi)$ — длина максимального межтекстового повтора в Π, будем называть совместным L-граммным спектром группы текстов Π. Иными словами, мы включаем в $\Phi(\Pi)$ такой набор L-граммных частотных характеристик, который содержит полную информацию о связях между текстами в виде общих цепочек с длинами $L \le L_{\max}(\Pi)$. Заметим, что длины максимальных внутритекстовых повторов $L_{\max}(T_j)$, $j = 1, 2, \dots, m$, могут быть как меньше, так и больше длины максимального межтекстового повтора $L_{\max}(\Pi)$, поскольку механизмы их возникновения различны.

В случае *нескольких (k) классов текстов* $K = \{\Pi_1, \Pi_2, \dots \Pi_k\}$, где ($\Pi_i = \{T_{i1}, T_{i2}, \dots T_{im_i}\}$, $1 \le i \le k$), а m_i — количество последовательностей в i-м классе, рассматривается характеристика $\Phi_L(\Pi_i/K)$ — множество L-грамм, присутствующих в каждом тексте i-го класса и отсутствующих во всех остальных текстах. Такие «контрастные» L-граммы удобно использовать в качестве признаков для классификации новых текстов. Интерес представляет весь диапазон значений L: от минимальной длины до максимальной. Фрагменты максимальной длины — консервативные фрагменты последовательностей, наиболее устойчивые в пределах одного класса. Однако эта характеристика зачастую зависит от количества текстов в классе.

Для вычисления L-граммных характеристик, совместных L-граммных спектров группы текстов и $\Phi_L(\Pi_i/K)$ используется алгоритм рекуррентного хеширования [4].

1.2 *L*-граммно-позиционный «срез» группы последовательностей

L-граммный подход применим к произвольным текстам и их классам. В случае «близких», предварительно выравненных по длине последовательностей, в качестве классификационных признаков можно использовать L-граммно-позиционный «срез», т.е. совокупность L-грамм, привязанных к определенной позиции.

Пусть N — длина последовательностей после выравнивания, $T_{i,j}[pos : pos + L - 1]$ — L-грамма, расположенная в позиции pos j-го текста i-го класса. Через $\Omega_{L,pos}(K) = \{T_{i,j}[pos : pos + L - 1]\}$ обозначим полную совокупность таких L-грамм. L-граммная позиционная характеристика $\Lambda_{L,pos}(\Pi_i)$ — множество различных L-грамм, расположенных в позиции pos в текстах класса Π_i. $M_{L,pos}(\Pi_i)$ — число различных L-грамм, расположенных в позиции pos в текстах класса Π_i (мощность множества $\Lambda_{L,pos}(\Pi_i)$).

Если $M_{L,pos}(\Pi_i) = M_{L,pos}(\Pi_j) = 1$ и $\Lambda_{L,pos}(\Pi_i) = \Lambda_{L,pos}(\Pi_j)$ ($1 \le i, j \le k$), т.е. во всех последовательностях, независимо от класса, в позиции pos стоит одна и та же L-грамма, то позиция pos определяет консервативный фрагмент. Такие фрагменты характеризуют набор текстов в целом.

С точки зрения классификации текстов наиболее интересным является случай, когда во всех последовательностях одного класса в позиции pos стоит L-грамма, уникальная для своего класса и присущая только ему, т.е. $M_{L,pos}(\Pi_i) = M_{L,pos}(\Pi_j) = 1$, и $\Lambda_{L,pos}(\Pi_i) \ne \Lambda_{L,pos}(\Pi_j)$ ($1 \le i, j \le k, i \ne j$). В общем случае, позиция pos трактуется как «классифицирующая», если каждая из L-грамм, расположенных в позиции pos, встречается только в текстах одного класса, т.е. $\Lambda_{L,pos}(\Pi_i) \cap \Lambda_{L,pos}(\Pi_j) = \emptyset$.

Для вычисления L-граммных позиционных характеристик классов используются L-граммные деревья, которые строятся отдельно для каждой рассматриваемой позиции pos.

1.3 Фрагменты с регулярной структурой

Наряду с L-граммами без явных проявлений структуры можно рассматривать фрагменты текста относительно небольшой длины, характеризующиеся скоплением повторов разного типа. Некоторые комбинации этих повторов образуют устойчивые конфигурации. В данной работе рассматриваются три типа таких конфигураций: периодичности, фракталоподобные структуры и комбинированные структуры. Сначала поясним, что мы понимаем под повторами разных типов.

Пусть $f : \Sigma \to \Sigma$ — взаимнооднозначное отображение алфавита Σ на себя («переименование» элементов алфавита). Пусть $u = u_1 u_2 \dots u_L$ — произвольное слово в алфавите Σ (фрагмент текста T), тогда результатом применения подстановки f к слову u является слово $f(u) = f(u_1) \dots f(u_L)$. Под инверсией слова u будем понимать слово $u^R = u_L \dots u_1$. Результатом последовательного применения преобразований f и R к слову u является $(f(u))^R = f(u_L) f(u_{L-1}) \dots f(u_1)$. Пусть u и v — произвольные фрагменты текста T одинаковой длины. Будем говорить, что пара (u, v) образует *прямой повтор*, если $u = v$, *симметричный повтор*, если $v = u^R$, *прямой f-повтор*, если $v = f(u)$, *симметричный f-повтор*, если $v = (f(u))^R$. Примером прямых f-повторов являются секвентные переносы в текстах мелодий, симметричных повторов — инверсии дисков политенных хромосом, симметричных f-повторов — комплементарые инвертированные повторы в ДНК-последовательностях ($\Sigma = a, c, g, t$), где комплементарное соответствие определяется подстановкой $f(a) = t$, $f(t) = a$, $f(c) = g$, $f(g) = c$.

Под **периодичностями** мы понимаем тандемно повторяющиеся цепочки символов, например, *tacg tacg tacg ta* (или, для краткости, $(tacg)^3 ta$). Здесь базовую цепочку *tacg* естественно называть периодом. Длину периода будем обозначать через p, а длину самой периодичности — через P. Отношение $k = P/p$ (равное $3,5$ в данном случае) характеризует кратность повторения.

Локальными фракталами мы называем фрагменты последовательностей, которые характеризуются проявлениями самоподобия. Повторение обычного симметричного палиндрома приводит к усилению конструкции, т.е. образованию нового палиндрома вдвое большей длины. Таким же свойством обладают f-палиндромы: $u(f(u))^R u(f(u))^R = v(f(v))^R$, если f обладает свойством симметрии. В частности, повторение комплементарного палиндрома в ДНК-последовательности приводит к образованию аналогичной структуры вдвое большей длины.

При наличии незначительных искажений внутри повторяющихся фрагментов, равно как и вставок между ними, используем термины **«фракталоподобные структуры»** или «несовершенные локальные фракталы». Предполагается, что размеры вставок сопоставимы с длинами повторяющихся фрагментов [5].

Комбинированными мы называем структуры, состоящие из двух разнотипных повторов (традиционный прямой плюс симметричный, прямой плюс симметричный f-повтор и т.п.) с ограничениями снизу на длины повторяющихся цепочек и сверху — на те же длины и расстояния между соседними элементами структуры [6]. Порядок чередования цепочек, образующих повторы разных типов — произвольный, возможны наложения и совпадения цепочек, относящихся к разным повторам.

Перечисленные структуры часто являются хорошими маркерами разных (в том числе близких) классов последовательностей

2 Сравнение последовательностей на примере геномов ВКЭ

Анализируется выборка кодирующих частей геномов вируса клещевого энцефалита (ВКЭ) из базы данных Genbank, содержащая 161 РНК-последовательность, каждая из которых имеет длину 10244 символов. Вся выборка разбита на четыре класса. Первые три отнесены к дальневосточному, европейскому и сибирскому генотипам, соответственно. Четвертый класс представлен «группой 886», циркулирующей на территории Восточной Сибири, и «претендующей» на роль отдельного генотипа. Число штаммов, характеризующих эти классы, различается существенным образом. Первый генотип — 80 штаммов, второй — 46, третий — 28, группа 886 включает всего 7 штаммов.

Среди ВКЭ встречаются высоковирулентные и низковирулентные (инаппарантные) штаммы в соответствии с их способностью вызывать заболевание. Эксперименты по выявлению маркеров, разделяющих ВКЭ по степени вирулентности, проводились на ограниченном материале (38 из 80 штаммов дальневосточного генотипа). По степени близости кодирующих частей эту подборку можно разделить на две группы из 22-х и 16 геномов соответственно. Это разбиение в значительной мере коррелирует с априорными оценками степени вирулентности штаммов, однако имеются исключения. В частности, два штамма выделены от умерших людей, но по нуклеотидной последовательности они ближе к инаппарантным штаммам. В то же время три

штамма выделены от людей с инаппарантной формой протекания заболевания, но на нуклеотидном уровне они ближе к высоковирулентным штаммам. Такого рода исключения могут быть обусловлены особенностями иммунной системы инфицированных людей, но подобная информация отсутствует.

2.1 L-граммный анализ

Для выяснения близости представителей одного класса и отличия их от представителей других классов выявим $\Phi_L(\Pi_i/K)$ — множество «контрастных» L-грамм, присутствующих в каждом тексте i-го класса и отсутствующих в текстах других классов.

Наибольший «консервативный» фрагмент, общий для всех 7 последовательностей группы 886 имеет длину 491 символов. Кроме него выявлено более 30 фрагментов с длиной $L > 100$, общих для всех последовательностей этой группы, но отсутствующих (в неискаженном виде) в последовательностях других классов. В данном случае более информативными оказываются фрагменты минимальной длины, присутствующие только в этой группе. Такими фрагментами являются 7-граммы *cccgctg* (поз. 2763 и 5221) и *atggcgc* (поз. 3859 и 5517).

Классы 1, 2 и 3 более многочисленны и вариативны. Длины максимальных внутриклассовых повторов (отсутствующих в текстах других классов) составляют 17, 35 и 35 символов, соответственно. Для класса 1 минимальная длина контрастного фрагмента составляет 6 символов. Эта 6-грамма (*agtaga*) присутствует во всех 80 текстах первого генотипа 182 раза, с частотой встречаемости в одном тексте от 1 до 4.

Во втором генотипе минимальная длина контрастного фрагмента составляет 7 символов. Выделено восемь 7-грамм (*gttattc*, *gcatctg*,...). Каждая из них встречается в текстах второго класса не более трех раз. И, наконец, минимальная длина общих L-грамм для текстов третьего генотипа составляет 8 символов. Таких 8-грамм насчитывается 9, 3 из которых встречаются в каждом тексте по одному разу: *gggtggac* в позиции 5029, *ataagccg* (поз. 6562) и *aggagagt* (поз. 8020), а остальные до трех раз.

Минимальная длина «контрастных» L-грамм, разделяющих штаммы дальневосточного генотипа на низко- и высоковирулентные равна 6. Для низковирулентных геномов выделено 10 таких 6-грамм (*gtccga*, *cggatt* ...), а для высоковирулентных — 16 (*gctaga*, *acttca*, ...). L-грамма максимальной длины ($L = 88$) обнаружена среди низковирулентных геномов в позиции 8645.

2.2 L-граммно-позиционный анализ

L-граммно-позиционный анализ проиллюстрируем на примере 9-граммных «срезов» последовательностей, соответствующих трем триплетам, кодирующим аминокислоты. Для каждой позиции $pos = 1, 4, 7, \ldots, 10240$ формируем совокупность из 161-й нуклеотидной 9-граммы (или аминокислотной 3-граммы). Выделяется 8 «устойчивых» позиций, содержащих 9-граммы, общие для всех последовательностях независимо от генотипа или разбиения на какие-либо другие классы. Пара таких позиций расположена по соседству, т.е. формируется «устойчивая» 12-грамма.

Позиция	Фрагмент РНК	Аминокислотная тройка
55	tcg-aaa-gag	S-K-E
73	aag-acg-cgt	K-T-R
115	ttg-atg-cgc	L-M-R
118	atg-cgc-atg	M-R-M
2269	atg-tcc-atg	M-S-M
2929	ctc-tgg-atg	L-W-M
4621	acg-atg-tgg	T-M-W
9382	aac-ata-aag	N-I-K

Заметим, что в позиции 4618, предшествующей 4621, стоит аминокислота H (гистидин), кодируемая триплетом *cac* во всех последовательностях основных генотипов, и триплетом *cat* в последовательностях группы 886 («тонкое» различие). Разделение по генотипам (1,2,3,4) наиболее ярко демонстрируют 9-граммы в позициях 3568 и 3571.

3568: (VAV)	1:	gtg-gca-gtt	3571: (AVG)	1:	gca-gtt-ggg
	2:	gtg-gca-gtg		2:	gca-gtg-ggg
	3:	gtg-gcg-gtg, gtt-gcg-gtg		3:	gcg-gtg-ggg
	4:	gta-gca-gtc		4:	gca-gtc-ggg

Соответствующие этим 9-граммам тройки аминокислот совпадают для всех 4 классов (VAV для 9-грамм в позиции 3568 и AVG для 9-грамм в поз. 3571), однако на уровне РНК наблюдается четкое расслоение на 4 класса (генотипа). Каждый характеризуется своей РНК-цепочкой длины 9 за единственным исключением: генотип 3 в поз. 3568 представлен двумя такими цепочками, ни одна из которых не встречается в последовательностях других генотипов. Такого рода эффекты мы также склонны относить к категории «тонких различий». Другим примером L-граммно-позиционного разбиения последовательностей на 4 класса является совокупность 9-грамм в позиции 2350:

9-грамма	Аминокислотная тройка	класс	Кол-во текстов
gac-acc-gaa	DTE	1	44 из 80
gac-act-gaa	DTE		34 из 80
gat-act-gaa	DTE		1
gac-ccc-gaa	DPE		1
gac-acg-gaa	DTE	2	45 из 46
gac-aca-gaa	DTE		1
gac-acc-gag	DTE	3	25 из 28
gac-act-gag	DTE		3
gac-aca-gag	DTE	4	7 из 7

Здесь каждому классу соответствует несколько 9-грамм, ни одна из которых не встречается в последовательностях других классов. 9-граммы с малой частотой встречаемости можно отнести к разряду малоинформативных. Кроме указанной позиции, существуют и другие, однозначно разделяющие тексты на 4 класса. Еще больше маркеров можно использовать для деления 38 последовательностей первого генотипа на высоко- и низковирулентные: выделяется около 30 позиций, однозначно разбивающих подборку на два указанных класса. Практически во всех позициях аминокислотные последовательности совпадают, т.е. всё различие проявляется лишь на нуклеотидном уровне.

2.3 Фрагменты со специфическими структурными особенностями

Периодичности. В каждом геноме выявлялись все периодичности с длиной $P \geq r$, где r — пороговое значение (в нашем случае $r = 10$). Их можно разделить на несколько групп. В первую включены те, которые присутствуют во всех генотипах. Они могут быть использованы для сопоставления ВКЭ с родственными организмами. Ко второй группе отнесены редко встречающиеся (а потому и малоинформативные) периодичности, существующие во всей подборке в одном-двух экземплярах. Оставшиеся периодичности разделим на две группы: А и Б. В группу А включим периодичности, представленные только (или преимущественно) в одном из генотипов. Они представляют наибольший интерес в плане генотипирования. В группу Б включим периодичности, представленные в разных (но не во всех четырех) генотипах. Факт отсутствия их в том или ином генотипе сужает число претендентов при классификации. Кроме того, периодичности из этой группы дают представление о связях между разными генотипами.

К группе А отнесены свыше 30 периодичностей. Для иллюстрации ограничимся лишь одним представителем каждого класса. Периодичность $(aagag)^2$ выявлена в позиции 3162 у 79 из 80 текстов первого генотипа. В позиции 8144 каждого их 46 текстов второго генотипа находится периодичность g^{10}. Она присутствует и во всех текстах группы 886, но в позиции 5241. У 25 из 28 текстов третьего генотипа в позиции 7720 обнаружена периодичность $(ctggc)^2$, в трех оставшихся она представлена в слегка варьированном виде: $(tggct)^2$ (позиция 7721). Из 20 наиболее ярких представителей группы Б отметим периодичность $(gaaag)^2g$ ($p = 5$, поз. 21), которая выявлена в 70-ти из 80 текстов первого генотипа, в 27 из 28 — третьего и в каждом тексте группы 886, но не представлена в последовательностях генотипа 2. Другая периодичность $(aagga)^2$ ($p = 5$) выявлена в позиции 398 у 36 из 46 текстов 2-го генотипа и 22 из 28 — третьего. У оставшихся 10 из 46 текстов второго генотипа фрагмент $(gaagg)^2$ находится в 397 позиции.

Для классификации по степени вирулентности, также можно указать маркеры — периодичности для каждого класса. Периодичность $(ggaggg)^2$ типична для высоковирулентных представителей ВКЭ первого генотипа, как и $(ccaaatg)^2$, но последняя не обнаружена у двух штаммов, отнесенных к исключениям: выделены от инфицированных пациентов с отсутствием симптомов заболевания. В инаппарантных штаммах выявлены периодичности $(agga)^3$ и $(aactc)^2a$. Периодичности разных классов могут отличаться длиной. Так, выявленная в инаппарантных штаммах периодичность $(accgc)^2acc$, в вирулентных присутствует в «сокращенном» варианте: $(accgc)^2$.

Фрактальные структуры — частный случай периодичностей. Их относительно немного, однако каждая из выявленных структур соответствует только (или преимущественно) одному из трех основных генотипов. В геномах группы 886 точные фрактальные структуры отсутствуют. Только в штаммах генотипа 1 в позиции 805 обнаружена фрактальная структура $(gtg)^4$, которой соответствует аминокислотная цепочка V^4 (встретилась 10 раз, преимущественно в высоковирулентных штаммах). Аналогично, в позиции 5870 того же генотипа представлена фрактальная структура $(agga)^4$ (встретилась 25 раз, из них в 22 инаппарантных штаммах). Эти структуры являются слабыми маркерами при генотипировании, поскольку в сумме они встретились меньше чем в половине геномов. Но и при разделении штаммов по степени вирулентности они могут допустить ошибку, поскольку в штамме $>JQ825147.1_Shkotovo94$ присутствуют обе структуры.

Только в штаммах генотипа 2 в позиции 9411 выявлена фрактальная структура $(ggaagg)^2gg$, которой соответствует, начиная со второй позиции, аминокислотная цепочка $EGEG$. Однако один раз эта структура появляется и в генотипе 3. И, наконец, только в генотипе 3 в позиции 6055 встречается фрактальная структура $ga(agaga)^2a$ (в 20 из 28 штаммов).

Из **фракталоподобных структур** рассматривались лишь такие, в которых отсутствовали искажения в повторяющихся ядрах, но между ними могли быть вставки ограниченной длины. Примером такой структуры, присутствующей в большинстве штаммов (146 из 161) независимо от генотипа, является *gagctcaaactggagagctc*, (ядро — комплементарный палиндром длины 6, подчеркнут). В отличие от предыдущей структуры, демонстрирующей сходство разных генотипов, цепочка *gttggttgctggttgttg*, с ядром *gttg* присутствует только в генотипе 1 (70 штаммов из 80). Поэтому штаммы, содержащие такую структуру, можно достаточно уверенно относить к первому генотипу. На том же основании штаммы, содержащие в позиции 8471 фракталоподобную структуру *cggcaccaaccggctcggcggc* с ядром *cggc*, можно без особого риска относить ко второму генотипу (41 случай из 46 на обучении). Фракталоподобных структур, пригодных для идентификации штаммов третьего генотипа, не обнаружено.

Напомним, что **комбинированными** мы называем структуры, состоящие из двух позиционно сближенных разнотипных повторов. В приводимых ниже примерах выбраны следующие значения параметров: минимальная длина повторов $r = 7$, максимальная $R = 20$, максимально допустимое расстояние между соседними компонентами структуры $d = 14$. Пары фрагментов, образующих симметричный повтор (обычный или комплементарный), будем обозначать Xs и X. Пары, образующие обычные прямые повторы, будем обозначать через Y. Допускаются наложения компонентов структуры друг на друга.

У 66 из 80 штаммов первого генотипа выделена структура:

```
Позиции : Xs - 1916;  X - 1927; Y - 1944; Y - 1947
       gataacacccaaccccacaatcgaaaccaatggtggtggttt
    Xs = taacaccc   cccacaat = X
     Y =                               tggtggt
     Y =                                  tggtggt
638: L  I  T  P  N  P  T  I  E  T  N  G  G  G
```

Здесь разнесенный симметричный повтор сопровождается периодичностью $(tgg)^3$, которая формально образует повтор длины 7 с наложением. Еще две структуры (поз. 4341 и 6970) встречаются более чем у половины последовательностей первого генотипа. Первая составлена из симметричного и прямого повтора, вторая — из комплементарного палиндрома, комплементарного инвертированного повтора и прямого повтора.

В то же время выделена структура, присутствующую только у инаппарантных штаммов:

```
   gagtgacacttgcagccacagtgcggaaagagagagacggcaccactgtg
Xs = gtgacac       cacagtg = X
 Y =                           agagaga
 Y =                             agagaga
              X = cacagtg                Xc = cactgtg
  G  V  T  L  A  A  T  V  R  K  E  R  D  G  T  T  V
```

В 18 последовательностях из 28 третьего генотипа в позиции 752 две комбинированные структуры налагаются друг на друга, в результате чего возникает структура, состоящая из двух прямых повторов и одного симметричного. В каждой из 7 последовательностей группы 886 присутствуют по две структуры (позиции 851 и 8393) типа «прямой повтор плюс симметричный» и одна структура (поз. 6954) типа «прямой повтор плюс комплементарный инвертированный». Комбинированных структур, позволяющих идентифицировать генотип 2, не обнаружено.

Заключение

Традиционно используемые меры сходства символьных последовательностей часто оказываются малоинформативными при сравнении очень близких текстов, относящихся, тем не менее, к разным классам. Исследование сходства и различия такого рода «параллельных» текстов обычно проводится путем их предварительного выравнивания, что само по себе представляет самостоятельную задачу. Возможен и другой вариант сравнения близких текстов, не требующий выравнивания. Структура, позволяющая осуществить такое сравнение, названа авторами совместным L-граммным спектром двух (и большего числа) последовательностей.

В работе показано, что важную информацию о параллельных текстах можно извлечь путем анализа их L-граммного состава не только при малых, но и при больших значениях L. Наряду с L-граммами, общими для сравниваемых текстов (или групп текстов) можно выявить и «контрастные» L-граммы, встретившиеся только в одном тексте (или группе текстов). Особый интерес представляют фрагменты последовательностей, обладающие регулярной структурой (тандемные повторы, симметрии, фракталоподобные структуры и др.). Они представляют комбинации повторов разного типа и легко интерпретируемы. Многие из них являются хорошими маркерами различных классов последовательностей, причем «тонкие различия» между классами могут проявить себя на уровне числа повторений в тандемной структуре или наличия характерного искажения в повторяющейся единице.

Подход иллюстрируется на двух задачах классификации очень близких геномов вируса клещевого энцефалита. Первая связана с разбиением подборки геномов на разные генотипы, вторая — с определением степени их вирулентности. Получены сильные РНК-маркеры, позволяющие решать оба типа задач.

Список литературы

[1] Колмогоров А.Н. Три подхода к понятию «количество информации» // Проблемы передачи информации. — Т.1, вып. 1, 1965. — С. 3–11.

[2] Gusev V. D., Miroshnichenko L. A Complexity decompositions in problems of comparison of symbolic sequences // Proc. 11th Int. Conference on Pattern Recognition and Image Analysis: New Information Technologies (PRIA-11-2013) September 23–28, 2013, Samara, Vol. 1., 94–97.

[3] Гусев В.Д. Характеристики символьных последовательностей // Машинные методы обнаружения закономерностей. – Новосибирск, ИМ СО РАН, 1981. – Вып. 88: Вычислительные системы. — С. 112–123.

[4] Гусев В.Д., Титкова Т.Н. Хеширование символьных цепочек в режиме скользящего окна. // Анализ последовательностей и таблиц данных. Новосибирск, 1994. — Вып. 150: Вычислительные системы. С. 94–106.

[5] Гусев В.Д., Мирошниченко Л.А., Чужанова Н.А. Выявление фракталоподобных структур в ДНК-последовательностях // Information Science and Computing. International Book Series, № 8: Classification, Forecasting, Data Mining. — ITHEA, Sofia, 2009.— P. 117–123.

[6] Гусев В.Д., Мирошниченко Л.А. Поиск комбинированных структур в ДНК-последовательностях // Доклады всероссийской конференции "Математические методы распознавания образов"(ММРО-13), Ленинградская обл., г. Зеленогорск, 30 сентября–6 октября 2007г., М., Макс-Пресс, 473–476.

Владимир Дмитриевич Гусев — к.т.н., ст. науч.сотр. Института математики им. С.Л.Соболева СО РАН;
e-mail: gusev@math.nsc.ru;
Любовь Александровна Мирошниченко — к.т.н., ст. науч.сотр. Института математики им. С.Л.Соболева СО РАН;
e-mail: luba@math.nsc.ru;
Татьяна Николаевна Титкова — к.т.н., науч.сотр. Института математики им. С.Л.Соболева СО РАН;
e-mail: titkova@math.nsc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА СЛУЧАЙНОГО БЛУЖДАНИЯ ПО СФЕРАМ В СОЧЕТАНИИ С МЕТОДОМ ЭЙЛЕРА ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕПЛОВОГО СОСТОЯНИЯ СОТОВЫХ ТЕПЛОЗАЩИТНЫХ КОНСТРУКЦИЙ

С. А. Гусев[1,2], В. Н. Николаев[3]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск*

[3] *Сибирский научно-исследовательский институт авиации имени С. А. Чаплыгина, 630051, Новосибирск*

УДК 519.676

В работе предложен метод статистического моделирования для определения теплового состояния теплозащитной панели сотового типа. Рассматриваемый процесс переноса тепла в неоднородной среде описывается третьей краевой задачей для уравнения теплопроводности. При этом коэффициенты температуропроводности материалов, из которых состоит панель, являются постоянными величинами, а процесс передачи тепла осуществляется только посредством теплопроводности. Поэтому в вероятностном представлении решения краевой задачи соответствующий случайный процесс представляет собой винеровский процесс без сноса в подобластях, в которых среда однородна. В работе предлагается для моделирования винеровского процесса внутри ячеек сотовой панели на некотором заданном удалении от каркаса использовать метод случайного блуждания по движущимся сферам, а для расчетов по каркасу панели и в его окрестности — метод Эйлера. Такой подход дает значительное ускорение счета по сравнению с использованием для моделирования траекторий только одного метода Эйлера.

Ключевые слова: сотовая теплозащитная панель, краевая задача, вероятностное представление решения, винеровский процесс, бесселевский процесс, случайное блуждание по движущимся сферам.

1 Постановка задачи

Одним из перспективных направлений в конструировании теплозащитных покрытий в технике является применение сотовых теплозащитных панелей. Сотовая теплозащитная панель (рис. 1) представляет собой конструкцию, состоящую из параллельно расположенных пластин из углепластика, между которыми заключен тонкий каркас тоже из углепластика в виде пчелиных сот, заполненных некоторым веществом с низкой теплопроводностью.

В работе [1] для расчета теплопереноса в таких панелях предложено использовать метод стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) на основе вероятностного представления решения уравнения теплопроводности. При этом делалось сглаживание разрывных коэффициентов уравнения теплопроводности на основе интегрального усреднения, а численное решение СДУ осуществлялось методом Эйлера. В данной работе предлагается использовать метод блуждания по движущимся сферам [2] для расчета траекторий трехмерного винеровского процесса в точках ячеек панели, находящихся на некотором расстоянии от каркаса, а в остальной части панели методом Эйлера.

В качестве области изменения пространственных переменных x_1,x_2,x_3 в работе принимается прямоугольный параллелепипед $G = (-l_1, l_1) \times (-l_2, l_2) \times (0, l_3)$. При этом G есть объединение двух непересекающихся подмножеств: $G = G_1 \cup G_2$, где G_1 — подобласть, соответствующая каркасу и пластинам, ограничивающим

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00698 А).

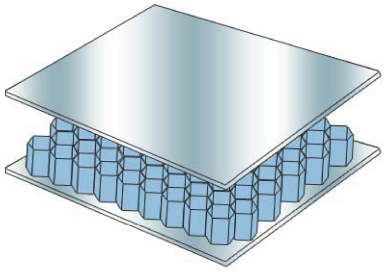


Рис.1: Сотовая панель

панель, а G_2 есть объединение подбластей, соответствующих ячейкам, содержащим теплоизоляционный материал. Каждая ячейка представляет собой внутренность правильной шестиугольной призмы, боковая поверхность которой параллельна оси x_3. Предполагается, что рассматриваемый процесс теплопередачи происходит на отрезке времени $[0, T]$.

В работе рассматривается краевая задача для уравнения теплопроводности, которая описывает теплоперенос в сотовой панели, в которой с двух сторон происходит конвективный теплообмен, а остальные четыре стороны теплоизолированы

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i}\Big(b(x)\frac{\partial u}{\partial x_i}\Big), \text{ где } b(x) = \begin{cases} b_1, & x \in G_1 \\ b_2, & x \in G_2 \end{cases}, \tag{1}$$

$$u(x,0) = \varphi(x), \tag{2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_1}\Big|_{x_1=-l_1} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x_1}\Big|_{x_1=l_1} = 0, \tag{3}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_2}\Big|_{x_2=-l_2} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x_2}\Big|_{x_2=l_2} = 0, \tag{4}$$

$$\lambda\frac{\partial u}{\partial x_3}\Big|_{x_3=0} = \alpha_1(t)\big(u - \psi_1(t)\big), \tag{5}$$

$$-\lambda\frac{\partial u}{\partial x_3}\Big|_{x_3=l} = \alpha_2(t)\big(u - \psi_2(t)\big). \tag{6}$$

В (1)–(6) использованы следующие обозначения: φ — начальное распределение температуры в панели; λ — коэффициент теплопроводности углепластика; b_1, b_2 — коэффициенты температуропроводности углепластика и воздуха, соответственно; α_1, α_1 — коэффициенты теплообмена между панелью и внешней средой; ψ_1, ψ_2 — температура внешней среды у нижней и верхней сторон панели, соответственно.

2 Переход к задаче со сглаженными коэффициентами

Поскольку теплозащитная панель состоит состоит из двух материалов с различными теплофизическими свойствами, то в задаче (1)–(6) мы имеем уравнение теплопроводности с разрывным коэффициентом температуропроводности. Достаточно полное математическое исследование краевых задач для параболических уравнений с разрывными коэффициентами дано в книге [3]. Там же приведены условия существования и единственности обобщенного решения (Теорема 5.1, Глава III) в пространстве функций $V_2^{1,0}(Q_T)$ ($Q_T \equiv G \times (0,T)$) с нормой

$$|u|_{Q_T} = \max_{0\le t\le T} \|u(x,t)\|_{L_2(G)} + \Big(\int\limits_{Q_T} u_x^2 dxdt\Big)^{\frac{1}{2}},$$

обладающих свойством

$$\int\limits_0^{T-h}\int_G h^{-1}\big(u(x,t+h) - u(x,t)\big)^2 dxdt \to 0 \text{ при } h \to 0.$$

Как утверждается в [3] (Теорема 4.5, Гл. III), обобщенное решение краевой задачи с разрывными коэффициентами в параболическом уравнении в норме пространства $\mathbf{V}_2^{1,0}(Q_T)$ устойчиво относительно вариаций коэффициентов. Из этой теоремы применительно к задаче (1)–(6) следует, что, если при $m \to \infty$ равномерно ограниченная последовательность $b^{(m)}$ сходится почти всюду к b, тогда обобщенные решения задач с коэффициентами $b^{(m)}$ сходятся сильно в норме $\mathbf{V}_2^{1,0}(Q_T)$ к обобщенному решению задачи (1)–(6).

Таким образом, при достаточно больших значениях m приближенное решение $u^{(m)}$ задачи (1)–(6) с разрывным коэффициентом температуропроводности можно получить, если решать задачу, в которой в уравнении (1) этот коэффициент заменить на его гладкую аппроксимацию $b^{(m)}$. В качестве такой замены можно, например, рассматривать его сглаживание в окрестности поверхностей разрыва с помощью интегрального усреднения с бесконечно дифференцируемым финитным ядром [4]

$$b^{(m)}(x) = \int\limits_{|x-y|<\rho_m} \omega_{\rho_m}(|x-y|)b(y)dy = \frac{1}{\rho_m^3} \int\limits_{|x-y|<\rho_m} \omega_1\Big(\frac{|x-y|}{\rho_m}\Big)b(y)dy \ . \tag{7}$$

При этом $\omega_1(|\xi|) = 0$ при $|\xi| \geq 1$; $\int\limits_{|\xi|\leq 1} \omega_1(|\xi|)d\xi = 1$. В (7) предполагается, что $\rho_m \to 0$ при $m \to \infty$. Функции $b^{(m)}$ имеют все производные любого порядка [4]. Поскольку функция $b \in L_q(G)$ $(q > 0)$, то для любой подобласти $G' \subset G$, отстоящей от границы ∂G на расстоянии не меньшем ρ_m, усреднение b^m сходится к b в $L_q(G')$

$$\|b^{(m)} - b\|_{q,G'} \leq \sup_{|v|\leq\rho_m} \Big(\int\limits_{G'} |b(x-v) - b(x)|^q dx\Big)^{\frac{1}{q}} \to 0 \text{ при } m \to \infty \ . \tag{8}$$

Таким образом, аппроксимации $b^{(m)}$ сходятся к b в норме пространства $\mathbf{L}_q(G)$. Известно также, что сходимость в $\mathbf{L}_q(G)$ влечет сходимость по мере, а, из сходящейся последовательности функций по мере можно выбрать подпоследовательность, сходящуюся почти всюду [5]. Причем в [5] дан конструктивный метод построения такой подпоследовательности. В связи со сказанным, далее будем считать, что такая подпоследовательность выбрана и это есть последовательность $\{b^{(m)}\}$.

В результате замены в (1)–(4) коэффициента температуропроводности функцией $b^{(m)}$, приходим к следующей краевой задаче

$$\frac{\partial u^{(m)}}{\partial t} = b^{(m)}(x)\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial^2 u^{(m)}}{\partial x_i^2} + \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial b^{(m)}}{\partial x_i}\frac{\partial u^{(m)}}{\partial x_i}, \tag{9}$$

$$u^{(m)}(x,0) = \varphi(x), \tag{10}$$

$$\frac{\partial u^{(m)}}{\partial x_1}\Big|_{x_1=-l_1} = 0, \quad \frac{\partial u^{(m)}}{\partial x_1}\Big|_{x_1=l_1} = 0, \tag{11}$$

$$\frac{\partial u^{(m)}}{\partial x_2}\Big|_{x_2=-l_2} = 0, \quad \frac{\partial u^{(m)}}{\partial x_2}\Big|_{x_2=l_2} = 0, \tag{12}$$

$$\lambda\frac{\partial u^{(m)}}{\partial x_3}\Big|_{x_3=0} = \alpha_1(t)\big(u^{(m)} - \psi_1(t)\big), \tag{13}$$

$$-\lambda\frac{\partial u^{(m)}}{\partial x_3}\Big|_{x_3=l} = \alpha_2(t)\big(u^{(m)} - \psi_2(t)\big). \tag{14}$$

Далее, в работе будут использоваться обозначения: ∂G — граница области G; $\chi(A)$ — индикаторная функция множества A; $Q_T = G \times [0,T]$.

Будем предполагать, что заданные в граничных условиях функции α_1, α_2, ψ_1, ψ_2 такие, что для некоторого $0 < \alpha < 1$ существует решение задачи (9)–(14) в пространстве Гельдера $H^{3+\alpha,\frac{3+\alpha}{2}}(Q_T)$ (Теорема 5.3, Глава IV). В [6] доказано, что при выполнении условий существования и единственности решений задач (1)–(6) и (9)–(14) для любого $\varepsilon > 0$ существует натуральное число m_ε такое, что при $m > m_\varepsilon$ выполняется неравенство

$$\operatorname{vrai}\max_{Q_T}|u^{(m)} - u| < \varepsilon.$$

Следовательно, выбирая радиус усреднения достаточно малым, можно с любой заданной точностью приблизить решение $u^{(m)}$ к u.

3 Решение на основе вероятностного представления

Для решений краевых задач для параболических уравнений с граничными условиями второго и третьего рода известны вероятностные представления [7], [8]. Чтобы получить вероятностное представление решения задачи (9)–(14), введем систему СДУ

$$X_r = x + \int\limits_{T-t}^{r} \sigma_v \chi(G)(X_v) dW_v^{(3)} + \int\limits_{T-t}^{r} \mathbf{a}\chi(G)(X_v) dv + \int\limits_{T-t}^{r} n(X_v)\chi(\partial G)(X_v) dK_v, \tag{15}$$

$$Y_r = 1 + \int\limits_{T-t}^{r} \alpha_1(v) Y_v \chi(X_3(v) = 0) dK_v + \int\limits_{T-t}^{r} \alpha_2(v) Y_v \chi(X_3(v) = l_3) dK_v, \tag{16}$$

$$Z_r = \int\limits_{T-t}^{r} \alpha_1(v)\psi_1(v) Y_v \chi(X_3(v) = 0) dK_v + \int\limits_{T-t}^{r} \alpha_2(v)\psi_2(v) Y_v \chi(X_3(v) = l_3) dK_v, \tag{17}$$

$$K_r = \int\limits_{T-t}^{r} \chi_{\partial G}(X_v) dK_v, \tag{18}$$

где $x \in G$ — начальная точка для $X_\cdot$; $W_\cdot^{(3)}$ — трехмерный винеровский процесс; $\sigma_v = \sqrt{2b^{(m)}(X_v)}$; $\mathbf{a} = \left(\frac{\partial b^{(m)}}{\partial x_i}\right)_{i=1,2,3}$; $n(P)$ — внутренняя нормаль в точке $P \in \partial G$; K_v — локальное время пребывания процесса $X_\cdot$ на границе, т.е. скалярный возрастающий процесс, который растет только когда $K_v \in \partial G$. Вероятностным представлением решения задачи (9)–(14) является математическое ожидание функционала от решения системы СДУ (15)–(18)

$$u(x,t) = \mathrm{E}_{x,T-t}\big(\varphi(X_T)Y_T + Z_T\big), \tag{19}$$

где $\mathrm{E}_{x,T-t}$ — математическое ожидание относительно вероятностной меры $\mathrm{P}_{x,T-t}$, соответствующей случайному процессу, стартующему в момент времени $T-t$ из точки x, т.е. $X_{T-t} = x$.

Приближенные значения $u^{(m)}(x,t)$ можно получить методом Монте-Карло путем статистического моделирования траекторий системы СДУ (15)–(18). Для этой цели в работах [1], [6] предлагалось использовать метод Эйлера. Моделирование траекторий методом Эйлера для СДУ (15)–(18) осуществляется по следующей схеме

$$X_{i+1}^{\Delta} = x_i + \sqrt{h}\sigma_i \xi_i + h\mathbf{a}_i, \tag{20}$$

$$x_{i+1} = X_{i+1}^{\Delta} + (\Delta_{i+1}K) n_i \chi_{\mathbb{R}^3 \setminus \bar{G}}(X_{i+1}^{\Delta}), \tag{21}$$

$$y_{i+1} = y_i\Big(1 + (\alpha_1)_i \chi_{\partial G}(x_i)\Delta_{i+1}K + (\alpha_2)_i \chi_{\partial G}(x_i)\Delta_{i+1}K\Big), \tag{22}$$

$$z_{i+1} = z_i + y_i(\alpha_1)_i(\psi_1)_i \chi_{\partial G}(x_i)\Delta_{i+1}K + y_i(\alpha_1)_i(\psi_1)_i \chi_{\partial G}(x_i)\Delta_{i+1}K, \tag{23}$$

$$k_{i+1} = k_i + \Delta_{i+1}K, \tag{24}$$

где i, $i+1$ — номера узлов сетки; ξ_i — вектор трех независимых $N(0,1)$ случайных величин; $\Delta_{i+1}K = d(X_{i+1}^{\Delta})$ — расстояние от X_{i+1}^{Δ} до ∂G в случае выхода X_{i+1}^{Δ} из области.

4 Применение методов Эйлера и случайного блуждания по движущимся сферам

Поскольку в работе предполагается, что теплофизические свойства материалов, из которых состоит сотовая панель, являются постоянными величинами, то движение случайного процесса $X_\cdot$ в однородной среде, соответствующей каркасу или ячейке, с точностью до постоянного множителя совпадает с движением винеровского процесса. Известно, что точка первого выхода из шара винеровского процесса, начинающего движение из центра этого шара, имеет на границе этого шара равномерное распределение. При этом эта точка не не зависит от времени первого выхода на границу.

В связи с этим предлагается для ускорения моделирования траекторий СДУ (15)–(18) при их прохождении внутри ячейки использовать случайное блуждание по сферам, а движение по каркасу моделировать с

помощью метода Эйлера с малым шагом. В работе [9] для решения стационарного диффузионного уравнения, был предложен алгоритм, в котором реализована комбинация блуждания по сферам в области и метода Эйлера вблизи границы.

При решении нестационарных задач методом блуждания по сферам требуется каждый раз моделировать не только точку первого выхода из шара, но и время первого выхода. Для моделирования времени первого выхода из шара радиуса R в работе используется определение времени первого достижения уровня R бесселевским процессом, который является решением СДУ [10]

$$S_t = S_0 + \int_0^t S_r^{-1} dr + W_t \ . \tag{25}$$

Одномерный случайный процесс (25) получается в результате применения формулы Ито к евклидовой норме трехмерного винеровского процесса, начинающего движение из точки $x \in G$. При этом выполняется равенство $S_0 = \|x\|$.

Время первого выхода трехмерного винеровского процесса из шара радиуса R и время первого достижения случайным процессом уровня R имеют одинаковое распределение. Известны явные формулы для плотности времени первого достижения бесселевским процессом заданного уровня для начальных точек $S_0 = 0$ и $S_0 > 0$ [2]. Но они представляются в виде рядов, содержащих функции Бесселя первого рода и их положительные нули, и поэтому численно-статистическое моделирование по ним крайне затруднительно. С другой стороны, вместо заданного уровня, который требуется достичь, можно подобрать некоторые кривые, зависящие от t, такие, что получаются достаточно простые и удобные для моделирования формулы для плотности времени первого достижения бесселевским процессом этих кривых.

Каждая такая кривая определяется задаваемой положительной сигма-конечной мерой G. Определим функцию

$$r(t,x) \equiv q(t,0,x) - \frac{1}{a}\int_0^\infty q(t,y,x)G(dy), \tag{26}$$

где $q(t,y,x)$ — плотность вероятности перехода бесселевского процесса, a — числовой параметр. Из свойства плотности q следует, что функции q и r удовлетворяют параболическому уравнению

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}\Big(\frac{1}{x}v\Big). \tag{27}$$

Пусть функция $g(t)$ такая, что на кривой $x = g(t)$ выполняется равенство $r(t,x) = 0$. Тогда эту кривую можно рассматривать в качестве граничного условия к уравнению (27). Причем, с учетом того, что бесселевский процесс стартует из заданной точки, решение полученной краевой задачи определяется единственным образом. Обозначим τ_g время достижения бесселевским процессом этой подвижной границы, т.е. $\tau_g = \inf\{t > 0,\ \ S_t = g(t)\}$.

Можно показать [2], что плотность времени достижения границы $x - g(t) = 0$ удовлетворяет уравнению

$$p_g(t) = -\frac{d}{dt}\left(\int_0^{g(t)} r(t,x)dx\right). \tag{28}$$

Если положить $G(dy) = y^2 dy$, то $g(t)$ и $p_g(t)$ определяются по формулам [2]:

$$g(t) = \left(2t\ln\Big(\frac{a}{\Gamma(\frac{3}{2})t^{\frac{3}{2}}\sqrt{2}}\Big)\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad p_g(t) = \frac{g^3(t)}{2at}. \tag{29}$$

В этом случае получается простая формула для моделирования τ_g

$$\tau_g = \left(\frac{a}{\Gamma(\frac{3}{2})\sqrt{2}}\right)^{\frac{2}{3}} e^{-H}, \tag{30}$$

где H — гамма распределенная случайная величина с параметрами $\frac{5}{2}$, $\frac{2}{3}$.

В ходе вычислений, после того как получено значение τ_g, радиус сферы для определения очередной точки положения случайного процесса определяется по первой формуле в (29). Выбор параметра a дает возможность определить радиусы моделируемых шаров так, чтобы они не выходили за границы текущей ячейки и чтобы они не были слишком малы. В случае, если расстояние до границы ячейки менее некоторой заданной величины ε, то производятся вычисления, соответствующие шагу метода Эйлера.

Были проведены расчеты температуры в сотовой панели с использованием реальных данных физического эксперимента. Результаты расчетов показали, что применение метода блуждания по движущимся сферам в сочетании с методом Эйлера для сотовой панели с такими физическими характеристиками, какие были в эксперименте, дает примерно стократное увеличение скорости счета по сравнению с использованием только одного метода Эйлера.

Заключение

В работе предложен численно-статистический метод для оценки теплового состояния теплозащитных конструкций сотового типа. Данный метод основан на вероятностном представлении краевой задачи для параболического уравнения и комбинированном применении методов Эйлера и случайного блуждания по движущимся сферам. Получено значительное ускорение счета по сравнению с моделированием траекторий только одним методом Эйлера.

Список литературы

[1] Gusev S.A., Nikolaev V.N. Calculation of heat transfer in heterogeneous structures such as honeycomb by using numerical solution of stochastic differential equations // Advanced Materials Research. 2014. V. 1016, P. 758–763.

[2] Deaconu M., Herrmann S.Hitting time for the Bessel processes - wolk on moving spheres algorithm (WOMS) // The Annals of Applied Probability 2013, Vol. 23, No. 6, P.2259–2289.

[3] Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. — М.: Наука, 1967.

[4] Соболев С.Л. Некоторые применения функционального анализа в матемтической физике. М.: Наука, Изд. 3-е, 1988.

[5] Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1976.

[6] Гусев С.А. Применение СДУ к оценке решения уравнения теплопроводности с разрывными коэффициентами// Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние.— Новосибирск.— 2015.— Т.18, №2.— С. 147–161.

[7] Гихман И.И., Скороход А.В. Стохастические дифференциальные уравнения и их приложения. Киев: Наукова думка, 1982.

[8] Кушнер Г. Дж. Вероятностные методы аппроксимации в стохастических задачах управления и теории эллиптических уравнений.— М. Наука, 1985.

[9] Бурмистров А.В., Михайлов Г.А. Вычисление производных от решения стационарного диффузионного уравнения методом Монте-Карло// ЖВМ и МФ.— 2003 , Т.43, №10, С. 1517–1529.

[10] Revuz, D. Yor, M. Continuous Martingales and Brownian Motion. 3ed., Springer 1999.

Сергей Анатольевич Гусев — д.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; доцент Новосибирского государственного технического университета;
e-mail: sag@osmf.sscc.ru;
Владимир Николаевич Николаев — д.т.н., главный научный сотрудник Сибирского научно-исследовательского института авиации имени С. А. Чаплыгина;
e-mail: nikvla50@mail.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ГЕМОДИНАМИКИ

С. Г. Давыдова[1], Э. А. Бибердорф[1,2]

[1] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*
[2] *Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 51-76+519.6+612.13

Математическое моделирование сердечно-сосудистой системы является обширной и востребованной областью биоинформатики. При моделировании артериальной системы в целом оптимальным является использование одномерной модели гемодинамики. Созданная на ее основе модель сердечно-сосудистой системы на платформе BioUML при валидации на большом объеме экспериментальных данных показала хорошее соответствие для таких параметров как систолическое и диастолическое давление. Для того, чтобы получить аналогичный результат по моделированию пульсовой волны, уравнения модели адаптированы для сосудов конической формы и предложены уточненные уравнения состояния. Численные исследования проведены на примере плечевой артерии.

Ключевые слова: одномерная модель гемодинамики, математическое моделирование, скорость пульсовой волны.

Введение

Согласно статистике, сердечно-сосудистые заболевания остаются основной причиной смертности и наиболее значимой проблемой здравоохранения в развитых странах. Именно поэтому остро стоят задачи, касающиеся улучшения лечебных и диагностических средств. В решении всех этих задач на современном уровне особая роль отводится математическому моделированию. Преимущества математического моделирования заключаются в том, что математические модели могут иметь различную степень точности и подробности в зависимости от поставленной задачи, а численный эксперимент может проводится как для различных значений параметров модели от самых распространенных до самых редких. Моделированию сердечно-сосудистой системы посвящено множество работ (см., в частности, [1, 2, 3]).

При моделировании артериальной системы человека, чаще всего используется одномерная модель гемодинамики. Несмотря на ее распространенность, некоторые вопросы еще не достаточно проработаны. Например, комплексная математическая модель сердечно-сосудистой системы, созданная ИМ СО РАН и КТИ ВТ СО РАН и реализованная на платформе BioUML, с высокой степенью достоверности предсказывает систолическое и диастолическое давление [4]. Однако при этом смоделированная форма пульсовой волны значительно отличается от ожидаемой, приведенной, например в [5]. При этом форма и скорость пульсовой волны имеют важное диагностическое значение при обследовании пациентов. И так как эти параметры могут быть измерены неинвазивно, спектр их использования может быть довольно широким.

Для того, чтобы построить адекватную форму пульсовой волны, необходимо решить две существенные проблемы в исходной модели. Во-первых, учесть геометрию сосуда, так как на самом деле целый ряд крупных сосудов, например аорта, имеет ярко выраженную коническую форму. Во-вторых, уточнить уравнение состояния с тем, чтобы оно адекватно отражало сложную структуру стенки сосуда. Первый вопрос рассмотрен в [6, 7]. Данная работа посвящена решению второго вопроса.

Одномерная модель описывает течение крови в артериях и ее взаимодействие с подвижными стенками. Пусть t — время, z — координата, направленная вдоль сосуда. Стандартная одномерная модель гемодина-

мики для цилиндрического сосуда имеет вид:

$$\begin{cases} \partial_t A + \partial_z Q = 0, \\ \partial_t Q + \alpha \partial_z \left(\frac{Q^2}{A} \right) + \frac{A}{\rho} (\partial_z p) + K_r \frac{Q}{A} = 0, \\ p = p(A). \end{cases} \tag{1}$$

Здесь $A = A(t,z) = \pi r^2(t,z)$ — площадь осевого сечения, $Q(t,z)$ — средний объемный кровоток, $\alpha \approx 1$ — коэффициент Кориолиса, $K_r \approx 8\pi\nu$ — коэффициент трения, где $\nu = 0.035$ см^2/с. Значения коэффициента Кориолиса и коэффициента трения соответствуют параболическому профилю скорости течения крови в сосуде [1].

В качестве замыкающего соотношения в (1) используется алгебраическое уравнение $p = p(A)$, играющее роль уравнения состояния.

1 Модификация уравнений состояния

Уравнение состояния

$$p = \beta \frac{\sqrt{A} - \sqrt{A_0}}{A_0}, \tag{2}$$

где A_0 — площадь сечения сосуда в ненапряженном состоянии, имеет широкое применение при моделировании артериальной системы (см., например, [8, 9]), однако, оно не учитывает сложную структуру стенки сосуда, а его вывод, приведенный в [10] содержит ряд математических неточностей с математической точки зрения. Для уточнения уравнения состояния в данной работе предлагается два подхода, которые более подробно описаны в следующих разделах.

1.1 Модуль Юнга, линейно зависящий от изменения площади сечения сосуда

Известно, что стенка сосуда состоит из волокон эластина, коллагена и мышц. Так как моделирование роли мышц является довольно сложной задачей, на данном этапе их влияние в модели учитываться не будет. Рассмотрим только вклад эластина и коллагена. Именно они определяют упругие свойства и прочность тканей. Эластиновые нити характеризуются сравнительно высокой способностью к растяжению, т.е. низким модулем Юнга: $(0,4-1,0)\cdot 10^6$ Н/м^2. Коллагеновые нити имеют модуль Юнга на порядок выше: $(0,5-1,0)\cdot 10^7$ Н/м^2, т.е. обладают низкой растяжимостью. Считается, что в тканях волокна эластина находятся под напряжением уже при умеренном растяжении, тогда как коллагеновые волокна оказываются в состоянии натяжения лишь при сильной деформации [10]. Поскольку механические параметры волокон эластина и коллагена значительно отличаются, предположим, что модуль Юнга меняется, в зависимости от относительного изменения площади осевого сечения сосуда. Желательно, чтобы эта взаимосвязь была как можно более простого вида, с другой стороны, она должна обеспечивать монотонную зависимость $p(A)$. Этим условиям удовлетворяет линейная функция:

$$E = E_0 + E_1 \frac{A - A_0}{A_0} = E_0 + E_1 \frac{r^2 - {r_0}^2}{{r_0}^2}. \tag{3}$$

Если $d\sigma$ — изменения тангенциального напряжения, соответствующее изменению длины радиуса сосуда dr, то, применяя локально закон Гука, получаем:

$$d\sigma = E \frac{2\pi(r+dr) - 2\pi r}{2\pi r} = E(r)\frac{dr}{r} \text{ или } \sigma = \int_{r_0}^{r} E(x)\frac{dx}{x} \tag{4}$$

Подставив выражение (3) в интеграл (4), получаем:

$$\sigma = (E_0 - E_1)\ln\sqrt{\frac{A}{A_0}} + E_1 \left(\frac{A - A_0}{2A_0} \right). \tag{5}$$

Используя уравнение Ламе

$$\sigma = \frac{pr}{h}, \tag{6}$$

где h — толщина стенки сосуда, и уравнение для напряжения (5) выведем закон давления:

$$p = \frac{(\beta_0 - \beta_1)\sqrt{A_0}\ln\sqrt{\frac{A}{A_0}}}{A} + \frac{\beta_1}{2}\left(\frac{A - A_0}{A\sqrt{A_0}}\right), \tag{7}$$

где $\beta_0 = E_0 h_0\sqrt{\pi}$, $\beta_1 = E_1 h_0\sqrt{\pi}$, h_0 — толщина стенки сосуда в ненапряженном состоянии.

1.2 Уравнение состояния с использованием экспериментальных данных in vivo

Приведем закон давления, полученный на основе экспериментальных данных. В статье [11] изложены результаты эксперимента, в котором участвовали семь здоровых мужчин от 22 до 56 лет. В их анамнезе отсутствовали болезни сердца, гипертония, сахарный диабет, сосудистые заболевания и другие хронические заболевания. На графике (рис. 1) представлены результаты измерений in vivo напряжения стенок плечевой артерии. Средняя кривая обозначает зависимость напряжения от деформации стенок плечевой артерии в исходном состоянии, а кривые слева и справа при введении норэпинефрина (NE) и нитроглицерина (NTG), соответственно.

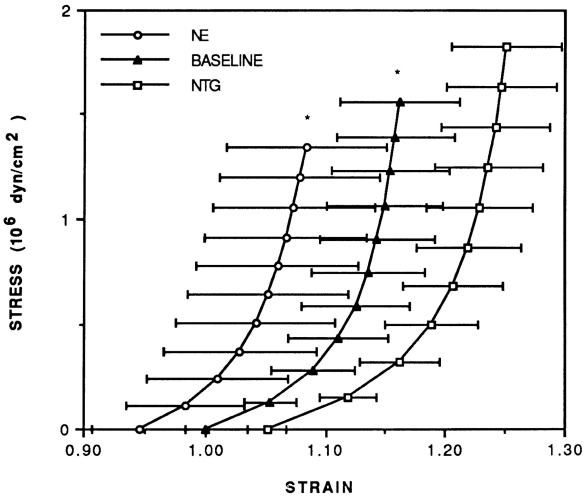


Рис. 1: Зависимость напряжения от деформации стенок плечевой артерии в исходном состоянии и при воздействии NE и NTG.

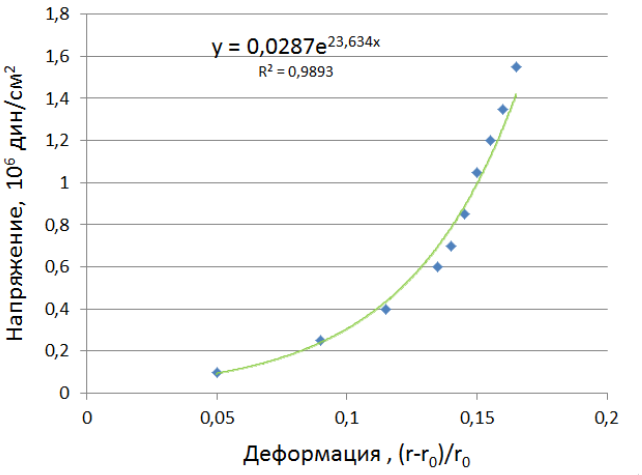


Рис. 2: Аппроксимация экспоненциальной функцией зависимости напряжения от относительной деформации стенок плечевой артерии.

Кривая, соответствующая исходному состоянию (средняя кривая на рис. 1), с хорошей точностью аппроксимируется экспоненциальной функцией (рис. 2):

$$\sigma = c\exp\left(\frac{d}{20}\right)\left(\exp\left(d\frac{r - r_0}{r_0}\right) - 1\right), \tag{8}$$

где $c = 0.0287, d = 23.634$.

Используя уравнения Ламе (6) и аппроксимацию напряжения (8) для формирования нового уравнения состояния, получаем:

$$p = \frac{\beta_0\sqrt{A_0}}{A}\exp\left(\frac{d}{20}\right)\left(\exp\left(d\left(\sqrt{\frac{A}{A_0}} - 1\right)\right) - 1\right), \tag{9}$$

где $\beta_0 = 10^6 c h_0\sqrt{\pi}$, $c = 0.0287$, d=23.634.

1.3 Сравнение уравнений состояния

Получено два новых уравнения состояния:

$$1)\ p = \frac{(\beta_0 - \beta_1)\sqrt{A_0}\ln\sqrt{\frac{A}{A_0}}}{A} + \frac{\beta_1}{2}\left(\frac{A - A_0}{A\sqrt{A_0}}\right);$$

$$2)\ p = \frac{\beta_0\sqrt{A_0}}{A}\exp\left(\frac{d}{20}\right)\left(\exp\left(d\left(\sqrt{\frac{A}{A_0}}-1\right)\right)-1\right).$$

На данных рис. 3 изображены графики $p(A)$. При этом используются следующие значения параметров: lля уравнения (2) $\beta_0 = 10^5$, для (7) $\beta_0 = 10^5$, $\beta_1 = 10^6$ и для (9) $\beta_0 \approx 2.5 \cdot 10^3$. График, отображающий зависимость p от A для уравнения состояния (9) более адекватен в реальной ситуации, так как при повышении давления растяжение не может бить бесконечным. При сильном растяжении сосуда его жесткость резко повышается, а дальнейшее повышение давления приводит к разрушению сосуда.

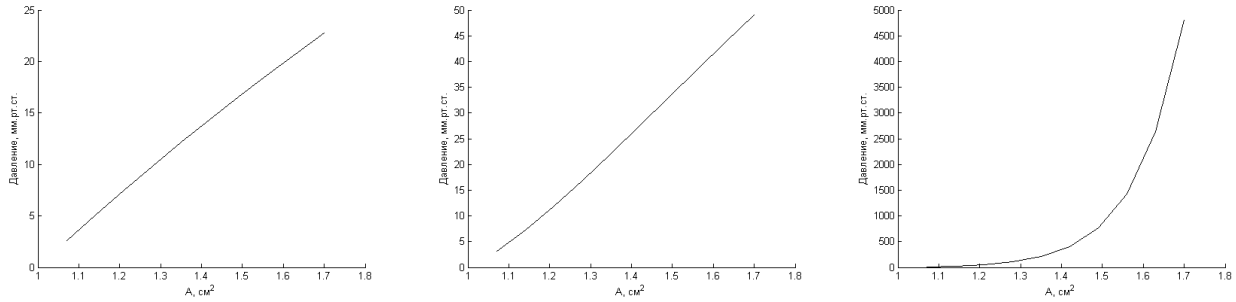


Рис. 3: Зависимость давления $p(A)$ для уравнения состояния (2) (слева), (7) (в центре), (9) (справа)

2 Сравнительное исследование скорости распространения пульсовой волны

Скорость распространения пульсовой волны представляет высокий интерес как диагностический параметр, так как позволяет оценивать состояние жесткости сосудов. Для того, чтобы определить скорость пульсовой волны, необходимо расстояние, пройденное волной поделить на время запаздывания, т.е.

$$v = \frac{\text{расстояние}}{\text{время запаздывания}}.$$

Приведем результаты сравнения скорости пульсовой волны для уравнений (2) и (9) на примере плечевой артерии, т.е. для цилиндрического сосуда с параметрами: $R = 0.3$ см, $\beta \approx 1.8 \cdot 10^7$ г/с^2, $l = 25$ см. На вход в сосуд подадим переменное давление, заданное периодической функцией $q(t)$. Функция $q(t)$ позволяет разделить прямую и возвратную волны. На выходе зададим $p = 0$ мм.рт.ст. Графики на рис. 4 отображают изменение площади сечения в середине сосуда.

Скорости для различных уравнений состояния:

$$v_1 = 13.15 \text{ м/с (уравнение (2))}, \qquad v_2 = 4.24 \text{ м/с (уравнение (9))}.$$

Заметим, что в норме скорость распространения пульсовой волны у здоровых людей молодого и среднего возраста достигает 5–10 м/с. Из этого следует, что скорость пульсовой волны при уточненном уравнении состояния соответствует нормальным значениям, тогда как при старом она значительно выше нормы.

Заключение

В работе два варианта получения уравнения состояния для одномерной модели гемодинамики:

- с использованием переменного модуля Юнга;
- с использованием экспериментальных данных in vivo.

Для второго случая проведено моделирование распространения пульсовой волны и исследована ее скорость.

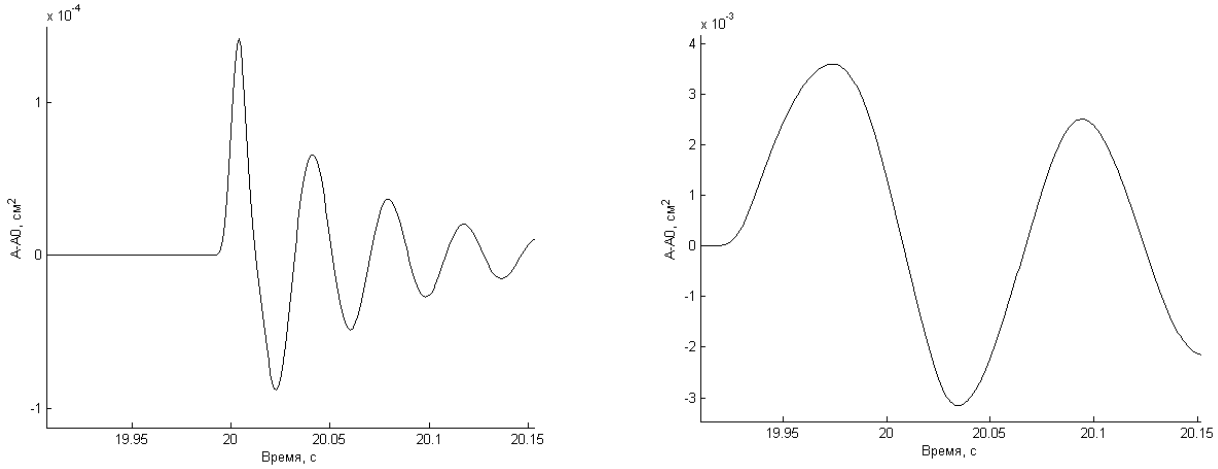


Рис. 4: Распространения пульсовой волны в модели с уравнением состояния (2) (слева) и с уравнением (9) (справа)

Список литературы

[1] Л.Н. Иванова, А.М. Блохин , А.Л Маркель. Система кровообращения и артериальная гипертония: биофизические и генетико-физиологические механизмы, математическое и компьютерное моделирование: Моногр. Новосибирск: Сиб. отд-ние РАН, 2009 (сер. Интеграционнные проекты. Вып. 17).

[2] И.Н. Киселев, Б.В. Семисалов, Э.А. Бибердорф, Р.Н. Шарипов, А.М. Блохин, Ф.А. Колпаков. Модульное моделирование сердечно-сосудистой системы человека. Математическая биология и биоинформатика. 2012. Т.7, № 2. С. 703–736.

[3] Circulatory System and Arterial Hypertension: Experimental Investigation, Mathematical and Computer Simulation. Series: Human Anatomy and Physiology. Editors: L.N. Ivanova, A.L. Markel, A.M. Blokhin. Nova Science Publishers INC, 2012.

[4] И.Н. Киселев, Э.А. Бибердорф, В.И. Баранов, Т.Г. Комлягина, В.Н. Мельников, И.Ю. Суворова, С.Г. Кривощеков, Ф.А. Колпаков. Персонализация параметров и валидация модели сердечно-сосудистой системы человека. Математическая биология и биоинформатика. 2015. Т. 10, № 2. С. 526–547.

[5] А.В. Фролов, Г.И. Сидоренко, А.П. Воробьев, О.П. Мельникова, Л.М. Гуль. Прямая и отраженная пульсовые волны: Методы исследования. Кардиология в Беларуси. 2009. № 5. С. 99–108.

[6] А.Ю. Кунделеев, Б.Я. Кантор. Распространение волн давления в сужающихся цилиндрических сосудах с жидкостью. Пробл. машиностроения. 2000. Т. 3, № 3–4. С. 118–122.

[7] А.В. Доль, Ю.П. Гуляев. Математические модели гемодинамики кровотока с учетом работы распределенного сердца. Ж. Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2011. № 4 (2). С. 423–424.

[8] Э.А. Бибердорф, А.М. Блохин, И.Н. Киселев, Б.В. Семисалов, Ф.А. Колпаков. Система кровообращения человека — математическое и компьютерное моделирование. Учебное пособие, Новосибирск, 2014.

[9] Lamponi D.N. One dimentional and multiscale models for blood flow circulation. Lausanne. EPFL. 2004.

[10] Владимиров Ю. А., Рощупкин Д. И., Потапенко А. Я., Деев А. И. Биофизика: Учебник. М., 1983. С. 200–205.

[11] Bank A.J., Wang H., Holte J.E., Mullen K., Shammas R., Kubo S.H. Contribution of collagen, elastin, and smooth muscle to in vivo human brachial artery wall stress and elastic modulus. Circulation. 1996; 94. C. 3263–3270.

Светамира Геннадьевна Давыдова — студент Новосибирского государственного университета;
e-mail: svetamira_ davydova@mail.ru;
Элина Арнольдовна Бибердорф — к.ф.-м.н., ст. науч. сотр. Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН; доцент Новосибирского государственного университета;
e-mail: biberdorf@ngs.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

МОДЕЛЬ ЛИНЗЫ ДЛЯ ТРАССИРОВКИ ЛУЧЕЙ С УЧЕТОМ ПОЛЯРИЗАЦИИ

В. А. Дебелов[1,2], К. Г. Кушнер[2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 004.925.3

Линза — один из основных объектов в оптике. Также она достаточно хорошо проработана в фотореалистической компьютерной графике. Существуют немало систем оптического дизайна, например, *ASAP*®, где также конструируются линзы. Тем не менее, при решении конкретной прикладной задачи, как правило, обнаруживается, что информация разбросана по источникам или, вообще, не полна, и нужным параметрам линзы не уделялось внимания. Рассматривается конкретное применение модели линзы, а именно: работа линзы в составе поляризационного микроскопа (или полярископа), когда надо учитывать поляризацию света при расчете интерференционных картин. Мы отвергли модель тонкой линзы и модель толстой линзы, т.к. они: во-первых, являются приближениями; во-вторых, частично подавляют реальные физические явления типа сферической или хроматической аберраций, что хорошо для фотографии, но совершенно не подходит для нашей задачи. Остановились на подходе реалистической компьютерной графики, представив линзу в виде 3D подсцены, ограниченной двумя «прозрачными» сферическими поверхностями и непрозрачной боковой поверхностью (цилиндр, сфера), и изучили ее влияние на поляризованный свет. Для расчета интерференционной картины применена трассировка лучей. Разработанная модель линзы преобразует входной луч света с известной поляризацией (неполяризованный, частично линейно поляризованный, линейно поляризованный) в выходной луч с точными интенсивностью и состоянием поляризации света. Линейная поляризация внутри устройства поддерживается наличием двух поляризаторов. Отметим, что в модели линзы учтены такие часто игнорируемые параметры, как поглощение и рассеяние оптического стекла. Кроме того, рассматривается влияние возможных искажений выходного луча, которые могут возникать из-за внутренних переотражений луча внутри линзы.

Ключевые слова: линза, линейная поляризация света, оптическая дисперсия, фотореалистический спектральный рендеринг, трассировка лучей, поляризационный микроскоп.

Введение

Линза — это один из самых распространенных оптических объектов, она применяется в повседневной жизни и в научных исследованиях. Очевидно, что реалистическая компьютерная графика не обошла вниманием такие объекты трехмерных сцен, особенно, в связи с разработкой систем виртуальной и добавленной реальности. В этой работе мы не будем рассматривать все многообразие линз, которые могут иметь достаточно причудливые геометрические формы — очки, например. Хотя, стоит отметить, что излагаемый здесь материал применим и в этом случае. Тем не менее мы рассмотрим изучаемые в оптике классические линзы [1], которые являются основными конструктивными элементами многих оптических устройств, например, таких как микроскопы, объективы и т.п. Отметим, что существует достаточно много систем оптического дизайна, например, наиболее мощные и продвинутые ASAP [2], OSLO [3] и другие, функциональность которых позволяет конструировать в том числе геометрию линз и определять различные их оптические характеристики, такие как аберрации, астигматизм и т.п. В основном эти САПР ориентируются на разработку более сложных оптических устройств, таких как объективы (несколько линз) и позволяют определять индивидуальные характеристики и поведение какого-либо отдельного луча света, например, в ASAP пользователь может задать и отследить до пяти лучей. Наша задача возникла в связи с компьютерным моделирование

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-07-00762).

поляризационного (или петрографического) микроскопа [4, 5], т.е. необходимо выполнить рендеринг (расчет изображения) специфической 3D сцены и получить изображение, аналогичное наблюдаемому в такой микроскоп. Таким образом, наша задача перенести через линзу (компьютерную модель линзы) весь световой поток одновременно. В нашем случае не надо заботиться о средствах, направленных на улучшение каких-либо характеристик линзы, чему посвящена значительная часть функциональности упомянутых САПР. Наша задача — разработка компьютерной модели линзы, удовлетворяющей расчету физически корректной картины. Таким образом, какое-либо заимствование из таких САПР практически невозможно, учитывая их know-how, правда, разработка опирается на те же самые физические принципы, на которых построены эти САПР. Расчет изображений — это задача другой дисциплины — компьютерной графики, где вопросам улучшения характеристик устройств не уделяется внимания вообще, поскольку рендеринг сцены заключается в расчете изображения представленных объектов со специфицированными оптическими характеристиками и параметрами камеры. Другими словами, если устройство не подавляет нежелательные эффекты, которые сказываются на изображении, они должны на нем проявиться.

Материал работы построен в виде исторического экскурса в эволюцию систем реалистического рендеринга 3D сцен, где показывается, что существующие коммерческие и открытые программы не удовлетворяют задаче синтеза изображений, получаемых в поляризационном микроскопе.

1 RGB-модель и спектральная модель представления света и цвета

RGB-модель происходит из трехстимульной теории психофизиологии восприятия цвета человеком как смеси основных цветов: R — красный, G — зеленый, B — синий. Не вдаваясь в подробности, для нас главное в этой модели, то, что даже наши бытовые устройства отображения — телевизоры и мониторы компьютеров — работают на ее основе. Надо отметить, что до настоящего времени — это наиболее используемая модель в играх, дизайне, системах виртуальной реальности и т.д.

Известно, что свет представляет совокупность волн электромагнитного излучения и имеет спектральную природу, любые цвета — это спектры из видимого диапазона от 380 до 780 нм. Создадим простейшую сцену, включающую расцвеченную плоскость, линзу, точечный источник света. На рис. 1 слева приводится изображение, рассчитанное на основе RGB-модели самым применяемым алгоритмом Виттеда [6, 7]. Вполне реалистичное изображение, хотя для всех трех компонент цвета мы вынуждены назначить единое значение коэффициента преломления стекла. Представим, что мы знаем спектральные характеристики источника света и стекла линзы (взяты данные для стекла N-SF11 [8]), тогда можно применить спектральный рендеринг [7], используя тот же алгоритм Виттеда, и получить среднее изображение на рис. 1. Отличия видны на глаз. Здесь коэффициенты преломления (или индексы рефракции) различаются для разных длин волн. Если спектр представлен nSp отсчетами, потребуется построить в nSp раз больше деревьев трассировки, что значительно увеличит время расчета, в нашем случае nSp=81. На рис. 1 справа приведена разность предыдущих изображений, из которой видно, что более физически корректная спектральная модель представления света и цвета ухватывает больше эффектов взаимодействия света с прозрачными поверхностями — особенно это видно при переходе от одного цвета к другому. Справедлив вывод, что более корректная модель требует большего времени расчета. Тем не менее, более простая модель дает достаточно корректное изображение, например, черное пятно на изображениях показывает эффект полного внутреннего отражения.

Рассмотрим более точный учет поведения света при взаимодействии с границами прозрачных сред. Свет может быть естественный (неполяризованный), частично поляризованный и поляризованный, см. [9]. Известные программы рендеринга работают только с неполяризованным светом. При этом сделана попытка точнее оценить физически корректное взаимодействие неполяризованного света с прозрачными поверхностями — приближение Шлика [10] для расчета интенсивностей порожденных (отраженный и преломленный) лучей по отношению к падающему на границу двух прозрачных сред. Модернизируем сцену: нет точечного источника, зато плоскость является источником диффузного неполяризованного освещения в сцене. Физически корректно рассчитывать изменение интенсивности с помощью формул Френеля [11], когда на границе сред делается разложение неполяризованного света на две линейно поляризованные компоненты. Аппроксимация Шлика позволяет в два раза (по нашим экспериментам) ускорить этот расчет.

На рис. 2 показаны изображения, полученные с применением аппроксимации Шлика и формул Френеля. По негативу разности этих изображений видно, что используемое приближение дает определенную погрешность.

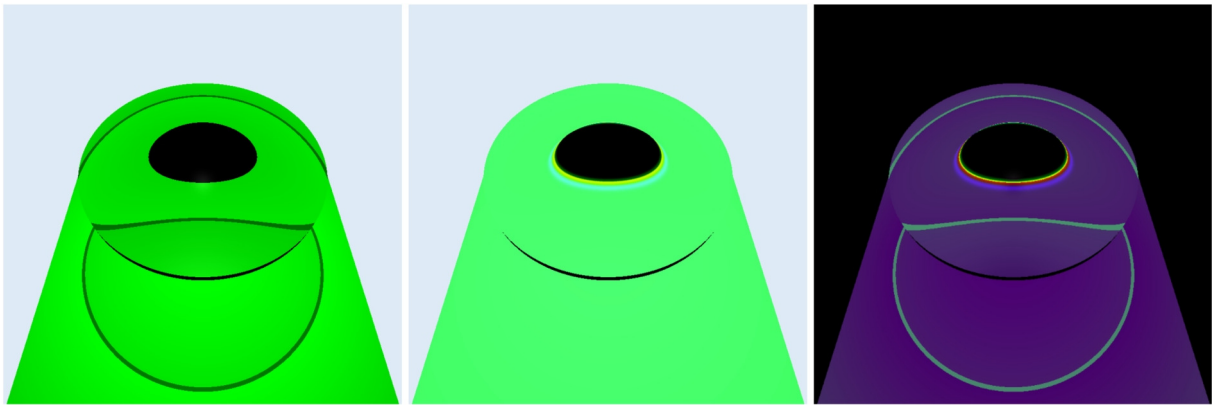


Рис. 1: Изображения слева направо: расчет по RGB-модели, расчет по спектральной модели, разность

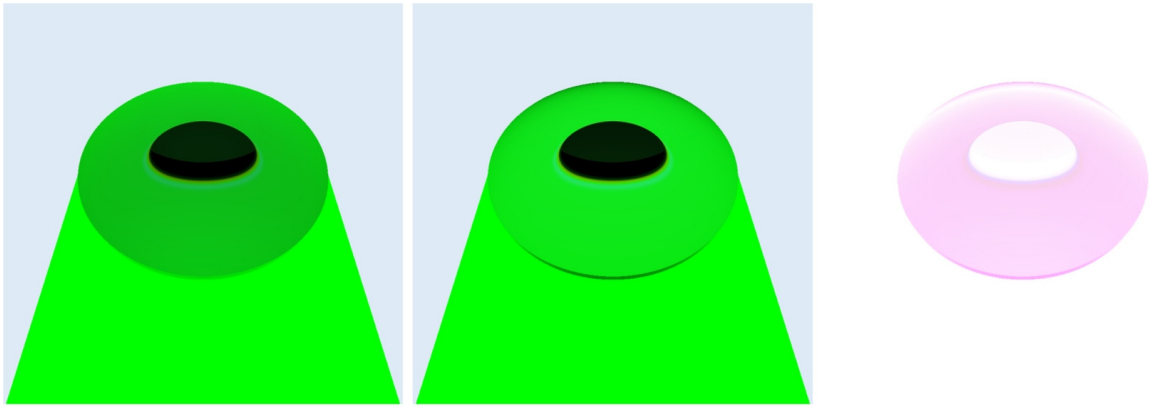


Рис. 2: Изображения слева направо: расчет по Шлику, расчет по Френелю, негатив разности

2 Модель представления луча света с учетом поляризации

Один взгляд на эволюцию представления луча, т.е. информационной нагрузки (или в дальнейшем — просто нагрузки) на математический луч, дается в работе [12]. В настоящее время применяемый на практике подход заключается в том, что нагрузка содержит одно (при спектральном рендеринге) или три (при RGB-рендеринге) значения интенсивности. Считается, что луч переносит неполяризованный свет между точками взаимодействия луча с поверхностями сцены. В предыдущем разделе мы показали, что даже локальный расчет (Шлик или Френель) на основе поляризации дает общее уточнение картинки. Все эти рассуждения о скорости расчета подходят в ситуации, когда необходимо выбирать визуальное восприятие рассчитанных картинок для «обычных» сцен. Другая ситуация при получении интерференционных картин, наблюдаемых в поляризационный микроскоп, когда невозможно применить какие-либо ускоряющие расчет аппроксимации или феноменологические модели отражения света подобные введенной Фонгом [7]. Требуется доводить до камеры лучи с точной спецификацией состояния поляризации переносимого света. Это не такое критическое требование для повседневной жизни, но приобретает первостепенное значение при изображении оптически анизотропных объектов или сред, например, кристаллов. В компьютерной графике этому направлению посвящено не так много исследовательских работ, ссылки на основные перечислены в [13, 14]. Состояние дел в компьютерной графике с интерференцией света см. в [15].

Линза входит во многие оптические устройства, поляризационный микроскоп можно представлять как конвейер обработки потока света, состоящий из линз, или аналог трубы с линзами перегородками [5]. На уровне компьютерной модели линзы невозможно решить задачу основного приложения, поэтому ее основная задача: корректно передавать вовне пришедшие на нее лучи, т.е. должны учитываться интенсивность, фаза и состояние поляризации. Рассмотрев возможные применения линзы, мы учли возможность получения интерференционных картин в основной программе — компьютерной модели поляризационного микроскопа. Вопросы дифракции на данном этапе не рассматривались.

3 Линзы in *silico*

В настоящее время компьютеризированы многие области научных исследований, в том числе и такие, в которых применяются микроскопы. Например, работа по световой микроскопии для физически обоснованной визуализации моделей мозга [16] или работа по восстановлению образца на основе цифровых изображений, полученных через микроскоп [17]. В таких разработках можно выделить компьютерные модели используемых линз. Это может быть некоторый преобразователь информации о проходящем свете, разработанный теоретически, или даже обособленный модуль, моделирующий линзу устройства. Показательный пример представления линз (и целых объективов) в компьютерной графике приведен в работе [18]. Здесь линзы — это просто часть сцены, никак особо не обозначенная и описанная набором поверхностей со специфицированными оптическими свойствами. Для получения изображения используется трассировка лучей, когда строится дерево (или путь), узлы которого соответствуют точкам поверхностей сцены, где происходит отражение и преломление света, т.е. возможное ветвление порождает не более двух потомков. Еще одна свежая работа [19] также игнорирует поляризацию света, предлагает достаточно эффективное моделирование поведения реальных линз и оптических систем для расчета изображений трассировкой лучей методом Монте-Карло.

Нам не удалось найти в доступных источниках компьютерных моделей поляризационных микроскопов и даже компьютерных моделей линз, обрабатывающих поляризованный свет. Показательно замечание из работы [16], что в текущем состоянии разработки игнорируются волновые эффекты, в основном дифракция, интерференция и поляризация. Почему можно в большинстве случаев игнорировать поляризацию? Во вводной главе к книге [20] Ханрахан отмечал, что игнорирование поляризации позволяет рассчитывать вполне реалистичные картины. Также отметим, что учет поляризации очень дорогой и, как правило, в отсутствии знания о когерентности света, приносимого различными лучами, не имеет смысла. Имеются компьютерные симуляции бытовых фотоаппаратов (та же работа [18]), но нет физически корректных моделей поляризационных фильтров в связи с тем, что они представляют оптически анизотропные объекты сцены.

Как уже упоминалось: поляризационный микроскоп — это конвейер обработки линейно поляризованного света, обрабатывающие элементы которого линзы, а окончательное изображение — это интерференционная картина. Интерференционная картина может возникнуть даже при неполяризованном освещении и с оптически изотропными объектами сцены, например, см. [15].

В данной работе представлена модель линзы in silico (Lis), которая, напротив, работает только с линейно поляризованным светом. Ограничение легко снимается, учитывая свойство аддитивности, что неполяризованный или частично поляризованный луч света можно представлять в виде суммы поляризованных лучей с соответствующими интенсивностями.

На текущий момент модель разработана для удовлетворения следующих основных требований:

- Lis может включаться в рендеры (программы расчета изображений), работающие на основе трассировки лучей. При этом модуль может работать как при прямой трассировке, так и при обратной рекурсивной трассировке лучей типа алгоритма Виттеда [6].
- Расчет ведется в спектральном формате, когда все показатели рассчитываются для каждой волны спектра отдельно в оптическом диапазоне электромагнитных волн 380—780 нм.
- Каждый входящий поляризованный луч характеризуется начальными значениями состояния поляризации, фазой и интенсивностью. А также идентификатором источника, генерирующего луч, чтобы при необходимости можно было определить когерентность лучей.
- В процессе обработки Lis может генерировать несколько выходных лучей. Это связано с тем, что луч попавший внутрь линзы в дальнейшем претерпевает множество переотражений, и при каждом из них может появиться выходящий (преломленный) луч.
- Lis позволяет задать предельное число внутренних переотражений, позволяя управлять скоростью расчета и точностью.
- Каждый выходящий луч несет идентификатор источника породившего луча, а также пересчитанные значения состояния поляризации, фазы и интенсивности. Учитываются индексы рефракции и показатели поглощения для конкретного стекла линзы. В целях отладки допускается задавать спектры преломления и поглощения, заданные пользователем. Будем считать, что стекло линзы достаточно хорошего качества, т.е. идеальное в некотором смысле стекло без каких-либо включений и рассеивающих элементов, оптически однородное, бессвильное, без пузырей и включений, без двойного лучепреломления (т.е. без напряжений) [21], но вполне реальное для поляризационного микроскопа.

- Каждый выходящий луч характеризуется полной линейной поляризацией. Если по данному направлению получились несколько поляризованных лучей, то они не объединяются, а так и выдаются «пучком». Для описания линейной поляризации достаточно всего одного вектора дополнительно к направлению луча, что не накладывает на приложение требований по представлению поляризованного света. Таким образом, приложение, использующее Lis, само решает, как трактовать информацию каждого такого пучка.

Заключение

Для придания большей универсальности применения разработанного модуля Lis спектр его применения расширен — можно задать дополнительные режимы работы: а) в рамках RGB-модели представления света; б) в спектральной модели без учета поляризации. Поскольку разработана наиболее сложная физически корректная модель для расчета отражения и преломления световых лучей с учетом поляризации света, реализацию оказалось нетрудно настроить и на более простые предыдущие модели представления света и цвета — наиболее используемую трехстимульную RGB и спектральную модели.

С одной стороны, модуль разработан так, что приложение, реализующее поляризационный микроскоп, будет последовательностью линз — конвейером, в начале которого источник поляризованного света, а в конце плоскость изображения. Образец минерала помещается внутри конвейера среди линз.

С другой стороны, конструкция модуля такова, что он достаточно просто может быть встроен в рендер, который позволяет расширять набор примитивов — типов объектов сцены. Например, в алгоритме Виттеда при построении дерева трассировки луч, попадая на прозрачную поверхность, образует узел с двумя потомками: ветвь отраженного луча и ветвь преломленного луча. В случае попадания луча на линзу образуется узел дерева с большим числом потомков, чем два.

В настоящее время реализован последовательный вариант с детерминированным поведением. Дальнейшее развитие разработки: а) параллельная реализация; б) более полный учет требований рендеров, рассчитывающих изображения по методу Монте — Карло.

Список литературы

[1] Ландсберг Г. С. Оптика. Учеб. пособие: для ВУЗов, 6-е изд. М.: Физматлит, 2003.

[2] The ASAP Primer. Breault Research Organization, Inc. Адрес доступа: http://www.breault.com/sites/default/files/knowledge_base/broman0955_primer.pdf (дата обращения 04.05.2017).

[3] Oslo. Optics Software for Layout and Optimization. User guide [Electronic resource]. — USA: Lambda Research Corporation, 2009. — Адрес доступа: http://www.phys.uconn.edu/ẽyler/phys4150/R/OSLO%20User%20Guide.pdf (дата обращения 04.05.2017).

[4] Скворцов Г. Е., Панов В. А., Поляков Н. И., Федин Л. А. Микроскопы / Под ред. Н. И. Полякова. Л.: Машиностроение, 1969.

[5] Bloss F. D. Introduction to the Methods of Optical Crystallography. NY: Holt, Rinehart and Winston, 1961.

[6] Whitted, T. An Improved Illumination Model for Shaded Display // Commun. ACM. 1980. Vol. 23, No. 6. P. 343–349.

[7] Роджерс, Д. Алгоритмические основы машинной графики. М.: МИР, 1989.

[8] Refractive index database. Optical constants of SF11, page N-SF11 (SCHOTT). A

[9] Born M., Wolf E. Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light. 6th ed. Cambridge Univ. Press, 1980.

[10] Schlick C. An Inexpensive BRDF Model for Physically-Based Rendering // Computer Graphics Forum. 1994. Vol. 13, No. 3. P. 233–246.

[11] Матвеев А. Н. Оптика. М.: Высшая школа, 1985.

[12] Васильева Л. Ф., Дебелов В. А. Эволюция модели луча света для рендеринга // Ситуационные центры и информационно-аналитические системы класса 4I для задач мониторинга и безопасности (SCVRT1516): Тр. Междунар. конф. Протвино: АНО ИФТИ, 2016. С. 178–184.

[13] Weidlich A., Wilkie A. A. Realistic Rendering of Birefringency in Uniaxial Crystals // ACM Transactions on Graphics: Proc. of the SIGGRAPH Conference). 2008. Vol. 27 (1). P. 6:1–6:12.

[14] Debelov V. A., Kozlov D. S. A Local Model of Light Interaction with Transparent Crystalline Media. // IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 2013, Vol. 19, No. 8, P. 1274–1287.

[15] Дебелов В. А. Интерференция света, изотропные прозрачные объекты, трассировка лучей // ГРАФИКОН'2015: Тр. Юбилейной 25-й Междунар. конф. Протвино: АНО ИФТИ, 2015. С. 168–173.

[16] Abdellah M., a.o. Physically-based in silico light sheet microscopy for visualizing fluorescent brain models // BMC Bioinformatics, 2015, Vol. 16, (Suppl. 11): S8.

[17] Kagalwala F., Kanade T. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B (Cybernetics), 2003, Vol. 33, iss. 5. P. 728–737.

[18] Жданов Д. Д., Потемин И. С., Гарбуль А. А., Соколов В., Валиев И. Методы стохастической трассировки лучей в задачах построения изображений, формируемых реальными оптическими системами // Тр. 26-ой Междунар. конф. по компьютерной графике и зрению ГРАФИКОН'2016. Протвино: АНО ИФТИ, 2016. С. 29–33.

[19] Hanika J., Dachsbacher C. Efficient Monte Carlo rendering with realistic lenses. Computer Graphics Forum. 2014, 33 (2): 323–332.

[20] Cohen, M. F., Wallace, J. R. Radiosity and Realistic Image Synthesis. — Academic Press, New York. 1993.

[21] Латыев С. М., Егоров Г. В., Митрофанов С. С., Каракулев Ю. А., Тимощук И. Н. Конструирование типовых оптических деталей и сборочных единиц оптических приборов. Адрес доступа: http://de.ifmo.ru/bk_netra/page.php?tutindex=46&index=5&layer=1 (дата обращения 04.05.2017).

Виктор Алексеевич Дебелов — д.т.н., вед. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: debelov@oapmg.sscc.ru;
Константин Григорьевич Кушнер — студент Новосибирского государственного университета;
e-mail: kushner@oapmg.sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАКРУЧЕННЫХ ТУРБУЛЕНТНЫХ СТРУЙНЫХ ТЕЧЕНИЙ

А. Г. Деменков[1,2], Г. Г. Черных[3,4], С. Н. Яковенко[5]

[1] *Институт теплофизики им С.С. Кутателадзе СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск*

[3] *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*

[4] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[5] *Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 532.517.4

Для описания течения в закрученных турбулентных струйных течениях привлекается система осредненных уравнений движения, неразрывности, переноса нормальных рейнольдсовых напряжений и скорости диссипации энергии турбулентности в приближении тонкого сдвигового слоя. Касательные турбулентные напряжения определяются из неравновесных алгебраических соотношений Роди. Численная реализация модели основана на применении конечноразностного алгоритма на подвижных сетках, консервативного по отношению к законам сохранения. В качестве примера расчетов закрученных турбулентных струй выполнено численное моделирование закрученного струйного турбулентного спутного течения за самодвижущимся телом. Рассмотрена модификация диффузионных слагаемых уравнений переноса, основанная на усовершенствованных алгебраических аппроксимациях Илюшина моментов третьего порядка, учитывающих закрутку потока. Результаты расчетов удовлетворительно согласуются с известными экспериментальными данными ИГиЛ СО РАН. Выполнен численный анализ автомодельности вырождения дальнего турбулентного следа с нулевым избыточным импульсом и ненулевым моментом количества движения. Построена упрощенная математическая модель закрученного дальнего безымпульсного турбулентного следа.

Ключевые слова: закрученные струйные турбулентные течения, математическое моделирование.

Введение

Исследование закрученных турбулентных струйных течений представляет интерес в связи с их чрезвычайной важностью при проектировании и использовании топочных агрегатов, камер сгорания, аппаратов химической технологии, изучении турбулентных следов за самодвижущимися телами и др. Закрученные турбулентные струйные течения рассматривались в целом ряде работ [1]–[11] (в них можно найти более полную библиографию). Ярким примером закрученного турбулентного струйного течения является течение в закрученном турбулентном следе за телом вращения [2], [4]–[11]. Уникальные данные о закрученных турбулентных следах с варьируемыми суммарным избыточным импульсом и моментом количества движения получены в ИГиЛ СО РАН [5], [8]. Несмотря на достаточно большое количество работ по математическому моделированию в этой области, целый ряд вопросов остался слабоизученным. Прежде всего это сопоставление с экспериментальными данными. Результаты расчетов [6], [9]–[11]на основе разработанных в этих статьях математических моделей удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными, однако при этом имеются отклонения численных решений от результатов экспериментов. С целью более детального описания течения в настоящей работе получена усовершенствованная математическая модель, основанная на модификации [12], [13] диффузионных слагаемых уравнений переноса нормальных компонент тензора рейнольдсовых напряжений и скорости диссипации энергии турбулентности.

С использованием разработанной ранее в [6] математической модели выполнено численное моделирование автомодельности вырождения дальнего турбулентного следа за телом вращения с нулевым суммарным

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00332).

избыточным импульсом и ненулевым моментом количества движения. Построена упрощенная математическая модель таких дальних турбулентных следов.

1 Постановка задачи

Для описания течения привлекается следующая система осредненных уравнений движения в приближении тонкого сдвигового слоя:

$$U\frac{\partial U}{\partial x}+V\frac{\partial U}{\partial r}=-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\langle uv\rangle+\frac{\partial}{\partial x}\int\limits_r^\infty\frac{[W^2+(\langle w^2\rangle-\langle v^2\rangle)]}{r}dr-\frac{\partial(\langle u^2\rangle-\langle v^2\rangle)}{\partial x}, \tag{1}$$

$$U\frac{\partial W}{\partial x}+V\frac{\partial W}{\partial r}+\frac{VW}{r}=-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\langle vw\rangle-\frac{\langle vw\rangle}{r}-\frac{\partial\langle uw\rangle}{\partial x}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial U}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial r}+\frac{V}{r}=0. \tag{3}$$

Здесь x, r, φ — цилиндрическая система координат с началом на задней кромке тела; ось x направлена противоположно направлению движения тела; U, V, W, u, v, w — соответствующие компоненты скорости осредненного и пульсационного движения; $\langle u^2\rangle$, $\langle v^2\rangle$, $\langle w^2\rangle$, $\langle uv\rangle$, $\langle uw\rangle$, $\langle vw\rangle$ — рейнольдсовы напряжения. Угловые скобки означают осреднение. В правых частях уравнений 1, 2 слагаемые с молекулярной вязкостью и диффузией отброшены в предположении малости. Поскольку рассматривается струйное турбулентное течение с вращательной симметрией, искомые функции от координаты φ не зависят. Система уравнений 1–3 незамкнута. Дополним ее дифференциальными уравнениями переноса рейнольдсовых напряжений. С учетом сделанных предположений уравнения записываются следующим образом:

$$U\frac{\partial\langle u^2\rangle}{\partial x}+V\frac{\partial\langle u^2\rangle}{\partial r}=D^t_{uu}+D^p_{uu}+P_{uu}+\Pi_{uu}-\varepsilon_{uu}, \tag{4}$$

$$U\frac{\partial\langle v^2\rangle}{\partial x}+V\frac{\partial\langle v^2\rangle}{\partial r}-2\langle vw\rangle\frac{W}{r}=D^t_{vv}+D^p_{vv}+P_{vv}+\Pi_{vv}-\varepsilon_{vv}, \tag{5}$$

$$U\frac{\partial\langle w^2\rangle}{\partial x}+V\frac{\partial\langle w^2\rangle}{\partial r}+2\langle vw\rangle\frac{W}{r}=D^t_{ww}+D^p_{ww}+P_{ww}+\Pi_{ww}-\varepsilon_{ww}, \tag{6}$$

$$U\frac{\partial\langle uv\rangle}{\partial x}+V\frac{\partial\langle uv\rangle}{\partial r}-\langle uw\rangle\frac{W}{r}=D^t_{uv}+D^p_{uv}+P_{uv}+\Pi_{uv}-\varepsilon_{uv}, \tag{7}$$

$$U\frac{\partial\langle uw\rangle}{\partial x}+V\frac{\partial\langle uw\rangle}{\partial r}+\langle uv\rangle\frac{W}{r}=D^t_{uw}+D^p_{uw}+P_{uw}+\Pi_{uw}-\varepsilon_{uw}, \tag{8}$$

$$U\frac{\partial\langle vw\rangle}{\partial x}+V\frac{\partial\langle vw\rangle}{\partial r}-\left(\langle w^2\rangle-\langle v^2\rangle\right)\frac{W}{r}=D^t_{vw}+D^p_{vw}+P_{vw}+\Pi_{vw}-\varepsilon_{vw}. \tag{9}$$

Величины P_{uu}, P_{vv}, P_{ww}, P_{uv}, P_{uw}, P_{vw} — порождения за счет градиентов скорости осредненного движения:

$$P_{uu}=-2\langle uv\rangle\frac{\partial U}{\partial r}, P_{vv}=2\langle vw\rangle\frac{W}{r}, P_{ww}=-2\langle vw\rangle\frac{\partial W}{\partial r},$$

$$P_{uv}=-\langle v^2\rangle\frac{\partial U}{\partial r}+\langle uw\rangle\frac{W}{r}, P_{uw}=-\langle uv\rangle\frac{\partial W}{\partial r}-\langle vw\rangle\frac{\partial U}{\partial r}, P_{vw}=-\langle v^2\rangle\frac{\partial W}{\partial r}+\langle w^2\rangle\frac{W}{r}.$$

Величины D^t_{uu}, D^t_{vv}, D^t_{ww}, D^t_{uv}, D^t_{uw}, D^t_{vw} описывают турбулентную диффузию:

$$D^t_{uu}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(-\langle u^2v\rangle\right)\right], D^t_{vv}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(-\langle v^3\rangle\right)\right]+2\frac{\langle vw^2\rangle}{r},$$

$$D^t_{ww}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(-\langle vw^2\rangle\right)\right]+2\frac{\langle vw^2\rangle}{r},$$

$$D^t_{uv}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(-\langle uv^2\rangle\right)\right]-\frac{\langle uw^2\rangle}{r}, D^t_{uw}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(-\langle uvw\rangle\right)\right]+\frac{\langle uvw\rangle}{r},$$

$$D^t_{vw}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\left(-\langle v^2w\rangle\right)\right]-\frac{\langle w^3\rangle}{r}+\frac{\langle v^2w\rangle}{r}.$$

Величины $D^p_{uu},\ D^p_{vv},\ D^p_{ww},\ D^p_{uv},\ D^p_{uw},\ D^p_{vw}$ — "диффузия давления":

$$D^p_{uu}=0,\quad D^p_{vv}=-\frac{2}{\rho}\frac{\partial\langle p'v\rangle}{\partial r},\quad D^p_{ww}=-\frac{2}{\rho}\frac{\langle p'w\rangle}{r},$$

$$D^p_{uv}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial\langle p'u\rangle}{\partial r},\quad D^p_{uw}=0,\quad D^p_{vw}=-\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial\langle p'w\rangle}{\partial r}-\frac{\langle p'w\rangle}{r}\right).$$

Величины $\Pi_{uu},\ \Pi_{vv},\ \Pi_{ww},\ \Pi_{uv},\ \Pi_{uw},\ \Pi_{vw}$ — корреляции с пульсациями давления:

$$\Pi_{uu}=\frac{2}{\rho}\langle p'\frac{\partial u}{\partial x}\rangle,\Pi_{vv}=\frac{2}{\rho}\langle p'\frac{\partial v}{\partial r}\rangle,\ \ \Pi_{ww}=\frac{2}{\rho r}\langle p'\left(\frac{\partial w}{\partial\varphi}+v\right)\rangle,$$

$$\Pi_{uv}=\frac{1}{\rho}\langle p'\left(\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)\rangle,\ \ \Pi_{uw}=\frac{1}{\rho}\langle p'\left(\frac{\partial w}{\partial x}+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial\varphi}\right)\rangle,\ \ \Pi_{vw}=\frac{1}{\rho}\langle p'\left(\frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial\varphi}-\frac{w}{r}+\frac{\partial w}{\partial r}\right)\rangle.$$

Наконец, $\varepsilon_{uu},\ \varepsilon_{vv},\ \varepsilon_{ww},\ \varepsilon_{uv},\ \varepsilon_{uw},\ \varepsilon_{vw}$ — соответствующие компоненты тензора диссипации.

Дополнительно к (4–9) привлекается уравнение для диссипации кинетической энергии турбулентности:

$$U\frac{\partial\varepsilon}{\partial x}+V\frac{\partial\varepsilon}{\partial r}=D^t_\varepsilon+P_\varepsilon-\varepsilon_\varepsilon,$$

где

$$D^t_\varepsilon=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\frac{\partial\langle v\varepsilon'\rangle}{\partial r}\right],$$

а $P_\varepsilon,\varepsilon_\varepsilon$ — слагаемые, отвечающие, соответственно, за порождение и деструкцию диссипации; $\rho=const$ — плотность жидкости.

Ниже рассмотрены две замкнутые математические модели. Модель 1 включает в себя дополнительно к 1–3 уравнения переноса нормальных рейнольдсовых напряжений:

$$U\frac{\partial\langle u^2\rangle}{\partial x}+V\frac{\partial\langle u^2\rangle}{\partial r}=-2(1-\alpha)\langle uv\rangle\frac{\partial U}{\partial r}-\frac{2}{3}\varepsilon-C_1\frac{\varepsilon}{e}\left(\langle u^2\rangle-\frac{2}{3}e\right)+\frac{2}{3}\alpha P+\frac{C_s}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{re\langle v^2\rangle}{\varepsilon}\frac{\partial\langle u^2\rangle}{\partial r}\right),\tag{10}$$

$$U\frac{\partial\langle v^2\rangle}{\partial x}+V\frac{\partial\langle v^2\rangle}{\partial r}-2\frac{W}{r}\langle vw\rangle=2(1-\alpha)\langle vw\rangle\frac{W}{r}-\frac{2}{3}\varepsilon-C_1\frac{\varepsilon}{e}\left(\langle v^2\rangle-\frac{2}{3}e\right)+$$

$$\frac{C_s}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{re}{\varepsilon}\left(\langle v^2\rangle\frac{\partial\langle v^2\rangle}{\partial r}-\frac{2\langle vw\rangle^2}{r}\right)\right]-\frac{2C_se}{r\varepsilon}\left[\langle vw\rangle\frac{\partial\langle vw\rangle}{\partial r}+\langle w^2\rangle\frac{(\langle v^2\rangle-\langle w^2\rangle)}{r}\right]+\frac{2}{3}\alpha P,\tag{11}$$

$$U\frac{\partial\langle w^2\rangle}{\partial x}+V\frac{\partial\langle w^2\rangle}{\partial r}+2\frac{W}{r}\langle vw\rangle=-2(1-\alpha)\langle vw\rangle\frac{\partial W}{\partial r}-\frac{2}{3}\varepsilon-C_1\frac{\varepsilon}{e}\left(\langle w^2\rangle-\frac{2}{3}e\right)+$$

$$\frac{C_s}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{re}{\varepsilon}\left(\langle v^2\rangle\frac{\partial\langle w^2\rangle}{\partial r}+\frac{2\langle vw\rangle^2}{r}\right)\right]+\frac{2C_se}{r\varepsilon}\left[\langle vw\rangle\frac{\partial\langle vw\rangle}{\partial r}+\langle w^2\rangle\frac{(\langle v^2\rangle-\langle w^2\rangle)}{r}\right]+\frac{2}{3}\alpha P,\tag{12}$$

В Модели 1 касательные турбулентные напряжения определяются из неравновесных соотношений Роди

$$\langle uv\rangle=\alpha_1\langle v^2\rangle\frac{\partial U}{\partial r}\tag{13}$$

$$\langle uw\rangle=\alpha_1\left(\langle uv\rangle\frac{\partial W}{\partial r}+\langle vw\rangle\frac{\partial U}{\partial r}\right)\tag{14}$$

$$\langle vw\rangle=\alpha_1\left(\langle v^2\rangle r\frac{\partial}{\partial r}(W/r)+\frac{W}{r}(\langle v^2\rangle-\langle w^2\rangle)\right)\tag{15}$$

где $\alpha_1=-\lambda_1\dfrac{e}{\varepsilon},\ \lambda_1=\dfrac{1-C_2}{C_1+P/\varepsilon-1}$.

Скорость диссипации ε находится путем решения соответствующего дифференциального уравнения переноса

$$U\frac{\partial\varepsilon}{\partial x}+V\frac{\partial\varepsilon}{\partial r}=\frac{C_\varepsilon}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{re\langle v^2\rangle}{\varepsilon}\frac{\partial\varepsilon}{\partial r}\right)+\frac{\varepsilon}{e}\left(C_{\varepsilon1}P-C_{\varepsilon2}\varepsilon\right).\tag{16}$$

Величина P в уравнениях 10–12, 16 — порождение энергии турбулентности за счет градиентов осредненного движения:

$$P = -\left(\langle uv\rangle\frac{\partial U}{\partial r} + \langle vw\rangle r\frac{\partial (W/r)}{\partial r} + \langle v^2\rangle\frac{\partial V}{\partial r} + \langle w^2\rangle\frac{V}{r}\right). \tag{17}$$

Эмпирические постоянные C_s, C_ε, α, C_1, C_2, $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$ в уравнениях и соотношениях (10)–(16) равны, соответственно, 0.22, 0.17, 0.93, 0.6, 2.2, 1.45, 1.92. В основу представленной выше математической модели положена модель [1]. Отличие от математической модели [1] состоит в алгебраических представлениях [12], [13].

В Модели 2 используются следующие представления одноточечных тройных корреляций поля скорости [12], [13] ($D_{u_iu_j} \equiv D_{u_iu_j}{}^t + D_{u_iu_j}{}^p$):

$$D_{uu} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(-r\langle u^2v\rangle); \quad D_{vv} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(-r\langle v^3\rangle) + 2\frac{\langle vw^2\rangle}{r}; \quad D_{ww} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(-r\langle vw^2\rangle) - 2\frac{\langle vw^2\rangle}{r};$$

$$D_{uv} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(-r\langle uv^2\rangle) + \frac{\langle uw^2\rangle}{r}; \quad D_{uw} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(-r\langle uvw\rangle) - \frac{\langle uvw\rangle}{r}; \quad D_{vw} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(-r\langle v^2w\rangle) - \frac{\langle v^2w\rangle}{r} + \frac{\langle w^3\rangle}{r};$$

$$D_k = \frac{1}{2}(D_{uu} + D_{vv} + D_{ww}); \quad \langle v^3\rangle = \frac{\langle v^3\rangle^0 + 6\frac{\tau}{C_3}\frac{W}{r}\cdot\langle v^2w\rangle^0}{1 + 6\left[\frac{\tau}{C_3}\right]^2\frac{W}{r}\left(\frac{\partial W}{\partial r} + \frac{W}{r}\right)} \quad \langle u^2v\rangle = \frac{\langle u^2v\rangle^0 + 2\frac{\tau}{C_3}\frac{W}{r}\cdot\langle u^2w\rangle^0}{1 + 2\left[\frac{\tau}{C_3}\right]^2\frac{W}{r}\left(\frac{\partial W}{\partial r} + \frac{W}{r}\right)};$$

$$\langle v^2w\rangle = \frac{\langle v^2w\rangle^0 + 4\frac{\tau}{C_3}\frac{W}{r}\cdot\langle vw^2\rangle^0}{1 + 8\left[\frac{\tau}{C_3}\right]^2\frac{W}{r}\left(\frac{\partial W}{\partial r} + \frac{W}{r}\right)}; \quad \langle uv^2\rangle = \frac{\langle uv^2\rangle^0 + 4\frac{\tau}{C_3}\frac{W}{r}\cdot\langle uvw\rangle^0}{1 + 4\left[\frac{\tau}{C_3}\right]^2\frac{W}{r}\left(\frac{\partial W}{\partial r} + \frac{W}{r}\right)}; \quad \langle vw^2\rangle = \frac{\langle vw^2\rangle^0 + 2\frac{\tau}{C_3}\frac{W}{r}\cdot\langle w^3\rangle^0}{1 + 6\left[\frac{\tau}{C_3}\right]^2\frac{W}{r}\left(\frac{\partial W}{\partial r} + \frac{W}{r}\right)};$$

$$\langle uvw\rangle = \frac{\langle uvw\rangle^0 + 2\frac{\tau}{C_3}\frac{W}{r}\cdot\langle uw^2\rangle^0}{1 + 4\left[\frac{\tau}{C_3}\right]^2\frac{W}{r}\left(\frac{\partial W}{\partial r} + \frac{W}{r}\right)}; \quad \langle w^3\rangle = \langle w^3\rangle^0 - 3\frac{\tau}{C_3}\left(\frac{\partial W}{\partial r} + \frac{W}{r}\right)\cdot\langle vw^2\rangle^0;$$

$$\langle uw^2\rangle = \langle uw^2\rangle^0 - 2\frac{\tau}{C_3}\left(\frac{\partial W}{\partial r} + \frac{W}{r}\right)\cdot\langle uvw\rangle^0; \langle k'v\rangle = \frac{\langle k'v\rangle^0 + 2\frac{\tau}{C_3}\frac{W}{r}\cdot\langle k'w\rangle^0 - \frac{\tau}{C_3}\left(\frac{\partial W}{\partial r} - \frac{W}{r}\right)\cdot\langle v^2w\rangle^0}{1 + 2\left[\frac{\tau}{C_3}\right]^2\frac{W}{r}\left(\frac{\partial W}{\partial r} + \frac{W}{r}\right)}.$$

Верхний индекс “0” означает классические, стандартные аппроксимации;

$$-\langle u^2v\rangle = C_s\frac{e}{\varepsilon}\left[\langle v^2\rangle\frac{\partial\langle u^2\rangle}{\partial r}\right]; \quad -\langle vw^2\rangle_B = C_s\frac{e}{\varepsilon}\left[\langle vw\rangle\frac{\partial\langle vw\rangle}{\partial r} - \langle w^2\rangle\frac{\langle w^2\rangle - \langle v^2\rangle}{r}\right];$$

$$-\langle v^3\rangle = C_s\frac{e}{\varepsilon}\left[\langle v^2\rangle\frac{\partial\langle v^2\rangle}{\partial r} - 2\langle vw\rangle\frac{\langle vw\rangle}{r}\right]; \quad -\langle vw^2\rangle_A = C_s\frac{e}{\varepsilon}\left[\langle v^2\rangle\frac{\partial\langle w^2\rangle}{\partial r} + 2\langle vw\rangle\frac{\langle vw\rangle}{r}\right];$$

$$-\langle uv^2\rangle = C_s\frac{e}{\varepsilon}\left[\langle v^2\rangle\frac{\partial\langle uv\rangle}{\partial r} - \langle uw\rangle\frac{\langle vw\rangle}{r}\right]; \quad -\langle uw^2\rangle = C_s\frac{e}{\varepsilon}\left[\langle vw\rangle\frac{\partial\langle uw\rangle}{\partial r} + \langle w^2\rangle\frac{\langle uv\rangle}{r}\right];$$

$$-\langle uvw\rangle_A = C_s\frac{e}{\varepsilon}\left[\langle v^2\rangle\frac{\partial\langle uw\rangle}{\partial r} + \langle uv\rangle\frac{\langle vw\rangle}{r}\right]; \quad -\langle uvw\rangle = C_s\frac{e}{\varepsilon}\left[\langle vw\rangle\frac{\partial\langle uv\rangle}{\partial r} - \langle w^2\rangle\frac{\langle uw\rangle}{r}\right];$$

$$-\langle v^2w\rangle_A = C_s\frac{e}{\varepsilon}\left[\langle v^2\rangle\frac{\partial\langle vw\rangle}{\partial r} - \langle vw\rangle\frac{\langle w^2\rangle - \langle v^2\rangle}{r}\right]; \; -\langle v^2w\rangle_B = C_s\frac{e}{\varepsilon}\left[\langle vw\rangle\frac{\partial\langle v^2\rangle}{\partial r} - 2\langle w^2\rangle\frac{\langle vw\rangle}{r}\right];$$

$$-\langle w^3\rangle = C_s\frac{e}{\varepsilon}\left[\langle vw\rangle\frac{\partial\langle w^2\rangle}{\partial r} + 2\langle w^2\rangle\frac{\langle vw\rangle}{r}\right].$$

C_3 — эмпирическая постоянная (из условий согласования с экспериментальными данными $1/C_3 = 0.19$); $\tau = e/\varepsilon$ ($e = k$ — энергия турбулентности, ε — скорость диссипации).

Рассмотрено также модифицированное уравнение переноса скорости диссипации ε, в котором использовалась учитывающая закрутку потока аппроксимация диффузионного слагаемого:

$$\langle\tilde{\varepsilon}'v\rangle = \frac{\langle\tilde{\varepsilon}'v\rangle^0 + 2\frac{\tau}{C_3}\frac{W}{r}\cdot\langle\tilde{\varepsilon}'w\rangle^0}{1+2\left[\frac{\tau}{C_3}\right]^2\frac{W}{r}\left(\frac{\partial W}{\partial r}+\frac{W}{r}\right)} \cong \frac{\langle\tilde{\varepsilon}'v\rangle^0}{1+2\left[\frac{\tau}{C_3}\right]^2\frac{W}{r}\left(\frac{\partial W}{\partial r}+\frac{W}{r}\right)} = \frac{-C_\varepsilon\tau\left\langle v^2\right\rangle}{1+2\left[\frac{\tau}{C_3}\right]^2\frac{W}{r}\left(\frac{\partial W}{\partial r}+\frac{W}{r}\right)}\cdot\frac{\partial\tilde{\varepsilon}}{\partial r} \tag{18}$$

В настоящей работе рассмотрена модификация Модели 1 с упрощенным представлением диффузионных слагаемых (по аналогии с [14]). Ниже под расчетами по Модели 2 будут пониматься расчеты именно по этой модели. Переменная x в рассматриваемых математических моделях играет роль времени. Математические модели дополняются начальными условиями, согласованными с экспериментальными данными [5], [8]. В качестве граничных условий ставятся условия невозмущенного потока на большом удалении от оси следа; при $r = 0$ ставятся условия симметрии (антисимметрии). Подробное изложение постановки задачи в рамках Модели 1 можно найти в [6]. Следствием дифференциальных уравнений 1–3, начальных и граничных условий являются законы сохранения суммарного избыточного импульса и момента количества движения ($U_1 = U - U_0$):

$$J(x) = 2\pi\rho_0\int_0^\infty[UU_1 - \int_r^\infty\frac{W^2+\langle w^2\rangle-\langle v^2\rangle}{r'}dr' + \langle u^2\rangle - \langle v^2\rangle]rdr = J(x_0), \tag{19}$$

$$M(x) = 2\pi\rho_0\int_0^\infty(UW+\langle uw\rangle)r^2dr = M(x_0). \tag{20}$$

Конечно-разностный алгоритм решения задачи основан на применении подвижных сеток и аппроксимаций, консервативных по отношению к (19)–(20) [6], [10].

2 Результаты численных экспериментов

Первая серия численных экспериментов направлена на сопоставление с экспериментальными данными ИГиЛ СО РАН [5], [8] о вырождении закрученных турбулентных следов с варьируемыми суммарными избыточным импульсом и моментом количества движения. Представленные на Рис.1 результаты расчетов относятся к турбулентному следу за самодвижущимся телом [8] с нулевыми законами сохранения (19), (20). Начальные данные ставились при $x_0 = 10D$ согласованными с экспериментальными данными [8]. На Рис. 1 приведены измеренные и рассчитанные интенсивности турбулентных флуктуаций компонент скорости $\sigma_u = \sqrt{\langle u^2\rangle}, \sigma_v = \sqrt{\langle v^2\rangle}, \sigma_w = \sqrt{\langle w^2\rangle}$ для ряда расстояний от тела ($x = 20D, 30D, 46D$). Результаты расчетов по Модели 1 обозначены на Рис. 1 сплошной и пунктирными линиями, расчеты по Модели 2 представлены сплошными линиями 1–3. Можно видеть удовлетворительное согласие измеренных и рассчитанных величин. Аналогичные результаты получены и для других измеренных в экспериментах [8] величин, а также в вариантах 1, 3 измерений [5]. Результаты расчетов по Моделям 1, 2 близки, что, по-видимому, объясняется слабостью закрутки течения.

С применением Модели 1 выполнено численное моделирование автомодельного вырождения безымпульсного закрученного турбулентного следа с ненулевым моментом количества движения (вариант 3 работы [5]). На относительно небольших удалениях от тела (на которых выполнены уникальные экспериментальные исследования) результаты расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. На достаточно больших удалениях от тела ($x/D > 1000$) течение выходит на автомодельный режим, характеризующийся степенным убыванием (возрастанием) характерных масштабов $l \sim x^{0.245}$, $U_{1m} \sim x^{-2}$, $W_m \sim x^{-0.735}$, $\sqrt{e_0} \sim x^{-0.725}$. Здесь l — характерный масштаб ширины следа: $e(l,x) = 0.5e(0,x) = 0.5e_0(x)$, $U_{1m} = U_1(0,x)$; $|W_m|$ — максимальное значение абсолютной величины трансверсальной компоненты скорости. По аналогии с [11] на основе анализа результатов расчетов получена упрощенная математическая модель дальнего закрученного безымпульсного турбулентного следа с ненулевым суммарным моментом количества движения:

$$U_0\frac{\partial U_1}{\partial x} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}rK_u\frac{\partial U_1}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x}\int_r^\infty\frac{W^2}{r'}dr';\quad U_0\frac{\partial W}{\partial x} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}[r^3K_w\frac{\partial}{\partial r}(W/r)];$$

$$U_0\frac{\partial e}{\partial x} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}rK_e\frac{\partial e}{\partial r} + P_w - \varepsilon;\quad U_0\frac{\partial\varepsilon}{\partial x} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}rK_\varepsilon\frac{\partial\varepsilon}{\partial r} + C_{\varepsilon1}\frac{\varepsilon P_w}{e} - C_{\varepsilon2}\frac{\varepsilon^2}{e};$$

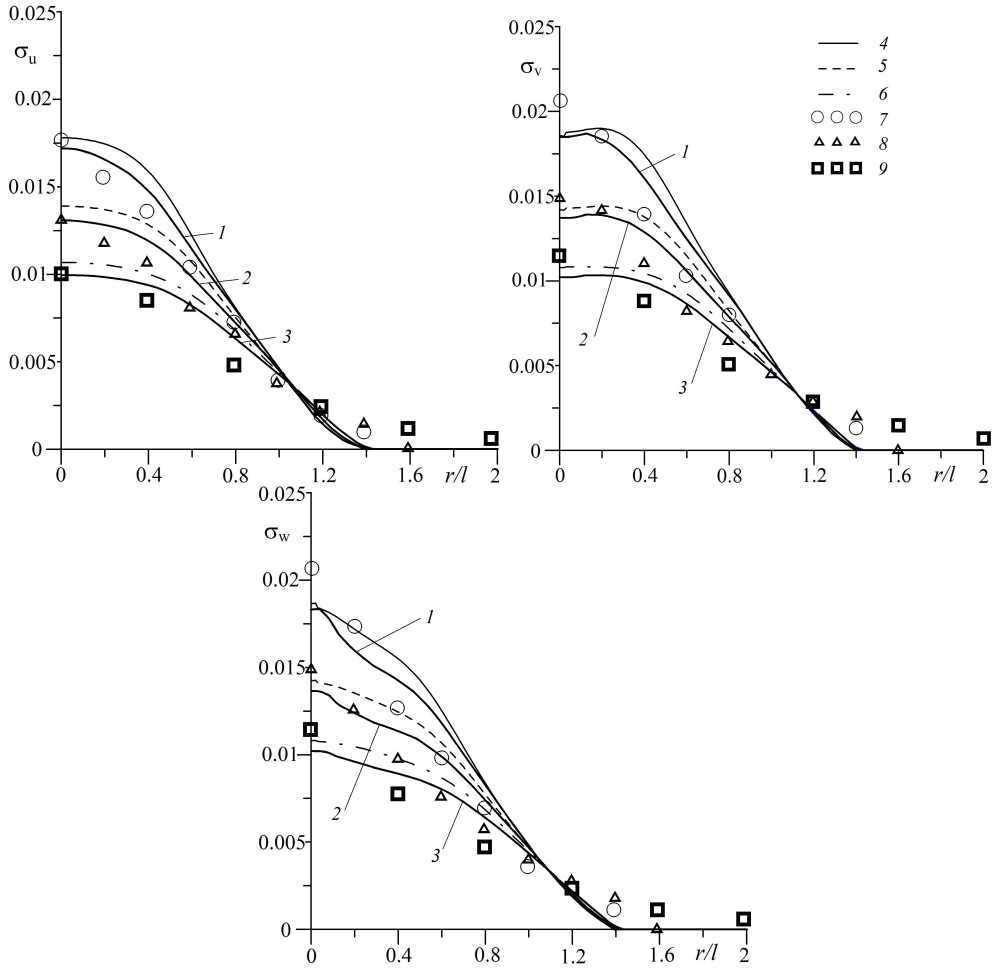


Рис. 1: Измеренные и рассчитанные интенсивности турбулентных флуктуаций компонент скорости. Кривые 1, 2, 3 — результаты расчетов по Модели 2; кривые 4 ,5, 6 — результаты расчетов по Модели 1; знаки 7, 8, 9 — экспериментальные данные [8].

$$K_u = K_w = \frac{2}{3}\frac{1-C_2}{C_1+\frac{P_w}{\varepsilon}-1}\frac{e^2}{\varepsilon};\quad K_e = 0.147\frac{e^2}{\varepsilon};\quad K_\varepsilon = 0.113\frac{e^2}{\varepsilon};\quad P_w = K_u r^2\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{W}{r}\right)\right]^2.$$

Модель представляет собой приближение дальнего следа и учитывает безымпульсность течения.

Заключение

Основные результаты работы сводятся к следующему. Построена усовершенствованная численная модель закрученных турбулентных следов за телами вращения с варьируемыми значениями суммарного избыточного импульса и момента количества движения. Получено удовлетворительное согласие с экспериментальными данными. Исследовано автомодельное вырождение безымпульсного турбулентного следа с ненулевым моментом количества движения. Построены упрощенные модели течения в дальнем следе. Дальнейшее уточнение математических моделей закрученных турбулентных струйных течений представляет задачу ближайших исследований.

Список литературы

[1] Лаундер Б.Е., Морс А. Численный расчет осесимметричных сдвиговых течений с использованием замыканий для напряжений// В кн. "Турбулентные сдвиговые течения I". Пер. с англ./Под ред.

А.С.Гиневского.- М.:Машиностроение, 1982. — С.291–310.

[2] Шетц Дж. Турбулентные течения. Процессы вдува и перемешивания.- М.: Мир, 1984. — 247 с.

[3] Абрамович Г.Н., Гиршович Т.А., Крашенинников С.Ю., Секундов А.Н., Смирнова И.П. Теория турбулентных струй. Изд. 2-е, перераб. и доп. /Под ред. Г.Н. Абрамовича. — М.: Наука, 1984. — 716 с.

[4] Гумилевский А.Г. Нарушение автомодельности в турбулентных осесимметричных следах с закруткой // Известия РАН. Сер. МЖГ. — 1993. — № 1. — С. 41–47.

[5] Костомаха В.А., Леснова Н.В. Турбулентный закрученный след за сферой с полной или частичной компенсацией силы сопротивления// Журнал ПМТФ. — 1995. — Т.36. — № 2. — С. 88–98.

[6] Chernykh G.G., Demenkov A.G., Kostomakha V.A. Numerical model of a swirling momentumless turbulent wake // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1998, Vol. 13, No 4, P. 279–288.

[7] Piquet J. Turbulent flows: Models and Physics. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1999. 761 p.

[8] Гаврилов Н.В., Деменков А.Г., Костомаха В.А., Черных Г.Г. Экспериментальное и численное моделирование турбулентного следа за самодвижущимся телом // Прикладная механика и техническая физика—2000. —Т .41. — № 4. — С. 49–58.

[9] Васильев О.Ф., Деменков А.Г., Костомаха В.А., Черных Г.Г. Численное моделирование закрученного турбулентного следа за самодвижущимся телом // Доклады Академии наук. 2001. Т. 376. № 2. С. 195–199.

[10] Chernykh G.G., Demenkov A.G., Kostomakha V.A. Swirling turbulent wake behind a self-propelled body // International Journal of Computational Fluid Dynamics, 2005, Vol. 19, No 5. P. 399–408.

[11] Деменков А.Г., Черных Г.Г. Численное моделирование вырождения закрученного турбулентного следа за самодвижущимся телом // Теплофизика и аэромеханика, 2016, Т.23, № 5, С. 693–702.

[12] Ilyushin B.B.Higher moment diffusion in stably stratified and swirled flows. In.: Closure Strategies for Turbulent and Transition Flows. Cambridge; Eds. Launder B.E., Sandham N.D.; Cambridge Univ. Press, 2001, P. 424–448.

[13] Ilyushin B.B., Yakovenko S.N. Testing of models for fourth-order cumulant, third- and second-moment models in stationary and rotating pipe flows // Russian Journal of Engineering Thermophysics, 2002, Vol. 11, No 1. P. 45–71.

[14] Воропаева О.Ф., Илюшин Б.Б., Черных Г.Г. Численное моделирование дальнего безымпульсного турбулентного следа в линейно стратифицированной среде с применением модифицированного уравнения переноса скорости диссипации // Теплофизика и аэромеханика, 2003, Т.10, № 3, С. 389–400.

Андрей Геннадьевич Деменков — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН; Новосибирский государственный технический университет
e-mail: demenkov@itp.nsc.ru;
Геннадий Георгиевич Черных — д.ф.-м.н., гл. науч.сотр. Института вычислительных технологий СО РАН
e-mail: chernykh@ict.nsc.ru;
Сергей Николаевич Яковенко — д.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН
e-mail: yakovenko1965@mail.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННЫЕ ОПЕРАЦИИ НАД ЯДЕРНЫМИ ОЦЕНКАМИ В ЗАДАЧЕ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ФУНКЦИИ ПЛОТНОСТИ ВЕРОЯТНОСТИ

Б. С. Добронец, О. А. Попова

Сибирский федеральный университет, Институт космических и информационных технологий, 660074, Красноярск

УДК 519.24

В статье рассматриваются новые подходы к повышению точности ядерных оценок и численные операции над плотностями вероятности. Для повышения точности оценок функции плотности вероятности применяется экстраполяция Ричардсона. Используя правило Рунге, рассмотрен алгоритм оценок вторых производных функции плотности вероятности. Показано, что использование экстраполяции Ричардсона, позволяет построить сплайны, аппроксимирующие функции плотности вероятности. Рассмотрена численная реализация арифметических операций над функциями плотности вероятности.

Ключевые слова: Численный вероятностный анализ, повышение точности, ядерные оценки, сплайны, арифметические операции, сглаживание.

Введение

Задача восстановления неизвестной функции плотности вероятности и оценка ее производных по эмпирическим данным с использованием численных методов является одним из наиболее важных вопросов в области прикладных исследований [2, 3, 9]. Важно знать оценку для математического ожидания нормы погрешности построенной эмпирической функции плотности вероятности [10].

Оценка производных функция плотности вероятности имеет важное значение для приложений. Подробный обзор существующих методов оценки производных и библиография представлены в [7]. Использование оценок вторых производных дает возможность получить реалистичные оценки математических ожиданий оценки погрешности восстановления функция плотности вероятности в норме l_2. Знание этих оценок позволяет рассчитать оптимальный параметр сглаживания h [7].

Одно из первых правил для практической оценки погрешности было предложено К. Рунге в начале XX века. Это правило широко использовалось сначала в области квадратурных вычислений, затем в разностных методах и методе конечных элементов. Это правило основано на декомпозиции приближенного решения u^h как суммы [1]

$$u^h = u + h^k v + O(h^{k+m}), \tag{1}$$

где u есть искомое точное решение, v — неизвестная функция и h — малый параметр дискретизации, который чаще всего рассматривается, как шаг разностной сетки. Целое значение k характеризует порядок точности приближенного решения, и $m > 0$ характеризует порядок точности приближенного решения членом погрешности $h^k v$. Поскольку u и v не зависят от h, для параметра $h/2$ справедливо разложение:

$$u^{h/2} = u + \left(\frac{h}{2}\right)^k v + O(h^{k+m}). \tag{2}$$

Вычтем его из (1) избавляясь от u:

$$u^h - u^{h/2} = v\left(\frac{h}{2}\right)^k (2^k - 1) + O(h^{k+m}).$$

Отсюда можно определить главный член погрешности:

$$u^{h/2} - u \approx \frac{u^h - u^{h/2}}{2^k - 1}. \tag{3}$$

Поскольку в формуле (3) отброшен остаточный член порядка $O(h^{k+m})$, то полученное выражение не приводит к гарантированной оценке, но при достаточно малых h дает представление о величине погрешности численного решения.

Экстраполяция Ричардсона является общим методом для получения результатов высокой точности по формулам низкого порядка [1].

Объединим две аппроксимации таким способом, чтобы исключить ошибку порядка h^k. Умножая (2) на 2^k и вычитая из (1), получаем

$$u = \frac{2^k}{2^k - 1} u^{h/2} - \frac{1}{2^k - 1} u^h + O(h^{k+m}).$$

В статье рассматривается подход к повышению точности восстановления функции плотности вероятности на основе эмпирических данных. Подход основан на использовании экстраполяции Ричардсона, для этого используются линейные комбинации ядерных оценок с разными параметрами сглаживания h. Применение правила Рунге позволяет строить оценки второй производной от функции плотности вероятности. В отличие от известных методов, этот подход не требует дифференцирования ядерных оценок или вычисления конечных разностей от эмпирической функции плотности вероятности.

Числовой пример подтвердил теоретические обоснования и показал хорошее качество представленного подхода.

1 Ядерные оценки функции плотности вероятности

Для оценки функция плотности вероятности часто используются непараметрические методы. Отметим, что вплоть до середины 50-х годов в качестве единственного подхода для построения непараметрической оценки функция плотности вероятности использовалась гистограмма. Первые важные результаты в области применения ядерных оценок для функция плотности вероятности были получены в работах М. Розенблатта, Э. Парзена и Н. Ченцова.

В общем виде ядерная оценка может быть записана в виде

$$\hat{f}^h(x) = \frac{1}{Nh} \sum_{i=1}^{N} K(\frac{x - \xi_i}{h}) = \frac{1}{Nh} \sum_{i=1}^{N} K_h(x - \xi_i),$$

где $K_h(t) = K(t/h)/h$.

Обозначим

$$K_h(x, \xi_i) = K\left(\frac{x - \xi_i}{h}\right).$$

где ξ случайная величина с функцией плотности вероятности $f(x)$.

Тогда математическое ожидание

$$\mathsf{M}[\hat{f}^h(x)] = \mathsf{M}[K_h(x, \xi)]$$

и

$$\sigma_N = \mathsf{D}[\hat{f}^h(x)] = \frac{1}{N} \mathsf{D}[K_h(x, \xi)].$$

Значение математического ожидания можно записать, как

$$\mathsf{M}[K_h(x, \xi)] = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} K\left(\frac{x - t}{h}\right) f(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} K(\eta) f(x - h\eta) d\eta.$$

Заметим, что

$$f(x - h\eta) = f(x) - hf'(x)\eta + \frac{h^2}{2} f''(x)\eta^2 + \frac{h^3}{6} f^{(3)}(x)\eta^3 + O(h^4).$$

$$\mathsf{M}[K_h(x,\xi)] = f(x)\int\limits_{-\infty}^{\infty} K(\eta)d\eta - hf'(x)\int\limits_{-\infty}^{\infty}\eta K(\eta)d\eta + \frac{h^2}{2}f''(x)\int\limits_{-\infty}^{\infty}K(\eta)\eta^2 d\eta + \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x)\int\limits_{-\infty}^{\infty}K(\eta)\eta^3 d\eta + O(h^4).$$

Пусть ядро K удовлетворяет требованиям

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}K(\eta)d\eta = 1, \quad \int\limits_{-\infty}^{\infty}\eta K(\eta)d\eta = 0 \quad \text{и} \quad \int\limits_{-\infty}^{\infty}\eta^3 K(\eta)d\eta = 0.$$

Обозначим

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\eta^2 K(\eta)d\eta = \sigma_K^2.$$

Тогда

$$\mathsf{M}[\hat{f}^h(x)] = \mathsf{M}[K_h(x,\xi)] = f(x) + \sigma^2 h^2 f''(x)/2 + O(h^4)$$

и

$$\mathsf{M}[\hat{f}^h(x) - f(x)] = \sigma^2 h^2 f''(x)/2 + O(h^4).$$

Определим $f^h(x)$

$$f^h(x) = \mathsf{M}[\hat{f}^h(x)] = f(x) + \sigma^2 h^2 f''(x)/2 + O(h^4). \tag{4}$$

и $f^{2h}(x)$

$$f^{2h}(x) = \mathsf{M}[\hat{f}^{2h}(x)] = f(x) + 4\sigma^2 h^2 f''(x)/2 + O(h^4). \tag{5}$$

Далее оценим

$$\mathsf{D}[K_h(x,\xi)] = \mathsf{M}[(\frac{1}{h}K(\frac{x-\xi}{h}))^2] - (\mathsf{M}[\frac{1}{h}K(\frac{x-\xi}{h})])^2.$$

$$\mathsf{M}[(\frac{1}{h}K(\frac{x-\xi}{h}))^2] = \frac{1}{h}\int\limits_{-\infty}^{\infty}K^2(\eta)f(x-h\eta)d\eta = \frac{f(x)}{h}\int\limits_{-\infty}^{\infty}K^2(\eta)d\eta + \frac{h^2}{2}f''(x)\int\limits_{-\infty}^{\infty}K^2(\eta)\eta^2 d\eta + O(h^4).$$

В итоге получим

$$\sigma^2(x) = \mathsf{D}[\hat{f}(x)] = \frac{f(x)}{Nh}||K||_2^2 + \frac{f(x)^2}{N} + O(h/N).$$

Без ограничения общности, можно записать, что [7]

$$\mathsf{M}[(\hat{f}^h(x) - f(x))^2] = \sigma^2(x) + f''(x)^2 h^4/4 + O(h^6)$$

и

$$\sigma_I^2 = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\sigma^2(x)dx = \frac{||K||_2^2}{Nh} - \frac{||f||_2^2}{N} + O(h/N).$$

$$\mathsf{M}||\hat{f}^h - f||_2^2 = \sigma_I^2 + \frac{||f''||^2 h^4}{4} + O(h^6) \tag{6}$$

2 Экстраполяция Ричардсона

Применим экстраполяцию Ричардсона к $f^h(x)$ и $f^{2h}(x)$. Далее умножим (4) на $1/4$ и вычтем результат из (5) Исключая $\sigma^2 h^2 f''(x)/2$ из (4) и (5), мы получим

$$f(x) = \frac{4}{3}f^h(x) - \frac{1}{3}f^{2h}(x) + O(h^4).$$

Заметим, что мы построили приближение к функции $f(x)$

$$f^h_{cor}(x) = \frac{4}{3}\hat{f}^h(x) - \frac{1}{3}\hat{f}^{2h}(x). \tag{7}$$

с точностью $O(h^4)$.

С другой стороны, применяя правило Рунге, мы можем получить оценку

$$f''(x) = 2(f^h(x) - f^{2h}(x))/(3\sigma h^2) + O(h^2)$$

или

$$||\hat{f}''|| = \frac{2}{3\sigma h^2}||\hat{f}^h - \hat{f}^{2h}|| \tag{8}$$

3 Аппроксимация сплайнами

Как вытекает из (7), точность построенных оценок определяется из соотношения

$$\mathsf{M}[f(x) - \hat{f}_{cor}(x)] = O(h^4),$$

что значительно точнее стандартных ядерных оценок. Важно отметить, что прямые вычисления $\hat{f}_{cor}(x)$ в произвольной точке x требуют значительных вычислительных затрат.

Рассмотрим вопрос построения сплайна s, аппроксимирующего $\hat{f}_{cor}(x)$, так чтобы выполнялась оценка

$$||f - s|| \le Ch^4.$$

Для этих целей построим в области $[a, b]$ носителя функции плотности вероятности $f(x)$ сетки $\omega_z = \{z_i = a + ih_z, i = 0, \ldots, N_z\}$, $\omega_x = \{x_i = a + ih_x, i = 0, \ldots, N_x\}$.

На сетке ω_z вычислим значения $f_i = \hat{f}_{cor}(z_i)$. Сплайн s будем строить на сетке ω_x. Краевые условия выберем следующим образом $s(a) = 0, s'(a) = 0$ $s(b) = 0, s'(b) = 0$

$$\sum_{i=1}^{N_z}(s(z_i) - f_i)^2 \to \min. \tag{9}$$

В случае кубических сплайнов, как классических так, и эрмитовых, задача (9) сводится к решению пятидиагональной системы линейных алгебраических уравнений.

Для кубических сплайнов справедлива следующая оценка

$$||f^\nu - s^\nu|| \le Kh_x^{4-\nu}||f^{(4)}||, \tag{10}$$

где K — константа, не зависящая от h_x.

Задачу можно упростить, если вычислить в узлах сетки ω_x значения $\hat{f}_i$. Для этих целей будем использовать значения $\hat{f}_{cor}(z_i)$ и процедуры сглаживания. Например, для классических кубических сплайнов можно использовать метод скользящего среднего, метод взвешенной локальной регрессии, фильтр Савицкого–Голея. Следует стремиться, чтобы выполнялись оценки

$$|\hat{f}_i - f(x_i)| = O(h_x^4).$$

В этом случае построение сплайна сводится к решению трех диагональной системы линейных алгебраических уравнений и будет выполнена оценка (10).

В итоге кубический сплайн на отрезках $[x_{j-1}, x_j]$, $j = 1, \ldots, N$ имеет два представления [8]:

$$s(x) = M_{j-1}(x_j - x)^3/(6h_j) + M_j(x - x_{j-1})^3/(6h_j) +$$
$$+(f_{j-1} - M_{j-1}h_j^2/6)(x_j - x)/h_j + (f_j - M_jh_j^2/6)(x - x_{j-1})/h_j, \tag{11}$$

или

$$s(x) = m_{j-1}(x_j - x)^2(x - x_{j-1})/h_j^2 - m_j(x - x_{j-1})^2(x_j - x)/h_j^2 +$$
$$+f_{j-1}(x_j - x)^2(2(x - x_{j-1}) + h_j)/h_j^3 + f_j(x - x_{j-1})^2(2(x_j - x) + h_j)/h_j^3, \tag{12}$$

где $M_j = s''(x_j)$, $m_j = s'(x_j)$, $f_j = f(x_j)$.

Для эрмитовых кубических сплайнов в узлах сетки ω_x необходимо вычислить $\hat{f}_i$ и значения производных $\hat{f}'_i$. Будем использовать фильтр Савицкого–Голея с кубическими полиномами [6]. В этом случае для построение эрмитовых кубических сплайнов достаточно локальных вычислений. На каждом интервале $[x_{j-1}, x_j]$, $j = 1, \ldots, n$ эти сплайны представимы в виде

$$s(x) = f_{j-1}v((x - x_{j-1})/h_j) + f'_{j-1}w((x - x_{j-1})/h_j) + f_jv((x - x_j)/h_j) + f'_jw((x - x_j)/h_j),$$

где $v(x) = (|x| - 1)^2(2|x| + 1); w(x) = x(|x| - 1)^2$.

4 Арифметические операции над плотностями вероятности

Реализация арифметических операций над двумя случайными величинами $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ основана на работе с их совместной функцией плотности вероятности $p(x,y)$.

Известны аналитические формулы для определения функции плотности вероятности результатов арифметических действий над случайными величинами. Например, для нахождения плотности вероятности $p_{x_1+x_2}$ суммы двух случайных величин $\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{x}_2$ используется соотношение [11]

$$p_{x_1+x_2}(x)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}p(x-v,v)dv=\int\limits_{-\infty}^{\infty}p(v,x-v)dv. \tag{13}$$

Плотность вероятности p_{x_1/x_2} частного двух случайных величин $\boldsymbol{x}_1/\boldsymbol{x}_2$ определяется выражением

$$p_{x_1/x_2}(x)=\int\limits_{0}^{\infty}vp(xv,v)dv-\int\limits_{-\infty}^{0}vp(v,xv)dv. \tag{14}$$

Плотность вероятности $p_{x_1x_2}$ произведения двух случайных величин $\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{x}_2$ представляется соотношением

$$p_{x_1x_2}(x)=\int\limits_{0}^{\infty}(1/v)p(x/v,v)dv-\int\limits_{-\infty}^{0}(1/v)p(v,x/v)dv. \tag{15}$$

В случае, когда случайные величины $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ являются независимыми и имеют плотности вероятности вероятности, представленные кубическими сплайнами, s_x s_y. Совместную плотность вероятности можно представить в виде произведения $p(x,y)=s_xs_y$. Поскольку кубический сплайн на каждом отрезке сетки представляет кубический полином, то $p(x,y)$ в случае вычисления интегралов (13)–(15) будет кусочно полиномиальной функцией шестой степени. Наиболее удобными в этом случае будут квадратуры Гаусса с четырьмя внутренними узлами, которые точны на полиномах седьмой степени.

В качестве примера, рассмотрим построение сплайна, аппроксимирующего $p_{x_1+x_2}$. Для этих целей в области носителя $p_{x_1+x_2}$ построим сетку $\omega=\{x_0,x_1,...,x_n\}$ и вычислим значения $f_i=p_{x_1+x_2}(x_i)$. Используя значения f_i и краевые условия $s'(x_0)=0$, $s'(x_n)=0$ на сетке ω построим кубический сплайн s. В этом случае справедлива оценка

$$||p^{(\nu)}_{x_1+x_2}-s^{(\nu)}||\le Kh^{4-\nu}||p^{(4)}_{x_1+x_2}||,\ \nu=1,2,3.$$

Далее вычислим

$$\mathrm{norm}=\int s(x)dx,$$

если norm$\neq 1$, то $s(x):=s(x)/\mathrm{norm}$.

В случае, когда случайные величины $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ являются зависимыми, совместную функцию плотности вероятности необходимо вычислять отдельной процедурой.

5 Численные примеры

В качестве примера, мы рассмотрим задачу восстановления функции плотности вероятности случайной величины ξ суммы четырех равномерно распределенных на $[0,1]$ случайных величин с использованием метода ядерных оценок.

Заметим, что функция плотности вероятности суммы n равномерно распределенных случайных величин может быть записана в виде

$$p_n(x)=\frac{1}{(n-1)!}(x^{n-1}-C_n^1(x-1)^{n-1}+C_n^2(x-2)^{n-1}-\dots) \tag{16}$$

где C_n^k коэффициенты биномиального разложения. При каждом фиксированном значении аргумента x суммы в скобках приведены только для тех членов, для которых величина $(x-k)$, $k=1,2,\dots$ неотрицательна.

Так, для $n = 4$ имеем:

$$p(x) = \begin{cases} \frac{1}{6}x^3, & \text{if } 0 \le x \le 1; \\ -\frac{1}{2}x^3 + 2x^2 - 2x + \frac{2}{3}, & \text{if } 1 \le x \le 2; \\ \frac{1}{2}x^3 - 4x^2 + 10x - \frac{22}{3}, & \text{if } 2 \le x \le 3; \\ -\frac{1}{6}x^3 + 2x^2 - 8x + \frac{32}{3}, & \text{if } 3 \le x \le 4. \end{cases}$$

На рис. 1 представлен численный пример оценки функции плотности вероятности случайной величины ξ, размерность выборки $N = 10^4$. Сплошная линия представляет точную функцию плотности вероятности $p(x)$, часть (a): "$\circ$" соответствует эмпирической функции плотности вероятности $\hat{f}^h$, $h = 0.1$, часть (b): "$\circ$"представляет f^h_{cor} восстановленную эмпирическую функцию плотности вероятности с использованием экстраполяции Ричардсона, часть (c): "$\circ$" — результат сглаживания f^h_{cor}.

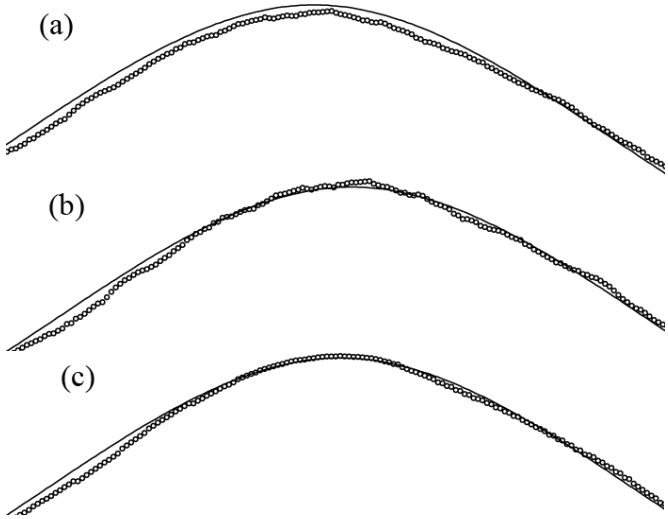


Рис. 1: (a): $\circ$ — $\hat{f}^h$, (b): $\circ$ — f^h_{cor}, (c): $\circ$ — сглаживание f^h_{cor}

Таблица 1: Аппроксимация $||f''||$

$N = 10^6$		$N = 10^4$	
h	$\|\|\hat{f}''\|\|$	h	$\|\|\hat{f}''\|\|$
0.05	1.6432	0.2	1.625162
0.1	1.6368	0.3	1.429925
0.2	1.52975	0.4	1.284578

Таблица 1 представляет оценку $||f''||$ через (8), точное значение $||f''|| = 1.6431$.

Таблица 2: Уточнение $\hat{f}$ по формуле (7), $N = 10^6$

h	$\|\|\hat{f}^h - f\|\|$	$\|\|f^h_{cor} - f\|\|$
0.3	0.01039296	0.00198244
0.35	0.01302775	0.00172713
0.4	0.01654605	0.00215959

Таблица 2 показывает сравнение математического ожидания ошибки до и после уточнения.

Заключение

Рассмотрены подходы повышения точности аппроксимации функции плотности вероятности по эмпирическим данным. Эти подходы основаны на правиле Рунге и экстраполяции Ричардсона. Используя правиле Рунге построены оценки вторых производных функции плотности вероятности. Это позволяет повысить точность оценок функции плотности вероятности на два порядка h. Знание оценок вторых производных позволяет выбрать оптимальные параметры h для построения ядерных оценок. Для оценки достоверности построенной эмпирической функции плотности вероятности предложена процедура построения апостериорных оценок.

Заметим, что использование ядерных оценок для восстановления функции плотности вероятности в некоторой точке x, требует вычисления значительного числа (сравнимого с размерностью выборки) функций ядер. В тех случаях, когда когда необходимо частое использование эмпирической функции плотности вероятности, предложен подход основанный на сплайн аппроксимации. В случае использования полиномиальных сплайнов вычисления эмпирической функции плотности вероятности сводятся лишь к вычислению соответствующего полинома.

Дальнейшее развитие данного подхода, предполагается в направлении построения эффективных процедур сглаживания и использования бутстреп технологии.

Список литературы

[1] Марчук Г.И., Шайдуров В.В. Повышение точности решений разностных схем. М.: Наука, 1979 г. 319 с.

[2] Dobronets B.S., Popova O.A. Numerical probabilistic analysis under aleatory and epistemic uncertainty // Reliable Computing. 2014. V. 19, P. 274–289.

[3] Dobronets B., Popova O.: Numerical Probabilistic Approach for Optimization Problems. Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Validated Numerics. Lecture Notes in Computer Science 9553. Springer International Publishing, 2016, 43–53.

[4] Dobronets B.S., Popova O.A. Improving the accuracy of the probability density function estimation // Journal of Siberian Federal University — Mathematics and Physics, V. 10 (1), (2017), 16–21.

[5] Dobronets B.S., Popova O.A. The numerical probabilistic approach to the processing and presentation of remote monitoring data// Journal of Siberian Federal University — Engineering and Technologies. 2016. V. 9(7), P. 960–971.

[6] Savitzky A., Golay M. J. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures // Anal. Chem. 1964. Vol. 36. P. 1627–1639

[7] Scott R.W.: Multivariate density estimation: theory, practice, and visualization. John Wiley & Sons, New York (2015)

[8] Альберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и ее приложения. М.: Мир, 1972. 318 с.

[9] Добронец Б.С., Попова О.А. Численный вероятностный анализ неопределенных данных. Красноярск: Сибирский федеральный университ, Институт космический и информационных технологий. 2014.

[10] Попова О.А. Информационный подход к апостериорным оценкам погрешности численного моделирования // Информатизация и связь. 2016. № 2. С. 40–43.

[11] Гнеденко Б. В. Курс теории вероятностей. М.: Наука, 1988. 448 с.

Борис Станиславович Добронец — д.ф.-м.н., профессор, институт космических и информационных технологий, Сибирский федеральный университет;
e-mail: BDobronets@yandex.ru;
Ольга Аркадьевна Попова — к.т.н., доцент, институт космических и информационных технологий, Сибирский федеральный университет;
e-mail: OlgaArc@yandex.ru.
Дата поступления — 29 мая 2017 г.

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ, ПОЛУЧАЕМЫХ В РЕЗУЛЬТАТЕ КОНЕЧНОЭЛЕМЕНТНОЙ АППРОКСИМАЦИИ ТРЕХМЕРНЫХ ЗАДАЧ МАГНИТОТЕЛЛУРИЧЕСКОГО ЗОНДИРОВАНИЯ

П. А. Домников

Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск

УДК 519.63

Рассматриваются подходы к моделированию магнитотеллурических полей в трехмерных средах с использованием скалярного и узлового метода конечных элементов и методы решения конечноэлементных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), возникающих при использовании данных подходов. Проводится сравнение прямых и итерационных методов решения СЛАУ с комплексно-симметричными и несимметричными матрицами. Предлагаются подходы к симметризации конечноэлементных матриц. Исследуется применение различных предобусловливателей.

Ключевые слова: итерационные методы, магнитотеллурическое зондирование, метод конечных элементов.

Введение

Технология магнитотеллурических зондирований (МТЗ) является лидирующей в области региональных электроразведочных исследований. Важные области ее применения — изучение перспектив нефтегазоносности осадочных бассейнов и оценка сейсмической опасности регионов [1]. Необходимость развития математического аппарата, позволяющего рассчитывать поля МТЗ в реальных (сложных) средах, постоянно растет [4]. При этом вычислительная эффективность методов расчета магнитотеллурических полей играет определяющую роль для их использования при выполнении практических исследований: проектировании электроразведочных работ и интерпретации данных. В данной работе трехмерные магнитотеллурические поля моделируются с использованием метода конечных элементов (МКЭ) со скалярными базисными функциями в вариационной постановке для двух потенциалов. Применяются различные подходы для сокращения времени решения конечноэлементных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ).

1 Математические модели

В случае применения узлового МКЭ система дифференциальных уравнений для вычисления трех-мерного поля (влияния 3D-неоднородностей) будет иметь вид

$$\begin{cases} -\dfrac{1}{\mu_0}\Delta\vec{A}^a + i\omega\sigma\vec{A}^a + \sigma\,\nabla V^a = (\sigma-\sigma^n)\vec{E}^n, \\ -\nabla\cdot(\sigma\,\nabla V^a) - i\omega\,\nabla\cdot\left(\sigma\vec{A}^a\right) = -\nabla\cdot\left((\sigma-\sigma^n)\vec{E}^n\right), \end{cases} \tag{1}$$

где μ_0 — магнитная проницаемость вакуума, $\sigma^n = \sigma^n(z)$ — удельная электрическая проводимость горизонтально-слоистой среды, $\omega = 2\pi\nu$ — круговая частота, ν — частота поля, i — мнимая единица. В данном случае $\vec{B}^a = \nabla\times\vec{A}^a$, $\vec{E}^a = -i\omega\vec{A}^a - gradV^a$. При этом потенциалы $\vec{A}^a$ и V^a аппроксимируются узловыми

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых-кандидатов наук (номер гранта МК-4858.2016.5).

базисными функциями (для вектор-потенциала $\vec{A}^a$ имеются ввиду три его компоненты). Запишем эквивалентную вариационную формулировку в форме Галеркина для системы уравнений (1). При этом учтем, что первое уравнение в системе (1) фактически является системой из трех скалярных уравнений. Скалярно умножим каждое уравнение на пробную функцию ϕ и проинтегрируем по расчетной области и применим теорему Грина (интегрирования по частям) и учтем, что ϕ равна нулю на границе расчетной области. Таким образом, вариационная постановка для системы уравнений (1) будет иметь следующий вид:

$$\frac{1}{\mu_0}\int\limits_\Omega \nabla A_x^a \cdot \nabla\phi \ \mathrm{d}\,\Omega + i\omega\int\limits_\Omega \sigma A_x^a\phi \ \mathrm{d}\,\Omega + \int\limits_\Omega \sigma\frac{\partial V^a}{\partial x}\phi \ \mathrm{d}\,\Omega = \int\limits_\Omega (\sigma-\sigma^n)E_x^n\phi \ \mathrm{d}\,\Omega, \tag{2}$$

$$\frac{1}{\mu_0}\int\limits_\Omega \nabla A_y^a \cdot \nabla\phi \ \mathrm{d}\,\Omega + i\omega\int\limits_\Omega \sigma A_y^a\phi \ \mathrm{d}\,\Omega + \int\limits_\Omega \sigma\frac{\partial V^a}{\partial y}\phi \ \mathrm{d}\,\Omega = \int\limits_\Omega (\sigma-\sigma^n)E_y^n\phi \ \mathrm{d}\,\Omega, \tag{3}$$

$$\frac{1}{\mu_0}\int\limits_\Omega \nabla A_z^a \cdot \nabla\phi \ \mathrm{d}\,\Omega + i\omega\int\limits_\Omega \sigma A_z^a\phi \ \mathrm{d}\,\Omega + \int\limits_\Omega \sigma\frac{\partial V^a}{\partial z}\phi \ \mathrm{d}\,\Omega = \int\limits_\Omega (\sigma-\sigma^n)E_z^n\phi \ \mathrm{d}\,\Omega, \tag{4}$$

$$\int\limits_\Omega \frac{\sigma}{\mu_0\omega}\nabla V^a \cdot \nabla\phi \ \mathrm{d}\,\Omega + i\int\limits_\Omega \sigma(A_x^a, A_y^a, A_z^a)\cdot\nabla\phi \,\mathrm{d}\,\Omega = \int\limits_\Omega \frac{(\sigma-\sigma^n)}{\omega}\vec{E}^n\cdot\nabla\phi \ \mathrm{d}\,\Omega. \tag{5}$$

2 Структура конечноэлементных СЛАУ

Конечноэлементная аппроксимация системы вариационных уравнений (2–5) на конечномерном функциональном пространстве финитных функций $\{\varphi_i\}_{i=1}^n \in H_h^1(\Omega)$, где n — число узлов в конечноэлементной сетке, приводит к разреженной конечноэлементной СЛАУ

$$Aq = f, \tag{6}$$

где A — несимметричная вещественная матрица размера $8n \times 8n$, f — вектор правой части, q — вектор неизвестных, состоящий из весов базисных функций φ_i в представлении искомых функций $\vec{A}^a = (A_x^a, A_y^a, A_z^a)$ и V^a в виде разложения по базисным функциям φ_i:

$$\mathrm{Re}\,\vec{A}^a = \left(\mathrm{Re}\,A_x^a, \mathrm{Re}\,A_y^a, \mathrm{Re}\,A_z^a\right) = \left(\sum_{i=1}^n q_i^{\mathrm{Re}\,A_x}\varphi_i, \sum_{i=1}^n q_i^{\mathrm{Re}\,A_y}\varphi_i, \sum_{i=1}^n q_i^{\mathrm{Re}\,A_z}\varphi_i\right), \tag{7}$$

$$\mathrm{Im}\,\vec{A}^a = \left(\mathrm{Im}\,A_x^a, \mathrm{Im}\,A_y^a, \mathrm{Im}\,A_z^a\right) = \left(\sum_{i=1}^n q_i^{\mathrm{Im}\,A_x}\varphi_i, \sum_{i=1}^n q_i^{\mathrm{Im}\,A_y}\varphi_i, \sum_{i=1}^n q_i^{\mathrm{Im}\,A_z}\varphi_i\right), \tag{8}$$

$$\mathrm{Re}\ V^a = \sum_{i=1}^n q_i^{\mathrm{Re}\,V}\varphi_i, \quad \mathrm{Im}\,V^a = \sum_{i=1}^n q_i^{\mathrm{Im}\,V}\varphi_i. \tag{9}$$

Если неизвестные пронумерованы в следующем порядке:

$$\begin{aligned} q = (&q_1^{\mathrm{Re}\,A_x}, q_1^{\mathrm{Im}\,A_x}, q_1^{\mathrm{Re}\,A_y}, q_1^{\mathrm{Im}\,A_y}, q_1^{\mathrm{Re}\,A_z}, q_1^{\mathrm{Im}\,A_z}, q_1^{\mathrm{Re}\,V}, q_1^{\mathrm{Im}\,V}, \ldots, \\ &\ldots, q_n^{\mathrm{Re}\,A_x}, q_n^{\mathrm{Im}\,A_x}, q_n^{\mathrm{Re}\,A_y}, q_n^{\mathrm{Im}\,A_y}, q_n^{\mathrm{Re}\,A_z}, q_n^{\mathrm{Im}\,A_z}, q_n^{\mathrm{Re}\,V}, q_n^{\mathrm{Im}\,V})^T, \end{aligned} \tag{10}$$

то матрица СЛАУ (6) будет состоять из блоков вида

$$A_{8\times 8}^{jk} = \begin{pmatrix} b_{jk} & -c_{jk} & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{jk}^x & 0 \\ c_{jk} & b_{jk} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{jk}^x \\ 0 & 0 & b_{jk} & -c_{jk} & 0 & 0 & d_{jk}^y & 0 \\ 0 & 0 & c_{jk} & b_{jk} & 0 & 0 & 0 & d_{jk}^y \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b_{jk} & -c_{jk} & d_{jk}^z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{jk} & b_{jk} & 0 & d_{jk}^z \\ 0 & -d_{kj}^x & 0 & -d_{kj}^y & 0 & -d_{kj}^z & g_{jk} & 0 \\ d_{kj}^x & 0 & d_{kj}^y & 0 & d_{kj}^z & 0 & 0 & g_{jk} \end{pmatrix}. \tag{11}$$

При этом вектор неизвестных будет состоять из блок-векторов вида
$q^k = (q_k^{\mathrm{Re}\,A_x}, q_k^{\mathrm{Im}\,A_x}, q_k^{\mathrm{Re}\,A_y}, q_k^{\mathrm{Im}\,A_y}, q_k^{\mathrm{Re}\,A_z}, q_k^{\mathrm{Im}\,A_z}, q_k^{\mathrm{Re}\,V}, q_k^{\mathrm{Im}\,V})^T$.

Форма записи конечноэлементной матрицы с блоками вида (11) применялась в работе [2]. Данная форма записи приводит к СЛАУ с вещественной несимметричной матрицей, и для решения полученной СЛАУ можно применять итерационные методы решения СЛАУ такие как GMRES и BCG [3]. В работе [4] было показано, что GMRES затрачивает меньше времени, чем BCG для решения СЛАУ данного вида, поэтому в данной работе для решения СЛАУ с матрицами, имеющими блочную структуру (11) мы будем применять GMRES.

Блок вида (11) также можно интерпретировать как несимметричную матрицу размера 4×4, состоящую из комплексных чисел, используя матричное представление комплексных чисел: комплексное число $a + ib$ соответствует матрице вида $\begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix}$. Матрицу конечноэлементной СЛАУ можно привести к комплексно-симметричному виду, если вектор неизвестных будет состоять из блок-векторов следующего вида $q'^k = (q_k^{\mathrm{Re}\,A_x}, q_k^{\mathrm{Im}\,A_x}, q_k^{\mathrm{Re}\,A_y}, q_k^{\mathrm{Im}\,A_y}, q_k^{\mathrm{Re}\,A_z}, q_k^{\mathrm{Im}\,A_z}, 0.5(q_k^{\mathrm{Re}\,V} + q_k^{\mathrm{Im}\,V}), 0.5(q_k^{\mathrm{Re}\,V} - q_k^{\mathrm{Im}\,V}))^T$. Тогда матрица СЛАУ будет состоять из блок-элементов вида

$$A'^{jk}_{8\times 8} = \begin{pmatrix} b_{jk} & -c_{jk} & 0 & 0 & 0 & 0 & d^x_{jk} & -d^x_{jk} \\ c_{jk} & b_{jk} & 0 & 0 & 0 & 0 & d^x_{jk} & d^x_{jk} \\ 0 & 0 & b_{jk} & -c_{jk} & 0 & 0 & d^y_{jk} & -d^y_{jk} \\ 0 & 0 & c_{jk} & b_{jk} & 0 & 0 & d^y_{jk} & d^y_{jk} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b_{jk} & -c_{jk} & d^z_{jk} & -d^z_{jk} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{jk} & b_{jk} & d^z_{jk} & d^z_{jk} \\ d^x_{kj} & -d^x_{kj} & d^y_{kj} & -d^y_{kj} & d^z_{kj} & -d^z_{kj} & 2g_{jk} & 0 \\ d^x_{kj} & d^x_{kj} & d^y_{kj} & d^y_{kj} & d^z_{kj} & d^z_{kj} & 0 & 2g_{jk} \end{pmatrix}. \tag{12}$$

Также можно использовать другой способ для получения комплексно-симметричной структуры блоков СЛАУ, если представить блок-вектор неизвестных в виде
$q''^k = (q_k^{\mathrm{Re}\,A_x}, q_k^{\mathrm{Im}\,A_x}, q_k^{\mathrm{Re}\,A_y}, q_k^{\mathrm{Im}\,A_y}, q_k^{\mathrm{Re}\,A_z}, q_k^{\mathrm{Im}\,A_z}, q_k^{\mathrm{Im}\,V}, -q_k^{\mathrm{Re}\,V})^T$. Тогда блок-элементы матрицы СЛАУ примут вид

$$A''^{jk}_{8\times 8} = \begin{pmatrix} b_{jk} & -c_{jk} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -d^x_{jk} \\ c_{jk} & b_{jk} & 0 & 0 & 0 & 0 & d^x_{jk} & 0 \\ 0 & 0 & b_{jk} & -c_{jk} & 0 & 0 & 0 & -d^y_{jk} \\ 0 & 0 & c_{jk} & b_{jk} & 0 & 0 & d^y_{jk} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b_{jk} & -c_{jk} & 0 & -d^z_{jk} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{jk} & b_{jk} & d^z_{jk} & 0 \\ 0 & -d^x_{kj} & 0 & -d^y_{kj} & 0 & -d^z_{kj} & 0 & -g_{jk} \\ d^x_{kj} & 0 & d^y_{kj} & 0 & d^z_{kj} & 0 & g_{jk} & 0 \end{pmatrix}. \tag{13}$$

Элементы блоков определяются соотношениями

$$\begin{gathered} b_{jk} = \frac{1}{\mu_0}\int\limits_\Omega \nabla\varphi_j \cdot \nabla\varphi_k \,\mathrm{d}\,\Omega, \quad c_{jk} = \omega\int\limits_\Omega \sigma\varphi_j\varphi_k \,\mathrm{d}\,\Omega, \quad d^x_{jk} = \int\limits_\Omega \sigma\frac{\partial\varphi_k}{\partial x}\varphi_j \,\mathrm{d}\,\Omega, \\ d^y_{jk} = \int\limits_\Omega \sigma\frac{\partial\varphi_k}{\partial y}\varphi_j \,\mathrm{d}\,\Omega, \quad d^z_{jk} = \int\limits_\Omega \sigma\frac{\partial\varphi_k}{\partial z}\varphi_j \,\mathrm{d}\,\Omega, \quad g_{jk} = \frac{1}{\omega}\int\limits_\Omega \sigma\nabla\varphi_j \cdot \nabla\varphi_k \,\mathrm{d}\,\Omega. \end{gathered} \tag{14}$$

СЛАУ с боками вида (12) будем называть симметричной СЛАУ типа I, а СЛАУ с боками вида (13) будем называть симметричной СЛАУ типа II. Существенным различием между структурой блоков (12) и (13) является разная заполненность ненулевыми элементами, а также наличие элемента с нулевой вещественной частью на диагонали блока вида (13). Для решения СЛАУ в комплексно-симметричном представлении будем использовать метод COCR [5].

Для предобусловливания матриц СЛАУ как в несимметричной, так и в симметричной формах использовалась главная диагональ матриц, состоящая из комплексных чисел.

Для векторного МКЭ используется векторное дифференциальное уравнение

$$\frac{1}{\mu_0}\,\mathrm{rot}\,\mathrm{rot}\,\vec{A}^a + i\omega\sigma\vec{A}^a = (\sigma - \sigma^n)\vec{E}^n, \tag{15}$$

для которого эквивалентная вариационная постановка принимает вид

$$\frac{1}{\mu_0}\int\limits_{\Omega}\operatorname{rot}\vec{A}^a\cdot\operatorname{rot}\vec{\Psi}\,\mathrm{d}\,\Omega+i\omega\int\limits_{\Omega}\sigma\vec{A}^a\cdot\vec{\Psi}\,\mathrm{d}\,\Omega=\int\limits_{\Omega}(\sigma-\sigma^n)\vec{E}^n\cdot\vec{\Psi}\,\mathrm{d}\,\Omega, \tag{16}$$

где вещественная и мнимая части решения $\vec{A}^a$ и вещественная пробная функция $\vec{\Psi}$ принадлежат пространству $H_0(\mathrm{rot},\Omega)$. Получаемая конечноэлементная СЛАУ явдяется комплексно-симметричной. Для ее решения используется метод COCR со следующим предобусловливателем: $M^{-1}=D^{-1}+G^TD^{-1}_{G^TAG}G$, где D — это главная диагональ исходной матрицы A, G — это матрица дискретного градиента, а D_{G^TAG} — это главная диагональ матрицы G^TAG.

3 Результаты

Для проведения вычислительных экспериментов была выбрана следующая геоэлектрическая модель, содержащая горизонтальные слои со следующими толщинами и удельными сопротивлениями: $h_1=120$ м, $h_2=680$ м, $h_3=25000$ м, $h_4=15000$ м, $h_5=230000$ м, $h_6=\infty$, $\rho_1=120\cdot$ Ом·м, $\rho_2=50$ Ом·м, $\rho_3=900$ Ом·м, $\rho_4=120$ Ом·м, $\rho_5=700$ Ом·м, $\rho_6=100$ Ом·м. В данную горизонтально-слоистую среду помещены 2 объекта в форме прямоугольных параллелепипедов. Первый объект имеет удельное сопротивление 1.5 Ом·м и имеет протяженность по X от 25000 м до 67000 м, по Y от -40000 м до 50000 м, по Z от -9000 м до -5000 м. Второй объект имеет удельное сопротивление 4 Ом·м и имеет протяженность по X от -25000 м до 4000 м, по Y от -10000 м до 0 м, по Z от -800 м до -300 м. В расчетной области была построена конечноэлементная сетка из несогласованных пря-моугольных параллелепипедов, содержащая 12601 узел. Фрагмент сечения сетки показан на рис. 1.

Проводимость слоев горизонтально-слоистой среды была получена в результате 1D-инверсии на одном из участков Восточно-Сибирской платформы. В данной геоэлектрической модели первый объект является целевым и расположен на большой глубине, а второй расположен сбоку на меньшей глубине и является помехой при поиске местоположения и глубины первого объекта. В этом случае задачу поиска целевого объекта нельзя корректно решить с использованием методов 1D- и 2D-моделирования, поэтому используется полноценное 3D-моделирование.

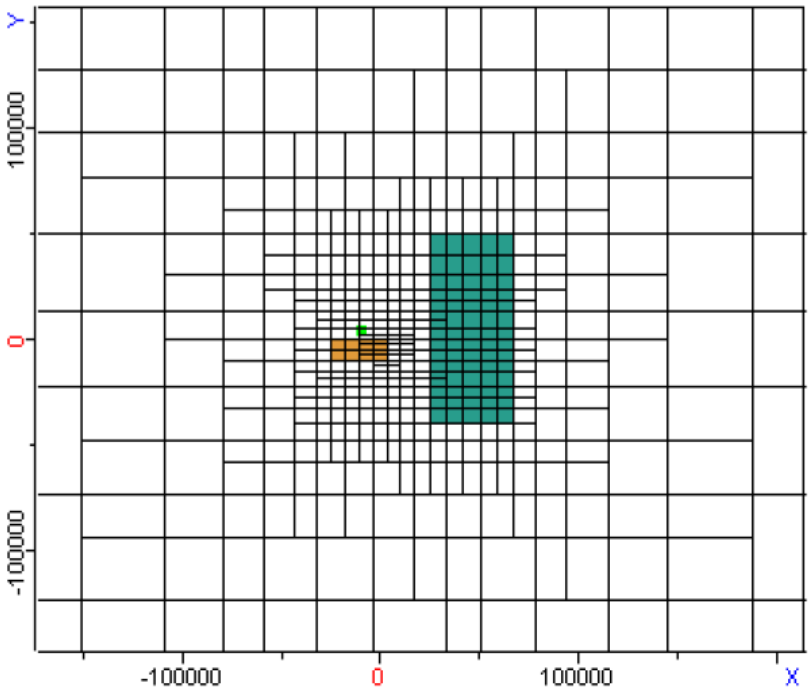


Рис. 1: Результаты моделирования

Матрицы конечноэлементных СЛАУ хранились в разреженном блочном строчно-столбцовом формате [2] в следующих массивах:
gg — массив вещественных чисел, содержащий блок-элементы нижнего треугольника матрицы, перечисленные в строчном порядке;
di — массив вещественных чисел, содержащий все ненулевые элементы диагональных блоков матрицы;
ig — целочисленный массив, содержащий адреса хранения блок-строк матрицы в массиве gg;
jg — целочисленный массив, содержащий номера блок-столбцов, соответствующих блок-элементам в массиве gg;
idi — целочисленный массив, содержащий адреса хранения диагональных блоков в массиве di;
ijg — целочисленный массив, содержащий адреса хранения внедиагональных блоков в массиве gg.

В каждом блоке только 26 ненулевых элементов, причем для хранения данного блока в памяти компьютера требуется хранить только 9 его ненулевых элементов (значения некоторых элементов совпадают, некоторые из них одинаковые по модулю и отличаются только знаком). Причем для хранения диагональных блоков достаточно хранить 6 его ненулевых элементов. Если блок соответствует узлу сетки, находящемуся в среде с нулевой проводимостью, то для хранения блока достаточно одной ячейки памяти. Все сказанное относится как к блокам вида (11), так и как блокам вида (12) и (13), которые содержат одинаковые элементы, отличающиеся лишь расположением, что учитывается на уровне подпрограммы матрично-векторного умножения. СЛАУ, полученная в данной работе, содержала 6602648 ненулевых элементов (при симметризации типа II), что при использовании разреженного блочного строчно-столбцового формата потребовало 869848 ячеек памяти.

В таблице 1 приведено время решения СЛАУ и число итераций при использовании узлового МКЭ в различных постановках и векторного МКЭ. При использовании GMRES и несимметричной постановки удается решить СЛАУ за приемлемое время на низких и высоких частотах, а в среднем диапазоне частот от 0.0488281 Гц до 0.78125 Гц время решения СЛАУ резко возрастает. При использовании же симметричных постановок мы имеем время решения на низких частотах порядка 20 с и наблюдаем увеличение времени решения СЛАУ с увеличением частоты поля. Причем при использовании симметризации типа I наблюдается резкое увеличение вычислительных затрат начиная с частоты 0.78125 Гц. В векторном МКЭ наблюдается обратная зависимость времени решения СЛАУ от увеличения частоты поля.

Таблица 1: Число итераций N и время t решения конечноэлементных СЛАУ

	GMRES		COCR, СЛАУ типа I		COCR, СЛАУ типа II		COCR, ВМКЭ	
ν, Гц	N	t	N	t	N	t	N	t
0.00038147	1950	57 с	838	24 с	861	22 с	1377	2мин 10с
0.00076294	2450	1 мин 12 с	863	25 с	860	22 с	1395	2мин 15с
0.00152588	3850	1 мин 53 с	969	28 с	939	24 с	1460	3мин 2с
0.00305176	8300	4 мин 3 с	1099	32 с	1090	27 с	1430	3мин 4с
0.00610352	14800	7 мин 12 с	1924	56 с	1705	43 с	1349	2мин 24с
0.012207	23150	11 мин 17 с	2612	1 мин 16 с	2054	52 с	1306	2мин 2с
0.0244141	33850	16 мин 29 с	4077	1 мин 59 с	2456	1 мин 2 с	1022	1мин 35с
0.0488281	>50000	>25 мин	6854	3 мин 20 с	2899	1 мин 13 с	848	1мин 19с
0.0976563	>50000	>25 мин	9530	4 мин 38 с	3315	1 мин 23 с	710	1мин 6с
0.195313	>50000	>25 мин	17876	8 мин 41 с	4751	1 мин 59 с	568	1мин 7с
0.390625	>50000	>25 мин	34968	17 мин 0 с	6612	2 мин 46 с	490	1мин 2с
0.78125	>50000	>25 мин	>50000	>25 мин	8710	3 мин 39 с	381	0мин 49с
1.5625	49450	24 мин 5 с	>50000	>25 мин	11372	4 мин 46 с	283	0мин 37с
3.125	17150	8 мин 21 с	>50000	>25 мин	11751	4 мин 56 с	218	0мин 28с
6.25	14250	6 мин 56 с	>50000	>25 мин	11705	4 мин 54 с	208	0мин 26с
12.5	100	0 мин 3 с	>50000	>25 мин	9180	3 мин 51 с	162	0мин 21с
25	650	0 мин 19 с	>50000	>25 мин	7942	3 мин 20 с	153	0мин 20с
50	1950	0 мин 57 с	>50000	>25 мин	6635	2 мин 47 с	148	0мин 19с
100	20650	10 мин 3 с	>50000	>25 мин	5338	2 мин 14 с	165	0мин 21с
250	9050	4 мин 24 с	>50000	>25 мин	5217	2 мин 11 с	165	0мин 21с

Заключение

Результаты вычислительных экспериментов показали, что оба предложенных способа симметризации матриц конечноэлементных СЛАУ позволили получить ускорение при решении СЛАУ, получаемых при низких частотах магнитотеллурического поля. Симметризация типа I привела к существенному замедлению решения СЛАУ, соответствующих частоте поля 0.390625 Гц и выше. При использовании узлового МКЭ наиболее оптимальным выбором является использование комплексно-симметричной формы II-го типа — использование матриц СЛАУ с блоками вида (12). Однако применение векторного МКЭ показывает, в целом, лучшие результаты, особенно при моделировании на высоких частотах из рассмотренного диапазона.

Список литературы

[1] Бердичевский М.Н., Дмитриев В.И. Модели и методы магнитотеллурики. М.: Научный мир, 2009, 680 с.

[2] Рояк М.Э., С.Х. Рояк, Ю.Г. Соловейчик, Г.М. Тригубович. Конечноэлементное моделирование трехмерных гармонических электромагнитных полей в задачах аэроэлектроразведки кимберлитовых трубок // Сибирский журнал индустриальной математики, 1998. — Т.1.— №2. — С.154–168.

[3] Saad Y., Iterative methods for sparse linear systems - 2nd ed. - SIAM, Philadelphia, — 2003, 528 p.

[4] П.А. Домников, С.В. Киреева, И.Е. Аврунева. О методах решения конечноэлементных СЛАУ при 3D-моделировании низкочастотных магнитотеллурических полей // Актуальные проблемы электронного приборостроения. АПЭП-2010.: материалы X международной конференции, Новосибирск, 22–24 сентября, 2010. — Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2010. — Том 6. — С. 118–123.

[5] Sogabe T., S.-L. Zhang. A COCR method for solving complex symmetric linear systems // Journal of Computational and Applied Mathematics, 199(2007), pp. 297–303.

Петр Александрович Домников — к.т.н., доцент кафедры Прикладной математики Новосибирского государственного технического университета;
e-mail: p_ domnikov@mail.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

О МОДЕЛЯХ ГОРНЫХ ВЫРАБОТОК С МНОЖЕСТВЕННЫМИ ШТОЛЬНЯМИ И МАТЕРИАЛОВ С МНОЖЕСТВЕННЫМИ ПОЛОСТЯМИ

О. В. Евдокимова[1], А. Г. Федоренко[1], В. А. Бабешко[1,2], Г. Н. Уафа[1], А. В. Плужник[2], С. Б. Уафа[2], Т. А. Хафуз[1], В. В. Лозовой[1]

[1] *Южный научный центр РАН, 630090, Ростов-на-Дону*

[2] *Кубанский государственный университет, 350040, Краснодар*

УДК 539.3

Развиваются методы оценки прочностных свойств объектов типа подземных сооружений, в частности, шахт, содержащих параллельные штольни, перегородки между которыми формируются материалом пластов. Подобные блочные конструкции из металлов, содержащие полости, облегчающие вес изделия, применяются в отраслях машиностроения, частности, в авиастроении, для лопаток двигателей. Обычно исследования выполняются для отдельно взятого крепления, а затем найденные параметры принимаются для всех остальных объектов. В то же время множественность таких объектов может приводить к возникновению еще одного фактора нарушения прочности, связанного с возможностью локализации напряженно-деформированного состояния в одной из зон сооружения, приводящей к превышению запланированных параметров прочности. В настоящей работе граничная задача сводится к функциональному уравнению Гильберта-Винера, которое позволит, при его решении получать приближенные значения, описывающие влияние множественности полостей на прочностные свойства блочной структуры.

Ключевые слова: напряжения, штольни, деформации, пластины Кирхгофа, блочные элементы, граничные задачи.

1 Постановка задачи

В проблеме прочности горных выработок имеется комплекс мер и способов упреждния горных ударов [1]. Они направлены, прежде всего, на снижение имеющихся больших вертикальных напряжений в зоне предстоящего отбора горной породы и достигается введением соответствующих креплений. В работах [2,3] развит подход, позволяющий исследовать влияние удаленных факторов, которые для деформируемых сред обладают дальнодействием, издали локализуя напряженно-деформируемое состояние в зоне штолен, если их количество и размеры увеличиваются. В указанных работах рассматривалось влияние на состояние штолен, нагрузок на пластовые перегородки, лишь вертикальных напряжений, в предположении, малости касательных напряжений в зонах контакта перегородок с верхним и нижним основаниями пород.

Объектом исследования является совокупность параллельных подземных сооружений как блочная структура, состоящая из верхнего линейно упругого слоя толщиной H_1 и пласта толщины h, моделируемого пластиной Кирхгофа. Пласт, содержащий добываемые полезные ископаемые, лежит на слое, механические характеристики среды которого грунтоподобные и позволяют моделировать его постелью Винклера. Предполагается, что толщина h пласта много меньше H_1 что имеет место в реальных условиях добычи многих полезных ископаемых. Расположим систему координат $ox_1x_2x_3$ таким образом, что плоскость ox_1x_2 совпадает со срединной плоскостью пластины, а ось ox_3 направлена строго вверх. Считаем, что вдоль оси ox_1, перпендикулярно оси ox_2, расположено N протяженных, параллельных между собой штольней, которые считаются бесконечными. Штольни находятся в рудном пласте и ширина каждой из них равна $b_{2n+1} - b_{2n}$,

Отдельные фрагменты работы выполнены в рамках реализации Госзадания на 2017 г. проекты (9.8753.2017/БЧ), (0256-2014-0006), Программы президиума РАН 1-33П, проекты с (0256-2015-0088) по (0256-2015-0093), и при поддержке грантов РФФИ (15-01-01379), (15-08-01377), (16-41-230214), (16-41-230218), (16-48-230216), (17-08-00323).

$n = 1, 2, \ldots, N$, где (b_{2n}, b_{2n+1}) — координаты на оси ox_2 штольни с номером $2n$. Пласт сверху накрыт верхним деформируемым слоем и лежит на основании Винклера, для которого связь между напряжениями $t(x_1, x_2)$ и перемещениями $u_{32}(x_1, x_2)$ верхней границы основания задается соотношением $u_{32}(x_1, x_2) = \varepsilon_6^{-1}\upsilon t(x_1, x_2)$, $\varepsilon_6^{-1}\upsilon > 0$. Здесь υ — коэффициент постели Винклера. Области между штольнями с координатами $\{b_{2n-1}, b_{2n}\}$ шириной, $b_{2n} - b_{2n-1}$, $n = 1, 2, \ldots, N$, $b_1 = -\infty$, $\quad b_{2N} = \infty$ являются опорами, имеющими номера $2n - 1$. Допускается, что верхний упругий слой со свободной от напряжений верхней границей, с плотностью материала ρ вертикально воздействует сверху на пласт напряжением $q_0 = \rho g H_1$, где g — ускорение свободного падения, вызывая пренебрежимо малые касательные напряжения в сравнении с нормальными.

2 Определяющие уравнения

Уравнение пластин Кирхгофа, описывающих поведение пласта, в том числе опорных зон, которые должны быть достаточно протяженными для удержания высокого давления верхнего слоя, имеют вид

$$\mathbf{R}_b(\partial x_1, \partial x_2)u_{3b} + \varepsilon_{53b}(t_{3b} - g_{3b}) \equiv \left(\frac{\partial^4}{\partial x_1^4} + 2\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^4}{\partial x_2^4}\right)u_{3b} + \varepsilon_{53b}(t_{3b} - g_{3b}) = 0, \tag{1}$$

$$\mathbf{R}_b(-i\alpha_1, -i\alpha_2)U_{3b} \equiv R_b(-i\alpha_1, -i\alpha_2)U_{3b} \equiv (\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^2 U_{3b},$$

$$U_{3b} = \mathbf{F}_2 u_{3b}, \quad G_{3b} = \mathbf{F}_2 g_{3b}, \quad T_{3b} = \mathbf{F}_2 t_{3b}, \quad b = \lambda, r,$$

$$M_b = -D_{b1}\left(\frac{\partial^2 u_{3b}}{\partial x_2^2} + \nu_b\frac{\partial^2 u_{3b}}{\partial x_1^2}\right), \quad D_{b1} = \frac{D_b}{H_1^2}, \quad D_{b2} = \frac{D_b}{H_1^3},$$

$$Q_b = -D_{b2}\left(\frac{\partial^3 u_{3b}}{\partial x_2^3} + (2 - \nu_b)\frac{\partial^3 u_{3b}}{\partial x_1^2 \partial x_2}\right) = f_{4b}(\partial\Omega_b),$$

$$u_{3b} = f_{1b}(\partial\Omega_b), \quad \frac{\partial u_{3b}}{H_1 \partial x_2} = f_{2b}(\partial\Omega_b), \quad D_b = \frac{E_b h_b^3}{12(1 - \nu_b^2)}, \quad \varepsilon_{53b} = \frac{(1 - \nu_b^2)12H_1^4}{E_b h_b^3}, \quad \varepsilon_6^{-1} = \frac{(1 - \nu)H_1}{\mu}.$$

Здесь для опор, сформированных из фрагментов пласта между штольнями, введено условное обозначение индексом b которому в будущем будет приданы текущие номера. Опоры занимают области Ω_b с границами $\partial\Omega_b$, при вертикальных статических воздействиях напряжением g_{3b} сверху и t_{3b} снизу. Используются общепринятые обозначения механических параметров в выбранной системе координат: M_b и Q_b — изгибающий момент и перерезывающая сила в системе координат $x_1 o x_2$; h_b — толщины пластин, H_1 — размерная толщина верхнего слоя. Обозначения заимствованы из [1, 2]. $\mathbf{F}_2 \equiv \mathbf{F}_2(\alpha_1, \alpha_2)$ и $\mathbf{F}_1 \equiv \mathbf{F}_1(\alpha_1)$ двумерный и одномерный операторы преобразования Фурье соответственно. Перемещение нижней границы верхнего слоя происходит за счет веса верхнего слоя и описывается соотношением [3–5]

$$u_{31}(x_1, x_2) = \mathrm{K}_{31}g = \varepsilon_6^{-1}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} k_{31}(x_1, -\xi_1, x_2 - \xi_2)\,[g(\xi_1, \xi_2) - g_0]\,d\xi_1 d\xi_2,$$

$$k_{31}(x_1, x_2) = \frac{1}{4\pi^2}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} K_{31}(\alpha_1, \alpha_2)e^{-i(\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2)}d\alpha_1 d\alpha_2, \tag{2}$$

$$G(\alpha_1, \alpha_2) = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\xi_1, \xi_2)e^{i(\alpha_1\xi_1 + \alpha_2\xi_2)}d\xi_1 d\xi_2.$$

Здесь $g(\xi, \eta)$ — воздействия на нижнюю границу верхнего слоя со стороны пласта, то есть контактные напряжения, действующие на верхний пласт от опор. Функция $K(\alpha_1, \alpha_2)$, называемая символом интегрального уравнения, представляет собой для линейно-упругого слоя мероморфную функцию двух комплексных переменных. Полюса функции по одному из комплексных переменных $\alpha_2 = \alpha_2(\alpha_1)$ при фиксированном вещественном втором переменном являются дискретными комплексными числами, не лежащими на вещественной оси в статических задачах. Воздействие со стороны пласта на верхнюю границу нижнего слоя обозначается $t(\xi_1, \xi_2)$, вертикальное перемещение этой границы при принятых предположениях есть $u_{32}(x_1, x_2)$.

3 Метод исследования

В основе решения граничной задачи лежит метод блочного элемента в сочетании с факторизационными подходами [1–5]. Следуя им, функциональные уравнения граничной задачи для каждой опоры можно представить в виде [1,2]

$$R_b(-i\alpha_1,-i\alpha_2)U_{3b}\equiv(\alpha_1^2+\alpha_2^2)^2U_{3b}=-\int\limits_{\partial\Omega_b}\omega_b-\varepsilon_{53b}S_{3b}(\alpha_1,\alpha_2),\tag{3}$$

$$S_{3b}(\alpha_1,\alpha_2)=\mathbf{F}_2(\alpha_1,\alpha_2)(t_{3b}-g_{3b}),\quad b=\lambda,r.$$

Здесь ω_b — участвующие в представлении внешние формы, имеющие вид

$$\omega_b=e^{i\langle\alpha,x\rangle}\Big\{-\left[\frac{\partial^3u_{3b}}{\partial x_2^3}-i\alpha_2\frac{\partial^2u_{3b}}{\partial x_2^2}-\alpha_2^2\frac{\partial u_{3b}}{\partial x_2}+i\alpha_2^3u_{3b}+2\frac{\partial^3u_{3b}}{\partial x_1^2\partial x_2}-2i\alpha_2\frac{\partial^2u_{3b}}{\partial x_1^2}\right]dx_1+$$
$$+\left[\frac{\partial^3u_{3b}}{\partial x_1^3}-i\alpha_1\frac{\partial^2u_{3b}}{\partial x_1^2}-\alpha_1^2\frac{\partial u_{3b}}{\partial x_1}+i\alpha_1^3u_{3b}\right]dx_2\Big\},\quad b=\lambda,r.$$

Интеграл вычисляется по границе опоры в направлении против часовой стрелки. Для прямолинейной границы внешняя форма принимает выражение

$$\omega_b=e^{i\langle\alpha,x\rangle}\left\{-\left[i\alpha_1M_bD_b^{-1}-Q_bD_b^{-1}-(\alpha_2^2+\nu_b\alpha_1^2)\frac{\partial u_{3b}}{\partial x_2}+i\alpha_2\left[\alpha_2^2+(2-\nu_b)\alpha_1^2\right]u_{3b}\right]\right\}dx_1,$$

Вычислив формы-вычеты Лере, в том числе двукратные, псевдодифференциальные уравнения граничной задачи, с учетом принятых обозначений, можем представить, отдельно для каждой стороны опоры λ и r, где λ — левая сторона опоры, а r — правая. Пусть пластина занимает область $\Omega_n(|x_1|\leqslant\infty,\ b_{2n-1}\leqslant x_2\leqslant b_{2n})$. Тогда для правой стороны имеем псевдодифференциальные уравнения

$$\mathbf{F}_1^{-1}(\xi_1)\Big\langle-\int\limits_{\partial\Omega_r}\left\{i\alpha_{2-}D_{r1}^{-1}M_r-D_{r2}^{-1}Q_r-(\alpha_{2-}^2+\nu_r\alpha_1^2)\frac{\partial u_{3r}}{\partial x_2}+i\alpha_{2-}\left[\alpha_{2-}^2+(2-\nu_r)\alpha_1^2\right]u_{3r}\right\}e^{i\alpha_1x_1+i\alpha_{2-}b_{2n}}dx_1+$$
$$+\int\limits_{\partial\Omega_\lambda}\left\{i\alpha_{2-}D_{\lambda1}^{-1}M_\lambda-D_{\lambda2}^{-1}Q_\lambda-(\alpha_{2-}^2+\nu_\lambda\alpha_1^2)\frac{\partial u_{3\lambda}}{\partial x_2}+i\alpha_{2-}\left[\alpha_{2-}^2+(2-\nu_\lambda)\alpha_1^2\right]u_{3\lambda}\right\}e^{i\alpha_1x_1+i\alpha_{2-}b_{2n-1}}dx_1+$$
$$+\varepsilon_{53b}S_3(\alpha_1,\alpha_{2-})\Big\rangle=0,\tag{4}$$

$$\mathbf{F}_1^{-1}(\xi_1^r)\Big\langle-\int\limits_{\partial\Omega_r}\left\{iD_{r1}^{-1}M_r-2\alpha_{2-}\frac{\partial u_{3r}}{\partial x_2}+i\left[3\alpha_{2-}^2+(2-\nu_r)\alpha_1^2\right]u_{3r}\right\}e^{i\alpha_1x_1+i\alpha_{2-}b_{2n}}dx_1+$$
$$+\int\limits_{\partial\Omega_\lambda}\left\{iD_{\lambda1}^{-1}M_\lambda-2\alpha_{2-}\frac{\partial u_{3\lambda}}{\partial x_2}+i\left[3\alpha_{2-}^2+(2-\nu_\lambda)\alpha_1^2\right]u_{3\lambda}\right\}e^{i\alpha_1x_1+i\alpha_{2-}b_{2n-1}}dx_1+$$
$$+\varepsilon_{53}S_3'(\alpha_1,\alpha_{2-})\Big\rangle=0.$$

На левой стороны пластины псевдодифференциальные уравнения имеют вид

$$\mathbf{F}_1^{-1}(\xi_1)\Big\langle-\int\limits_{\partial\Omega_\lambda}\left\{i\alpha_{2+}D_{\lambda1}^{-1}M_\lambda-D_{\lambda2}^{-1}Q_\lambda-(\alpha_{2+}^2+\nu_\lambda\alpha_1^2)\frac{\partial u_{3\lambda}}{\partial x_2}+i\alpha_{2+}\left[\alpha_{2+}^2+(2-\nu_\lambda)\alpha_1^2\right]u_{3\lambda}\right\}e^{i\alpha_1x_1+i\alpha_{2+}b_{2n-1}}dx_1+$$
$$+\int\limits_{\partial\Omega_r}\left\{i\alpha_{2+}D_{r1}^{-1}M_r-D_{r2}^{-1}Q_r-(\alpha_{2+}^2+\nu_r\alpha_1^2)\frac{\partial u_{3r}}{\partial x_2}+i\alpha_{2+}\left[\alpha_{2+}^2+(2-\nu_r)\alpha_1^2\right]u_{3r}\right\}e^{i(\alpha_1x_1+\alpha_{2+}b_{2n})}dx_1+$$
$$+\varepsilon_{53}e^{i\alpha_{2+}b_{2n-1}}S_3(\alpha_1,\alpha_{2+})\Big\rangle=0,\tag{5}$$

$$\mathbf{F}_1^{-1}(\xi_1)\Bigg\langle -\int\limits_{\partial\Omega_\lambda}\left\{iD_{\lambda1}^{-1}M_\lambda-2\alpha_{2+}\frac{\partial u_{3\lambda}}{\partial x_2}+i\left[3\alpha_{2+}^2+(2-\nu_\lambda)\alpha_1^2\right]u_{3\lambda}\right\}e^{i\alpha_1x_1+i\alpha_{2+}b_{2n-1}}dx_1+$$
$$+\int\limits_{\partial\Omega_r}\left\{iD_{r1}^{-1}M_r-2\alpha_{2+}\frac{\partial u_{3r}}{\partial x_2}+i\left[3\alpha_{2+}^2+(2-\nu_r)\alpha_1^2\right]u_{3r}\right\}e^{i(\alpha_1x_1+\alpha_{2+}b_{2n})}dx_1+\varepsilon_{53}S_3'(\alpha_1,\alpha_{2+})\Bigg\rangle=0.$$

В подынтегральных функциях принято

$$\alpha_{2-}=-i\sqrt{\alpha_1^2},\quad \alpha_{2+}=i\sqrt{\alpha_1^2}$$

Введем следующую систему обозначений, основываясь на (4) и (5):

$$\mathbf{Y}_\lambda=\{y_{1\lambda},y_{2\lambda}\},\quad \mathbf{Z}_\lambda=\{z_{1\lambda},z_{2\lambda}\},\quad \mathbf{Y_r}=\{y_{1r},y_{2r}\},\quad \mathbf{Z_r}=\{z_{1r},z_{2r}\},$$

$$\mathbf{F}_1g=\mathbf{F}_1(\alpha_1)g,\quad \mathbf{F}_2g=\mathbf{F}_2(\alpha_1,\alpha_2)g,$$

$$y_{1\lambda}=D_\lambda^{-1}\mathbf{F}_1M_\lambda,\quad y_{2\lambda}=D_\lambda^{-1}\mathbf{F}_1Q_\lambda,\quad y_{1r}=D_r^{-1}\mathbf{F}_1M_r,\quad y_{2r}=D_r^{-1}\mathbf{F}_1Q_r,$$

$$z_{1\lambda}=\mathbf{F}_1\frac{\partial u_\lambda}{\partial x_2^\lambda},\quad z_{2\lambda}=\mathbf{F}_1u_\lambda,\quad z_{1r}=\mathbf{F}_1\frac{\partial u_r}{\partial x_2^r},\quad z_{2r}=\mathbf{F}_1u_r,$$

$$\mathbf{K}_\lambda=\{k_{1\lambda},k_{2\lambda}\},\quad \mathbf{K_r}=\{k_{1r},k_{2r}\},\quad k_{1\lambda}=\varepsilon_{53\lambda}\mathbf{F}_2(\alpha_1,\alpha_{2-})(t_\lambda-g_\lambda)=\varepsilon_{53\lambda}S_{3\lambda}(\alpha_1,\alpha_{2-}),$$
$$k_{2\lambda}=\varepsilon_{53\lambda}S_{3\lambda}'(\alpha_1,\alpha_{2-}),\quad k_{1r}=\varepsilon_{53r}\mathbf{F}_2(\alpha_1,\alpha_{2+})(t_\lambda-g_\lambda)=\varepsilon_{53r}S_{3r}(\alpha_1,\alpha_{2+}),k_{2r}=\varepsilon_{53r}S_{3r}'(\alpha_1,\alpha_{2+}).$$

Будем считать, что боковые границы опор штольней свободны от напряжений, то есть $\mathbf{Y}_\lambda=\mathbf{Y_r}=0$. Тогда, введя обозначения,

$$\mathbf{Z}_{\lambda r}=\{z_{1\lambda},z_{2\lambda},z_{1r},z_{2r}\},\quad \mathbf{K}_{\lambda\mathbf{r}}=\{k_{1\lambda},k_{2\lambda},k_{1r},k_{2r}\},$$

с учетом направлений дифференцирования получим для каждой опоры систему уравнений для решения псевдодифференциальных уравнений для левой стороны вида

$$\begin{gathered}(-1+\nu_\lambda)\alpha_1^2z_{1\lambda}-i\alpha_{2+}\left[\,(1-\nu_\lambda)\alpha_1^2\,\right]z_{2\lambda}-\left\{(-1+\nu_r)\alpha_1^2z_{1r}-i\alpha_{2+}\left[(1-\nu_r)\alpha_1^2\right]z_{2r}\right\}e^{i\alpha_{2+}b_{2n-1}}=-k_{1\lambda},\\ 2\alpha_{2+}z_{1\lambda}+i\left[\,(1+\nu_\lambda)\alpha_1^2\,\right]z_{2\lambda}-\left\{2\alpha_{2+}z_{1r}+i\left[(1+\nu_r)\alpha_1^2\right]z_{2r}\right\}e^{i\alpha_{2+}b_{2n}}=-k_{2\lambda}.\end{gathered}\tag{6}$$

Аналогично для правой стороны.

В результате псевдодифференциальные уравнения для этого случая можно переписать в виде системы алгебраических уравнений

$$\mathbf{A}_\lambda\mathbf{Y}_\lambda+\mathbf{B}_\lambda\mathbf{Z}_\lambda+\mathbf{K}_\lambda=0,\quad \mathbf{A}_r\mathbf{Y}_r+\mathbf{B}_r\mathbf{Z}_r+\mathbf{K}_r=0,\tag{7}$$

$$\mathbf{A}_\lambda=\begin{Vmatrix}a_{11\lambda}&a_{12\lambda}\\a_{21\lambda}&a_{22\lambda}\end{Vmatrix},\quad \mathbf{B}_\lambda=\begin{Vmatrix}b_{11\lambda}&b_{12\lambda}\\b_{21\lambda}&b_{22\lambda}\end{Vmatrix},\quad \mathbf{A}_r=\begin{Vmatrix}a_{11r}&a_{12r}\\a_{21r}&a_{22r}\end{Vmatrix},\quad \mathbf{B}_r=\begin{Vmatrix}b_{11r}&b_{12r}\\b_{21r}&b_{22r}\end{Vmatrix}.$$

$$\begin{gathered}a_{11\lambda}=-i\alpha_{2-},\quad a_{12\lambda}=1,\quad a_{21\lambda}=-i,\\ a_{22\lambda}=0,\quad b_{11\lambda}=(\alpha_{2-}^2+\nu_\lambda\alpha_1^2),\quad b_{12\lambda}=-i\alpha_{2-}\left[\alpha_{2-}^2+(2-\nu_\lambda)\alpha_1^2\right],\\ b_{21\lambda}=2\alpha_{2-},\quad b_{22\lambda}=-i\left[3\alpha_{2-}^2+(2-\nu_\lambda)\alpha_1^2\right],\\ a_{11r}=-i\alpha_{2+},\quad a_{12r}=1,\quad a_{21r}=-i,\\ a_{22r}=0,\quad b_{11r}=(\alpha_{2+}^2+\nu_r\alpha_1^2),\quad b_{12r}=-i\alpha_{2+}\left[\alpha_{2+}^2+(2-\nu_r)\alpha_1^2\right],\\ b_{21r}=2\alpha_{2+},\quad b_{22r}=-i\left[3\alpha_{2+}^2+(2-\nu_r)\alpha_1^2\right].\end{gathered}\tag{8}$$

Решив эти псевдодифференциальные уравнения для избранной граничной задачи и внеся найденные неизвестные во внешние формы. Преобразование Фурье решения для пластин можно представить для левой полуплоскости, $b=\lambda$, и для правой, $b=r$, в однотипном виде в локальных системах координат

$$U_{3b}=[R_b(-i\alpha_{1b},-i\alpha_{2b})]^{-1}\left\langle -\int\limits_{\partial\Omega_b}\omega_b+\varepsilon_{5b}\mathbf{F}_2(g_{3b}+t_{3b})\right\rangle.$$

Дальнейшее использование этого представления для сопряжения с подложкой детально описано в [1, 2]. В результате получается система интегральных уравнений для исследования и решения разрабатывается поход, который позволит строить приближенные решения граничной задачи, не прибегая к уравнениям, построенным в [1,2], основано на сведении проблемы к краевой задаче Римана для нескольких пар функций.

Внеся решения этой системы в псевдодифференциальные уравнения, получим полный набор граничных условий на каждой границе. После этого они вносятся в правые части функциональных уравнений (3). В результате соотношения для опор могут быть представлены в следующем виде

$$U_{2n-1} = -R^{-1}(-i\alpha_1, -i\alpha_2)\left[\int\limits_{\partial\Omega_n} \omega_{2n-1} + \varepsilon_{53}\mathbf{F}_2(t_{2n-1} - g_{2n-1})\right].$$

Приняв теперь во внимание, что число опор равно $N+1$ с обозначениями сторон опор $\lambda = 2n-1$, $r = 2n$, получим, в результате сопряжения блочных элементов опор с верхним и нижним слоями, следующую систему уравнений

$$U_{31}(\alpha_1, \alpha_2) = -\varepsilon_6^{-1}K_{31}\left(\sum_{n=1}^{N} G_{2n-1} - G_0\right), \quad U_{32}(\alpha_1, \alpha_2) = \varepsilon_6^{-1}\upsilon\sum_{n=1}^{N} T_{2n-1}.$$

Здесь $U_{32}(\alpha_1, \alpha_2)$ — перемещения нижнего основания по закону постели Винклера [2]. Можно также использовать другую модель основания, принятую в [1].

Справедливы соотношения

$$U_{2n-1} = -(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^{-2}\left\langle \int\limits_{\partial\Omega_{\lambda 2n-1}} \omega_{\lambda 2n-1} - \int\limits_{\partial\Omega_{r2n-1}} \omega_{r2n-1} + \varepsilon_{53}S_{312n-1}(\alpha_1, \alpha_2)\right\rangle,$$

$$\omega_{\lambda 2n-1} = e^{i\alpha_1 x_1 + i\alpha_2 b_{2n-1}}\left\{-\left[(\alpha_2^2 + \nu\alpha_1^2)\frac{\partial u_{\lambda 2n-1}}{\partial x_2} + i\alpha_2\left[\alpha_2^2 + (2-\nu)\alpha_1^2\right]u_{\lambda 2n-1}\right]\right\}dx_1,$$

$$\omega_{r2n-1} = e^{i\,\alpha_1 x_1 + i\alpha_2 b_{2n}}\left\{-\left[(\alpha_2^2 + \nu\alpha_1^2)\frac{\partial u_{r2n-1}}{\partial x_2} + i\alpha_2\left[\alpha_2^2 + (2-\nu_b)\alpha_1^2\right]u_{r2n-1}\right]\right\}dx_1,$$

$$\langle\alpha, x\rangle = \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2.$$

В результате ряда преобразований, приходим к следующему функциональному уравнению, описывающему поведение отдельно выбранной опоры.

$$\left[\varepsilon_6^{-1}K_{31} + \varepsilon_{53}(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^{-2}(1 + \upsilon^{-1}K_{31})\right]G_{2n-1} =$$
$$= (\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^{-2}\left\langle\left[Q_{2n-1}(\alpha_1, \alpha_2)e^{i\alpha_2 b_{2n-1}} + Q_{2n}(\alpha_1, \alpha_2)e^{i\alpha_2 b_{2n}}\right] + \varepsilon_6^{-1}K_{31}(\varepsilon_6^{-1} + \varepsilon_{53}\upsilon^{-1})G_0\right\rangle.$$

Значение $t_{2n-1}(x_1, x_2) = \mathbf{F}_2^{-1}T_{2n-1}$ находится из соотношения

$$t_{2n-1}(x_1, x_2) = \upsilon^{-1}\mathbf{P}_{\Omega_{2n-1}}\mathbf{F}_2^{-1}K_{31}(G_0 - G_{2n-1})$$

Здесь $\mathbf{P}_{\Omega_{2n-1}}$ — проектор на область Ω_{2n-1}. Последнее соотношение можно приближенно представить в виде $t_{2n-1}(x_1, x_2) = \upsilon^{-1}\mathbf{F}_2^{-1}K_{31}(G_0 - G_{2n-1})$. Это оправдано тем, что в статических задачах правая часть последнего выражения экспоненциально убывает при удалении от зоны контакта.

Для сведения функционального уравнения к системе интегральных уравнений, введем следующие обозначения

$$\left[\varepsilon_6^{-1}K_{31} + \varepsilon_{53}(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^{-2}(1 + \upsilon^{-1}K_{31})\right] = K(\alpha, \beta),$$

$$\mathbf{P}_{\Omega_{2n-1}}\mathbf{F}_2^{-1}(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^{-2}\left\langle\left[Q_{2n-1}(\alpha_1, \alpha_2)e^{i\alpha_2 b_{2n-1}} + Q_{2n}(\alpha_1, \alpha_2)e^{i\alpha_2 b_{2n}}\right] + \varepsilon_6^{-1}K_{31}(\varepsilon_6^{-1} + \varepsilon_{53}\upsilon^{-1})G_0\right\rangle = f_{2n-1}(x_1, x_2),$$

$$\mathbf{P}_{\Omega_{2n}}\mathbf{F}_2^{-1}(\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^{-2}\left\langle\left[Q_{2n-1}(\alpha_1, \alpha_2)e^{i\alpha_2 b_{2n-1}} + Q_{2n}(\alpha_1, \alpha_2)e^{i\alpha_2 b_{2n}}\right] + \varepsilon_6^{-1}K_{31}(\varepsilon_6^{-1} + \varepsilon_{53}\upsilon^{-1})G_0\right\rangle = \phi_{2n}(x_1, x_2),$$

$$U_{2n-1} = -(\alpha_1^2+\alpha_2^2)^{-2}\big\langle (A_{2n-1}\alpha_2^3 + B_{2n-1}\alpha_2^2 + C_{2n-1}\alpha_2 + D_{2n-1})e^{i\alpha_2 b_{2n-1}} + \\ + (A_{2n}\alpha_2^3 + B_{2n}\alpha_2^2 + C_{2n}\alpha_2 + D_{2n})e^{i\alpha_2 b_{2n}} + \varepsilon_{53}(T_{2n-1} - G_{2n-1})\big\rangle,$$

$$(A_{2n-1}\alpha_2^3 + B_{2n-1}\alpha_2^2 + C_{2n-1}\alpha_2 + D_{2n-1}) = Q_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2), \quad (A_{2n}\alpha_2^3 + B_{2n}\alpha_2^2 + C_{2n}\alpha_2 + D_{2n}) = Q_{2n}(\alpha_1,\alpha_2).$$

4 Сведение к функциональному уравнению

Приняв во внимание наличие N опор, функциональное уравнение граничной задачи можно записать в виде функционального уравнения

$$K(\alpha_1,\alpha_2)\sum_{n=1}^{N} G_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2) - \sum_{n=2}^{N-1}\Phi_{2n}(\alpha_1,\alpha_2) = \sum_{n=1}^{N} F_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2), \quad n = 1,2,\ldots,N,$$

$$F_0(\alpha_1,\alpha_2) = \sum_{n=1}^{N} F_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2).$$

Имеют место соотношения

$$G_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2 b_{2n-1}} = G^+_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2) \quad G_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2 b_{2n}} = G^-_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2),$$

$$\Phi_{2n}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2 b_{2n}} = \Phi^+_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2), \quad \Phi_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2 b_{2n+1}} = \Phi^-_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2),$$

$$G^+_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2) = G^-_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2(b_{2n}-b_{2n-1})}, \quad \Phi^+_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2) = \Phi^-_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2(b_{2n+1}-b_{2n})}.$$

Отсюда

$$K(\alpha_1,\alpha_2)\sum_{n=1}^{N} G^+_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2)e^{i\alpha_2 b_{2n-1}} - \sum_{n=1}^{N-1}\Phi^+_{2n}(\alpha_1,\alpha_2)e^{i\alpha_2 b_{2n}} = e^{i\alpha_2 b_{2N-1}}F_0(\alpha_1,\alpha_2), \quad n = 1,2,\ldots,N,$$

$$F_0(\alpha_1,\alpha_2) = \sum_{n=1}^{N} F_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2),$$

$$K(\alpha_1,\alpha_2)G^+_{2N-1}(\alpha_1,\alpha_2) + K(\alpha_1,\alpha_2)\sum_{n=1}^{N-1} G^-_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2(b_{2N}-b_{2n})} - \\ - \sum_{n=2}^{N-1}\Phi^-_{2n}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2(b_{2N}-b_{2n+1})} = F_0(\alpha_1,\alpha_2), \quad n = 1,2,\ldots,N.$$

В результате получаем выражения

$$G^+_{2N-1}(\alpha_1,\alpha_2) = -\sum_{n=1}^{N-1} G^-_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2(b_{2N-1}-b_{2n})} + \\ + K^{-1}(\alpha_1,\alpha_2)\sum_{n=2}^{N-1}\Phi^-_{2n}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2(b_{2N-1}-b_{2n+1})} + K^{-1}(\alpha_1,\alpha_2)F(\alpha_1,\alpha_2),$$

$$G^{\pm}_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2) = X^{\pm}_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2), \quad \Phi^{\pm}_{2n}(\alpha_1,\alpha_2) = X^{\pm}_{2n}(\alpha_1,\alpha_2),$$

$$X^+_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2) = X^-_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2(b_{2n}-b_{2n-1})}, \quad X^+_{2n}(\alpha_1,\alpha_2) = X^-_{2n}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2(b_{2n+1}-b_{2n})},$$

$$X^+_{2N-1}(\alpha_1,\alpha_2) = -\sum_{n=1}^{N-1} X^-_{2n-1}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2(b_{2N}-b_{2n})} + \\ + K^{-1}(\alpha_1,\alpha_2)\sum_{n=2}^{N-1} X^-_{2n}(\alpha_1,\alpha_2)e^{-i\alpha_2(b_{2N}-b_{2n+1})} + K^{-1}(\alpha_1,\alpha_2)F_0(\alpha_1,\alpha_2),$$

$$F(\alpha_1, \alpha_2) = K^{-1}(\alpha_1, \alpha_2) F_0(\alpha_1, \alpha_2).$$

Введем обозначения векторов

$$\mathbf{X}^{\pm}(\alpha_1, \alpha_2) = \left\{ X_n^{\pm}(\alpha_1, \alpha_2) \right\}.$$

Тогда получаем матричные функциональные уравнения Гильберта - Винера [6].

$$\mathbf{X}^{+}(\alpha_1, \alpha_2) = \mathbf{D}(\alpha_1, \alpha_2)\mathbf{X}^{-}(\alpha_1, \alpha_2) + \mathbf{F}(\alpha_1, \alpha_2), \quad m, n = 1, 2, \ldots, 2N,$$

$$\mathbf{D} = \|d_{mn}\|, \quad d_{mn} = 0, \quad m \neq n, \quad m \neq 2N,$$

$$d_{Ns} = \begin{cases} -e^{-i\alpha_2(b_{2N} - b_{2n})}, & s = 2n - 1; \\ K^{-1}(\alpha_1, \alpha_2) e^{-i\alpha_2(b_{2N} - b_{2n+1})}, & s = 2n - 1. \end{cases}$$

Это уравнение будет объектом последующих изучений и разработки метода его приближенного решения.

Список литературы

[1] Бабешко В.А., Бабешко О.М., Евдокимова О.В. К проблеме мониторинга напряженности зон параллельных штольней // МТТ 2016. № 5. С. 6–14.

[2] Бабешко В.А., Евдокимова О.В., Бабешко О.М. К теории влияния глобального фактора на прочность совокупности параллельных соединений // Вычислительная механика сплошных сред. 2016, т. 9, № 4 С. 412–419.

[3] Ворович И.И., Бабешко В.А. Динамические смешанные задачи теории упругости для неклассических областей. М.: Наука, 1979. 320 с.

[4] Ворович И.И., Александров В.М., Бабешко В.А. Неклассические смешанные задачи теории упругости М.: Наука, 1974. 456 с.

[5] Бабешко В.А. Обобщенный метод факторизации в пространственных динамических смешанных задачах теории упругости. М.: Наука, 1984. 256 с.

[6] Бабешко В.А., Евдокимова О.В., Бабешко О.М. Об одной факторизационной задаче Гильберта–Винера и методе блочного элемента // ДАН. 2014. Т. 459. № 5. С. 557–561.

Евдокимова Ольга Владимировна — д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник Южного научного центра РАН;
e-mail: evdokimova.olga@mail.ru
Федоренко Алексей Григорьевич — канд. физ.-мат. наук, младший научный сотрудник Южного научного центра РАН;
e-mail: afedorenko@mail.ru;
Бабешко Владимир Андреевич — академик РАН, д-р физ.-мат. наук, заместитель председателя Южного научного центра РАН, зав. кафедрой математического моделирования Кубанского государственного университета, директор Научно-исследовательского центра прогнозирования и предупреждения геоэкологических и техногенных катастроф Кубанского государственного университета;
e-mail: babeshko41@mail.ru;
Уафа Галина Николаевна, инженер-исследователь Южного научного центра РАН;
e-mail: uafa70@mail.ru;
Плужник Андрей Валерьевич, научный сотрудник Научно-исследовательского центра прогнозирования и предупреждения геоэкологических и техногенных катастроф Кубанского государственного университета;
e-mail: infocenter@kubsu.ru;
Уафа Самир Баширович — инженер Кубанского государственного университета;
e-mail: uafa70@mail.ru;
Хафуз Татьяна Александровна, стажер-исследователь Южного научного центра РАН;
e-mail: masya16.92@mail.ru;
Лозовой Виктор Викторович, научный сотрудник Южного научного центра РАН;
e-mail: niva_kgu@mail.ru;
Дата поступления — 10 мая 2017 г.

АЛГОРИТМЫ ИНТЕРПРЕТАЦИИ И ВИЗУАЛИЗАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ПОСТОЯННО ДЕЙСТВУЮЩЕГО МОНИТОРИНГА МЕСТОРОЖДЕНИЙ УГЛЕВОДОРОДОВ

Г. Н. Ерохин, К. С. Алсынбаев, В. М. Брыксин, В. В. Савеленко, В. И. Строков, А. В. Козлов, М. В. Козлов

Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, 236016, Калининград

УДК 004.93:550.8

Рассмотрена технология постоянного мониторинга состояния месторождений углеводородов (УВ) (MicroseismicPRM), включающая мониторинг мероприятий по интенсификации добычи УВ и мониторинг процессов, протекающих между этими мероприятиями. Технология включает определение параметров микросейсмических событий на основе решения обратных задач с последующим применением пространственно-временной фильтрации полученных событий и определением тензоров сейсмических моментов.

Представлены алгоритмы моделирования и определения численных характеристик образований в виде полигонов и граневых фигур. Все модули объединены в единый вычислительный комплекс. Графический пользовательский интерфейс позволяет интерактивно редактировать вычислительные процессы, представленные в форме ациклического графа обработки. Счётные модули работают на удаленном суперкомпьютере, а управление и 3D-визуализация осуществляются на персональных рабочих станциях.

Ключевые слова: микросейсмический мониторинг, тензор сейсмического момента, кластеризация, тетраэдризация, воксель, распознавание.

Введение

Технология PRM. Данная технология предполагает непрерывный процесс мониторинга за состоянием месторождений углеводородов (УВ), что позволяет отследить мельчайшие изменения в состоянии исследуемых пластов. Для использования данной технологии необходимы как комплекс технических средств для осуществления мониторинга, так и комплекс программных средств для обработки и интерпретации получаемых данных.

Для регистрации микросейсмических возмущений от глубинных источников, связанных с локальными деформациями в среде, используется многоканальная (одно или трехкомпонентная) сейсмическая антенна малой апертуры (около 500 метров). В качестве регистрирующих датчиков выступают электро-механические геофоны.

Дальнейшая обработка состоит в извлечении координат микровозмущений из зарегистрированных временных записей. Она сводится к решению задачи обнаружения локальных микровозмущений на временных записях с сопутствующим детектированием их времен приходов на соответствующие каналы пространственной антенны с последующим решением обратной задачи.

Анализ полученных событий. В данной статье не будем останавливаться на вопросах решения задачи обнаружения событий и определения их координат, а подробно рассмотрим постобработку получаемых микросейсмических событий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 16-29-15090 офи_м, 16-07-00684 А).

1 Анализ тензора сейсмического момента

Рассмотрим описание подхода для идеально упругой среды. Система уравнений Ламе описывает движение однородной идеально упругой среды:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma^0_{ij}(x,t)}{\partial x_j} \tag{1}$$

Здесь $i,j = 1,2,3$; $x, y \in R^3$; $t \in R^1$; ρ — плотность среды, σ_{ij} — тензор напряжения, связанный с вектором смещения $u(x,t) = (u_1, u_2, u_3)$ в виде

$$\sigma_{ij} = \mu(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}) + \lambda \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \tag{2}$$

где λ, μ — константы Ламе, повторение индексов означает суммирование, а $\sigma^0_{ij}(x,t)$ — тензор напряжения разлома, который имеет вид

$$\sigma^0_{ij}(x,t) = M_{ij}(t)\delta(x-y) \tag{3}$$

где $i,j = 1,2,3$; $x, y \in R^3$; $\delta(x)$ — обобщенная функция Дирака нулевого порядка, $M_{ij}(t)$ — симметричный тензор второго порядка. $M_{ij}(t)$ называется тензором сейсмического момента. Тензор $M_{ij}(t)$ имеет размерность единиц измерения энергии $g \cdot cm^2 \cdot s^2$. Размерность обобщенной функции $\delta(x)$ — cm^{-3}. Вектор y описывает координаты очага землетрясения.

В терминах эквивалентных сил, тензор сейсмического момента может описывать сдвиговый разрыв, сдвиговое разрушение среды, трансформационное изменение объема, трещину отрыва и т.д. [1, 2].

Расчет и анализ вышеуказанного тензора сейсмического момента позволяет дополнить информацию о геометрическом расположении микросейсмических событий такими важными параметрами как значения и направления главных осей напряжений в данной точке пласта, что дает возможность анализировать направление разлома (рис. 1).

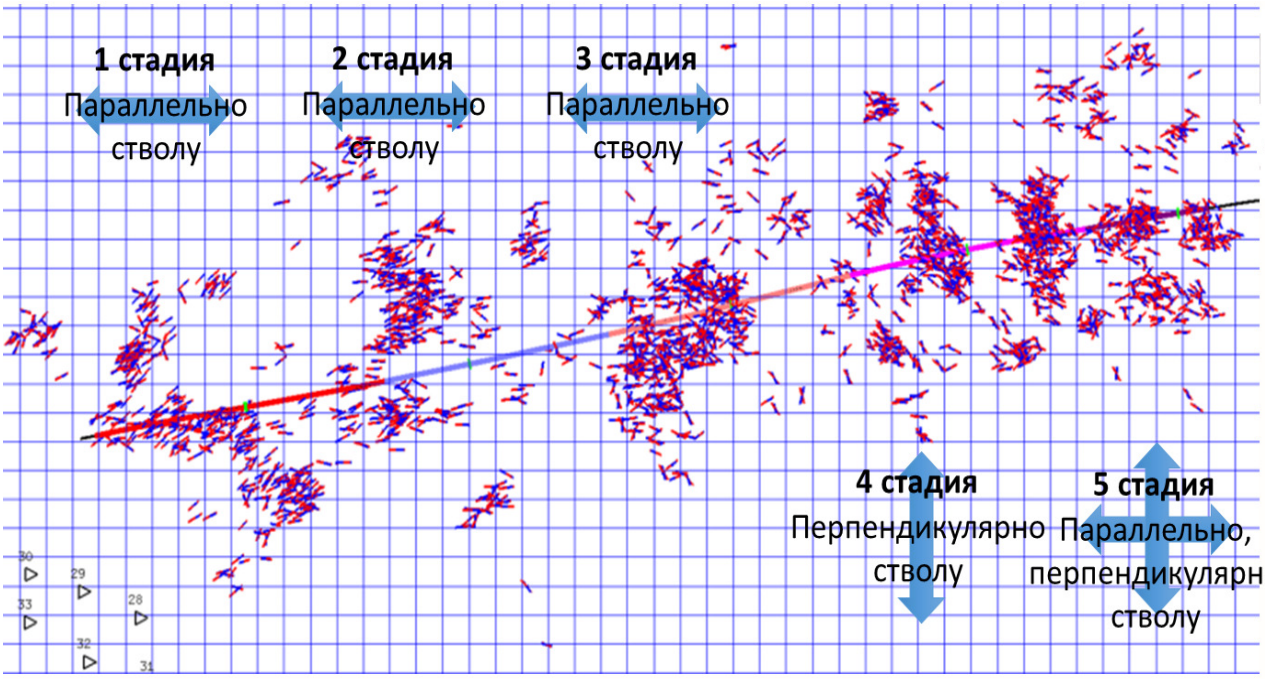


Рис. 1: Зарегистрированные микросейсмические события в процессе производства 5-стадийного гидроразрыва пласта (ГРП) с нанесенными осями главных напряжений. Шаг сетки равен 10 метрам

2 Изоповерхности как отображение зон энергетических сгущений

Одним из важных этапов анализа области локализации микросейсмических событий является построение изоповерхности параметров событий. Изоповерхность строится с применением широко известного алгоритма секущих кубов [3] (рис. 2) на основании интерполированного по пространству параметра (наиболее важной для анализа является изоповерхность плотности энергии событий — позволяет оценить наиболее деформационно-активную область пласта).

Функция построения изоповерхности глубоко параметризована для отображения различных характеристик облака микросейсмических событий. Так необходимо задать дискретность воксельного поля, радиус усреднения для сглаживания атрибутов, уровень отсечения (например, в процентном соотношении от значений атрибутов вокселов).

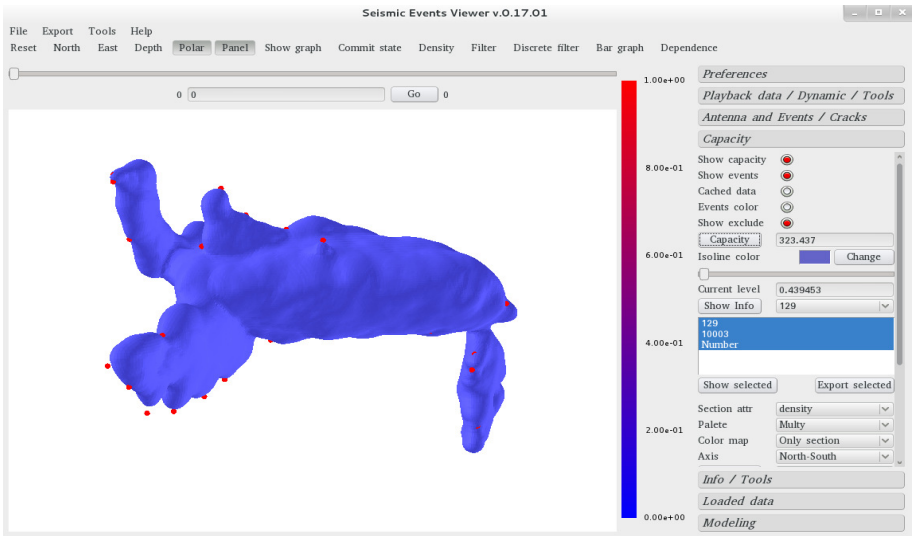


Рис. 2: Модель в виде изоповерхности в воксельном поле

3 Кластеризации как средство локализации образований в облаке микросейсмических событий

Одним из способов выделения отдельных образований или объектов в облаке микросейсмических событий является проведение кластеризации, при которой близкорасположенные в евклидовом пространстве события объединяются в один объект [5]. Однако при проведении процедуры кластеризации учитывается не только евклидово расстояние между событиями, но и направления сейсмических напряжений в этих точках пространства, что позволяет более полно учесть связь определенных событий.

Каждая пара компонент тензора сейсмического момента может быть охарактеризована их векторным произведением. Направление векторного произведения перпендикулярно плоскости, образуемой этими компонентами, а его модуль, соответствующий площади прямоугольника, построенного на двух векторах-компонентах, определяет совокупную мощность этих двух компонент. Плоскость с наибольшим по площади прямоугольником — наибольшая тензорная плоскость.

При кластеризации используется метрика двух типов. Первая учитывает угол между наибольшими тензорными плоскостями и линией соединяющей два события: большему углу соответствует большее расстояние. Вторая учитывает угол между нормалями к наибольшим тензорным плоскостям и линией соединяющей два события: большему углу соответствует большее расстояние.

На рис. 3 приведены результаты кластеризации микросейсмических событий для трех используемых метрик.

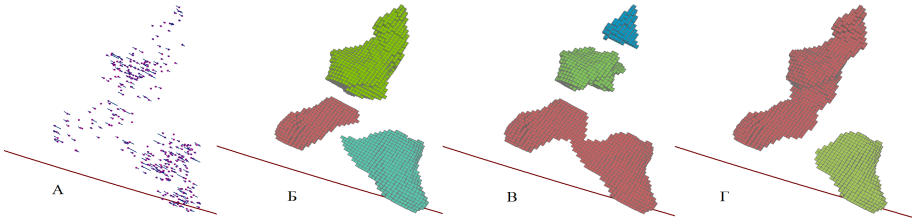


Рис. 3: А) облако микросейсмических событий, Б) кластеризация с учетом только эвклидовой метрики, В) кластеризация с учетом метрики, зависящей от угла между наибольшими тензорными плоскостями, Г) кластеризация с учетом метрики, зависящей от угла между нормалями к наибольшим тензорным плоскостям

4 Формирование граневых и тетраэдных моделей

Для построения граневой модели используется модифицированный алгоритм триангуляции Делоне [4] для трехмерного случая с одновременным удалением больших тетраэдров. Для построения описывающей области необходимо предварительно отфильтровать интересующие события, для которых она будет строиться, например, выделить определенный кластер микросейсмических событий или события с определённой плотностью (энергией и т.п.) и задать радиус вырезающей сферы. Пример применения триангуляции приведен на рис. 4

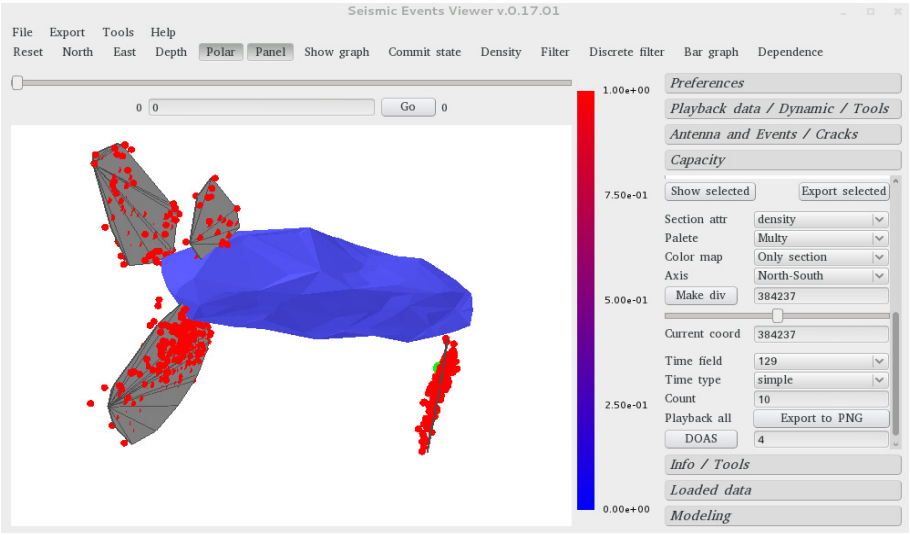


Рис. 4: Описывающая область событий, построенная методом модифицированной триангуляции Делоне

5 Формирование и анализ воксельных представлений

Это самый простой способ геометрически представить 3-мерное пространство в виде дискретной сетки, элемент которой, по аналогии с пикселем, называется «воксел». Иначе говоря, производится своеобразная пространственная растеризация трехмерной области. При разреженной структуре данных возникает проблема определения принадлежности телу области каждого отдельного вокселя.

Авторами предложена и реализована методика, позволяющая определять вхождение вокселей в «тело» объекта или «полость» и основывающаяся на регулярности сетки вокселей и тетраэдризации Делоне. Алгоритм тетраэдризации может быть реализован с использованием принципов растровой графики, описанных в алгоритме Брезенхейма.

Используемый алгоритм тетраэдризации имеет сложность $O(N^2 logN)$, где N – количество точек событий. Для сокращения количества вычислений предложено проводить расчеты не для всего облака событий,

а для отдельных кластеров. При этом, как правило, отдельному кластеру соответствует группа событий при пассивном мониторинге, так как данный вид мониторинга продолжителен по времени и регистрирует сотни тысяч наблюдаемых событий. При наблюдении за быстропроходящими событиями, такими как ГРП, количество регистрируемых событий, оставшихся после проведенной фильтрации, невелико, что позволяет рассматривать их как единое облако.

Для выделения областей трещиноватости на основе воксельного анализа предложен алгоритм выделения «толстых» и «тонких» областей тела кластера, на основе алгоритма повоксельного сканирования пространства тела трехмерной маской[6]. Сканирование проводится в 2 этапа: на первом этапе выделяются граничные воксели, а на 2 этапе выделяются тонкие воксели, т.е. воксели не имеющие в соседстве внутренних вокселей. На основе полученной воксельной модели производится сепарация исходных микросейсмических событий по принципу «толстых» и «тонких». «Тонкие» события могут аппроксимироваться плоскими образованиями. Для упрощения вычислений автоматического построения плоскостей микросейсмические «тонкие» события разбиваются на кластера. По каждому полученному «тонкому» кластеру выполняется автоматическое построение плоскостей. Сканирующий алгоритм разработан на основе анализа функционала на локальные минимумы. На рисунках 5,6 приведены примеры выполнения расчетов по данной методике.

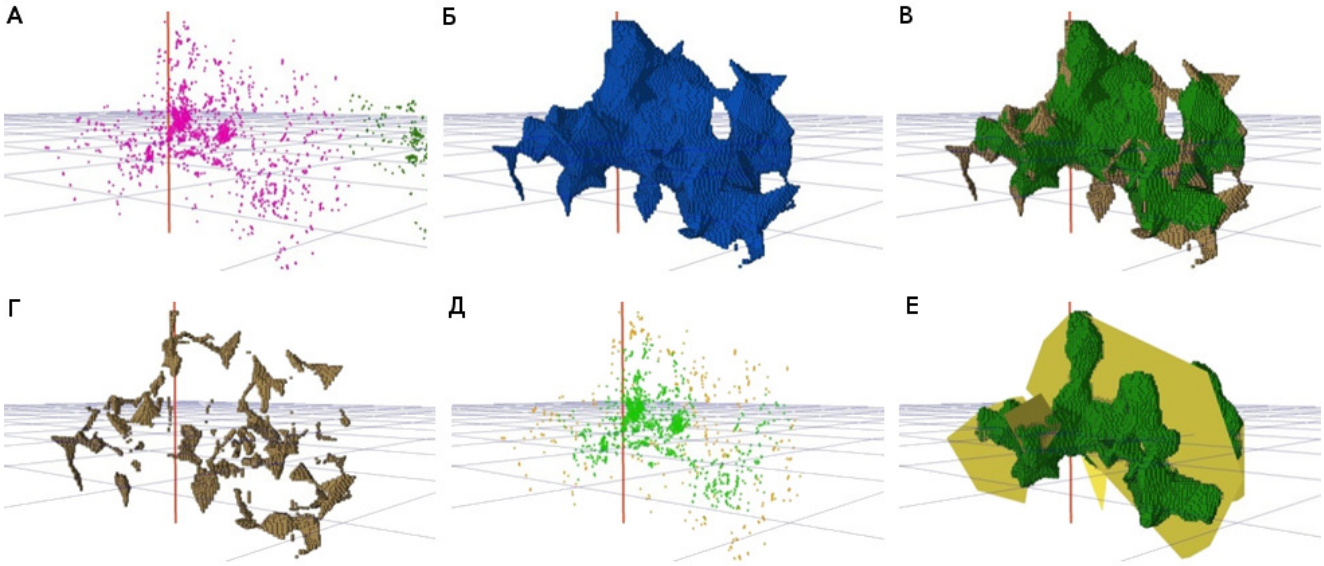


Рис. 5: Модель воксельного пространства: А) кластеризованное облако по эвклидовой метрике; Б) тело, распознанное в воксельном представлении; В) тело в воксельном пространстве с выделенными «толстыми» и «тонкими» вокселями. Построение плоскостей трещиноватости: Г) «тонкие» части тела; Д) исходные точки-события, подкрашенные в соответствии с принадлежностью к «толстым» или «тонким» вокселям; Е) линейная аппроксимация фрагментов распознанного тела

6 Комплекс программ

Для удобства получения и интерпретации результатов весь процесс обработки осуществляется с применением реализованной единой программной системы. В графическом пользовательском интерфейсе системы каждый из используемых алгоритмов представлен в виде элемента графа обработки. Такой графический пользовательский интерфейс позволяет интерактивно редактировать вычислительные процессы. Все счётные модули работают на удаленном кластере, а управление и 3D-визуализация осуществляются на персональных рабочих станциях.

Все удалённые счётные модули (вокселизации, фильтрации, кластеризации, корелляции и др.) распараллеливаются для оптимизации временных затрат. Основной применяемый подход — разбитие входных данных на независимые фрагменты, которые возможно обрабатывать одновременно на различных узлах кластера. При таком подходе выигрыш получается линейным и пропорциональным числу одновременно считаемых

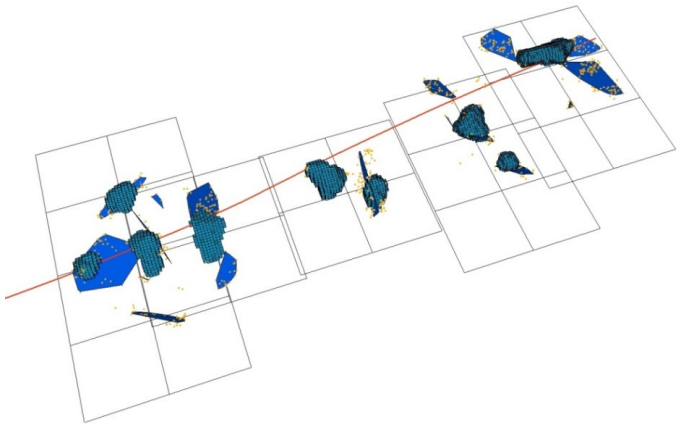


Рис. 6: Воксельная модель с выделением плоских образований при многостадийном ГРП

регионов или интервалов времен. Счётные модули имеют доступ к общему файловому хранилищу и управляющему графом обработки программному обеспечению по высокоскоростной сети InfiniBand, управление вычислительными ресурсами осуществляется с помощью Sun Greed Engine. На кластере установлено программное обеспечение для разработки и выполнения параллельных программ в составе компилятора и среды выполнения MPI от Intel, Mpich, открытых математических библиотек BLAS, nlopt, OpenCV и др.

Ввиду разнородности входных данных, различных приемов фильтрации и моделирования процессов граф обработки не является строго определенным в процессе решения. Система интерактивного управления в части пользовательского интерфейса позволяет добавлять, удалять, редактировать элементы графа обработки, соответствующие этапам обработки, запускает этапы обработки на выполнение и обеспечивает вывод информации о ходе этапа и результатах. Граф обработки, которым оперирует система управления, является ациклическим направленным графом, вершинами которого являются технологические (ввод начальных данные, конвертация и т.п.) и расчетные этапы. Ребрами графа обработки являются данные, являющиеся выходными для одного этапа и исходными для другого, сгруппированные по типам. Один из основных принципов системы — воспроизводимость всех проведенных экспериментов. Завершенный эксперимент является иммутабельным, его можно клонировать (перенесутся настройки) и запустить на счет, изменив состав входных данных, либо настройки. Каждый эксперимент визуально представляется как прямоугольный блок на графе процесса обработки. Работа пользователя с каждым этапом обработки осуществляется на соответствующей этому этапу группе элементов интерфейса, доступных в диалоговом окне, ассоциированном с этапом обработки. Возможные состояния этапов и переходы между ними приведены на рис. 7.

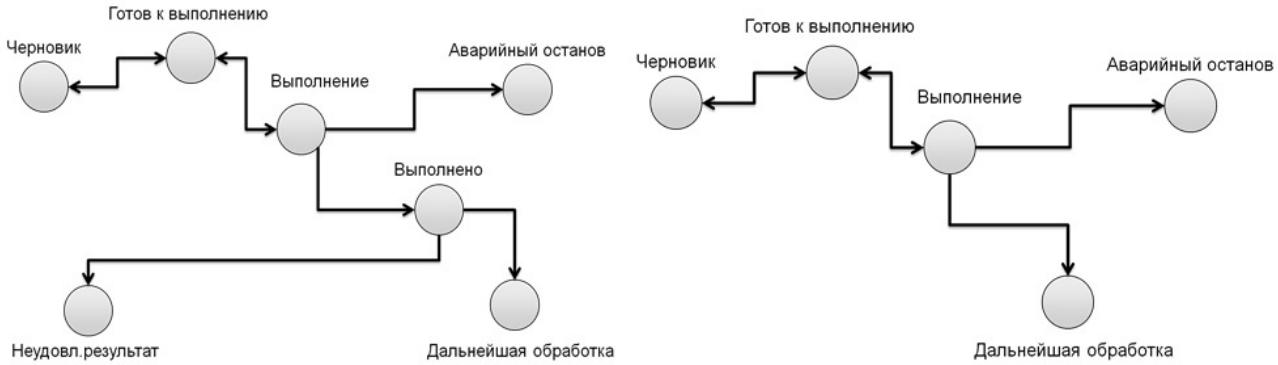


Рис. 7: Состояния этапа (слева — этап предполагает оценку оператором, справа — не предполагает)

Система интерактивного управления осуществляет управление рабочим потоком компьютерной обработки микросейсмических данных. Она включает в себя функционал пользовательского интерфейса, осуществляет создание и редактирование проектов, состоящих из множества этапов обработки. Система управления

работает в многопользовательском режиме, с одним графом обработки (проектом) работают несколько операторов, изоляция установлена на уровне отдельных этапов: редактировать их может только автор, клонировать и просматривать все остальные пользователи.

Основным модулем для визуализации и постобработки микросейсмических событий с помощью методов, представленных ранее, является модуль 3dEventViever. Он позволяет осуществлять фильтрацию событий, строить изоповерхности, отображать кластеры и т.п. (см. рисунки, приведенные ранее).

Заключение

Описанные в статье методы постобработки событий, а так же представленный подход к осуществлению вычислений позволяют существенно ускорить процесс получения конечного результата мониторинга и предоставляют наглядный инструментарий для интерпретации. Они позволяют оперативно отслеживать изменения характеристик активной области пласта, что важно при осуществлении постоянного микросейсмического мониторинга

Список литературы

[1] Aki K., Richards P. Quantitative Seismology Theory and Methods. 1980, vol. 1

[2] Новацкий В. Теория эластичности, 1975, Москва: Наука. 1975.

[3] William E. L., Harvey E. C. Marching cubes: a high resolution 3D surface construction algorithm // Computer Graphics. 1987. V. 21. Number 4. P. 163–169.

[4] Кластеризация точек на регулярной сети, http://habrahabr.ru/post/138185/

[5] Боровиков С.Н., Иванов И. Э., Крюков И. А. Построение тетраэдризации Делоне с ограничениями для тел с криволинейными границами // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2005. Том 45. № 8. С. 1407–1423.

[6] Алсынбаев К. С., Брыксин В. М., Гапеев Д. Н., Ерохин Г. Н., Козлов А. В., Козлов М. В., Шмаков Ф. Д. Построение модели трещиноватости в объеме разрабатываемого месторождения на основе данных микросейсмического мониторинга // 18-я научно-практическая конференция «Геомодель 2016» EAGE (European Association of Geoscientists & Engineers), г.Геленджик, Россия, 12-15 сентября 2016г. Тезисы докладов // ISBN: 978-94-6282-198-9, ISSN: 2214-4609, DOI: 10.3997/2214-4609.201602178. http://www.earthdoc.org/publication/publicationdetails/?publication=86749

Геннадий Николаевич Ерохин — д.ф.-м.н., директор НИИ прикладной информатики и математической геофизики Балтийского федерального университета имени И.Канта;
e-mail: GErokhin@kantiana.ru,
Камил Салихович Алсынбаев — к.т. н., зав. лаб. НИИ прикладной информатики и математической геофизики Балтийского федерального университета имени И.Канта;
e-mail: KAlsynbaev@kantiana.ru;
Виталий Михайлович Брыксин — к.т.н., вед. науч. сотр. НИИ прикладной информатики и математической геофизики Балтийского федерального университета имени И.Канта;
e-mail: Vbryksin@kantiana.ru;
Василий Викторович Савеленко — науч. сотр. НИИ прикладной информатики и математической геофизики Балтийского федерального университета имени И.Канта;
e-mail: VSavelenko@kantiana.ru;
Виталий Игоревич Строков — к.ф.-м.н., ст. науч. сотр. НИИ прикладной информатики и математической геофизики Балтийского федерального университета имени И.Канта;
e-mail: ViStrokov@kantiana.ru;
Антон Владимирович Козлов — зав. лаб. НИИ прикладной информатики и математической геофизики Балтийского федерального университета имени И.Канта;
e-mail: AnKozlov@kantiana.ru;
Максим Владимирович Козлов — мл. науч. сотр. НИИ прикладной информатики и математической геофизики Балтийского федерального университета имени И.Канта;
e-mail: MKozlov@kantiana.ru.

Дата поступления — 22 мая 2017 г.

ТЕХНОЛОГИЯ 3D МОДЕЛИРОВАНИЯ ГИДРОТОРМОЗНЫХ УСТРОЙСТВ ПУШЕЧНЫХ УСТАНОВОК

В. Р. Ефремов[2], А. С. Козелков[1], В. В. Курулин[1], Ю. Г. Нечепуренко[2], А. В. Саразов[1], А. С. Кривонос[1]

[1] *ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, Саров*

[2] *АО «КБП» им. А.Г. Шипунова, 300001, Тула*

УДК 517.968

Гидротормоз является главным конструктивным элементом противооткатного устройства — важнейшей составной части пушечных установок артиллерийских орудий. Доклад посвящен описанию разработанной технологии трехмерного моделирования физических процессов, протекающих в концентричных наствольных гидротормозных устройствах с профильной поверхностью гидроцилиндра и наличием в нем свободного объема рабочей полости. Технология основана на численном решении системы уравнений Навье-Стокса, которая дополняется уравнением переноса для отслеживания движения границы «рабочая жидкость-свободный объем» методом VOF

Ключевые слова: гидротормоз, метод подвижных деформирующихся сеток, метод VOF, противооткатные устройства, пушечные установки

Введение

Гидротормоз является главным конструктивным элементом противооткатного устройства — важнейшей составной части пушечных установок артиллерийских орудий [1]. Противооткатное устройство, предотвращающее разрушение пушечной установки путем погашения импульса от выстрела, может состоять из одного или нескольких гидротормозов, назначением которых является торможение наката и отката ствола с заданными законами сопротивления движению, обеспечивающими работу автоматики других механизмов. Определение тактико-технических характеристик процесса работы гидротормоза связано с определением параметров демпфирования силы действия поровых газов, на которое влияют процессы перетекания рабочей жидкости при откате через систему полостей. В настоящее время существуют возможности численного моделирования процессов работы гидротормоза, что позволяет существенно упростить и ускорить усовершенствование его конструкции, минуя стадию натурных экспериментов. Наиболее перспективным является трехмерное моделирование с учетом всех особенностей геометрии задачи.

Доклад посвящен описанию разработанной технологии трехмерного моделирования физических процессов, протекающих в концентричных наствольных гидротормозных устройствах с профильной поверхностью гидроцилиндра и наличием в нем свободного объема рабочей полости. Рассматриваемая конструкция гидротормоза совмещает откатник с накатником , что уменьшает массо-габатитные характеристики устройства. Технология основана на численном решении системы уравнений Навье-Стокса, которая дополняется уравнением переноса для отслеживания движения границы «рабочая жидкость-свободный объем» методом VOF (Volume of Fluid) [2, 3]. В качестве метода решения системы используется итеративный алгоритм PISO [2] совместно с решателем СЛАУ, основанном на алгебраическом многосеточном методе [4]. Для увеличения точности решения вблизи границы фаз используются схемы, сжимающие фронт раздела фаз — HRIC и MCICSAM [2]. Моделирование подвижных частей производится путем применения метода подвижных деформирующихся сеток [5], учет которых в исходных уравнениях осуществлен с использованием приближения

Работа выполнена при поддержке АО «КБП» им. Шипунова А.Г. (г. Тула) в рамках НИР «Моделирование концентричных наствольных гидротормозных устройств с профильной поверхностью гидроцилиндра и наличием в нем свободного объема рабочей полости», а также при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта №16-01-00267).

Лагранжа-Эйлера [5]. Разработанная технология позволяет моделировать полный цикл работы гидротормозного устройства: откат подвижных частей при выстреле и обратный накат при приведении пушечной установки в положение следующего выстрела.

В докладе представлено описание технологии. В качестве основной задачи рассматривается работа гидротормозного устройства в различных постановках. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными, полученными на стендах АО «КБП».

1 Описание задачи

Гидротормоз предназначен для поглощения энергии подвижных частей при откате и плавного торможения их при накате и исключения удара в крайних положениях. Гидротормоз расположен концентрично относительно ствола и конструктивно состоит из кожуха с профилированной внутренней поверхностью, кольцевого поршня, закрепленного непосредственно на наружной поверхности ствола и имеющего отверстия под направляющие стержни с многожильными пружинами накатника, равномерно распределенными вокруг ствола в полости гидротормоза, а также переднего и заднего сальников с кольцевыми резиновыми уплотнениями круглого сечения, обеспечивающих герметичность полости гидротормоза, заполненной рабочей жидкостью с заданными физико-химическими свойствами, далее жидкость (рис. 1).

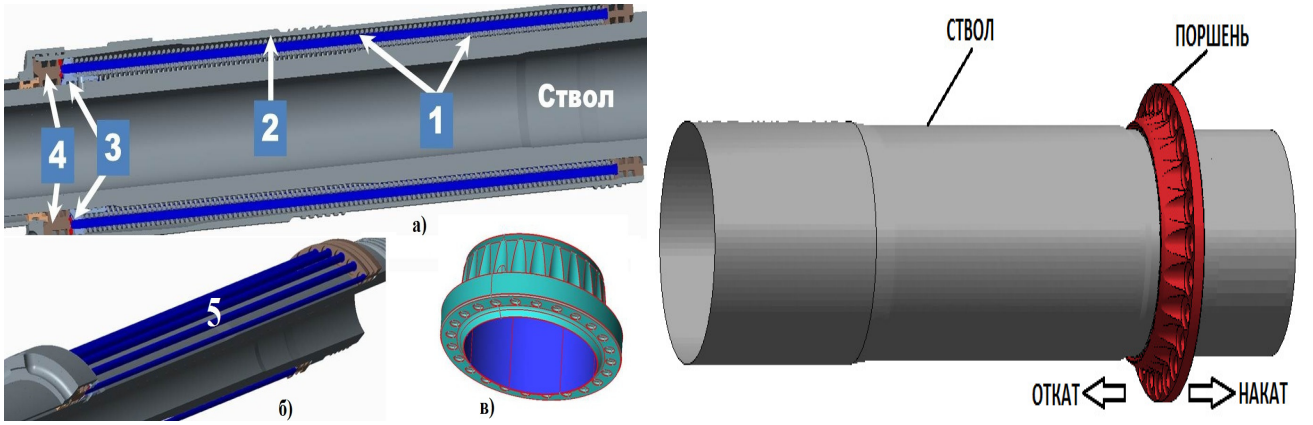


Рис. 1: Слева: Общая схема гидротормоза пушечной установки: а) — Общая схема (1 - цилиндр с рабочей жидкостью с направляющими и пружинами; 2 — кожух, 3 — поршень, 4 - сальники); б) — общая схема без кожуха (5 — направляющие); в) — поршень; справа — принципиальная схема работы

Последовательность этапов работы гидротормоза следующая. Гидротормоз начинает оказывать значительной силу сопротивления при откате подвижных частей после выбора свободного объема в откатной полости, при этом жидкость из откатной полости (полость между поршнем и задним сальником) ускоренно пробрызгивается через зазоры в накатную полость (полость между поршнем и передним сальником), вследствие чего происходит торможение подвижных частей до полной их остановки.

Накат подвижных частей происходит за счет энергии, запасенной при торможении пружинами накатника. В накате жидкость из накатной полости пробрызгивается через зазоры в откатную полость, обеспечивая требуемый закон торможения в накате. Как для отката, так и для наката площади перетекания в гидротормозе образованы зазорами между поршнем и профилем на кожухе,определяющими закон движения, а также между отверстиями в поршне и стержнями.

Численное моделирование работы гидротормоза связано с моделированием следующих физических процессов:

- турбулентное течение жидкости при наличии внезапных сужений, расширений и осесимметричных зазоров;
- течение многофазной смеси, с различными уравнениями состояния. Для жидкости целесообразно использовать приближение постоянства плотности, для воздуха — уравнение состояния идеального газа;
- течение с наличием подвижных твердых тел.

В рамках настоящей работы разработана математическая модель, включающая данные физические процессы.

2 Математическая модель и численная схема

Моделирование работы гидротормозного устройства связано с моделированием течения многофазной среды, состоящее из двух и более количества фаз. Каждая фаза может иметь своё отличное уравнение. Будем полагать, что в течении одного цикла работы гидротормоза течение изотермическое, и что поле скорости общее для всех фаз — так называемая односкоростная модель [6, 7]. С учетом данных допущений для описания движения среды можно записать систему уравнений в декартовой системе координат, состоящую из уравнения сохранения массы, уравнения сохранения импульса и уравнения переноса объёмной доли:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = \sum\limits_{\xi} \alpha_\xi \rho_\xi s_\xi, \\ \dfrac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\dfrac{\partial p}{\partial x_i} + \dfrac{\partial}{\partial x_j}\tau_{ij} + \rho g_i, \\ \dfrac{\partial \rho_\xi \alpha_\xi}{\partial t} + \dfrac{\partial}{\partial x_i}(u_i \rho_\xi \alpha_\xi) = s_\xi, \end{cases} \tag{1}$$

где t — время, $u_i = \{u_1, u_2, u_3\} = \{u, v, w\}$ — скорость, x_i — компонент пространственного вектора, s — объемный источник или сток, τ_{ij} — тензор вязких напряжений, g_i — вектор ускорения свободного падения, ξ — индекс, указывающий на принадлежность к отдельной фазе, α_ξ — объёмная доля ξ-й фазы, ρ — результирующая плотность, представляющая собой усреднённое значение плотности по всем фазам:

$$\rho = \sum_{\xi=1}^{N} \rho_\xi \alpha_\xi \tag{2}$$

где N — количество фаз.

Тензор вязких напряжений для сжимаемой ньютоновской жидкости выражается уравнением [18]:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \tag{3}$$

где $\mu = \sum\limits_{\xi=1}^{N} \mu_\xi \alpha_\xi$ — результирующая молекулярная динамическая вязкость, $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } i = j; \\ 0, & \text{если } i \neq j. \end{cases}$ — символ Кронекера.

Важной особенностью задачи является необходимость учета движения подвижных частей, которые в процессе моделирования перемещаются более чем на половину длины всего гидротормоза. Для учета движения был выбран метод деформации расчетной сетки без изменения ее топологии [5]. Для предотвращения излишней деформации расчетных ячеек узлы расчетной сетки, расположенные на неподвижных элементах (кожух, направляющие стержни) двигались сообразно перемещению поршня, сохраняя при этом свою геометрию. Деформация сетки осуществлялась методом IDW [5].

Учет движения сетки в системе уравнений (1) осуществлялся путем использования Лагранже-Эйлерового приближения [10]. Для этого вводилась скорость движения сетки $u_i^g(t, x, y, z)$ и относительная скорость жидкости $u_i^* = u_i - u_i^{grid}$. Выбранный способ учета движения сетки является оптимальным, поскольку не требует перестроения топологии сетки и в то же время является консервативным относительно основных величин.

Экспериментальные данные по работе гидротормоза позволяют оценить число Рейнольдса, которое в цилиндрическом зазоре при откате подвижных частей составляет $\mathrm{Re} = 10^5 - 10^6$. Для учета турбулентных составляющих течения при таком числе Рейнольдса целесообразнее всего является использование RANS подхода, основанного на решении системы (1) осредненной по Рейнольдсу [11]. Для замыкания осредненной системы уравнений используется модель турбулентности SST, которая хорошо зарекомендовала себя при решении практических задач [12]. Результирующая система уравнений решается путем численного интегрирования на конечно-объемной расчетной сетке. Для дискретизации уравнений используется оригинальный

полностью неявный метод решения уравнений Навье-Стокса для расчета многофазных течений со свободной поверхностью [3].

Для дискретизации уравнений по времени используется трехслойная схема второго порядка точности [13]. Дискретизация конвективных членов в уравнении движения, уравнении переноса турбулентных параметров осуществляется по противопоточной схеме LUD [13], в уравнении переноса объемной доли фаз — по схеме HRIC [6], позволяющей предотвращать излишнюю численную диффузию раздела фаз. Учет силы тяжести производился с использованием алгоритма, основанного на поправке объемных сил типа Рхи-Чоу.

Данная математическая модель и численная схема была реализована на базе пакета программ ЛОГОС [14, 15], позволяющей проводить эффективное распараллеливание и использовать многосеточные технологии для решения СЛАУ [16]. Итоговая реализация метода прошла верификацию на различных задачах турбулентный течений однородной и многофазной сред [3, 4, 14, 15, 17].

3 Численное моделирование работы гидротормоза

Описанная выше численная методика используется для моделирования работы гидротормоза. На первом этапе моделирования целесообразно рассмотреть однофазное приближение, в котором пренебрегается наличием воздуха в рабочем объеме гидротормоза. Данное допущение существенно упрощает численное моделирование, однако влияет на итоговый результат, поэтому представленные результаты можно рассматривать как первое приближение к решению задачи в полной постановке.

Рассматривается режим работы гидротормоза, в котором моделируется процесс наката подвижных частей, когда подвижные части вместе с поршнем (см. рис. 1 справа) под действием пружин, преодолевая гидродинамическую силу, действующую со стороны жидкости перемещаются из своего крайне левого положения в крайне правое.

Для данной задачи была построены последовательно сгущающиеся неструктурированные расчетные сетки. Параметры сеток приведены в таблице 1.

Таблица 1: Параметры расчетных сеток ($\delta_0 = 0.001$м базовый размер ячейки)

№	Базовый размер ячеек	Размер вблизи поршня	Кол-во ячеек, млн
G1	δ_0	$0.25 \cdot \delta_0$	**4.0**
G2	$0.75 \cdot \delta_0$	$0.17 \cdot \delta_0$	**8.5**
G3	$0.5 \cdot \delta_0$	$0.125 \cdot \delta_0$	**12.0**

Сетки имеют сгущение вблизи поршня, а также в зазорах между поршнем и кожухом, где происходит наиболее интенсивное движение жидкости. На рисунке 2 изображены фрагменты расчетной сетки G1.

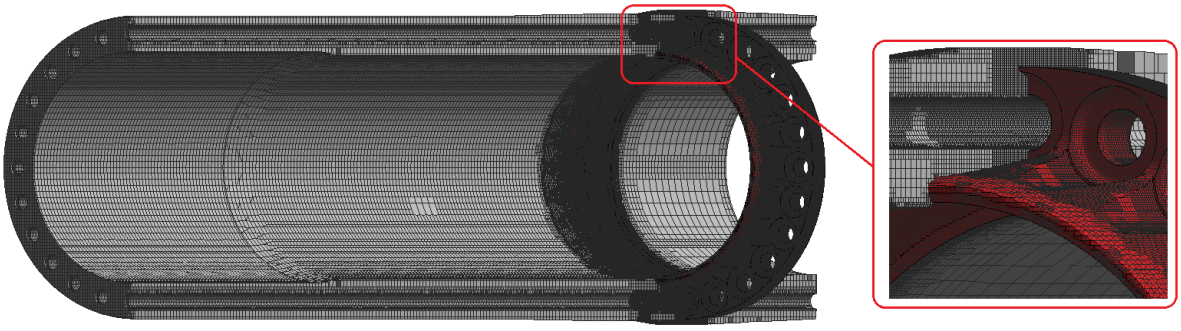


Рис. 2: Фрагменты расчетной сетки G1

При построении сетки положение поршня выбиралось посередине между его крайним левым положением, которое он занимает вначале наката и крайним правым, которое является конечным для наката. Это позволяет минимизировать деформацию сетки в процессе расчета, но требует предварительного этапа, в котором поршень без учета движения жидкости сдвигается на исходную позицию крайне левую позицию.

Проводилось решение задачи в нестационарной постановке, шаг по времени составлял $10^{-3}t_0$, где t_0 — полное время движения поршня в накате. Силы, действующие на поршень, скорость его движения, а также

его положение вычислялось в конце каждого шага по времени, после установления решения уравнений Навье-Стокса.

В процессе расчета поршень вместе с подвижными частями ускоряется под действием пружин и набирает максимальную скорость V_0. Далее поршень попадает в профилированный участок кожуха, уменьшающий зазор, вследствие чего возрастает гидродинамическое сопротивление жидкости, которое, в конечном счете, приводит к остановке поршня и всех подвижных частей. На рисунке 3 показано поле амплитуды скорости в различные моменты времени.

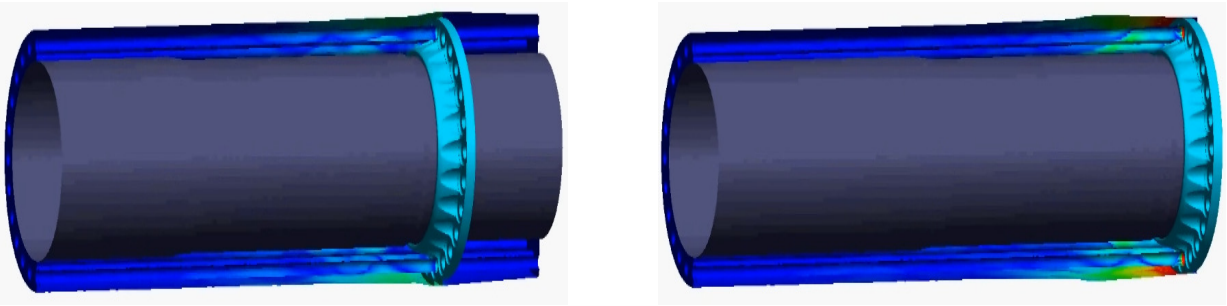


Рис. 3: Поле амплитуды скорости, $t = 0.6 \cdot t_0$ (слева), $t = 0.9 \cdot t_0$ (справа)

По распределению поля амплитуды скорости видно, как в конечный момент времени амплитуда скорости в зазоре между поршнем и кожухом достигает своих максимальных значений. На рисунке 4 изображен график скорости поршня, в зависимости от перемещения в сравнении с экспериментальными данными. График представлен в безразмерном виде.

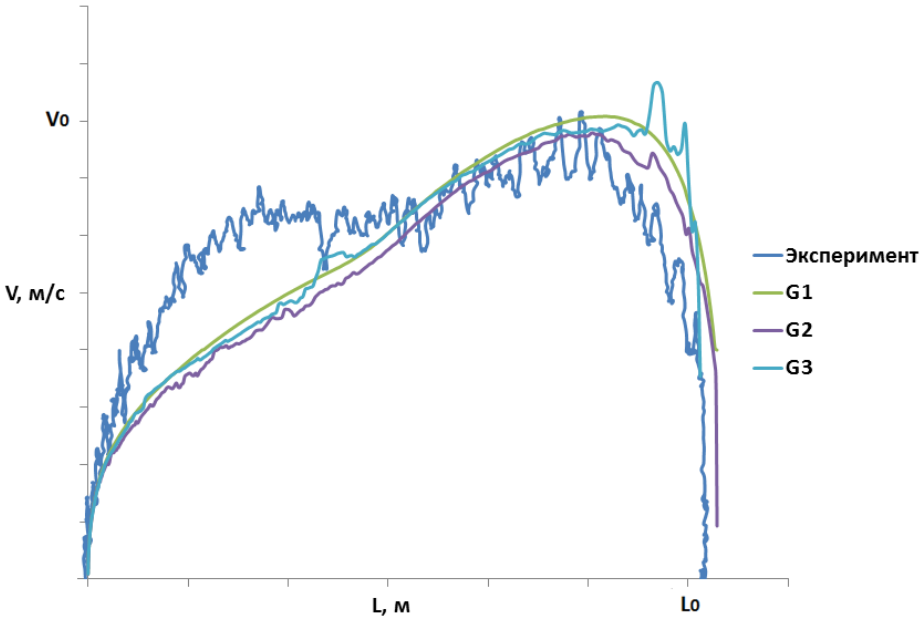


Рис. 4: График скорости поршня в зависимости от его положения

По графику видно, что результаты, полученные на сетках G1–G3, близки друг к другу, среднее отклонение не превышает 5 %. Это указывает на достаточность используемого сеточного разрешения. Сравнение кривых показывает, что в первой половине графика наблюдается некоторое различие между расчетными и экспериментальными данными. Это связано с отсутствием в расчете воздушной среды, которая присутствует в эксперименте. В расчете, гидротормоз, полностью заполненный жидкостью, завышает силу, действующую на поршень со стороны жидкости, что приводит к менее интенсивному разгону поршня в начальный момент. Вторая половина графика соответствует этапу, когда в эксперименте в накатной полости остается минимальное количество воздуха и по всей площади зазора кожух-поршень течет жидкость. И здесь

наблюдается лучшее согласие расчетных и экспериментальных данных. Также нужно отметить хорошее совпадение кривых до момента времени $0.05 \cdot t_0$, что соответствует этапу, когда поршень начинает разгон и еще не испытывает серьезного сопротивления со стороны жидкости - это указывает на верное моделирование кинематики поршня. В целом, расчет показывает верную качественную картину движения поршня и течения жидкости. Учет наличия свободного газового объема внутри гидротормоза позволит увеличить точность расчета в первой половине рассматриваемого режима.

Список литературы

[1] Жуков И.И., Башкатов В.А., и др., Артиллерийское вооружение. Основы устройства и конструирование // М.: Машиностроение, 1975, 420 с.

[2] Ubbink O. Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces // PhD thesis, Imperial College, University of London, 1997.

[3] Козелков А.С., Мелешкина Д.П., Куркин А.А., Тарасова Н.В., Лашкин С.В., Курулин В.В. Полностью неявный метод решения уравнений Навье-Стокса для расчета многофазных течений со свободной поверхностью // Вычислительные технологии, 2016, Том 21, № 5, с. 54–76.

[4] Волков К.Н., Дерюгин Ю.Н., Емельянов В.Н., Козелков А.С., Тетерина И.В. Алгебраический многосеточный метод в задачах вычислительной физики // Вычислительные методы и программирование, 2014, т. 15, стр. 183–200.

[5] Benek J. A., Donegan T. L., Suhs N. E., Extended Chimera Grid Embedding Scheme With Application to Viscous Flow // AIAA Paper. 1987. № 87–1126.

[6] Ubbink O. Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces. PhD thesis, Imperial College, University of London, 1997.

[7] Rusche H. Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions. PhD thesis, Imperial College, University of London, 2002.

[8] Khrabry A. I., Smirnov E. M., Zaytsev D. K. Solving the convective transport equation with several high-resolution finite volume schemes. Test computations // Proc. 6th Int. Conf. on Computational Fluid Dynamics (ICCFD-6), July 12-16, 2010, St. Petersburg, Russia. Ed. A. Kuzmin. — Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011, PP. 535–540.

[9] Яцевич С.В., Курулин В.В., Рубцова Д.П. О применении алгоритма PISO в задачах динамики молекулярно-несмешивающихся жидкостей // ВАНТ, сер. математическое моделирование физических процессов. 2015.№ 1. стр. 16–29.

[10] Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1950.

[11] Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей в двух томах. М:Мир, 1991.

[12] Menter F.R., Kuntz M., Langtry R. Ten Years of Experience with the SST Turbulent Model. Turbulence, Heat and Mass Transfer 4. Ed. by K. Hanjalic, Y. Nagano, M. Tummers. Begell House Inc,. 2003.

[13] Jasak H. Error Analysis and Estimation for the finite volume method with applications to fluid flows. Thesis submitted for the degree of doctor // Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science, 1996.

[14] Козелков А. С., Курулин В. В., Лашкин С. В., Шагалиев Р. М., Ялозо А. В. Исследование потенциала суперкомпьютеров для масштабируемого численного моделирования задач гидродинамики в индустриальных приложениях // Журнал вычислительной математики и математической физики, 2016, том 56, № 8, с. 1524–1535

[15] Сафронов А.В., Дерюгин Ю.Н., Жучков Р.Н., Зеленский Д.К., Саразов А.В., Козелков А.С., Кудимов Н.Ф., Липницкий Ю.М., Панасенко А.В. Результаты валидации многофункционального пакета программ ЛОГОС при решении задач аэрогазодинамики старта и полета ракет-носителей // Математическое моделирование, 2014, т. 26, № 9, с. 83–95.

[16] Козелков А.С., Дерюгин Ю.Н., Лашкин С.В., Силаев Д.П., Симонов П.Г. Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС // ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов, 2013, выпуск 4.

[17] Козелков А.С. Методика численного моделирования цунами оползневого типа на основе уравнений Навье-Стокса // Вычислительная механика сплошных сред, 2016, том 9, № 2, стр. 218–236.

[18] Ландау Л.Д., Лифшиц В.М. Гидродинамика. - М.: Наука, 1988.

Ефремов Валентин Робертович — советник управляющего директора АО «КБП» им. А.Г. Шипунова,
e-mail: valentin_ e@mail.ru;
Козелков Андрей Сергеевич — д.ф.-м.н., заместитель начальника отдела, начальник научно-исследовательской лаборатории Института теоретической и математической физики ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ»;
старший научный сотрудник кафедры «Прикладная Математика» Нижегородского Государственного Технического Университета им. Р.А. Алексеева;
e-mail: askozelkov@mail.ru;
Курулин Вадим Викторович — к.ф.-м.н., научный сотрудник Института теоретической и математической физики ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ»;
e-mail: kurulin@mail.ru;
Нечепуренко Юрий Григорьевич — д.т.н., технический руководитель по комплексам активной защиты и пушечным вооружениям АО «КБП» им. А.Г. Шипунова,
e-mail: nechepur@gmail.com;
Саразов Алексей Владимирович — старший научный сотрудник Института теоретической и математической физики ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ»;
e-mail: alex_ sar@bk.ru;
Кривонос Алексей Станиславович — старший научный сотрудник Института теоретической и математической физики ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ»;
e-mail: askrivonos1@rambler.ru.

Дата поступления — 25 мая 2017 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКЕ ВРАЩАЮЩИМСЯ ПЛАСТИНЧАТЫМ ЭЛЕКТРОДОМ-ИНСТРУМЕНТОМ

В. П. Житников[1], Р.Р. Муксимова[2], А. А. Соколова[1]

[1] *Уфимский государственный авиационный технический университет, 450008, Уфа,*
[2] *Санкт-Петербургский государственный университет гражданской авиации, 196210, Санкт-Петербург*

УДК 544.641; 001.891.573

Проведено математическое моделирование электрохимической обработки вращающимся пластинчатым электродом-инструментом. Электрическое поле считалось потенциальным и соленоидальным. Для численного исследования применялся метод граничных элементов. Рассмотрена задача прорезания пазов. Исследованы особенности формообразования границ паза.

Ключевые слова: электрохимическое формообразование, прорезание пазов, уравнение Лапласа.

Введение

Для операций контурной вырезки деталей сложной формы часто используется электрохимическая обработка (ЭХО). В этом случае обычно используется электрод-инструмент (ЭИ) круглого сечения [1], [2], [3]. При этом во избежание загрязнения электролита его прокачивают вдоль ЭИ. Однако во фронтальной области межэлектродного пространства (МЭП) поверхность круглого ЭИ находится слишком близко от обрабатываемой поверхности (ОП), что замедляет движение электролита и затрудняет его обмен. Для улучшения условий обмена возможно использовать вращающийся пластинчатый ЭИ. В этом случае вращение ЭИ будет создавать условия для постоянного перемешивания электролита и его эвакуации из тыльной части МЭП.

1 Постановка задачи

Рассмотрим нестационарную задачу ЭХО с помощью пластинчатого ЭИ конечной толщины. Форма межэлектродного пространства показана на рис. 1. Центр ЭИ движется внутри заготовки со скоростью V_C вниз вдоль оси ординат. Одновременно ЭИ вращается относительно своего центра с угловой скоростью ω. Начальное отверстие в заготовке имеет некоторую форму (обычно, круглую), разность потенциалов между электродами равна U.

Процесс электрохимического растворения материала анода определяется законами Фарадея и Ома [4]

$$V_{ecm} = kE, \quad E = j/\kappa, \quad k = \kappa\eta\varepsilon/\rho, \tag{1}$$

где V_{ecm} — скорость электрохимического растворения (сдвига границы); E, j — напряженность и плотность тока на границе анода; κ — электропроводность электролита; η — выход по току; ε — электрохимический эквивалент; ρ — плотность растворяемого материала.

Электрическое поле считается потенциальным и соленоидальным, поэтому потенциал $\Phi(X, Y)$ удовлетворяет уравнению Лапласа $\Delta\Phi = 0$.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-07-00356).

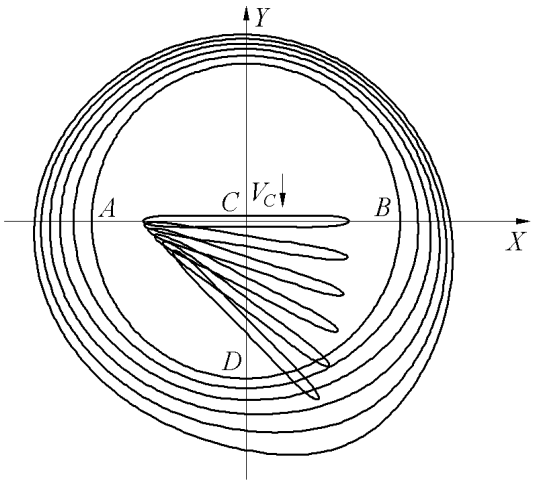


Рис. 1: Схема МЭП: ADB — обрабатываемая поверхность (анод); C — ЭИ (катод)

На границах, соответствующих электродам, значения потенциала на аноде и катоде равны

$$\Phi_a = 0, \quad \Phi_c = -U. \tag{2}$$

Перейдем к безразмерным величинам. Безразмерные величины x, y, τ и φ определяются следующим образом

$$x = \frac{X}{l}, \quad y = \frac{Y}{l}, \quad \tau = \frac{V_C}{l}t = \frac{kU}{l^2}t, \quad \varphi = \frac{\Phi}{U}, \tag{3}$$

где $l = kU/V_C$ — величина стационарного зазора в задаче об обработке плоским горизонтальным ЭИ.

Центр ЭИ движется, как показано на рис. 1 со скоростью V_C. При этом

$$v_C = -\frac{dy_C}{d\tau} = -\frac{1}{V_C}\frac{dY_C}{dt} = 1. \tag{4}$$

Граница детали также подвижна, нормальная скорость ее движения определяется уравнением (1). Представим (1) в безразмерном виде

$$\frac{dx_a}{d\tau} = \frac{\partial\varphi}{\partial n}\cos n, \quad \frac{dy_a}{d\tau} = \frac{\partial\varphi}{\partial n}\sin n. \tag{5}$$

Здесь $x_a(\tau)$, $y_a(\tau)$ — координаты точек на ОП; n — единичный вектор внешней нормали к ОП.

Перемещение точек поверхности ЭИ в процессе обработки можно определить следующим образом:

$$x_c(\tau) = Re\left[\left(x_c^0 + iy_c^0\right)e^{i\alpha(\tau)}\right], \quad y_c(\tau) = -\tau + Im\left[\left(x_c^0 + iy_c^0\right)e^{i\alpha(\tau)}\right], \tag{6}$$

где x_c^0, y_c^0 — координаты точек на исходной поверхности ЭИ (при $\tau = 0$); $\alpha(\tau) = -\omega\tau$ — угол поворота ЭИ вокруг своей оси относительно начального положения (на рис. 1 α изменяется от 0 до $-\pi/2$).

При численном решении безразмерное время дискретизируется, т. е. разбивается на некоторое количество шагов, на каждом шаге решается краевая задача для уравнения Лапласа

$$\Delta\varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} = 0 \quad \text{с условиями} \quad \varphi_a = 0, \quad \varphi_c = -1. \tag{7}$$

При этом определяются нормальные производные $\partial\varphi/\partial n$. Далее, согласно (5) и (6), производится шаг по времени (например, по методу Эйлера). Далее процесс повторяется.

2 Метод граничных элементов

Решение краевой задачи для уравнения Лапласа с граничными условиями первого рода (7) на основе интеграла Грина сводится к граничному интегральному уравнению [1]

$$\frac{1}{2}\varphi(\varsigma) = \frac{1}{2\pi}\oint\limits_{\Gamma} \frac{1}{r(\varsigma,\xi)}\frac{\partial r}{\partial n}\varphi(\xi)d\Gamma + \frac{1}{2\pi}\oint\limits_{\Gamma} \ln\frac{1}{r(\varsigma,\xi)}\frac{\partial\varphi(\xi)}{\partial n}d\Gamma, \quad \forall\varsigma\in\Gamma, \tag{8}$$

где ς — точка наблюдения, ξ — точка расположения источника; $r(\varsigma,\xi)$ — расстояние между точкой наблюдения и источником; Γ — граница области, проходимая так, что область находится слева.

Для решения интегрального уравнения (8) будем использовать метод граничных элементов. Для упрощения расчетов, следуя [1], будем использовать постоянные граничные элементы, в которых напряженность электрического поля имеет постоянные значения. При этом граница Γ разбивается на n прямолинейных элементов.

3 Результаты исследований

На рис. 2 и 3 приведены формы границ для различных значений круговой частоты ω вращения ЭИ для $\tau = 0, 2, 4, \ldots, 20$. Видно, что для малых частот левая боковая граница паза приобретает существенную волнообразность формы, причем максимальная амплитуда волн наблюдается при $\omega \approx \pi/8$. При $\omega \geq \pi/2$ волнообразность практически исчезает.

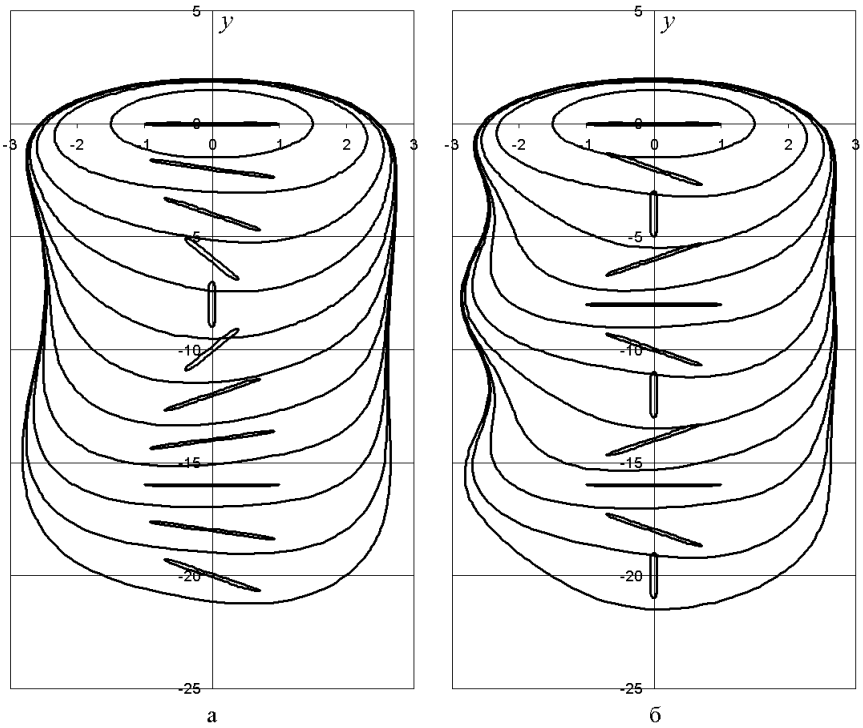


Рис. 2: Формы обрабатываемой поверхности: а — $\omega = \pi/16$; б — $\omega = \pi/8$

Явление образования волнообразной формы боковой части ОП можно объяснить следующим образом. При прохождении левой части зоны обработки кромка ЭИ движется вверх, поскольку ЭИ вращается по часовой стрелке, но центр ЭИ движется вниз. Тем самым, скорость движения кромки ЭИ относительно ОП уменьшается, и количество растворенного материала в левой части ОП увеличивается. При углах наклона ЭИ к оси x, близких к πn ($n = 1, 2, \ldots$), можно определить мгновенный центр вращения ЭИ C_t (рис. 4).

Расстояние L от C_t до центра ЭИ C_{et} определяется из уравнения

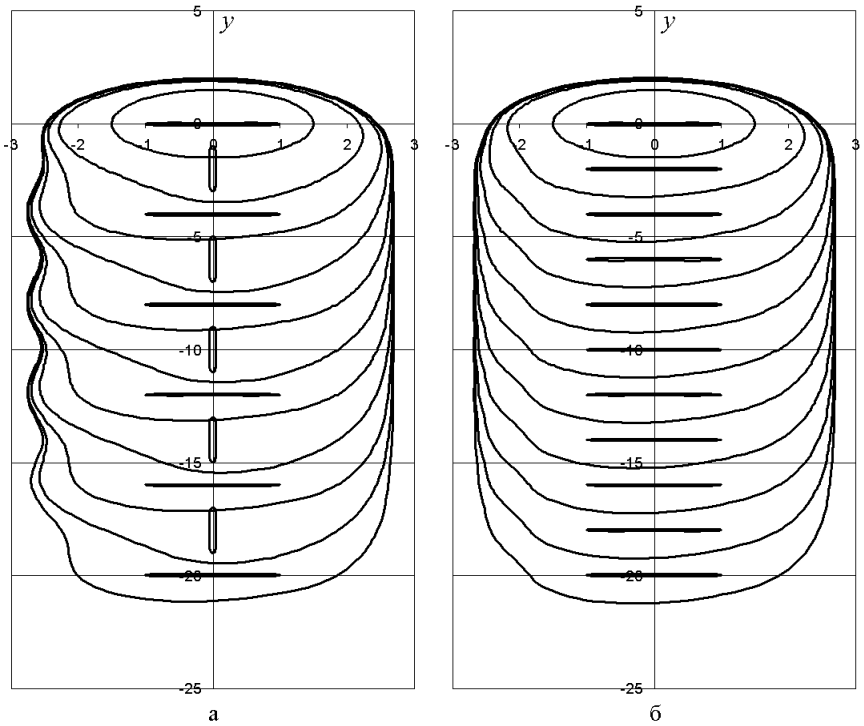


Рис. 3: Формы обрабатываемой поверхности: а — $\omega = \pi/4$; б — $\omega = \pi/2$

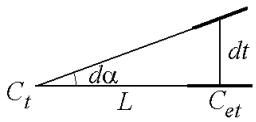


Рис. 4: К определению положения центра вращения ЭИ

$$-tg\,(d\alpha) \approx -d\alpha = \frac{dt}{L}.$$

Отсюда при $d\alpha = -\omega dt$ найдем $L = 1/\omega$.

Существует значение ω, при котором центр вращения находится на левой границе ОП. При $\omega = \pi/8$ величина L равна 2.55, что, судя по рис. 3,б, приблизительно соответствует полуширине невозмущенного паза. Это же значение приближенно соответствует максимальной амплитуде волны, что подтверждается вычислительным экспериментом (рис. 2, 3). При увеличении ω время прохождения центра вращения пропорционально уменьшается, но уменьшается и период волны на ОП, что компенсирует и то, и другое. Поэтому наблюдаемый факт образования волнообразной формы левой границы максимальной амплитуды можно объяснить наиболее сильным “замиранием” кромки ЭИ вблизи левой части ОП при расположении мгновенного центра вращения ЭИ на границе ОП.

Заключение

С помощью вычислительного эксперимента было исследовано формообразование границ паза при различных значениях угловой скорости ω вращения ЭИ. Эксперимент показал, что левая граница прорезаемого паза при малых частотах вращения по часовой стрелке приобретает волнообразную форму. При некотором значении ω амплитуда волн имеет максимальное значение. Это было объяснено совпадением мгновенного центра вращения ЭИ, совершающего вращательное движение с одновременным поступательным движением его

центра, с некоторой точкой на ОП. Это способствует наиболее длительному нахождению кромки ЭИ вблизи ОП и увеличению количества растворяемого материала в локальной зоне вблизи кромки.

Список литературы

[1] Волгин В. М., До Ван Донг, Давыдов А. Д. Моделирование электрохимической обработки проволочным электродом-инструментом // Изв. ТулГУ. Технические науки. 2013. V. 11. С. 122–136.

[2] Volgin V. M., Do V. D., Davydov A. D. Modeling of wire electrochemical machining. // Chem. Eng. Trans. 2014. V. 41, pp. 91–96.

[3] Житников В.П., Муксимова Р.Р., Зарипов А.А. Моделирование прецизионной нестационарной электрохимической обработки круглым и пластинчатым электрод-инструментом // Вестник УГАТУ. 2015. V. 19, iss. 1 (67). С. 92–99.

[4] Клоков В. В. Электрохимическое формообразование. Казань: Изд-во Казан. ун-та. 1984.

Владимир Павлович Житников — д.ф.-м.н., проф. Уфимского государственного авиационного технического университета;
e-mail: zhitnik@mail.ru;
Роза Равилевна Муксимова — к.т.н., доцент Санкт-Петербургского государственного университета гражданской авиации;
e-mail: rose.r.mux@gmail.com;
Александра Алексеевна Соколова — аспирант Уфимского государственного авиационного технического университета;
e-mail: alexandrakrasich@gmail.com.
Дата поступления — 19 мая 2017 г.

УНИФИКАЦИЯ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОГО ПРОГРАММНО-АППАРАТНОГО КОМПЛЕКСА ТЕСТИРОВАНИЯ ПРОГРАММ УПРАВЛЕНИЯ НА ПРИМЕРЕ ЗАДАЧИ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ПРИКЛАДНОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ АСУ ТП ШАХТНЫМ КОНВЕЙЕРНЫМ ТРАНСПОРТОМ

С. С. Журавлев, В. В. Окольнишников, С. В. Рудометов, С. Р. Шакиров

Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.686

В работе приведено описание специализированного программно-аппаратного комплекса тестирования программ управления прикладного программного обеспечения АСУ ТП конвейерного транспорта шахт и рудников. Дано описание способа унификации рассмотренного комплекса.

Ключевые слова: прикладное программное обеспечение, автоматизированная система управления технологическим процессом, отладочный комплекс.

Введение

Ошибки в прикладном программном обеспечении автоматизированных систем управления технологическими процессами (далее АСУ ТП) могут стать причиной возникновения аварийных ситуаций или сбоев в режиме работы технологического оборудования. Отладка и корректировка прикладного программного обеспечения на объекте замедляет процесс внедрения АСУ ТП и является причиной появления экономических потерь. Выполнение комплексного тестирования прикладного программного обеспечения АСУ ТП на предприятии изготовителе является важной и актуальной задачей. Эту задачу возможно решить с помощью создания специализированного программно-аппаратного комплекса, содержащего в своей структуре проблемно-ориентированные математические модели автоматизируемых технологических процессов, обеспечивающих согласованную генерацию сигналов датчиков и управляющих сигналов.

Средства тестирования прикладного программного обеспечения АСУ ТП подразделяются на физические имитаторы, имитаторы программных сигналов, специализированные комплексы. К работам, посвященным созданию специализированных комплексов, можно отнести: WinMOD [1], xPC Target [2], имитационная модель гидроагрегата для АСУ ТП [3], тренажерно-управляющий программно-технический комплекс для объектов химической технологии [4], стенд для отладки программного обеспечения бортовой авиационной аппаратуры [5] и др. В том числе, к специализированным комплексам относится разработка ИВТ СО РАН — Программно-аппаратный комплекс для тестирования программ управления АСУ ТП шахт и рудников [6]. Данный комплекс применяется в институте при отладке прикладного программного обеспечения систем шахтной автоматики. По результатам эксплуатации были выявлены недостатки комплекса связанные с его узкой специализацией — не гибкая архитектура, необходимость разработки дополнительных программных модулей для подключения к комплексу оборудования и программного обеспечения с интерфейсами, поддержка которых не реализована в нем, не стандартизированное отображение информации.

Решение этой задачи возможно посредством создания усовершенствованной структуры специализированного программно-аппаратного комплекса и разработки алгоритмов работы модуля контроля и управления комплексом, позволяющих выполнить его унификацию на уровне подключаемых программных и аппаратных модулей. Унификация заключается в применении масштабируемой архитектуры, использовании

стандартизированного представления графической информации о моделируемом технологическом процессе, унификации электрических параметров входов и выходов.

1 Специализированный программно-аппаратный комплекс тестирования программ управления прикладного программного обеспечения АСУ ТП

В ИВТ СО РАН создан специализированный программно-аппаратный комплекс [6, 7]. Комплекс имеет двухуровневую структуру, содержащую программный и аппаратный уровни. Программный уровень содержит: SCADA (аббр. от англ. Supervisory Control And Data Acquisition — диспетчерское управление и сбор данных) систему соответствующей АСУ ТП, среду моделирования MTSS [8], менеджер связи, модели модулей ввода/вывода АСУ ТП, модели технологических процессов, модели технологического оборудования, алгоритмы АСУ ТП верхнего и нижнего уровней.

Для моделирования технологических процессов шахт и рудников в MTSS разработана специализированная библиотека технологического оборудования шахт и рудников. В состав библиотеки входят модели технологического оборудования: забой, бункер, конвейер, трансформаторная подстанция, линия электропередач и др. С использованием созданной библиотеки разработана имитационная модель конвейерной системы одной из угольных шахт Кузбасса, обеспечивающая согласованную генерацию сигналов оборудования соответствующего технологического процесса.

Аппаратный уровень комплекса содержит: рабочую станцию оператора модели, рабочую станцию оператора SCADA, среду передачи данных, блок формирования физических сигналов и оборудование АСУ ТП. Блок формирования физических сигналов формирует на основе полученных информационных сигналов соответствующие физические аналоговые или дискретные сигналы. На рисунке 1 изображен разработанный специализированный программно-аппаратный комплекс. Функционирование комплекса возможно в следующих режимах: генерация сигналов датчиков технологического оборудования, генерация управляющих сигналов для оборудования соответствующей АСУ ТП, генерация технологической информации для SCADA системы АСУ ТП.



Рис. 1: Специализированный программно-аппаратный комплекс тестирования программ управления прикладного программного обеспечения АСУ ТП

2 Унификация специализированного программно-аппаратного комплекса тестирования программ управления прикладного программного обеспечения АСУ ТП

Унифицированный программно-аппаратный комплекс для тестирования прикладного программного обеспечения АСУ ТП представляет собой комплекс взаимосвязанных программно-технических средств, включающих имитационную модель соответствующего технологического процесса. Имитационная модель учитывает особенности предметной области, а именно — использование параметров технологического оборудования, проектных данных о конфигурации технологического оборудования, параметры реальных технологических процессов.

Расширяемая архитектура комплекса основана на использовании подхода «In-the-loop» [9, 10] и применении технологии OPC [11]. Комплекс позволяет обеспечить поддержку жизненного цикла разработки прикладного программного обеспечения при создании АСУ ТП без необходимости изменения конфигурации проекта или структуры комплекса на разных стадиях разработки. Стандартизированное отображение информации обеспечивается посредством реализации возможности подключения SCADA систем с помощью технологии OPC (например, TraceMode). Унификация комплекса на уровне подключения тестируемого оборудования АСУ ТП осуществляется путем подбора оптимальных параметров модулей ввода и вывода, входящих в состав блока формирования физических сигналов.

Наиболее часто используемым технологическим оборудованием для транспортировки угля в шахте является ленточный конвейер. Для контроля функционирования ленточных конвейеров применяются следующие датчики: кабель-тросовый выключатель (датчик экстренной остановки), датчик схода ленты, датчик заштыбовки (переполнение места пересыпа), датчик скорости (контроль скорости ленты и барабанов), датчик контроля натяжения ленты, датчик контроля ограждений, датчик давления пороговый, реле положения коммутационного аппарата, датчики положения тормозов, реле включения тормозов, реле источника питания и др. [12, 13, 14, 15]. На основе обзора датчиков и систем управления конвейерным транспортом шахт и рудников [15, 16, 17, 18, 19, 20] сформулированы требования к параметрам модулей комплекса, входящих в состав блока формирования физических сигналов. Этим требованиям, например, удовлетворяют модули ввода и вывода фирмы Advantech серии ADAM4000. Однако, формирование частотных и резистивных сигналов с помощью этих модулей требует разработки дополнительного оборудования сопряжения, ухудшающего характеристики комплекса. Для решения этой задачи были разработаны специализированные модули ввода и вывода с соответствующими параметрами, что позволило улучшить блок формирования физических сигналов, не ухудшив параметры комплекса в целом.

Ключевым объектом унифицированной структуры комплекса является разработанный специализированный модуль контроля и управления. Его алгоритмы основаны на адаптации технологии OPC к решению задач, выполняемых комплексом, и разделении видов взаимодействия модулей комплекса на уровни — программный моделирующий, программный прикладной, программный тестовый, аппаратный сопряжения и аппаратный тестовый. Созданные алгоритмы модуля позволяют осуществить централизованный контроль и управление комплексом, улучшая его эксплуатационные характеристики.

Обобщенная структура комплекса изображена на рисунке 2. Она содержит среду моделирования (например, MTSS), SCADA систему соответствующей АСУ ТП, дополнительные программы (например, SCADA TraceMode для стандартизированной визуализации процесса моделирования), OPC серверы соответствующих протоколов, специализированный модуль контроля и управления комплекса, программируемый логический контроллер (ПЛК) АСУ ТП, блок формирования физических сигналов и реальные датчики. В усовершенствованной структуре комплекса специализированный модуль контроля и управления комплекса выполняет следующие функции:

- тестирование алгоритмов прикладного программного обеспечения как с использованием модельных данных, так и без них;
- стандартизация визуализации модельных данных и обеспечение возможности взаимодействия с другими средами моделирования;
- унификация взаимодействия с аппаратным обеспечением комплекса;
- формирование единой конфигурации для выполнения экспериментов с различными компонентами АСУ ТП;

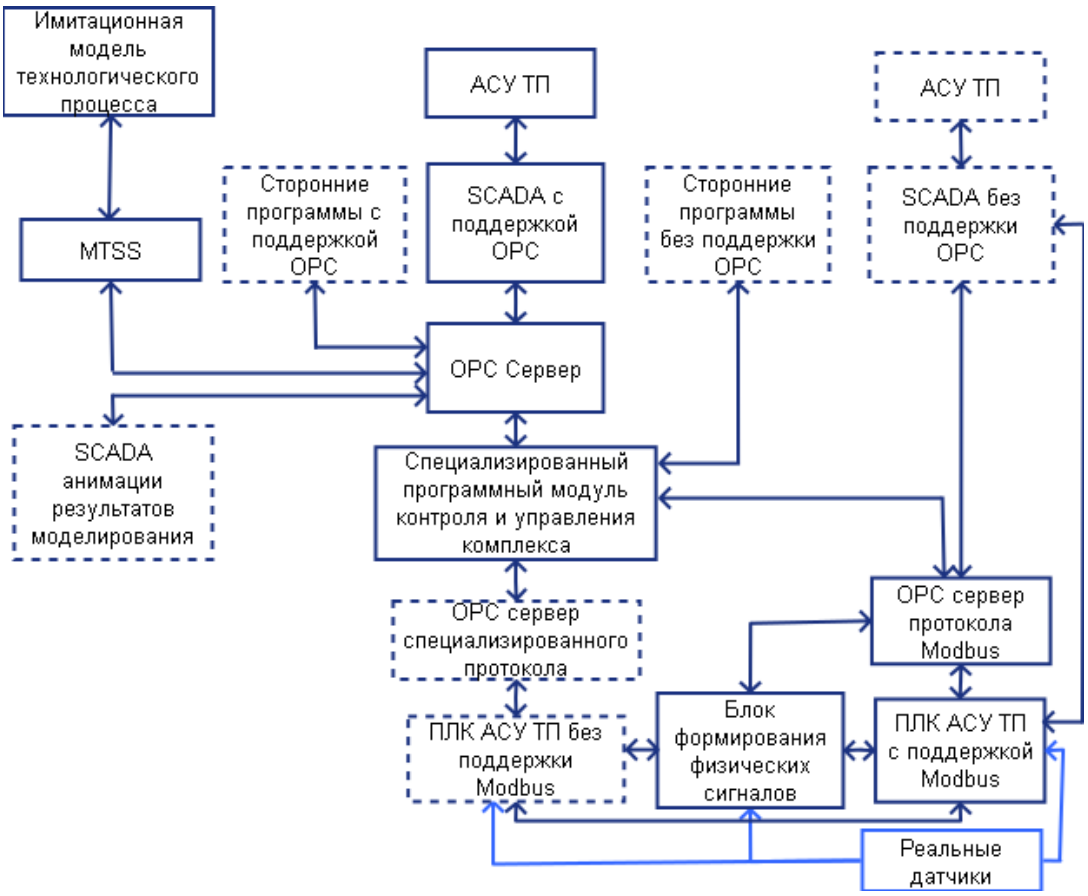


Рис. 2: Обобщенная структура унифицированного комплекса

- предоставление пользовательского интерфейса управления функционированием комплекса;
- формирование отчетов о результатах тестирования.

Заключение

Применение подхода «In-the-loop» и технологии OPC позволяет создать унифицированную структуру программно-аппаратного комплекса тестирования программ управления прикладного программного обеспечения АСУ ТП шахт и рудников. Это позволяет организовать универсальную расширяемую структуру, стандартизировать взаимодействие программных и аппаратных частей комплекса, применить стандартизированную визуализацию результатов моделирования.

Стандартные и специализированные модули блока формирования физических сигналов расширяют функциональные возможности комплекса и обеспечивают унификацию стенда на уровне электрических параметров входов и выходов комплекса с точки зрения датчиков и исполнительных механизмов систем автоматизации конвейерного транспорта шахт и рудников.

Список литературы

[1] WinMOD system platform. Hennigsdorf, Mewes & Partner GmbH, 1995. URL: http://winmod.com.

[2] xPC Target. Natick, MathWorks, 2013. URL: http://www.mathworks.com/products/xpctarget/.

[3] Захарченко В.Е. Имитационная модель гидроагрегата для АСУ ТП // Автоматизация в промышленности. 2007. № 7. — С. 37–40.

[4] Сухарев А.В., Головушкин Б.А., Лабутин А.Н., Ерофеева Е.В. Тренажерно-управляющий программно-технический комплекс для объектов химической технологии // Автоматизация в промышленности. 2011. № 7. — С. 25–28.

[5] Бабаян Р.Р., Осипов А.Б. Стенд для отладки ПО бортовой авиационной аппаратуры // Автоматизация в промышленности. 2013. № 5. — С. 55–56.

[6] Журавлёв С.С. Программно-аппаратный комплекс для тестирования программ управления АСУ ТП шахт и рудников // Вычислительные технологии. – 2013. — Т.18. — С. 150–155. — ISSN 1560-7534. — EISSN 2313–691X.

[7] Журавлев С.С., Окольнишников В.В., Меркулов И.В., Рудометов С.В., Шакиров С.Р. Генератор сигналов для отладки и тестирования АСУ ТП на базе имитационных моделей подсистем угольной шахты // Труды Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики — 2015», посвященной 90–летию со дня рождения академика Гурия Ивановича Марчука (19–23 октября 2015 г.) / ИВМиМГ СО РАН. — 2015. — Новосибирск: Абвей. — С.260–265. — ISBN: 978–5–9905347–2–8.

[8] Рудометов С.В. Визуально-интерактивная система имитационного моделирования технологических систем // Вестник СибГУТИ. 2011. № 3. — С. 14–27.

[9] Ryssel U., Ploennigs J., Kabitzsch K., Folie M. Generative Design of Hardware-in-the-Loop Models // APGES'07 — Salzburg, Austria, 2007. — С. 4–11.

[10] Maibaum O. Comparsion of Approaches to the Test of Control Unit Software. — 2007. — URL: http://elib.dlr.de/46744/1/ics_maibaum.pdf.

[11] Швецов Д. Новые технологии работы с данными OPC // СТА. 2007. № 1. — С. 66–69.

[12] Комплект датчиков "Контроль". ООО "Опытное Производство "Технологии Контроля 2017. URL: http://op-teko.ru/control/control.html.

[13] Конвейерная автоматика. АО НПК "ТЕКО 2017. URL: http://teko-com.ru/catalog/konvejernaja-avtomatika/.

[14] Конвейерное оборудование. ООО "Промышленный Союз 2017. URL: http://gsho-prom.ru/konvejernoe-oborudovanie.html.

[15] Устройства управления и связи. Прокопьевский завод взрывозащищенного оборудования «ГОРЭКС — Светотехника». URL: http://www.gorex-ex.ru/category-items/1-produktsiya/4-ustrojstva-upravleniya-i-svyazi/.

[16] Патент на полезную модель № 100669 Российская Федерация, МПК7 H01H3/00. Пульт группового управления для работы в условиях подземной выработки угля / Гусев О.З., Иванов А.Е., Лесков С.К., Нарымский Б.В., Меркулов И.В., Шакиров Р.А.; заявитель и патентообладатель КТИ ВТ СО РАН. — № 2010130020/07; заявл. 19.07.10 ; опубл. 20.12.10 , Бюл. № 35. — 1 с.

[17] Патент на полезную модель № 133951 Российская Федерация, МПК7 G06F 9/00, G05B 19/00. Блок контроля и управления в условиях опасного производства / О.З. Гусев, В.В. Колодей, А.С. Мамаев, Э.Г. Михальцов , С.Р. Шакиров; заявитель и патентообладатель КТИ ВТ СО РАН. -– № 2013126010/08; заявл. 05.06.13 ; опубл. 27.10.13 , Бюл. № 30. — 1 с.

[18] ЦАУК. ООО «ЭНИКОМП», 2017.
URL: http://enicomp.ru/produktsiya/gorno-shahtnoe-oborudovanie/tsauk-2m/.

[19] Блок управления конвейером. Компания ДЭП, 2017. URL: http://dep.ru/catalog/103/buk-ks-ex/.

[20] Контроллер универсальный шахтный. ООО "ИНГОРТЕХ 2017.
URL: http://www.ingortech.ru/produktsiya/
tekhnicheskie-ustrojstva/iskrobezopasnye-kontrollery/item/139-контроллер-универсальный-шахтный-куш/.

Журавлев Сергей Сергеевич — младший научный сотрудник Института вычислительных технологий СО РАН; e-mail: s-zhur@yandex.ru

Окольнишников Виктор Васильевич — д.т.н., ведущий научный сотрудник Института вычислительных технологий СО РАН; e-mail: okoln@mail.ru

Рудометов Сергей Валерьевич — к.т.н., научный сотрудник Института вычислительных технологий СО РАН; e-mail: rsw@inbox.ru

Шакиров Станислав Рудольфович — к.ф.-м.н., начальник отдела Института вычислительных технологий СО РАН; e-mail: ShakirovSR@ict.nsc.ru.

Дата поступления — 31 мая 2017 г.

К ОПРЕДЕЛЕНИЮ НАПРЯЖЕННОСТИ РАЗНОТИПНЫХ БЛОКОВ ЛИТОСФЕРНЫХ ПЛИТ

М. В. Зарецкая

Кубанский государственный университет, 350040, Краснодар

УДК 539.422.3

В данной работе предложен метод исследования техногенной напряженности коры Земли. В общем случае сейсмические процессы в коре Земли должны описываться связанными динамическими задачами, в которых учитываются наличие и взаимодействие в деформируемых средах полей различной природы. Для упрощения постановки задачи, не теряя при этом точности, предлагается рассматривать кору Земли как блочную структуру и применять развитые теорию блочных структур и метод блочного элемента. Для исследования процессов в отдельных объектах могут применяться блоки со сферической границей (резервуары подземных вод, месторождения углеводородов). Они включаются в общую структуру среды, моделируемой, например, пространством, полупространством, слоем, прямоугольными параллелепипедами. Для исследования процессов, протекающих в блочно-структурированной среде, блоки которой формируются сферическими границами, развит и применяется топологический математический аппарат. Его применением реализуется автоморфизм топологического объекта на себя, при этом оператор краевой задачи получает отображение в изоморфное пространство преобразования Фурье–Бесселя медленно растущих обобщенных функций. Дальнейшие преобразования этого оператора приводят вначале к функциональным, а затем к псевдодифференциальным уравнениям. Последние, в зависимости от граничных условий, могут быть системами интегральных или интегро-дифференциальных уравнений, при решении которых определяются напряжения и деформации в отдельных блоках.

Ключевые слова: геомеханика, напряженно-деформированное состояние, разнотипные включения, сферическая неоднородность, топологический метод.

Введение

Среди реальных причин возникновения землетрясений, как результата разрядки локальных очагов напряжения, особое место занимает воздействие производственной деятельности человека на геодинамические процессы в геосферах Земли. В отличие от иных, естественных, причин физического и механического характера хозяйственная деятельность человека является регулируемой и управляемой, что позволяет снизить сейсмогенное воздействие и минимизировать уровень наведенной сейсмичности. Этому может способствовать также создание и развитие системы превентивных мер для снижения риска возникновения техногенного землетрясения, позволяющая до начала производственного процесса выполнить перспективный анализ техногенных напряжений в земной коре и оценить возможность возникновения сейсмического события.

Зоной риска для активизации сейсмических процессов и возникновения техногенных землетрясений являются области интенсивной нефте- и газодобычи. Если работы ведутся в районах с высокой естественной напряженностью коры, то даже слабое воздействие может привести к сильной наведенной сейсмичности. Зная естественную напряженность коры до техногенного воздействия, можно, применяя методы геомеханики, механики деформируемого твердого тела или механики сплошных сред, установить изменения поля напряженности на различных этапах выработки, оценить закономерности изменения сейсмичности во времени, дать прогнозные оценки. Аналогичные проблемы возникают в задачах геофизики, гидрогеологии, инженерной геологии, изучающей условия строительства различных сооружений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-08-00191_а), Российского фонда фундаментальных исследований и администрации Краснодарского края (код проекта 16-41-230154).

1 Модель

Для корректного решения проблемы оценки наведенной сейсмичности необходимо рассматривать модель геологической среды, максимально приближенной к естественной, и модели механики деформируемого твердого тела, адекватно описывающие напряженно-деформированное состояние сред различной реологии [1]. В общем случае сейсмические процессы в коре Земли должны описываться связанными динамическими задачами, в которых учитываются наличие и взаимодействие в деформируемых средах полей различной природы. Для упрощения, но не теряя при этом точности, предлагается принять для исследования модель блочной структуры среды литосферных плит, которая формируется в горных породах совокупностью трещин и иных неоднородностей. Для исследования процессов, протекающих в блочно-структурированной среде, блоки которой формируются материалами различной реологии, применяется топологический математический аппарат, включающий в себя теорию блочных структур, дифференциальный метод факторизации, интегральный метод факторизации, метод блочного элемента, специально адаптированные для поставленного класса задач [2, 3]. Они опираются на современные, редко применяемые в механике математические методы, в частности, внешний анализ, теорию функций многих комплексных переменных, формы-вычеты Лере, факторизацию матриц-функций нескольких комплексных переменных, методы интегральной геометрии, теории представления групп [4]. Каждый элемент блочной структуры рассматривается как топологический объект. Применением дифференциального метода факторизации реализуется автоморфизм топологического объекта на себя, при этом оператор краевой задачи получает отображение в изоморфное пространство преобразования Фурье медленно растущих обобщенных функций. Дальнейшие преобразования этого оператора приводят вначале к функциональным, а затем — к псевдодифференциальным уравнениям. Последние, в зависимости от граничных условий, могут быть как системами интегральных уравнений традиционных контактных задач, так и интегро-дифференциальными уравнениями.

2 Метод исследования

Для исследования наведенной сейсмичности земной коры особый интерес представляет оценка напряжений и деформаций, возникающих на границе пласта пород коры и резервуара воды или углеводородного сырья до и после выработки. Рассматривая указанную систему как блочную структуру, наиболее целесообразным представляется введение для моделирования резервуара шаровый блочный элемент. Так как теория блочных структур и метод блочного элемента имеют топологическую основу, то можно рассмотреть два типа блочных элементов в сферических координатах — шаровая область и вырезанная шаровая область. Согласование с соседними блоками, где постановки задач осуществляются в декартовых координатах, регулируется картой.

Рассматривается задача построения блочных элементов для граничной задачи в шаровой области Ω_1 радиуса b и в пространстве с вырезанной шаровой областью Ω_2 радиуса a с границами $\partial\Omega_s$, $s = 1,\ 2$.

Решения поставленных граничных задач ищутся в пространствах медленно растущих обобщенных функций H_s.

Введем преобразования и обращение Фурье–Бесселя в сферических функциях.

$$\mathbf{B}_2(l,m) = \int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{2\pi} g(\theta,\phi)Y_l^{m-}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi = G(l,m),$$

$$\mathbf{B}_2^{-1}(\theta,\phi)G = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} G(l,m)Y_l^{m+}(\theta,\phi) = g(\theta,\phi),$$

$$\mathbf{B}_3(\lambda,l,m)g = \int\limits_0^{\infty}\int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{2\pi} g(r,\theta,\phi)J_{l+\frac{1}{2}}(\lambda r)Y_l^{m-}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi r dr = G(\lambda,l,m),$$

$$\mathbf{B}_3^{-1}(r,\theta,\phi)G = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\int\limits_0^{\infty} G(\lambda,l,m)J_{l+\frac{1}{2}}(\lambda r)Y_l^{m+}(\theta,\phi)\lambda d\lambda = g(r,\theta,\phi).$$

Здесь $J_\nu(\lambda r)$ — функция Бесселя, $Y_l^m(\theta,\psi)$ — сферическая функция:

$$Y_l^{m\pm}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2l+1}{\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{\pm im\phi}.$$

Чтобы получить псевдодифференциальное уравнение и обеспечить автоморфизм, представление решения граничной задачи строится в виде:

$$\psi(r,\theta,\phi) = \mathbf{B}_3^{-1}(r,\theta,\phi)\frac{L_{lm}(\lambda)}{(\lambda^2 - k_1^2)}.$$

Требование автоморфизма обеспечивается, если [5]

$$\psi(r,\theta,\phi) = 0, \quad r > b.$$

В результате преобразований для шаровой области получено псевдодифференциальное уравнение

$$L_{lm}(k_1) = 0,$$

исследуя которое с учетом граничных условий, можно получить для шаровой области решение вида:

$$\psi_{lm}(b) = \frac{\psi'_{lm1}(b)T_{lm}(k_1,b)}{T'_{lm}(k_1,b)}.$$

Для пространства с шаровой полостью радиуса a общее представление решения записывается в виде:

$$w(r,\theta,\phi) = \mathbf{B}_3^{-1}(r,\theta,\phi)\frac{N_{lm}(\lambda)}{(\lambda^2 - k_2^2)}.$$

Требование автоморфизма многообразия с краем — пространства с удаленным шаром, выполняется, если

$$w(r,\theta,\phi) = 0, \quad r < a.$$

Данное требование позволяет получить псевдодифференциальное уравнение

$$w'_{lm}(a)P_{lm}(\lambda,a) - w_{lm}(a)P'_{lm}(\lambda,a) = 0,$$

решение которого может иметь вид

$$w'_{lm}(a) = \frac{w_{lm0}(a)P'_{lm}(k_2,a)}{P_{lm}(k_2,a)} \text{ или } w_{lm}(a) = \frac{w'_{lm0}(a)P_{lm}(k_2,a)}{P'_{lm}(k_2,a)}$$

в зависимости от заданных граничных условий.

Особенности получения систем псевдодифференциальных уравнений и обозначения представлены, например, в работе [5].

Заключение

В результате применения топологических методов получены псевдодифференциальные уравнения и интегральные представления решений граничных задач, сформулированных в сферической системе координат.

Применение разработанных методов способствует созданию основ новых наукоемких перспективных технологий мониторинга и прогноза наведенной сейсмической активности до начала производственного процесса.

Список литературы

[1] Зарецкая М.В. Математические методы исследования неустойчивых геологических структур // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. 2013. № 7. С. 33–38.

[2] Babeshko V.A., Evdokimova O.V., Babeshko O.M., Zaretskaya M.V., Pavlova A.V. The differential factorization method for a block structure // Doklady Physics. 2009. Т. 54. № 1. С. 25–28.

[3] Бабешко В.А., Бабешко О.М., Евдокимова О.В., Зарецкая М.В., Павлова А.В., Федоренко А.Г. О дифференциальном методе факторизации в приложениях // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2008. № 2. С. 5–12.

[4] Бабешко В.А., Евдокимова О.В., Бабешко О.М., Горшкова Е.М., Зарецкая М.В., Мухин А.С., Павлова А.В. О конвергентных свойствах блочных элементов // Доклады академии наук. 2015. Т. 465. № 3. С. 298–301.

[5] Babeshko V.A., Evdokimova O.V., Babeshko O.M. The theory of the starting earthquake // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2016. № 1. Т. 2. С. 37–80.

Зарецкая Марина Валерьевна — д.ф.-м.н., профессор кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета; Краснодар, 350040;
e-mail: zarmv@mail.ru.
Дата поступления — 15 мая 2017 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ РАСЧЕТЕ КОНСТРУКЦИЙ, СОДЕРЖАЩИХ СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ МАТЕРИАЛЫ

А. В. Зеленский, И. М. Ступаков

Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск

УДК 519.6

В работе рассмотрена возможность моделирования сверхпроводящего состояния вещества в предположении полного отсутствия электрического сопротивления. Сформулирована постановка макроскопической модели, предусматривающей наличие в области сверхпроводников и внешних источников тока. Предложенная модель учитывает сверхпроводимость при температуре и интенсивности магнитного поля не превышающих критические. На примере решения тестовой задачи было проведено сравнение данных, полученных применением данной модели, с другой, приближенной, моделью.

Ключевые слова: сверхпроводники, МКЭ.

Введение

Математическое моделирование играет важную роль в современной физике. Появление новых технологий и новых материалов требует развития математических моделей. Одним из видов таких материалов являются сверхпроводники. Однако, точных моделей поведения сверхпроводников в магнитном поле, допускающих макроскопическое численное моделирование, в настоящее время не существует. В данной статье будет рассмотрена модель, рассматривающая сверхпроводник как обычный проводник, обладающий бесконечной проводимостью. Это предположение не противоречит современному представлению о свойствах данных материалов [1] и может быть легко применено для моделирования сложных устройств, содержащих в конструкции сверхпроводники. Сверхпроводник в предлагаемой в статье модели представлен как множество проводников со сторонним током. Плотность стороннего тока в этих проводниках подбирается исходя из предположения, что вихревые токи внутри сверхпроводящего материала не затухают и не дают магнитному полю проникать внутрь. Такое представление сверхпроводника позволит учитывать ситуации частичного отключения эффекта сверхпроводимости на некоторых участках, что позволит более точно описывать поведение сверхпроводящего материала в сильных магнитных полях.

1 Математическая модель

Рассмотрим сверхпроводник как проводник, обладающий бесконечной проводимостью. В данной статье не будет учитываться влияние критических токов на отключение сверхпроводимости. Система уравнений Максвелла при отсутствии токов смещения имеет вид:

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{J} + \sigma \mathbf{E}, \tag{1}$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \tag{2}$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0. \tag{3}$$

Введение векторного потенциала $\mathbf{A}$ следующим образом [2]:

$$\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}, \tag{4}$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \tag{5}$$

позволяет свести решение системы уравнений Максвелла к решению следующего уравнения:

$$\mathrm{rot}\left(\frac{1}{\mu}\mathrm{rot}\,\mathbf{A}\right) + \sigma\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \mathbf{J}. \tag{6}$$

Из уравнения (1) следует, что при бесконечной проводимости напряженность электрического поля в сверхпроводнике должна быть бесконечно мала, то есть:

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = 0 \tag{7}$$

Таким образом, подобрав токи внутри сверхпроводящего объема, сводящие к нулю производную векторного потенциала по времени в этом объеме, можно обеспечить выполнение уравнения (7).

1.1 Дискретная модель

Пусть объем сверхпроводника разбит на N непересекающихся подобластей, в каждой из котороых протекает ток с постоянной плотностью j_i, и выбрано K точек $(\mathbf{x}_k)$ внутри сверхпроводника. Для моделирования процесса во времени разобъем временной интервал на M временных слоев. Тогда для выполнения условия (7) на m-том временном слое необходимо минимизировать функционал $\mathfrak{F}_m$, который в случае, когда магнитная проницаемость не зависит от магнитного поля имеет вид:

$$\mathfrak{F}_m = \sum_{k=1}^{K}\left(\sum_{i=1}^{N}\mathbf{A}\left[j_i(t_m)\right](\mathbf{x}_k) + \mathbf{A}_m(\mathbf{x}_k)\right)^2, \tag{8}$$

где $\mathbf{A}\left[j_i(t_m)\right](\mathbf{x}_k)$ — значение векторного потенциала только тривиального i-того элементарного проводника с током $j_i(t_m)$ (в точке $\mathbf{x}_k$) на временном слое с номером m, $\mathbf{A}^m(\mathbf{x}_k) = \mathbf{A}^{EX}_m(\mathbf{x}_k) - \mathbf{A}^T_{m-1}(\mathbf{x}_k)$, $\mathbf{A}^{EX}_m(\mathbf{x}_k)$ — значение векторного потенциала, образованного источниками тока вне сверхпроводящего объема на m-том временном слое, $\mathbf{A}^T_{m-1}(\mathbf{x}_k)$ — значение суммарного векторного потенциала на $m-1$-ом временном слое, образованного как источниками вне сверхпроводящего объема, так и элементарными проводниками. В начальный момент времени источник считается выключенным, и токи внутри сверхпроводника отсутствуют.

Далее будем считать, что магнитная проницаемость всех источников не зависит от магнитного поля, и функционал — квадратичен относительно j_i. Минимизация функционала на каждом временном слое может быть произведена методом наименьших квадратов в результате применения которого будет получена система линейных уравнений:

$$\mathrm{M}\mathbf{q} = \mathbf{b}, \tag{9}$$

где $\mathrm{M}_{i,k}$ — величина векторного потенциала в точке $\mathbf{x}_i$ образуемого током с единичной плотностью в подобласти Ω_k, b_i — величина изменения векторного потенциала в точке $\mathbf{x}_i$ при условии, что токи внутри сверхпроводника не изменились, $\mathbf{q}$ — вектор значений плотности тока доставляющий минимум функционалу (8).

Для того, чтобы вычислить вклад в значение векторного потенциала от i-того тривиального проводника с током в точке $\mathbf{x}_k$ можно воспользоваться решением прямой задачи магнитостатики, считая все проводники кроме i-того отключенными. В рассматриваемом случае расчетная область не содержит проводников с ненулевой проводимостью, кроме обмотки источника и сверхпроводника, следовательно, задачу по нахождению векторного потенциала можно решить с помощью закона Био-Савара:

$$\mathbf{A}\left[j_i\right](\mathbf{x}_k) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int\limits_{\Omega}\frac{j_i\,\mathrm{d}V}{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}|} \tag{10}$$

Таким образом, элементы матрицы M и вектора b могут быть вычислены с помощью (11) и (12) соответственно.

$$M_{i,k} = \frac{\mu_0}{4\pi}\int\limits_{\Omega_k}\frac{\mathrm{d}V}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}|}, \tag{11}$$

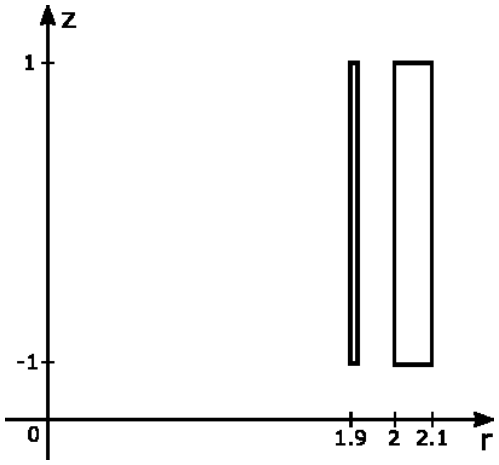


Рис. 1: Схема расчетной области, содержащей сверхпроводник и источник тока в осесимметричной постановке

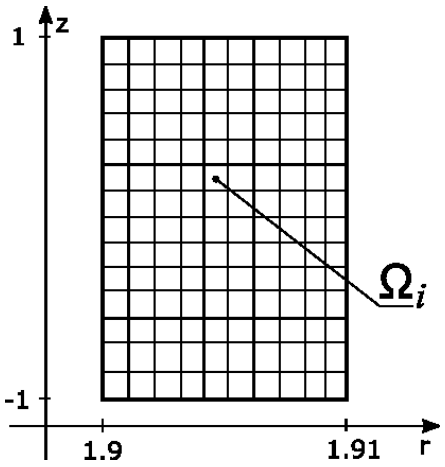


Рис. 2: Пример разбиения области сверхпроводника на подобласти с постоянной плотностью тока

$$b_i = \frac{\mu_0}{4\pi} \int\limits_{\Omega} \frac{(j_{ext} - j_{m-1})\ \mathrm{d}V}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}|}, \tag{12}$$

где j_{ext} — плотность всех токов вне сверхпроводника, j_{m-1} — плотность всех токов на предыдущем временном слое.

1.2 Осесимметричная постановка

Рассмотрим модельную задачу с заданным разбиением области сверхпроводника. Пусть расчетная область представляет собой бесконечный воздушный объем с круглой обмоткой с прямоугольным сечением и круглым сверхпроводником с прямоугольным сечением, соосным с обмоткой. В таком случае имеет место осевая симметрия, следовательно, траектории токов внутри сверхпроводника тоже должны обладать осевой симметрией. Геометрия сечения расчетной области представлена на рис. 1. Ток в источнике ориентирован перпендикулярно осевому сечению обмотки, следовательно, магнитное поле, образуемое источником, лежит в плоскостях осевого сечения обмотки. Так как образуемое при этом поле векторного потенциала имеет только одну ненулевую компоненту в цилиндрических координатах (A_ϕ), токи, необходимые для того чтобы скомпенсировать его, тоже должны иметь только одну ненулевую компоненту. Таким образом, область сверхпроводника может быть разбита на N подобластей круглой формы с прямоугольным сечением (Ω_i), как показано на рис. 2. Такое разбиение образует сетку задачи, шаг сетки определяется размером сечения подобласти.

Для ускорения вычислений интегралов (11) и (12) по сверхпроводящим подобластям Ω_i используем полуаналитический метод предложенный в [3].

Для рассматриваемой задачи достаточно сделать всего один шаг во времени, так как расчетная область не содержит материалов с ненулевой проводимостью, кроме сверхпроводника.

Рассматриваемая задача полностью эквивалентна решению задачи с уравнением (6) с однородным краевым условием первого рода на поверхности сверхпроводника, однако, знание поля токов внутри сверхпроводника дает возможность моделирования частичного отключения сверхпроводимости.

1.3 Проверка корректности решения на модельной задаче

Для проверки адекватности результатов, полученных применением описанного выше метода будет использована приближенная модель, в которой сверхпроводник будет рассмотрен как проводник с достаточно большой проводимостью, такая задача может быть решена методом конечных элементов с разностной аппроксимацией по времени, для уравнения (6). В качестве результата будет рассматриваться поле магнитной индукции.

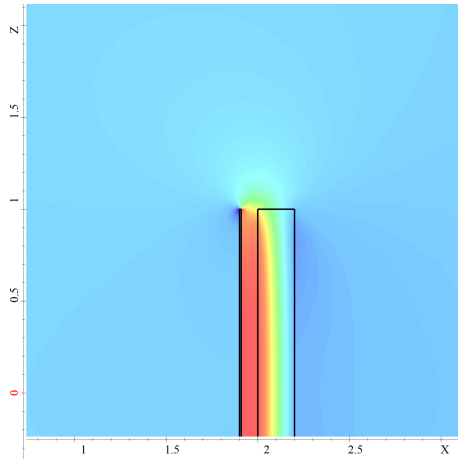


Рис. 3: Решение нестационарной задачи

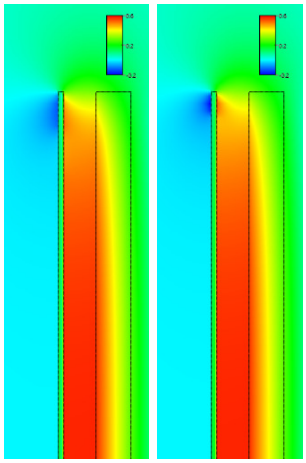


Рис. 4: Решение задачи подбора токов (слева — на грубой сетке, справа — на измельченной)

Расчетная область задачи представленна на рис. 2. До момента времени $t = 0$ источник с током выключен и внешнее поле отсутствует, на протяжении t_e ток в источнике линейно возрастает. Вихревые токи, возникающие в сверхпроводящей подобласти на протяжении времени t_e, и образованная ими и источником индукция магнитного поля будут считаться решением. Следует отметить, что так как описанная модель является грубой аппроксимацией, критерием оценки точности решения может быть только относительное значение плотности вихревых токов и индукции магнитного поля.

Тестирование данной постановки будет производится на описанной в разделе (1.2) модельной задаче. Решение, с которым будет проводиться сравнение, получено с помощью программного комплекса Telma. Реализация описанной в статье модели была встроена в программный комплекс Quasar. На рис. 3 и рис. 4 представлено поле Z-компоненты вектора магнитной индукции вблизи сверхпроводника. Решение на рис. 3 получено при решении нестационарной задачи с уравнением (1) с проводимостью 10^{10} Ом$^{-1}$. При этом, для получения достаточно точных результатов необходима мелкая сетка, что значительно увеличивает время решения. На рис. 4 изображено решение задачи в описанной ранее постановке с разным размером подобластей Ω_i. На рис. 4 видно, что с измельчением сетки, решение меняется существенно только вблизи сверхпроводника.

На рис. 5 и рис. 6 приведены результаты моделирования вдоль линии, параллельной оси симметрии, на расстоянии 0.4м от внутренней поверхности сверхпроводящего материала. Как видно из графиков, предложенная модель соответствует приближенной. Расхождения в значениях незначительны и обусловлены выбором конечноэлементной сетки как по пространству, так и по времени при решении задачи с помощью приближенной модели.

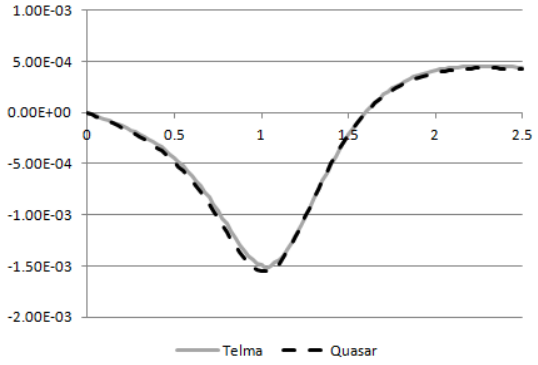


Рис. 5: X-компонента вектора магнитной индукции в тестовых точках

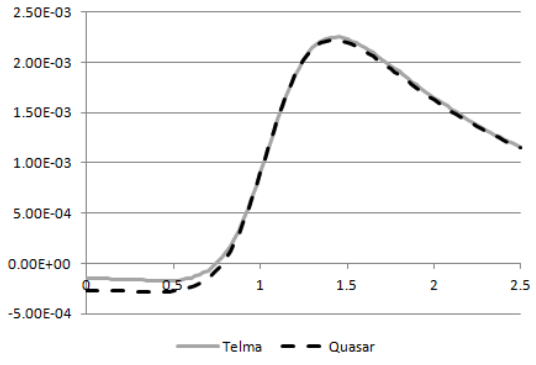


Рис. 6: Z-компонента вектора магнитной индукции в тестовых точках

Заключение

Рассмотренная в данной статье модель достаточно точно описывает поведение сверхпроводящих материалов, как тел с бесконечной проводимостью, в магнитном поле. Вычисление векторного потенциала для данной модели с помощью интеграла Био-Савара может быть заменено на другие методы в том числе метод конечных и метод граничных элементов, что позволяет вносить в расчетную область ферромагнитные материалы. Также, с использованием данной модели предполагается решение задач, в которых имеет место частичное отключение эффекта сверхпроводимости в некоторых участках сверхпроводящего материала.

Список литературы

[1] Гинзбург В. Л., Андрюшин Е. А. Сверхпроводимость. — 2-е издание, переработанное и дополненное. — Альфа-М, 2006. — 112с.

[2] Бинс К., Лауренсон П. Анализ и расчет электрических и магнитных полей. — М.: Энергия, 1970. — 376с.

[3] Stupakov I. M., Royak M. E., Kondratyeva N. S. The method for calculating magnetic field induced by current coils — 13th International Scientific-Technical Conference on Actual Problems of Electronics Instrument Engineering (APEIE), 2016

Арсений Валерьевич Зеленский — аспирант каф. прикладной математики;
Новосибирский государственный технический университет;
e-mail: virus1001010@gmail.com;
Илья Михайлович Ступаков — к.т.н., доц. каф. прикладной математики;
Новосибирский государственный технический университет;
e-mail: istupakov@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ИНФОРМАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ КИБЕРФИЗИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Д. Н. Зырянов, Н. Ф. Денисова

Восточно-Казахстанский государственный технический университет им. Д. Серикбаева, 070004, Усть-Каменогорск, Казахстан

УДК 004.4

Киберфизические системы (КФС) представляют собой инженерные системы, в которых операции отслеживаются, координируются и контролируются с помощью вычислительного ядра. КФС основываются на технологии «Интернет вещей» и взаимодействуют с реальным миром через сенсоры и манипуляторы. Следовательно, информацию в КФС необходимо обрабатывать и передавать как можно быстрее для своевременного создания управляющих сигналов на возникающие события физического мира. Данное утверждение является главным требованием к информационной системе, поддерживающей работу КФС. В статье приводится краткое описание физической инфраструктуры КФС, анализ производственного процесса мебельного цеха с использованием КФС и его функциональное моделирование в нотации IDEF0 для определения основных модулей, что является промежуточным этапом на пути создания имитационной модели КФС.

Ключевые слова: киберфизические системы, IDEF0, модель системы, промышленный интернет.

Введение

Быстрое развитие и внедрение информационно-коммуникационных технологий привело к широкому распространению Интернета. В наши дни он становится недорогим сервисом, доступным широкому кругу лиц как по проводной, так и по беспроводной технологиям. С другой стороны, технологические достижения в области микрочипов и микропроцессоров позволяют в настоящее время создавать очень маленькие и миниатюрные микрокомпьютеры, которые могут быть встроены в любое электрическое устройство, например, в стиральную машину, микроволновую печь, холодильник и т.д.

Основная идея Интернета вещей заключается в объединении различных интеллектуальных встроенных систем в единую глобальную сеть для регистрации и передачи информации с конечных устройств в информационные системы для целей мониторинга [1, 2].

КФС являются следующим этапом развития встроенных вычислительных систем (рис. 1), где ключевым аспектом является функционирование различных устройств и программного обеспечения в качестве единой системы, не обязательно требующей подключения к Интернету [3]. Современными примерами КФС являются транспортные сети [4], электростанции [5] и умные производства [6].

КФС взаимодействуют с физическим миром через сенсоры и манипуляторы. Манипулятор (или привод) является физическим устройством, которое может изменять окружающее пространство, к примеру, поднять и переместить объект или переместиться самостоятельно на необходимое расстояние. Сенсорами являются электронные устройства, которые могут измерять различные характеристики окружающего пространства или идентифицировать происходящие в нем события. В качестве примеров можно привести датчик освещенности, датчик влажности, инфракрасный сенсор, определяющий расстояние до ближайшего объекта, и т.д.

Наличие подобных возможностей отличает КФС от других информационных систем, которые работают только в киберпространстве. Необходимо учитывать отличительные особенности такой физической архитектуры при описании информационной модели системы, поддерживающей функционирование КФС.

Дальнейшая часть статьи представлена следующим образом. В 1 разделе изложена информация о схожих работах в данном направлении исследований. Во 2 разделе рассматривается физическая архитектура КФС и ее отличите от других систем. В 3 разделе представлена функциональная модель КФС производства мебели. Заключение содержит результаты моделирования и дальнейшие направления исследований.

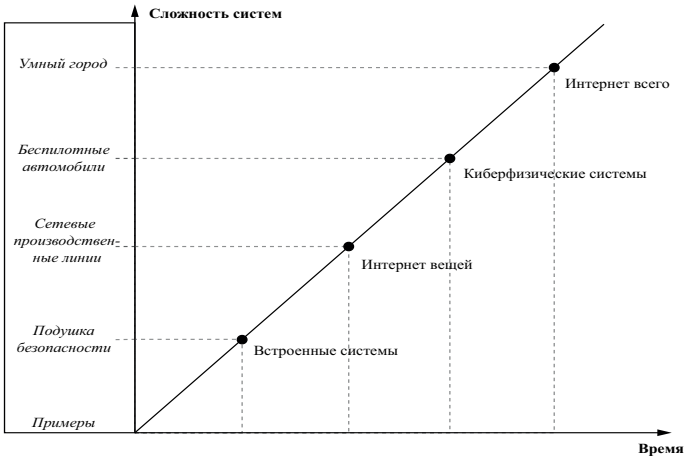


Рис. 1: Эволюция встроенных компьютерных систем

1 Обзор литературы

КФС является системой высокой сложности, состоящей из множества типов аппаратного и программного обеспечения. Более того, возможность взаимодействия с реальным миром накладывает дополнительные требования к безопасности, экологичности и отказоустойчивости такой системы.

Одним из наиболее важных направлений исследований КФС за последние 3 года (2014-2016) является обеспечение безопасности их функционирования [7]. Кибератаки на КФС могут быть как внешние [8], так и внутренние [9]. Другим направлением исследований является адаптация технологий КФС для взаимодействия с физическим миром (в котором, по сравнению с киберпространством, время играет важнейшую роль) посредством создания новых моделей задач [10] или событийно-ориентированных систем [4]. В связи с изменяющейся структурой КФС (добавление/удаление устройств и обновление программного обеспечения), были предложены динамические и адаптивные модели данных [4].

Все вышеизложенные модели рассматривают КФС как сложную систему или систему систем, без учета ориентированности на цель ее создания.

2 Физическая инфраструктура КФС

В любой КФС можно выделить три уровня физической архитектуры: уровень устройств, сетевой и системный уровни. Каждый уровень выполняет определенные задачи (рис. 2).



Рис. 2: Физическая архитектура КФС

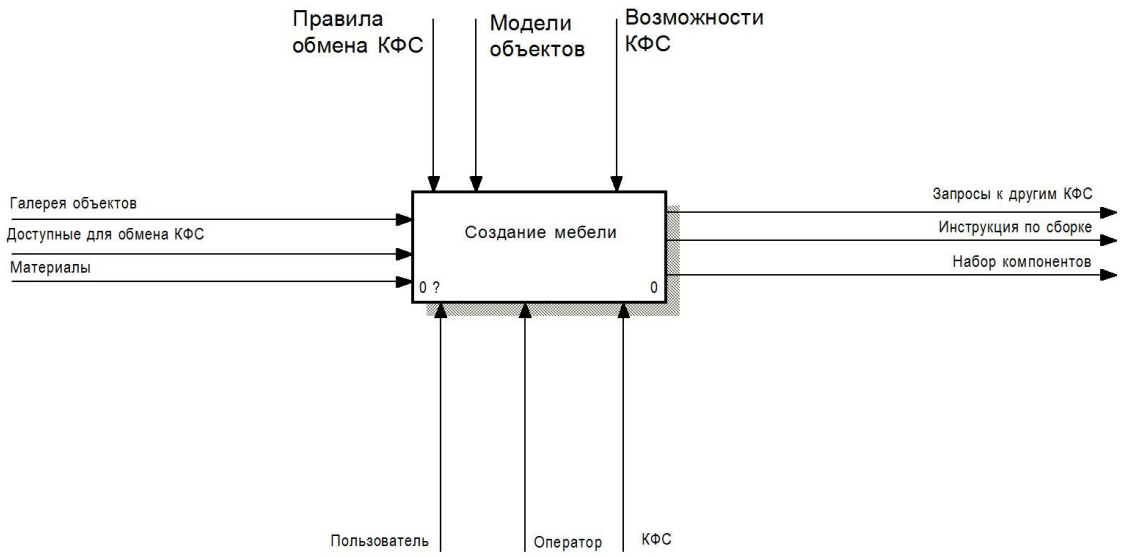


Рис. 3: Контекстная диаграмма

На первом уровне физической архитектуры КФС располагаются различные электронные и встроенные устройства, такие как манипуляторы и сенсоры. Они являются своеобразным интерфейсом между физическим миром и киберпространством. Устройства на этом уровне регистрируют события и свойства окружающего пространства и взаимодействуют с ним.

Второй, сетевой уровень физической архитектуры КФС, представлен проводными и беспроводными сетями и аппаратными комплексами, которые соединяют различные устройства первого уровня между собой и с другими сетями через Интернет. На данном уровне данные от сенсоров передаются другим устройствам и информационным системам, которые в свою очередь посылают управляющие сигналы манипуляторам. Второй уровень называется киберфизической системной сетью и основывается на беспроводной сети датчиков (англ. WSN – Wireless Sensor Networks).

Последний, третий уровень состоит из различных серверов и персональных компьютеров. Основное назначение системного уровня заключается в координации поведения всех устройств и обучении КФС соответствующим образом реагировать на события физического мира в зависимости от целей функционирования. В результате все подключенные устройства взаимодействуют друг с другом в киберпросранстве и выполняют соответствующие действия в физическом мире, основываясь на командах системного уровня и знаниях, хранящихся в базе знаний.

Такая архитектура позволяет построить отказоустойчивую распределенную систему с высокой нагрузкой данных. Расширяемость системы реализуется путем добавления дополнительных вычислительных и сетевых ресурсов на втором и третьем уровнях [11].

Основное отличие КФС от обычных информационных систем (или производственных цепочек) заключается в изменчивой структуре компонентов КФС, особенно на уровне устройств физической архитектуры. Добавление нового оборудования должно приводить к увеличению возможностей системы и реконфигурированию ее алгоритмов.

Еще одной отличительной чертой КФС является широкое разнообразие в архитектуре и принципах функционирования различных электронных устройств. База знаний КФС должна содержать всю необходимую информацию о протоколах и интерфейсах для взаимодействия с различными видами оборудования.

3 Функциональная модель КФС

Для определения требований, критериев функциональности и эффективности информационной системы поддержки КФС необходимо разработать функциональную модель со стандартными неизменяемыми функциями.

Рассмотрим для примера применение КФС в производственном процессе создания мебели. Основным

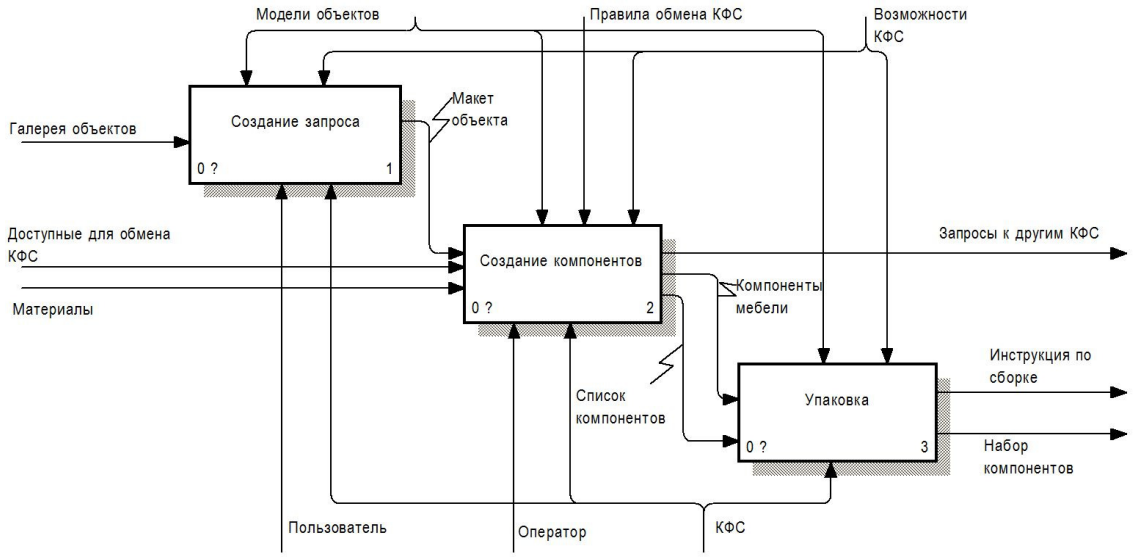


Рис. 4: Декомпозиция первого уровня

процессом данного производства будет являться создание заготовок — элементов конструкции всей мебели (рис. 3). Любой заказчик (пользователь КФС) может выбрать необходимую мебель из галереи шаблонов. Подобная галерея состоит из различной мебели, которую можно создать в зависимости от возможностей КФС.

Одним из важных свойств таких систем является возможность обмена данными с другими КФС. Если некоторые элементы модели невозможно создать в КФС, система может найти другую КФС с необходимыми возможностями и отправить запрос на создание детали.

Процесс создания может быть декомпозирован на 3 подпроцесса (рис. 4): создание запроса пользователем, производство и упаковка деталей КФС под контролем оператора.

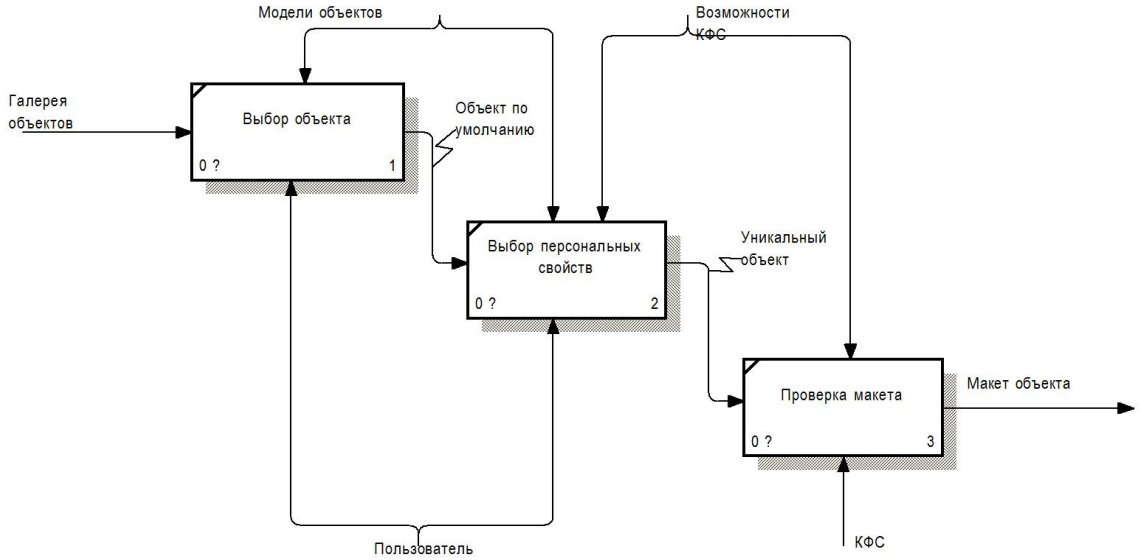


Рис. 5: Действие «Создание запроса»

На этапе создания запроса пользователь выбирает необходиму заготовку из галереи и указывает дополнительные параметры из определенного перечня, такие как: цвет, материал и размер (рис. 5). Взаимодействие между заказчиком и КФС осуществляется с помощью графического пользовательского интерфейса

информационной системы, работающей на верхнем уровне архитектуры КФС. В отличие от серийного производства, в КФС существует возможность указания дополнительных персональных параметров [12]. Процесс производства начинается после проверки модели и характеристик пользователя.

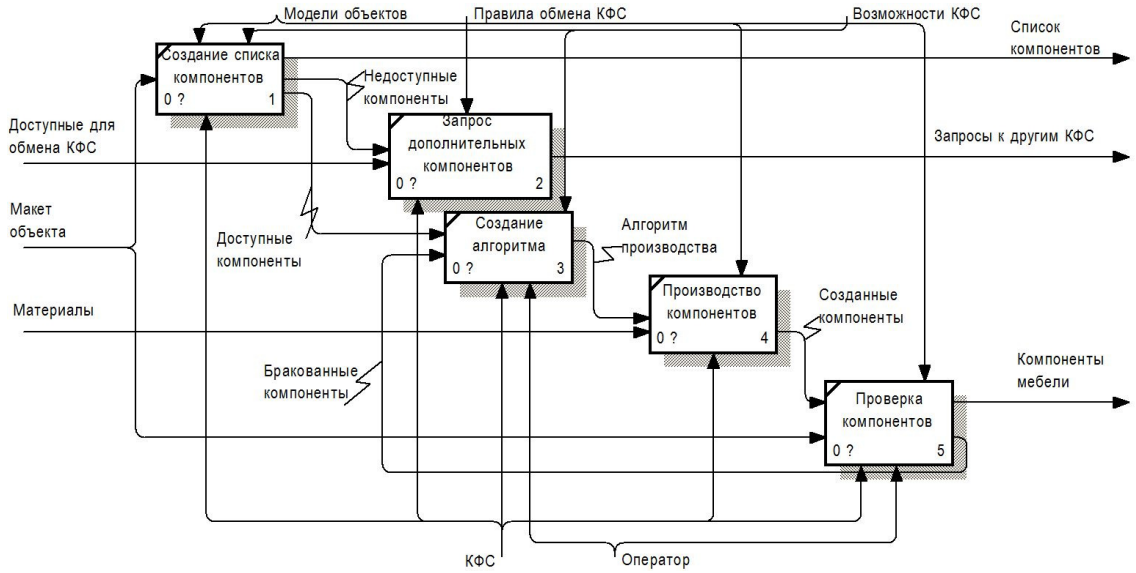


Рис. 6: Действие «Создание компонентов»

Первым этапом производственного подпроцесса является декомпозиция модели на составные компоненты (рис. 6). Данный шаг выполняется с использованием накопленной информации из базы знаний, либо с помощью специальных алгоритмов. Результатом данного действия является список элементов, которые необходимо создать на машинах КФС.

В дальнейшем система делит элементы списка на 2 группы. Первая группа содержит список компонентов, которые КФС не может произвести на существующем оборудовании или из имеющихся материалов. Данные компоненты запрашиваются у других КФС с помощью интерфейса обмена (второе действие). На основании списка элементов второй группы создается производственный алгоритм для существующих машин (третье действие) и начинается процесс их создания из заготовок в соответствии с дополнительными характеристиками заказчика (четвертое действие). После создания каждого элемента КФС сравнивает его с прототипом благодаря наличию сенсоров (пятое действие). Возможны два варианта развития событий, если деталь не будет соответствовать шаблону: доработка до необходимого состояния или создание новой из другой заготовки.

Оператор, в свою очередь, также проверяет соответствие созданных компонентов заданным шаблонам. При возникновении любых ошибок или некорректного функционирования системы оператор имеет возможность остановить производственный процесс для устранения выявленных проблем.

Последним подпроцессом производства мебели является упаковка компонентов. Он начинается с создания инструкции по сборке, основанной на списке компонентов и описании прототипа. В соответствии с этой инструкцией, каждый созданный компонент получает соответствующую метку. В итоге получается готовый набор, состоящих из созданных компонентов и других элементов, полученных от сторонних КФС.

Заключение

КФС имеют динамическую физическую архитектуру, которая изменяется в процессе функционирования системы путем добавления и замены различных электронных устройств и программного обеспечения. Трехуровневая физическая архитектура упрощает масштабирование системы при увеличении потока данных или вычислений.

Любой производственный процесс с участием КФС состоит из вышеизложенных шагов. Следовательно, можно предположить, что информационные системы, поддерживающие работу КФС, должны выполнять идентичные функции и иметь совпадающие параметры и возможности.

Дальнейшая работа заключается в создании диаграмм потоков данных в соответствии с представленной высокоуровневой моделью для определения параметров, критериев функционирования и информационных потоков в КФС.

Список литературы

[1] Rajkumar Ragunathan, Insup Lee, Lui Sha and John Stankovic, «Cyber-Physical Systems: The Next Computing Revolution», Design Automation Conference, Proceedings of the 47th IEEE, Anaheim, USA, 2010, pp. 731–736, ISBN 978-1-4244-6677-1.

[2] Jiafu Wan, Min Chen, Feng Xia, Di Li and Keliang Zhou, «From Machine-to-Machine Communications towards Cyber-Physical Systems», Computer Science and Information Systems, 2013, vol. 10, no. 3, pp. 1105–1128, ISSN 1820-0214.

[3] Dietmar P.F. Moller, «Guide to Computing Fundamentals in Cyber-Physical Systems: Concepts, Design Methods, and Applications», Switzerland: Springer International Publishing, 2016, 422 p., ISBN 978-3-319-25178-3.

[4] D.B. Work and A.M. Bayen, «Impacts of the Mobile Internet on Transportation Cyberphysical Systems: Traffic Monitoring using Smartphones», National Workshop for Research on High-Confidence Transportation Cyber-Physical System: Automotive, Aviation and Rail, Washington, 2008, 3 p.

[5] Brent Kesler, «The Vulnerability of Nuclear Facilities to Cyber Attack», Strategic Insights, vol. 10, no. 1, 2005, pp. 15–25.

[6] Jan Kleissl and Yuvraj Agarwal, «Cyber-physical energy systems: Focus on smart buildings», Design Automation Conference, 2010, pp. 749–754, ISBN 978-1-4503-0002-5.

[7] Phu H. Nguyen, Shaukat Ali and Tao Yue, «Model-based security engineering for cyber-physical systems: A systematic mapping study», Information and Software Technology, vol. 83, 2016, pp. 116-135, ISSN 0950-5849.

[8] Xiaoxue Liu, Jiexin Zhang and Peidong Zhu, «Modeling cyberphysical attacks based on probabilistic colored Petri nets and mixed-strategy game theory», International Journal of Critical Infrastructure Protection, 2016, 32 p, in press.

[9] Santiago Ruiz-Arenas, Imre Horvath, Eliab Z. Opiyo, Ricardo Mejia Gutierrex, «Dual-aspect model for failure forecasting in cyber-physical systems», Proceedings of TMCE, Budapesht, Hungray, Ed. By I. Horvath, Z. Rusak, 2014, pp. 1473–1486, ISBN 978-94-6186-177-1.

[10] Jinkyu Lee and Kang G. Shin, «Development and Use of a New Task Model for Cyber-Physical Systems: a Real-Time Scheduling Perspective», The Journal of Systems & Software, 2017, 14 p., in press.

[11] Olivia Penas, Regis Plateaux, Stanislao Patalano and Moncef Hammadi, «Multi-scale approach form mechatronic to Cyber-Physical Systems for the design of manufacturing systems», Comput. Industry, 2016, 18 p., in press.

[12] Fatos Xhafa, «Cyber-Physical Systems: Foundations, Principles and Applications», Ed. By Houbing Song, Danda B. Rawat, Sabina Jeschke, Christian Brecher, Elseiver, 484 p., ISBN 978-0-12-803801-7.

Зырянов Дмитрий Николаевич — аспирант Восточно-Казахстанского государственного технического университета им. Д.Серикбаева;
070003, Казахстан, Восточно-Казахстанская обл., г. Усть-Каменогорск, ул. Серикбаева 19
e-mail: dzyryanov@ektu.kz;

Денисова Наталья Федоровна — к.ф.-м.н., декан факультета информационных технологий и бизнеса; Восточно-Казахстанский государственный технический университет им. Д.Серикбаева
070003, Казахстан, Восточно-Казахстанская обл., г. Усть-Каменогорск, ул. Серикбаева 19
e-mail: ndenisova@ektu.kz.

Дата поступления — 31 мая 2017 г.

РАЗНОСТНЫЙ АНАЛОГ ЭНТРОПИЙНОГО НЕРАВЕНСТВА ДЛЯ СХЕМЫ КАБАРЕ

Н. А. Зюзина[1], В. В. Остапенко[1,2]

[1] *Институт гидродинамики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.63

Для схемы КАБАРЕ получен разностный аналог энтропийного неравенства и предложен метод, обеспечивающий в разностном решении полный распад неустойчивых сильных разрывов для любых чисел Куранта, при которых схема КАБАРЕ является устойчивой. Приведены тестовые расчеты, иллюстрирующие данные свойства схемы КАБАРЕ.

Ключевые слова: монотонная схема КАБАРЕ, скалярный закон сохранения, сильный разрыв, разностный аналог энтропийного неравенства.

Введение

Для численного решения гиперболических уравнений была предложена трехслойная по времени и двухточечная по пространству схема Upwind Leapfrog [1], которая имеет второй порядок аппроксимации на гладких решениях, является явной и условно устойчивой при числах Куранта $r \in (0, 1]$. Детальный анализ этой схемы был проведен в работах [2] и [3], в которых с учетом кососимметричности своего пространственного шаблона она была названа схемой КАБАРЕ. Основные достоинства этой схемы связаны с тем, что она задана на компактном пространственном шаблоне, является обратимой по времени и точной при двух различных числах Куранта $r = 0.5, 1$, что наделяет ее уникальными диссипативными и дисперсионными свойствами [3]. Для численного моделирования гидродинамических течений широко применяется двухслойная по времени форма записи схемы КАБАРЕ [4]. Монотонность этой схемы при аппроксимации линейного уравнения переноса в одномерном случае изучалась в [5] и [6], а в двумерном — в [7]. Условия монотонности двухслойной по времени схемы КАБАРЕ, аппроксимирующей скалярный закон сохранения с выпуклым потоком, исследовались в [8] и [9].

В настоящей работе изучается схема КАБАРЕ, аппроксимирующая скалярный закон сохранения с выпуклым потоком, в случае, когда скорость распространения характеристик аппроксимируемого дивергентного уравнения является положительной. Показано, что стандартная схема КАБАРЕ [4] при числах Куранта $r \in (0.5, 1]$ не обеспечивает полного распада неустойчивых сильных разрывов в начальных данных. Для схемы КАБАРЕ получен разностный аналог энтропийного неравенства, с учетом которого предложен метод, гарантирующий монотонность этой схемы и одновременно обеспечивающий полный распад неустойчивых сильных разрывов в ее разностных решениях для любых чисел Куранта, при которых схема КАБАРЕ является устойчивой. Приведены тестовые расчеты, иллюстрирующие данные свойства схемы КАБАРЕ.

1 Стандартная и монотонная схемы КАБАРЕ

Рассмотрим задачу Коши для гиперболического скалярного закона сохранения

$$v_t + f(v)_x = 0, \quad v(x, 0) = v_0(x) \tag{1}$$

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-01-00333).

со строго монотонно возрастающей и строго выпуклой функцией потока $f(v)$:

$$a(v) = f'(v) > 0, \quad a'(v) = f''(v) > 0.$$

Аппроксимируем эту задачу двухслойной по времени схемой КАБАРЕ, заданной на прямоугольной разностной сетке

$$\{x_j, t_n\} : \; x_j = jh, \quad t_{n+1} = t_n + \tau_n, \; t_0 = 0, \tag{2}$$

в которой h — постоянный шаг сетки по пространству, а τ_n — шаг сетки по времени, определяемый из условия устойчивости

$$\tau_n = rh / \max_j |a^n_{j+1/2}|, \tag{3}$$

где $r \in (0,1)$ — число Куранта, $a^n_{j+1/2} = a(U^n_{j+1/2})$. В этой схеме используются потоковые $u^n_j = u(x_j, t_n)$ и консервативные $U^n_{j+1/2} = u(x_{j+1/2}, t_n)$ переменные, заданные соответственно в целых x_j и полуцелых $x_{j+1/2} = x_j + h/2$ пространственных узлах разностной сетки.

Пусть u^n_j, $U^n_{j+1/2}$ — известное численное решение задачи (1) на n-ом временном слое t_n, при $n = 0$ — сеточная аппроксимация начальной функции $v_0(x)$. Численное решение u^{n+1}_j, $U^{n+1}_{j+1/2}$ на $(n+1)$-ом временном слое t_{n+1} находится по стандартной схеме КАБАРЕ [4] в три этапа. На первом этапе по разностным уравнениям

$$\frac{U^{n+1/2}_{j+1/2} - U^n_{j+1/2}}{\tau_n/2} + \frac{f^n_{j+1} - f^n_j}{h} = 0, \tag{4}$$

где $f^n_j = f(u^n_j)$, вычисляются значения консервативных переменных $U^{n+1/2}_{j+1/2} = U(x_{j+1/2}, t_{n+1/2})$ на полуцелом временном слое $t_{n+1/2} = t_n + \tau_n/2$. На втором этапе путем экстраполяции

$$\bar{u}^{n+1}_{j+1} = 2U^{n+1/2}_{j+1/2} - u^n_j \tag{5}$$

находятся предварительные значения потоковых переменных $\bar{u}^{n+1}_{j+1}$, которые корректируются по формуле

$$u^{n+1}_{j+1} = F\left(\bar{u}^{n+1}_{j+1}, m^n_{j+1/2}, M^n_{j+1/2}\right), \tag{6}$$

где

$$F(u,m,M) = \begin{cases} u, & m \le u \le M, \\ m, & u < m, \\ M, & u > M, \end{cases} \tag{7}$$

$$m^n_{j+1/2} = \min\left(u^n_j, U^n_{j+1/2}, u^n_{j+1}\right), \quad M^n_{j+1/2} = \max\left(u^n_j, U^n_{j+1/2}, u^n_{j+1}\right). \tag{8}$$

На третьем, заключительном этапе, по разностным уравнениям

$$\frac{U^{n+1}_{j+1/2} - U^{n+1/2}_{j+1/2}}{\tau_n/2} + \frac{f^{n+1}_{j+1} - f^{n+1}_j}{h} = 0 \tag{9}$$

вычисляются значения консервативных переменных $U^{n+1}_{j+1/2}$ на $(n+1)$-ом временном слое t_{n+1}.

В работе [8] показано, что стандартная схема КАБАРЕ (4)–(9) является немонотонной и предложена ее монотонная модификация, содержащая четыре этапа. В настоящей работе на втором и четвертом этапах мы модифицируем алгоритм, предложенный в [8]. На первом этапе по разностным уравнениям (4) вычисляются значения консервативных переменных $U^{n+1/2}_{j+1/2}$. На втором этапе по формуле (5) находятся величины $\bar{u}^{n+1}_{j+1}$, используемые для определения предварительных значений потоков

$$\bar{f}^{n+1/2}_{j+1} = f\left(\bar{u}^{n+1/2}_{j+1}\right), \quad \bar{u}^{n+1/2}_{j+1} = \left(u^n_{j+1} + \bar{u}^{n+1}_{j+1}\right)/2, \tag{10}$$

которые корректируются по формуле

$$f^{n+1/2}_{j+1} = F\left(\bar{f}^{n+1/2}_{j+1}, m^n_{j+1/2}, M^n_{j+1/2}\right), \tag{11}$$

где

$$m^n_{j+1/2} = \min\left(f^n_{j+1/2}, \max(f^n_{j+1}, \varphi^n_{j+1/2})\right),\ M^n_{j+1/2} = \max\left(f^n_{j+1/2}, \min(f^n_{j+1}, \varphi^n_{j+1/2})\right), \tag{12}$$

$$f^n_{j+1/2} = f(U^n_{j+1/2}), \quad \varphi^n_{j+1/2} = \frac{U^n_{j+1/2} - u^n_j}{r_n} + f^n_j, \quad r_n = \frac{\tau_n}{h}. \tag{13}$$

На третьем этапе по разностным уравнениям типа "крест"

$$\frac{U^{n+1}_{j+1/2} - U^n_j}{\tau_n} + \frac{f^{n+1/2}_{j+1} - f^{n+1/2}_j}{h} = 0 \tag{14}$$

вычисляются значения консервативных переменных $U^{n+1}_{j+1/2}$. На четвертом этапе по формулам

$$\widetilde{u}^{n+1}_j = 2u^{n+1/2}_j - u^n_j, \quad u^{n+1/2}_j = f^{-1}(f^{n+1/2}_j) \tag{15}$$

где f^{-1} — функция, обратная к f, находятся вторые предварительные значения потоковых переменных на $(n+1)$-ом временном слое, которые корректируются по формуле

$$u^{n+1}_j = \begin{cases} F\left(\widetilde{u}^{n+1}_j, m^{n+1}_j, M^{n+1}_j\right), & a^{n+1}_{j-1/2} \geq a^{n+1}_{j+1/2}, \\ \dfrac{1}{2}\left(U^{n+1}_{j-1/2} + U^{n+1}_{j+1/2}\right), & a^{n+1}_{j-1/2} < a^{n+1}_{j+1/2}, \end{cases} \tag{16}$$

где

$$m^{n+1}_j = \min\left(U^{n+1}_{j-1/2}, U^{n+1}_{j+1/2}\right), \quad M^{n+1}_j = \max\left(U^{n+1}_{j-1/2}, U^{n+1}_{j+1/2}\right). \tag{17}$$

2 Распад неустойчивого сильного разрыва

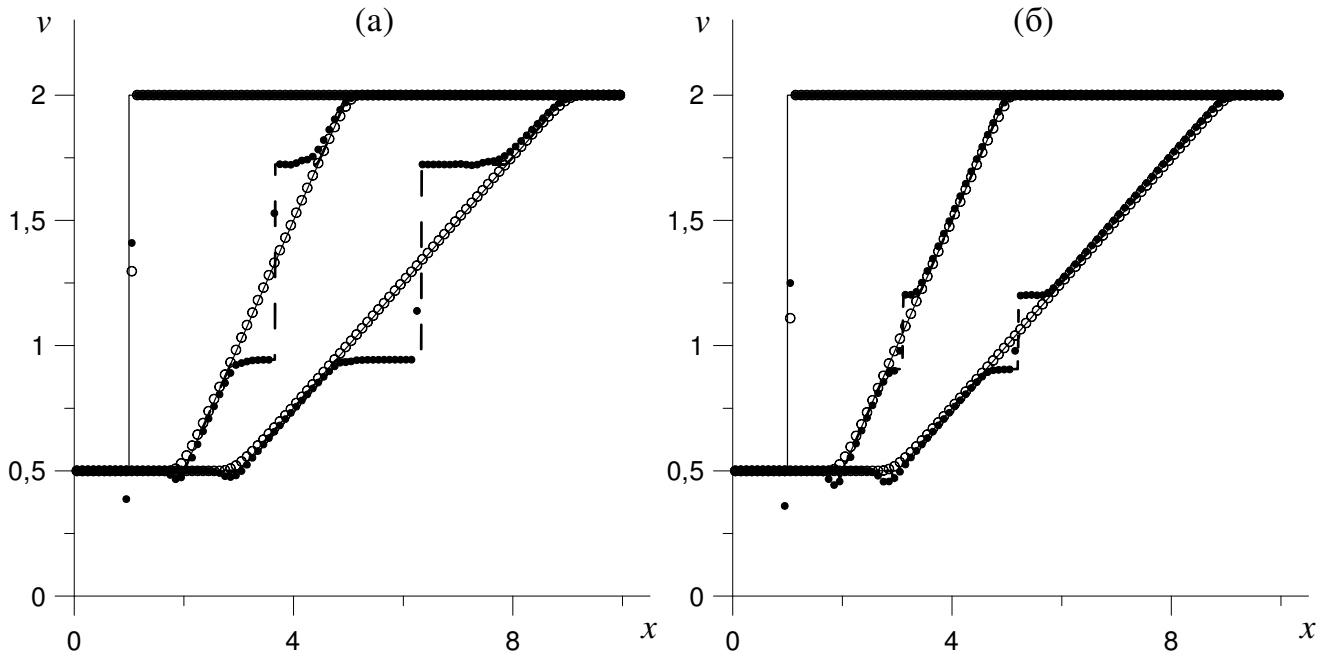


Рис. 1: Сравнение точного и численных решений задачи (1), (18) на три последовательных момента времени $t = \tau$, $t = 2$ и $t = 4$ при числах Куранта $r = 0.75$ (а) и $r = 0.95$ (б). Точки — стандартная схема КАБАРЕ, кружки — монотонная схема КАБАРЕ.

На рис. 1 на три последовательных момента времени $t = \tau$, $t = 2$ и $t = 4$ приведено сравнение точного и численного решений задачи Коши (1), для которой

$$f(v) = \frac{v^2}{2}, \quad v_0(x) = \begin{cases} 0.5, & x < 1, \\ 2, & x \geq 1. \end{cases} \tag{18}$$

Начальная функция $v_0(x)$ имеет в точке $x = 1$ неустойчивый сильный разрыв, который при $t > 0$ преобразуется в центрированную волну разрежения, показанную на рис. 1 сплошными линиями. Расчеты проводились по схемам КАБАРЕ на разностной сетке (2), (3), где $h = 0.1$, $r = 0.75$ (рис. 1а) и $r = 0.95$ (рис. 1б), со следующими сеточными начальными данными

$$U^0_{j+1/2} = v_0(x_{j+1/2}), \quad u^0_j = \frac{U^0_{j-1/2} + U^0_{j+1/2}}{2} \ . \tag{19}$$

Точками изображены результаты расчета консервативной переменной $U^n_{j+1/2}$ по стандартной схеме (4)–(9), а кружками — по монотонной схеме (4), (5), (10)–(17).

Из рис. 1 видно, что стандартная схема КАБАРЕ (в отличие от монотонной схемы) существенно искажает профиль точного решения, не обеспечивая полного распада неустойчивого сильного разрыва, за фронтом которого в этой схеме возникает нефизическая осцилляция, которая с течением времени постепенно сглаживается. При этом численные расчеты, проведенные на последовательности сгущающихся сеток, показали, что разностное решение, получаемое по монотонной схеме, при $h \to 0$ сходится к непрерывному решению аппроксимируемой задачи (1), (18), в то время как разностное решение, получаемое по стандартной схеме, при $h \to 0$ сходится к другому решению, содержащему неустойчивый сильный разрыв (на рис. 1 это решение показано пунктирными линиями). Теоретическое объяснение данных результатов дается в следующем разделе.

3 Разностный аналог энтропийного неравенства

Дифференциальным следствием уравнения (1) является дивергентное дифференциальное уравнение

$$V(v)_t + F(v)_x = 0, \quad V(v) = v^2/2, \quad F(v) = \int a(v)v dv, \tag{20}$$

получаемое в результате умножения уравнения (1) на функцию $v(x,t)$. Поскольку функция $V(v)$ является выпуклой, то уравнение (20) представляет собой выпуклое расширение [10] базисного закона сохранения (1), которое в форме интегрального (энтропийного) неравенства

$$\oint_{\partial S} V(v)dx - F(v)dt \le 0 \tag{21}$$

можно использовать для отбора устойчивых сильных разрывов [11], [12]. Во многих работах, например [13]–[15], при построении разностных схем повышенной точности для обеспечения распада неустойчивых сильных разрывов используются различные варианты разностного аналога энтропийного неравенства.

Применим разностный аналог энтропийного неравенства (21) для обоснования результатов численных расчетов, приведенных в предыдущем разделе. Умножая разностное уравнение (4) на сеточную функцию

$$\widehat{U}^{n+1/2}_{j+1/2} = \frac{1}{2}\left(U^n_{j+1/2} + U^{n+1}_{j+1/2}\right), \tag{22}$$

получим, что для монотонной схемы КАБАРЕ разностное уравнение, аппроксимирующее дополнительный закон сохранения (20), имеет вид

$$\frac{V^{n+1}_{j+1/2} - V^n_{j+1/2}}{\tau_n} + \frac{\widehat{U}^{n+1/2}_{j+1/2}\left(f^{n+1/2}_{j+1} - f^{n+1/2}_j\right)}{h} = 0,$$

где $V^n_{j+1/2} = V(U^n_{j+1/2})$. Перепишем это уравнение в стандартной форме

$$\frac{V^{n+1}_{j+1/2} - V^n_{j+1/2}}{\tau_n} + \frac{F^{n+1/2}_{j+1} - F^{n+1/2}_j}{h} = \frac{\psi^{n+1/2}_{j+1/2}}{h}, \tag{23}$$

где

$$F^{n+1/2}_j = F(u^{n+1/2}_j), \quad \psi^{n+1/2}_{j+1/2} = \int_{u^{n+1/2}_j}^{u^{n+1/2}_{j+1}} a(u)u du - \widehat{U}^{n+1/2}_{j+1/2}\left(f^{n+1/2}_{j+1} - f^{n+1/2}_j\right).$$

Для получения разностного уравнения, аппроксимирующего дополнительный закон сохранения (20) в случае стандартной схемы КАБАРЕ необходимо сеточную функцию (22) умножить на полусумму уравнений (4) и (9), т.е. на симметричное разностное уравнение

$$\frac{U_{j+1/2}^{n+1}-U_{j+1/2}^{n}}{\tau_n}+\frac{\hat{f}_{j+1}^{n+1/2}-\hat{f}_{j}^{n+1/2}}{h}=0,$$

где $\hat{f}_j^{n+1/2}=\left(f_j^n+f_j^{n+1}\right)/2$. В результате получаем уравнение

$$\frac{V_{j+1/2}^{n+1}-V_{j+1/2}^{n}}{\tau_n}+\frac{\widehat{U}_{j+1/2}^{n+1/2}\left(\hat{f}_{j+1}^{n+1/2}-\hat{f}_{j}^{n+1/2}\right)}{h}=0,$$

при записи которого в стандартной форме (23) имеем

$$\psi_{j+1/2}^{n+1/2}=\int_{\hat{u}_j^{n+1/2}}^{\hat{u}_{j+1}^{n+1/2}}a(u)udu-\widehat{U}_{j+1/2}^{n+1/2}\left(\hat{f}_{j+1}^{n+1/2}-\hat{f}_{j}^{n+1/2}\right),\quad \hat{u}_j^{n+1/2}=\frac{u_j^n+u_j^{n+1}}{2}.$$

Предположим, что задача Коши (1), (18) численно решается в сеточной области, содержащей $M+1$ пространственный узел $x_j=jh$, где $j=\overline{0,M}$. Поскольку максимальное значение точного решения этой задачи равно 2, то шаг по времени с учетом условия устойчивости (3) возьмем постоянным $\tau_n=\tau=r/20$. Суммируя разностное уравнение (23), умноженное на h и $\tau_n=\tau$, по пространственным узлам и временным слоям, получаем

$$h\sum_{j=0}^{M-1}\left(V_{j+1/2}^{N}-V_{j+1/2}^{0}\right)+\tau\sum_{n=0}^{N-1}\left(F_M^{n+1/2}-F_0^{n+1/2}\right)=\tau W_N, \tag{24}$$

где

$$W_N=\sum_{n=0}^{N-1}\sum_{j=0}^{M-1}\psi_{j+1/2}^{n+1/2}. \tag{25}$$

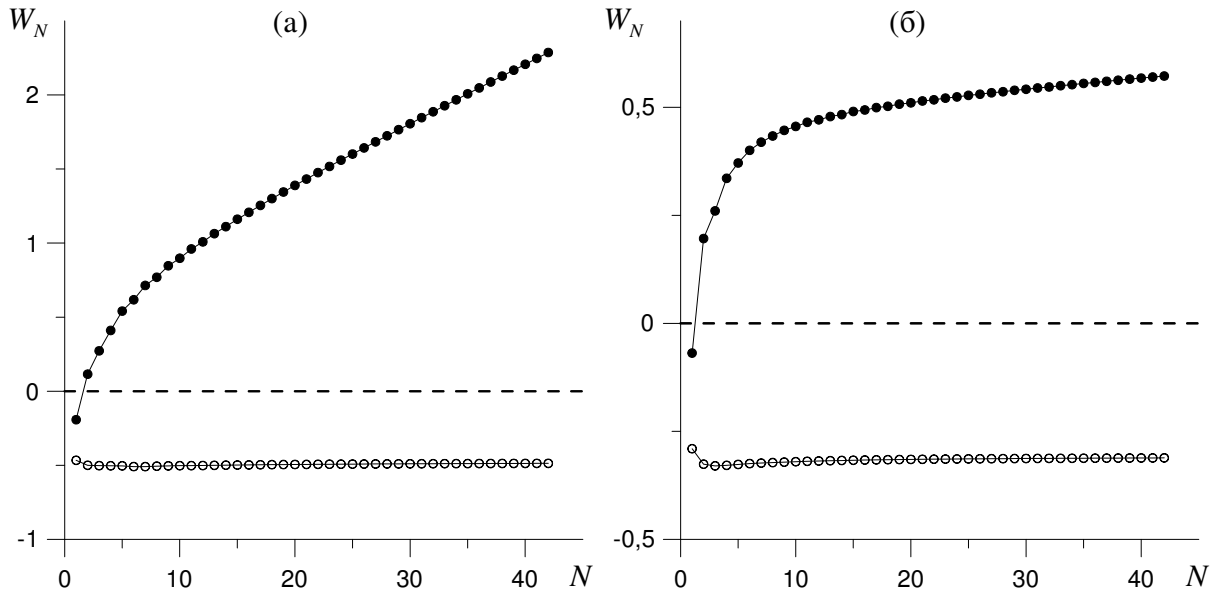


Рис. 2: Графики сеточной функции (25), задающей дисбаланс разностного энтропийного закона сохранения при численном решении задачи (1), (18) для чисел Куранта $r=0.75$ (а) и $r=0.95$ (б). Точки — стандартная схема КАБАРЕ, кружки — монотонная схема КАБАРЕ.

Из уравнения (24) следует, что условие $W_N\le 0$ представляет собой разностный аналог энтропийного неравенства (21) в прямоугольной области $S=\{(x,t):\ 0\le x\le Mh,\ 0\le t\le N\tau\}$. На рис. 2 для стандартной

(точки) и монотонной (кружки) схем КАБАРЕ приведены графики сеточной функций W_N, задающей дисбаланс разностного энтропийного закона сохранения. Из этого рисунка следует, что в отличие от монотонной, стандартная схема КАБАРЕ при $N \geq 2$ не удовлетворяет разностному аналогу энтропийного неравенства $W_N \leq 0$, что и приводит к формированию неустойчивых сильных разрывов в ее разностном решении.

Применим монотонную схему КАБАРЕ для численного решения задачи Коши (1), в которой

$$f(v) = \frac{v^2}{2}, \quad v_0(x) = \begin{cases} 2, & x < 1, \\ 6, & 1 \leq x < 3.5, \\ 1, & 3.5 \leq x < 6, \\ 3, & x \geq 6. \end{cases} \tag{26}$$

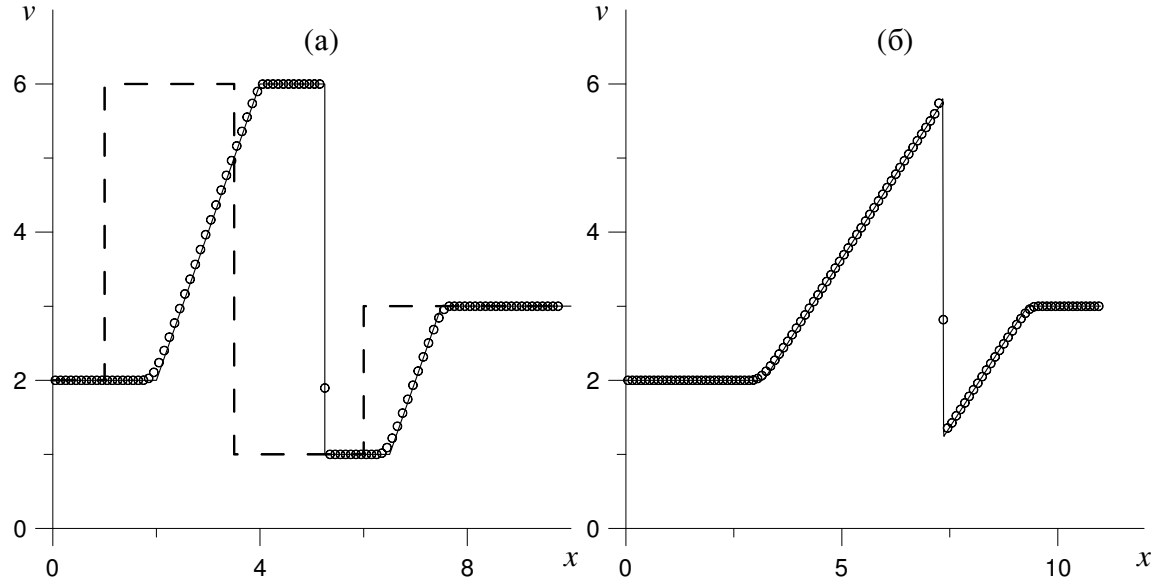


Рис. 3: Сравнение точного и численного решений по монотонной схеме КАБАРЕ задачи (1), (26) на два последовательных момента времени $t = 0.5$ (а) и $t = 1.1$ (б) при числе Куранта $r = 0.95$.

Начальная функция этой задачи имеет один устойчивый и два неустойчивых сильных разрыва. На рис. 3 на два последовательных момента времени приведены результаты численного решения задачи Коши (1), (26) на разностной сетке (1.3), (1.4), где $h = 0.1$ и $r = 0.95$. Пунктирной линией показана начальная функция, сплошными линиями приведено точное решение, а кружками изображены значения консервативной переменной $U^n_{j+1/2}$, получаемые при численном решении, в котором сеточные начальные данные задаются по формулам (19). Из рис. 3 следует, что разностное решение, получаемое по монотонной схеме КАБАРЕ (при числе Куранта близком к максимальному значению $r = 1$, допустимому условием устойчивости) не имеет схемных осцилляций, хорошо воспроизводит профили центрированных волн разрежения, возникающих из неустойчивых сильных разрывов начальных данных, и сохраняет повышенную точность при локализации сильных и слабых разрывов точного решения.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ (проект 16–01–00333).

Список литературы

[1] Iserles A. Generalized leapfrog methods // IMA Journal of Numerical Analysis. 1986. V. 6. N. 3. P. 381–392.

[2] Головизнин В. М., Самарский А. А. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // Матем. моделирование. 1998. Т. 10. № 1. С. 86–100.

[3] Головизнин В. М., Самарский А. А. Некоторые свойства разностной схемы "Кабаре"// Матем. моделирование. 1998. Т. 10. № 1. С. 101–116.

[4] Головизнин В. М., Зайцев М. А., Карабасов С. А., Короткин И. А. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов. М.: Изд. МГУ, 2013.

[5] Ковыркина О. А., Остапенко В. В. О монотонности двухслойной по времени схемы кабаре // Матем. моделирование. 2012. Т. 24. № 9. С. 97–112.

[6] Ковыркина О. А., Остапенко В. В. О монотонности схемы КАБАРЕ, аппроксимирующей гиперболическое уравнение со знакопеременным характеристическим полем // Ж. вычисл. матем. и матем. физики. 2016. Т. 56. № 5. С. 796–815.

[7] Ковыркина О. А., Остапенко В. В. О монотонности схемы КАБАРЕ в многомерном случае // ДАН. 2015. Т. 462. № 4.С. 385–390.

[8] Зюзина Н. А., Остапенко В. В. О монотонности схемы КАБАРЕ, аппроксимирующей скалярный закон сохранения с выпуклым потоком // ДАН. 2016. Т. 466. № 5.

[9] Зюзина Н. А., Остапенко В. В. Монотонная аппроксимация схемой КАБАРЕ скалярного закона сохранения в случае знакопеременного характеристического поля // ДАН. 2016. Т. 470. № 4. С. 375–379.

[10] Friedrichs K. O., Lax P .D. Systems of conservation equation with convex extension // Proc. Nat. Acad. Sci: USA. 1971. V. 68. N 8. P. 1686–1688.

[11] Lax P. D. Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves. Philadelphia: Soc. Ind. Appl. Math., 1972.

[12] Остапенко В. В. Гиперболические системы законов сохранения и их приложение к теории мелкой воды. Новосибирск, НГУ, 2014.

[13] Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // J. Comp. Phys. 1983. V. 49. P. 357–393.

[14] Остапенко В. В. Симметричные компактные схемы с искусственными вязкостями повышенного порядка дивергентности // Ж. вычисл. матем. и матем. физики. 2002. Т. 42. № 7. С. 1018–1037.

[15] Fisher T. C., Carpenter M. H. High-order entropy stable finite difference schemes for nonlinear conservation laws: finite domains. Hampton, Virginia: Langley Research Center, 2013.

Надежда Александровна Зюзина — аспирант Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН;
e-mail: nzyuzina1992@gmail.com;
Владимир Викторович Остапенко — д.ф.-м.н., г.н.с. Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН;
профессор Новосибирского государственного университета;
e-mail: ostapenko_vv@ngs.ru.
Дата поступления — 29 мая 2017 г.

КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ОДНОЙ ПЕРЕОПРЕДЕЛЕННОЙ СТАЦИОНАРНОЙ СИСТЕМЫ, ВОЗНИКАЮЩЕЙ В ДВУХЖИДКОСТНОЙ СРЕДЕ

Х. Х. Имомназаров[1], М. В. Урев[1,2,3]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[3] *Сибирский институт управления — филиал РАНХиГС, 630102, Новосибирск*

УДК 517.956.3

Рассматривается стационарная система двухжидкостной среды с равновесием фаз по давлению и неоднородными дивергентными и краевыми условиями для двух скоростей. Рассматриваема система дифференциальных уравнений является переопределенной. В докладе показана, что решение системы дифференциальных уравнений сводится к последовательному решению двух краевых задач: задачи Стокса для одной скорости и давления и переопределенной системы для другой скорости. Приведены обобщенные постановки этих задач. Для решения переопределенной задачи применяется вариант метода регуляризации.

Ключевые слова: переопределенная стационарная система двухскоростной гидродинамики, множитель Лагранжа.

Введение

Формы движения двухфазных потоков значительно многообразнее, а законы, ими управляющее, существенно сложнее, чем формы движения и законы гидродинамики однородных сред. Интерес исследователей к проблемам и задачам механики многофазных сред обусловлен широким распространением таких систем в природе и их интенсивным использованием в современной технике. Математические модели многофазных или гетерогенных сред описывают различные явления гидро- и газодинамики, теории фильтрации, ракетостроения, угле- и нефтедобычи, ядерной и неядерной теплоэнергетики, металлургической и строительной промышленности, астрофизики. Модели многофазных сред возникают также при рассмотрении разнообразных задач описания техногенных систем: моделирование динамических процессов в нефтяных скважинах и приповерхностных пластах; а так же при описании эндогенных процессов и при решении связанных с ними задач геодинамики и моделирования рудообразующих структур в рамках единой согласованной модели эволюции системы, включающей верхнюю мантию, мантийную литосферу и земную кору, включая геоэкологический мониторинг за конкретными природными и техногенными объектами.

В [1, 2] для объяснения локализации и генерации магмы предложена нелинейная математическая модель на основе метода законов сохранения. В этих работах сплошная среда в геологическом временном масштабе представлена как вязкая жидкость-1 за счет собственной вязкости, либо достигающая необходимых термодинамических условий протекания фазового перехода по другим причинам. По границам зерен и межзеренным узлам начинает скапливаться магма-жидкость-2 с вязкостью, присущей известным в геологии расплавам. Такой расплав включается в процесс совместного тепломассопереноса и фильтруется сквозь систему, его породившую. Другими словами, эта модель представляет собой динамику взаимного проникновения одной менее вязкой жидкости сквозь более вязкую среду, как своеобразный процесс фильтрации.

В ограниченной односвязной области Ω трехмерного евклидова пространства $\mathbb{R}^3$ с достаточно гладкой границей $\partial\Omega$ рассматривается линеаризованная стационарная неоднородная система двухскоростной гидродинамики [3]–[5].

$$\nu_1 \mathbf{\Delta u}_1 - \nabla p = -\rho \mathbf{f}, \quad \mathrm{div}\mathbf{u}_1 = 0 \quad \text{в } \Omega \tag{1}$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 14-11-00485).

$$\nu_2\boldsymbol{\Delta}\mathbf{u}_2 - \nabla p = -\rho\mathbf{f}, \quad \mathrm{div}\mathbf{u}_2 = 0 \quad \text{в } \Omega \tag{2}$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{g}_1, \quad \mathbf{u}_2 = \mathbf{g}_2 \qquad \text{на } \partial\Omega, \tag{3}$$

где $\mathbf{f} = (f_1, f_2, f_3)$ — массовая сила, $\mathbf{u}_i = (u_{i1}, u_{i2}, u_{i3})$, $i = 1, 2$, grad — оператор градиента по $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$, ν_1 и ν_2 — соответствующие сдвиговые вязкости фаз [5]. Через $\boldsymbol{\Delta}$ и $\triangle$ будем обозначать векторный и скалярный операторы Лапласа соответственно, так что

$$\boldsymbol{\Delta}\mathbf{v} := -\mathrm{rotrot}\mathbf{v} + \nabla\mathrm{div}\mathbf{v}, \quad \triangle\varphi := \mathrm{div}\nabla\varphi.$$

В п. 2 для исходной переопределенной системы (1)–(3) устанавливается необходимое условие разрешимости. Затем система (1)–(3) заменой неизвестных скоростей и правых частей в векторных уравнениях (1) и (2) приводится к системе с однородными дивергентными ограничениями и однородными краевыми условиями для скоростей. Для преобразованной системы необходимым условием разрешимости является равенство дивергенций от правых частей векторных уравнений. Наличие условий согласования данных связано с переопределенностью системы (1)–(3). В полученную переопределенную систему вводится дополнительное слагаемое в виде градиента от новой неизвестной скалярной функции с нулевым граничным условием. Такая функция называется множителем Лагранжа. Далее решение данной системы сводится к последовательному решению двух краевых задач: задачи Стокса для одной скорости и давления и задачи с множителем Лагранжа для второй скорости.

В п. 3 приводятся необходимые сведения из функционального анализа и формулируются обобщенные постановки для приведенных выше двух краевых задач. Для задачи Стокса принята хорошо изученная смешанная обобщенная постановка в терминах скорость-давление. Для второй векторной задачи смешанная обобщенная постановка оригинальным приемом приводится к регуляризированному уравнению.

1 Рассмотрение системы при гладких данных

В данном пункте будем выполнять преобразования, связанные с системой (1)–(3), предполагая, что все функции обладают необходимой гладкостью.

Заметим, что правые части дивергентных уравнений в (1) и (2) должны удовлетворять определенным условиям согласования. Действительно, применяя формулу векторного анализа $\mathrm{divrot}\mathbf{v} = 0$ получим, что

$$\mathrm{div}\boldsymbol{\Delta}\mathbf{v} = \mathrm{divgrad}(\mathrm{div}\mathbf{v}) = \triangle(\mathrm{div}\mathbf{v}). \tag{4}$$

Далее, действуя на первые векторные уравнения в (1) и (2) оператором дивергенции, получим из одного уравнения

$$\triangle p = \nu_1\triangle q_1 + \rho\mathrm{div}\mathbf{f},$$

а из другого

$$\triangle p = \nu_2\triangle q_2 + \rho\mathrm{div}\mathbf{f}, \tag{5}$$

откуда

$$\nu_1\triangle q_1 = \nu_2\triangle q_2. \tag{6}$$

Граничные функции $\mathbf{g}_i$ в (3) должны удовлетворять следующим соотношениям:

$$\int_{\partial\Omega}\mathbf{g}_i\cdot\mathbf{n}\,d\,s = \int_\Omega q_i\,d\,\mathbf{x}, \quad i = 1, 2, \tag{7}$$

где $\mathbf{n}$ — единичный вектор внешней нормали к границе $\partial\Omega$. Систему уравнений (1)–(3) можно свести к равносильной системе с однородными дивергентными и краевыми условиями. Для этого вводим функции $\tilde{\mathbf{u}}_i = \mathrm{grad}\psi_i$, $i = 1, 2$, где ψ_i — решения граничных задач

$$\triangle\psi_i = q_i \quad \text{в } \Omega, \quad \psi_i = 0 \quad \text{на } \partial\Omega.$$

Тогда новые искомые функции $\tilde{\mathbf{v}}_i = \mathbf{u}_i - \tilde{\mathbf{u}}_i$ будут удовлетворять системе уравнений

$$\nu_i\boldsymbol{\Delta}\tilde{\mathbf{v}}_i - \mathrm{grad}p = \tilde{\mathbf{f}}_i, \quad \mathrm{div}\tilde{\mathbf{v}}_i = 0, \quad \text{в}\,\Omega, \quad i = 1, 2, \tag{8}$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_1 = \mathbf{a}_1, \quad \tilde{\mathbf{v}}_2 = \mathbf{a}_2 \quad \text{на}\,\partial\Omega, \tag{9}$$

где $\tilde{\mathbf{f}}_i = -\nu_i \boldsymbol{\Delta}\mathrm{grad}\psi_i - \rho\mathbf{f}$ в Ω и $\mathbf{a}_i = \mathbf{g}_i - \mathrm{grad}\psi_i$ на $\partial\Omega$. Отметим, что если имеют место соотношения (6) и (7), то правые части $\tilde{\mathbf{f}}_i$ в (8) и граничные функции $\mathbf{a}_i$ в (9) удовлетворяют условиям

$$\mathrm{div}\tilde{\mathbf{f}}_1 = \mathrm{div}\tilde{\mathbf{f}}_2, \quad \text{в}\,\Omega, \qquad \int_{\partial\Omega} \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{n}\, d\,s = 0, \quad i = 1, 2. \tag{10}$$

Граничные функции $\mathbf{a}_i$ в (9), удовлетворяющие условиям (10), могут быть продолжены в область Ω в виде соленоидальных функций $\mathbf{z}_i$, то есть так, что $\mathrm{div}\mathbf{z}_i = 0$ в Ω и $\mathbf{z}_i = \mathbf{a}_i$ на $\partial\Omega$ [см. [6] с. 38, [7] Лемма 2.2]. Положим $\tilde{\mathbf{v}}_i = \mathbf{v}_i + \mathbf{z}_i$. Тогда из системы (8)–(9) получим следующую систему уравнений относительно функций $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, p$:

$$\nu_i \boldsymbol{\Delta}\mathbf{v}_i - \mathrm{grad}p = \mathbf{f}_i, \quad \mathrm{div}\mathbf{v}_i = 0, \quad \text{в}\,\Omega, \quad i = 1, 2, \tag{11}$$

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{0}, \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{0}, \quad \text{на}\,\partial\Omega, \tag{12}$$

где $\mathbf{f}_i = \tilde{\mathbf{f}}_i - \nu_i \boldsymbol{\Delta}\mathbf{z}_i$ в Ω. Кроме того, функции $\mathbf{f}_i$ должны удовлетворять условию разрешимости системы (11)–(12), а именно, необходимо, чтобы

$$\mathrm{div}\mathbf{f}_1 = \mathrm{div}\mathbf{f}_2, \quad \text{в}\,\Omega. \tag{13}$$

Далее будем рассматривать систему уравнений (11)–(12), которая является переопределенной, так как состоит из восьми уравнений и семи искомых скалярных функций и, следовательно, не является эллиптической. Следуя [8] мы добавим к нашей системе градиент от новой искомой функции φ с нулевым граничным условием так, что наша система станет эллиптической. Такую функцию φ принято называть множителем Лагранжа. Итак, вместо системы (11)–(12) будем рассматривать расширенную систему

$$\nu_1 \boldsymbol{\Delta}\mathbf{v}_1 - \mathrm{grad}p = \mathbf{f}_1, \quad \mathrm{div}\mathbf{v}_1 = 0, \qquad \text{в}\,\Omega \tag{14}$$

$$\nu_2 \boldsymbol{\Delta}\mathbf{v}_2 - \mathrm{grad}p + \mathrm{grad}\varphi = \mathbf{f}_2, \quad \mathrm{div}\mathbf{v}_2 = 0, \quad \text{в}\,\Omega \tag{15}$$

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{0}, \ \mathbf{v}_2 = \mathbf{0}, \ \varphi = 0 \qquad \text{на}\,\partial\Omega. \tag{16}$$

Решение системы (14)–(16) сводится к последовательному решению двух краевых задач. Сначала рашается задача для $(\mathbf{v}_1, p)$:

$$\nu_1 \boldsymbol{\Delta}\mathbf{v}_1 - \mathrm{grad}p = \mathbf{f}_1, \quad \mathrm{div}\mathbf{v}_1 = 0 \ \text{в}\,\Omega, \quad \mathbf{v}_1 = \mathbf{0} \quad \text{на}\,\partial\Omega. \tag{17}$$

Затем определяется пара $(\mathbf{v}_2, \varphi)$ как решение системы

$$\nu_2 \boldsymbol{\Delta}\mathbf{v}_2 + \mathrm{grad}\varphi = \mathrm{grad}p + \mathbf{f}_2, \quad \mathrm{div}\mathbf{v}_2 = 0 \ \text{в}\,\Omega,$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{0}, \ \varphi = 0 \quad \text{на}\,\partial\Omega. \tag{18}$$

Для задач (17) и (18) выполнение условия согласования (13) не предполагается. Если же условие (13) выполнено, то $\varphi = 0$ в Ω и тройка функций $(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, p)$ удовлетворяет системе (11)-(12). Действительно, пусть выполнено условие (13). Тогда после применения к первому уравнению системы (17) и к первому уравнению системы (18) оператора div, ввиду (4), (13) и равенств $\mathrm{div}\mathbf{v}_i = 0$, $i = 1, 2$, получим:

$$\begin{aligned} &-\Delta p = \mathrm{div}\mathbf{f}_1, \\ &\mathrm{div}(\nu_2 \boldsymbol{\Delta}\mathbf{v}_2 + \mathrm{grad}\varphi) = \triangle\varphi, \\ &\mathrm{div}(\mathrm{grad}p + \mathbf{f}_2) = \Delta p + \mathrm{div}\mathbf{f}_2 = -\mathrm{div}\mathbf{f}_1 + \mathrm{div}\mathbf{f}_2 = 0. \end{aligned}$$

Откуда имеем

$$\triangle\varphi = 0 \ \text{в}\,\Omega, \quad \varphi = 0 \ \text{на}\,\partial\Omega.$$

Значит $\varphi = 0$ в Ω.

Отметим, что множитель Лагранжа φ можно было ввести в первое векторное уравнение системы (14) и последовательно решать две краевые задачи в обратном порядке. При выполнении условия согласования (13) результат решения не измениться.

2 Обобщенная постановка

Сначала приведем обобщенную постановку задачи (17). Для этого введем необходимые гильбертовы функциональные пространства [9]. Через $H^k(\Omega)$, где k положительное целое, будем обозначать скалярные гильбертовы пространства Соболева $W_2^k(\Omega)$

$$H^k(\Omega) = \{f \in L^2(\Omega) : D^\alpha f \in L^2(\Omega),\ \forall |\alpha| \le k\}.$$

Здесь $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ — мультииндекс, $|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$, D^α — это дифференциальный оператор

$$D^\alpha f = \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \partial x_3^{\alpha_3}}.$$

Норма и полунорма в них обозначаются через $\|\cdot\|_{k,\Omega}$ и $|\cdot|_{k,\Omega}$ соответственно и определяются равенствами

$$\|f\|_{k,\Omega}^2 = \int_\Omega \sum_{|\alpha|\le k} (D^\alpha f)^2\, d\mathbf{x}, \quad |f|_{k,\Omega}^2 = \int_\Omega \sum_{|\alpha|=k} (D^\alpha f)^2\, d\mathbf{x}.$$

Введем также пространства

$$\mathbf{H}^k(\Omega) = (H^k(\Omega))^3, \quad H_0^1(\Omega) = \{f \in H^1(\Omega) : f|_{\partial\Omega} = 0\},$$

$$X = \mathbf{H}_0^1(\Omega) = (H_0^1(\Omega))^3,\ P = L_0^2(\Omega) = \Big\{p \in L^2(\Omega);\ \int_\Omega p\, d\mathbf{x} = 0\Big\}.$$

Для пространства вектор-функций $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3) \in \mathbf{H}^k(\Omega)$ норма и полунорма в нем обозначаются аналогично скалярному случаю и определяются равенствами

$$\|\mathbf{u}\|_{k,\Omega} = \Big(\sum_{s=0}^{k} |\mathbf{u}|_{s,\Omega}^2\Big)^{1/2}, \quad |\mathbf{u}|_{s,\Omega} = \Big(\sum_{i=1}^{3} |u_i|_{s,\Omega}^2\Big)^{1/2},\ s = 0, \dots, k.$$

Для функций $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3) \in X$ и $p \in P$ имеем

$$\|\mathbf{u}\|_X = \Big(\sum_{i=1}^{3} |u_i|_{1,\Omega}^2\Big)^{1/2},\ \|p\|_P = \|p\|_{0,\Omega} = \Big(\int_\Omega p^2\, d\mathbf{x}\Big)^{1/2}.$$

Далее для $G \subset \mathbb{R}^3$ через $(\cdot,\cdot)_{0,G}$, или просто $(\cdot,\cdot)_0$ в очевидных случаях, будем обозначать скалярное произведение как в $L^2(G)$, так и в $\mathbf{L}^2(G) = (L^2(G))^3$. Таким образом, если $p, q \in L^2(G)$, а $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbf{L}^2(G)$, то

$$(p, q)_{0,G} = \int_G pq\, d\mathbf{x}, \quad (\mathbf{u}, \mathbf{v})_{0,G} = \int_G \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}\, d\mathbf{x}.$$

Введем билинейные формы $a_1(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ на $X \times X$ и $b_1(\mathbf{v}, q)$ на $X \times P$

$$a_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \nu_1(\mathrm{grad}\mathbf{u}, \mathrm{grad}\mathbf{v})_0 = \nu_1 \sum_{i,j=1}^{3} \Big(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \frac{\partial v_i}{\partial x_j}\Big)_0,$$

$$b_1(\mathbf{v}, q) = -(q, \mathrm{div}\mathbf{v})_0.$$

Система (17) является стационарной задачей Стокса движения вязкой несжимаемой жидкости. В качестве ее обобщенной постановки примем широко распространенную смешанную формулировку: найти вектор-функцию $\mathbf{v}_1 \in X$ и функцию $p \in P$, удовлетворяющие равенствам

$$a_1(\mathbf{v}_1, \mathbf{u}) + b_1(\mathbf{u}, p) = -(\mathbf{f}_1, \mathbf{u})_0 \qquad \forall \mathbf{u} \in X, \tag{19}$$

$$b_1(\mathbf{v}_1, q) = 0 \qquad \forall q \in P. \tag{20}$$

Смешанная постановка (19)–(20) задачи Стокса в терминах скорость-давление исследована, например, в [7]. Там же подробно рассмотрен метод конечных элементов для численного решения данной задачи.

Теперь сформулируем обобщенную постановку для задачи (18). Для этого введем гильбертовы пространства, см. [7]

$$H(\mathrm{rot};\Omega)=\{\mathbf{u}\in\mathbf{L}_2(\Omega):\mathrm{rot}\,\mathbf{u}\in\mathbf{L}_2(\Omega)\},$$

$$H_0(\mathrm{rot};\Omega)=\{\mathbf{u}\in H(\mathrm{rot};\Omega):\mathbf{n}\times\mathbf{u}|_{\partial\Omega}=\mathbf{0}\},$$

$$V=H_0(\mathrm{rot};\Omega),\quad Q=H_0^1(\Omega).$$

Пространство V снабжается следующей нормой:

$$\|\mathbf{u}\|_V=(\|\mathrm{rot}\,\mathbf{u}\|^2_{0,\Omega}+\|\mathbf{u}\|^2_{0,\Omega})^{1/2},\qquad \mathbf{u}\in V.$$

Обозначим через $-\mathbf{F}_2$ правую часть в первом уравнении системы (18): $-\mathbf{F}_2=\mathrm{grad}p+\mathbf{f}_2$. Имея ввиду формулу векторного анализа для определения векторного оператора Лапласа, перепишем систему (18) в следующем виде:

$$\begin{cases}\nu_2\mathrm{rotrot}\mathbf{v}_2-\mathrm{grad}\varphi=\mathbf{F}_2 & \text{в }\Omega,\\ \mathrm{div}\mathbf{v}_2=0 & \text{в }\Omega,\\ \mathbf{v}_2=\mathbf{0},\ \varphi=0 & \text{на }\partial\Omega.\end{cases}\tag{21}$$

Теперь вариационную постановку задачи (21) в области Ω сформулируем следующим образом: пусть $\mathbf{F}_2\in\mathbf{L}^2(\Omega)$, требуется найти пару функций $(\mathbf{v}_2,\varphi)\in V\times Q$, удовлетворяющих равенствам

$$\begin{cases}a_2(\mathbf{v}_2,\mathbf{u})+b_2(\mathbf{u},\varphi)=(\mathbf{F}_2,\mathbf{u})_0 & \forall\,\mathbf{u}\in V,\\ b_2(\mathbf{v}_2,\psi)=0 & \forall\psi\in Q.\end{cases}\tag{22}$$

Здесь $a_2(\cdot,\cdot)$ и $b_2(\cdot,\cdot)$ обозначают билинейные формы на пространствах $V\times V$ и $V\times Q$ соответственно

$$a_2(\mathbf{u},\mathbf{v})=\nu_2\int_\Omega\mathrm{rot}\,\mathbf{u}\cdot\mathrm{rot}\,\mathbf{v}\,d\mathbf{x}\qquad\forall\,\mathbf{u},\mathbf{v}\in V,\tag{23}$$

$$b_2(\mathbf{u},\psi)=-\int_\Omega\mathbf{u}\cdot\nabla\psi\,d\mathbf{x}\qquad\forall\,\mathbf{u}\in V,\ \forall\,\psi\in Q.\tag{24}$$

Очевидно, что $a_2(\cdot,\cdot)$ и $b_2(\cdot,\cdot)$ являются непрерывными билинейными формами на пространствах $V\times V$ и $V\times Q$ соответственно, а $F(\mathbf{u})=(\mathbf{F}_2,\mathbf{u})_0$ — непрерывным линейным функционалом на пространстве V.

Билинейным формам $a_2(\cdot,\cdot)$ и $b_2(\cdot,\cdot)$ отвечают два ограниченных линейных оператора $\mathcal{A}\in\mathcal{L}(V,V')$ и $\mathcal{B}\in\mathcal{L}(V,H^{-1}(\Omega))$, определяемые как

$$<\mathcal{A}\mathbf{u},\mathbf{v}>=a_2(\mathbf{u},\mathbf{v})\qquad\forall\,\mathbf{u},\mathbf{v}\in V,$$

$$<\mathcal{B}\mathbf{u},\psi>=b_2(\mathbf{u},\psi)\qquad\forall\,\mathbf{u}\in V,\ \forall\,\psi\in Q,$$

где V' и $H^{-1}(\Omega)=Q'$ — сопряженные пространства для V и Q соответственно, а запись $<\cdot,\cdot>$ обозначает отношение двойственности между элементами исходного и сопряженного ему пространства.

Воспользуемся теперь спецификой нашей исходной задачи (22), связанной с конкретным видом билинейных форм $a_2(\cdot,\cdot)$ и $b_2(\cdot,\cdot)$, которая позволяет исключить из системы (22) множитель Лагранжа φ. Отметим, что если $\psi\in Q$, то $\nabla\psi\in V$, и тогда

$$a_2(\mathbf{u},\nabla\psi)=0\qquad\forall\,\mathbf{u}\in V,\ \forall\,\psi\in Q,$$

что позволяет выделить из системы (22) отдельную задачу для множителя Лагранжа φ, а именно, найти $\varphi\in Q$:

$$b_2(\nabla\psi,\varphi)=(\mathbf{F}_2,\nabla\psi)_0\qquad\forall\,\psi\in Q.\tag{25}$$

Используя (25), перепишем второе уравнение в системе (22) в следующем виде:

$$b_2(\mathbf{v}_2,\psi)+\beta b_2(\nabla\psi,\varphi)=\beta(\mathbf{F}_2,\nabla\psi)_0\qquad\forall\,\psi\in Q,\tag{26}$$

где $\beta>0$ — произвольная постоянная.

Равенство (26) будем рассматривать как другое уравнение относительно функции φ, то есть как задачу определения $\varphi\in Q$:

$$c(\varphi,\psi)=\beta^{-1}b_2(\mathbf{v}_2,\psi)-(\mathbf{F}_2,\nabla\psi)_0\qquad\forall\,\psi\in Q.\tag{27}$$

Здесь $c(\cdot,\cdot): Q \times Q \to \mathbb{R}$ — билинейная форма, определенная равенством

$$c(\varphi,\psi) = -b_2(\nabla\psi,\varphi) \qquad \forall\,\varphi,\psi \in Q.$$

Непрерывность формы $c(\cdot,\cdot)$ на $Q \times Q$ и ее Q — эллиптичность показаны в [10]. Ограниченность линейного функционала в правой части (27) на пространстве Q также устанавливается просто:

$$|(\mathbf{F}_2,\nabla\psi)_0 - \beta^{-1}b_2(\mathbf{v}_2,\psi)| \le (\|\mathbf{F}_2\|_0 + \beta^{-1}\|\mathbf{v}_2\|_0)\|\psi\|_1 \quad \forall\,\psi \in Q.$$

Таким образом, выполнены все условия леммы Лакса–Мильграма для однозначной разрешимости вариационной задачи (27).

Представим задачу (27) в операторном виде. Известно (см. [7], п.1.2), что ограниченный линейный оператор $\mathcal{C}: Q \to H^{-1}(\Omega)$, определяемый равенством

$$< \mathcal{C}\varphi,\psi >= c(\varphi,\psi) \qquad \forall\,\varphi,\psi \in Q,$$

является изоморфизмом и, следовательно, имеет ограниченный обратный оператор $\mathcal{C}^{-1}: H^{-1}(\Omega) \to Q$. Напомним также определение обобщенной дивергенции функции $\mathbf{F}_2 \in \mathbf{L}^2(\Omega)$ как функционала $\div\mathbf{F}_2 \in H^{-1}(\Omega)$, который задается равенством

$$< \mathrm{div}\mathbf{F}_2, q >= -(\mathbf{F}_2,\nabla q)_0 \qquad \forall\, q \in Q.$$

Теперь вариационную задачу (27) можно переписать в следующем виде:

$$< \mathcal{C}\varphi,\psi >=< \beta^{-1}\mathcal{B}\mathbf{v}_2,\psi > + < \mathrm{div}\mathbf{F}_2,\psi > \qquad \forall\,\psi \in Q,$$

что соответствует операторному уравнению

$$\mathcal{C}\varphi = \beta^{-1}\mathcal{B}\mathbf{v}_2 + \div\mathbf{F}_2.$$

Таким образом, решение задачи (27) можно представить как

$$\varphi = \beta^{-1}\mathcal{C}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{v}_2 + \mathcal{C}^{-1}\mathrm{div}\mathbf{F}_2. \tag{28}$$

Подставляя в первое уравнение системы (22) вместо функции φ ее выражение в правой части (28), получим отдельную вариационную задачу для определения векторной функции $\mathbf{v}_2$ во всем пространстве V. Именно, найти $\mathbf{v}_{2,\beta} \in V$: $\forall\,\mathbf{u} \in V$

$$a_2(\mathbf{v}_{2,\beta},\mathbf{u}) + \beta^{-1} < \mathcal{B}\mathbf{u},\mathcal{C}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{v}_{2,\beta} >= (\mathbf{F}_2,\mathbf{u})_0 - < \mathcal{B}\mathbf{u},\mathcal{C}^{-1}\mathrm{div}\mathbf{F}_2 > . \tag{29}$$

Теорема существования и единственности решения вариационной задачи (29) доказана в [10] [10].

Отметим, что в отличие от общего случая регуляризации (см. [7], п. 4.3) использование специфики билинейной формы $a_2(\cdot,\cdot)$ и билинейной формы $c(\cdot,\cdot)$, связанной с оператором Лапласа $\mathcal{C}$, позволило сформулировать регуляризованную задачу в виде уравнения (29) так, что пара $(\mathbf{v}_{2,\beta},\varphi_\beta)$ будет точным решением системы (22) при любом $\beta > 0$. Здесь $\mathbf{v}_{2,\beta}$ — решение задачи (29), а φ_β определяется формулой (28). В случае выполнения равенства $\mathrm{div}\mathbf{F}_2 = 0$, что соответствует условию согласования $\mathrm{div}\mathbf{f}_1 = \mathrm{div}\mathbf{f}_2$ для задач (17) и (18), нетрудно видеть, что $\varphi_\beta = 0$ и $\mathbf{v}_{2,\beta}$ является решением задачи (21) без множителя Лагранжа φ.

Заключение

— Исходная переопределенная система (1)–(3) с неоднородными дивергентными и краевыми условиями приведена заменами искомых скоростей к системе (14)–(16) с однородными условиями.

— Решение системы (14)–(16) сводится к последовательному решению двух краевых задач: задачи Стокса для одной скорости и давления и переопределенной задачи для второй скорости.

— Для задачи Стокса принята смешанная обобщенная постановка в терминах скорость-давление, которая хорошо изучена.

— Для решения второй переопределенной задачи использован новый вариант метода регуляризации, ранее предложенный и исследованный в работах [10], [13], [14] с участием одного из авторов.

Список литературы

[1] Доровский В.Н. Образование диссипативных структур в процессе необратимой передачи импульса литосферы // Геология и геофизика, 1987, No. 6, с. 108–117.

[2] Доровский В.Н., Перепечко Ю.В. Теория частичного плавления // Геология и геофизика, 1989, No. 9, с. 56–64.

[3] Джураев Д., Имомназаров Х.Х., Урев М.В. Краевая задача для одной переопределенной системы, возникающей в двухскоростной гидродинамике // Тезисы республиканской научной конф. (с участием зарубежных ученых) "Математическая физика и родственные проблемы современного анализа 26–27 ноября 2015 г., Бухара, с. 197–198.

[4] Имомназаров Х.Х., Имомназаров Ш.Х., Маматкулов М.М., Черных Е.Г. Фундаментальное решение для стационарного уравнения двухскоростной гидродинамики с одним давлением // Сиб. журн. индустр. матем., 2014, т. 17, № 4, с. 60–66.

[5] Жабборов Н.М., Имомназаров Х.Х. Некоторые начально-краевые задачи механики двухскоростных сред. Ташкент, 2012., 212 с.

[6] Ладыженская О.А. Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости. — М.: Изд. “Наука”, 1970, 288 с.

[7] Girault V. and Raviart P.-A. Finite element methods for Navier-Stokes equations. Springer-Verlag, Berlin, 1986.

[8] Гудович И.С., Крейн С.Г., Куликов И.М. Краевые задачи для уравнений Максвелла // Доклады АН СССР, 1972, т. 207, № 2, с. 321–324.

[9] Лионс Ж.-Л., Мадженес Э. Неоднородные граничные задачи и их приложения. — М.: Мир, 1971.

[10] Кремер И.А., Урев М.В. Регуляризация стационарной системы Максвелла в неоднородной проводящей среде и решение ее методом конечных элементов // Сиб. журн. вычисл. матем., 2009, т. 12, № 2, с. 161–170.

[11] Nedelec J.C. A new family of mixed finite elements in $\mathbb{R}^3$ // Numer. Math., 1986, v. 50, p. 57–81.

[12] Ф.Сьярле Метод конечных элементов для эллиптических задач. — М.: Мир, 1980.

[13] Кремер И.А., Урев М.В. Решение методом конечных элементов регуляризованной версии стационарной системы Максвелла в неоднородной проводящей среде // Сиб. журн. вычисл. матем., 2010, т. 13, № 1, с. 33–49.

[14] Иванов М.И., Кремер И.А., Урев М.В. Решение методом регуляризации квазистационарной системы Максвелла в неоднородной проводящей среде // Журн. вычисл. матем. и матем. физ., 2012, т. 52, № 3, с. 564–576.

Холматжон Худайназарович Имомназаров — д.ф.-м.н., ведущий науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: imom@omzg.sscc.ru.
Михаил Вадимович Урев — д.ф.-м.н., ведущий науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет,
Сибирский институт управления — филиал РАНХиГС;
e-mail: urev@nmsf.sscc.ru.
Дата поступления — 29 мая 2017 г.

АНАЛИЗ РАДАРОГРАММ ОПЫТНОГО ОБРАЗЦА ГЕОРАДАРА НА МИШЕНЯХ В ЛАБОРАТОРНЫХ И ПОЛЕВЫХ УСЛОВИЯХ

К. Т. Искаков[1], С. А. Боранбаев[1], А. Т. Кусаинова[1], О. К. Туенбаев[2]

[1] *Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, 010008, Астана*
[2] *Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, 050040, Алматы*

УДК 550.8

В работе представлены результаты проведения тестовых экспериментов с опытным георадаром [1] для определения максимальной глубины зондирования и разрешающей способности при различных частотах зондирующего импульс на искусственных мишенях в лабораторных условиях [2]. Проведена диагностика глубины зондирования опытного образца георадара на основе известных инженерно-технических приемов [3].

Ключевые слова: георадиолокационные исследования, георадар, опытный образец георадара, зондирование.

1 Основные узлы опытного образца георадара

На основе разработанного технического задания для опытного образца георадилокационной системы, получены технические характеристики этой системы. Основные узлы прибора: блок передатчика; блок приемника; блок формирования временных интервалов; блока питания. Проектирование и моделирование принципиальных схем компонентов опытного образца георадара осуществлялось с помощью комплексной системы проектирования высокоскоростных электронных устройств Altium Designer /1/. Используются современные технологии, способные излучать электромагнитные сигналы в среду обследования, принимать и записывать отраженные электромагнитные сигналы, затем строить радарограмму на основе отраженных электромагнитных сигналов. Комплект оборудования интегрирует в себе основные узлы: блок передатчика; блок приемника; блок формирования временных интервалов; блока питания, а также соответствующие программные обеспечения для обработки георадарных данных. Геофизические измерения позволяют определить физические характеристики слоев грунта и сделать выводы об их строении и структуре материала с поверхности земли или воды. В ходе реализации технического задания проводились лабораторные исследования основных узлов георадара. Были созданы собственные экспериментальные образцы основных узлов георадара: блока передатчика; блока приемника; блока формирования временных интервалов; блока питания. Апробированы различные конструктивные решения формирования зондирующего импульса передатчика. Радиолокационный прибор подповерхностного зондирования предназначен для геофизических измерений, позволяющих определить физические характеристики слоев грунта, формировать и передавать зондирующие импульсы и интерпретировать полученные отраженные/поглощенные сигналы. Состав измерителя: блок формирования временных интервалов (БФВИ); блок формирования зондирующих импульсов (БФЗИ); блок приемника (БСП); аналого-цифровой преобразователь (АЦП); блок питания (БП). Управление измерителя осуществляется от ЭВМ. Структурная схема измерителя представлена на рисунке 1.

Георадиолокационная система состоит из следующих узлов: блока передатчика; блока приемника; блока формирования временных интервалов; блока питания. На рисунках 2–3 представлены основные узлы прибора.

Опишем этапы формирования сигнала. Импульс формируется на интервале порядка одной наносекунды. Из них порядка 0,6 НС занимает сам импульс (1,0)., т.е. излучается импульс порядка 2 МГЦ, затем сброс —

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и наук Республики Казахстан по договору №266 от 09.03.2017 года

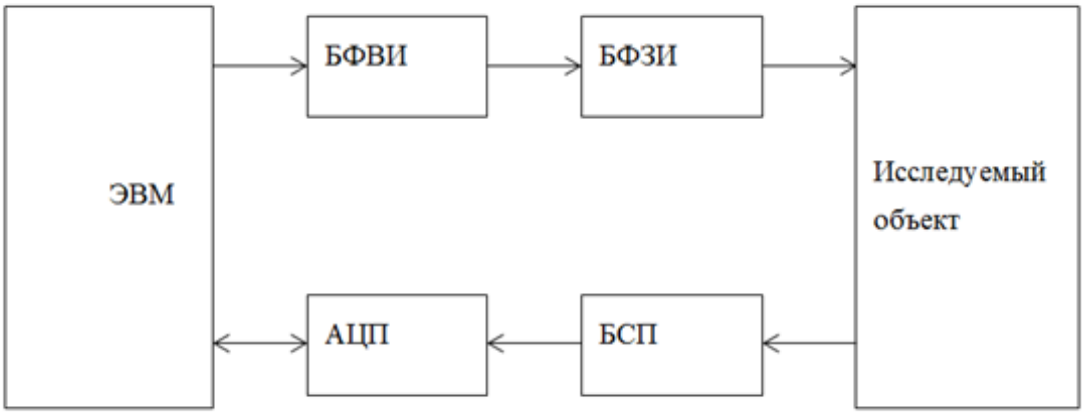


Рис. 1: Структурная схема измерителя

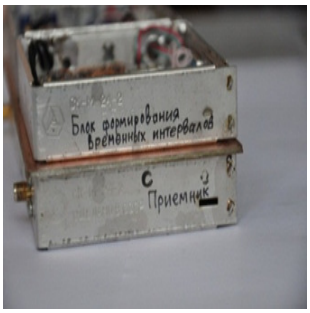


Рис. 2: Основные узлы прибора (вид с торца)

Reset, затем — Start. Перед стартом выставляется Busy, сигнал занятости. За время Busy проводится 16 импульсов с частотой 2 МГЦ. Между временем на Busy и новым стартом есть интервал времени для записи на АЦП.

Опишем блок формирования временных интервалов. Тактовая частота 100 МГЦ. Первый интервал (временной) — 10 НС. Этот интервал делится на 256 частей, т.е. переход от точки к точке по времени с шагом 0,039 НС. Аппаратно установлен таймер отсчета на сдвиг по шагу. Счетчик таймера сдвига на новый интервал с длиной 10 НС, выполняется автоматически. Максимально количество интервалов с тактовой частотой 100 МГЦ составляет 15 единиц. Время пробега сигнала (по воздуху, где диэлектрическая проницаемость) составляет — 3 метра с возвратом. Т.е. мощность глубины измерения по воздуху с тактовой частотой 100 МГЦ составляет 45 метров с возвратом сигнала. В зависимости от диэлектрической проницаемости сред, это величина измениться в сторону уменьшения.

На рисунке 4 представлен результат тестового эксперимента функционирования георадиолокационной системы. Перед антеннами выставлена металлическая поверхность. Справа отчетливо видно изменение сигнала от границы перехода (изменения диэлектрической проницаемости воздух-металлическая пластина). Аналогичный эксперимент приведен на рисунке 5, но с другим объектом - деревянная дощечка. Также изменилась радарограмма на границе раздела сред — воздух-деревянная дощечка.

Проведены тестовые эксперименты с опытным георадаром для определения максимальной глубины зондирования и разрешающей способности при различных частотах зондирующего импульса. Для обработки сигнала использовался цифровой осциллограф с USB входом ZET 302 (20 Мгц), на рисунке 6 представлен полученный результат.

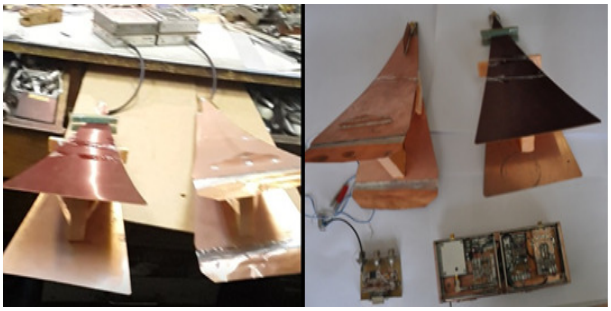


Рис. 3: Принимающая антенна и передающая антенна (фрагмент слева), Полная комплектация основных узлов прибора (фрагмент справа)

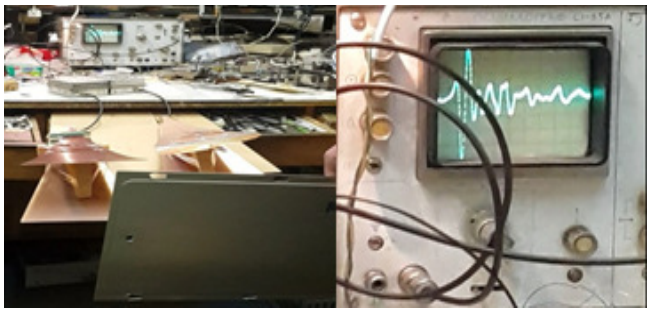


Рис. 4: Перед антеннами установлена металлическая отражающая поверхность (фрагмент рисунка — слева). Фрагмент справа — радарограмма

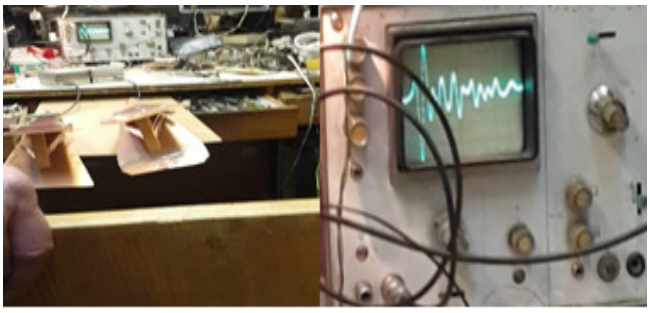


Рис. 5: Перед антеннами установлена деревянная поверхность (фрагмент рисунка — слева). Фрагмент справа — радарограмма.

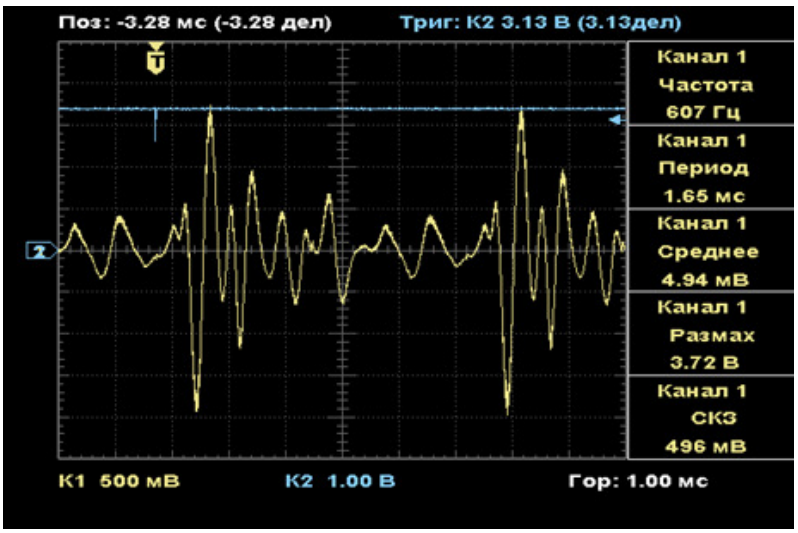


Рис. 6: Результат полученный с помощью цифрового осциллографа

2 Лабораторный эксперимент с опытным образцом георадара

Для проведения тестовых экспериментов с опытным образцом георадара, для определения глубины залегания объектов, в лабораторных условиях был смоделирован макет котлована с различными объектами (мишенями). Аквариум с размерами: длина — 40 см., ширина — 25 см., высота — 35 см. На дно аквариума засыпан песок, т.е имитация подстилающая слоя с шириной — 7 см, затем на этот слой помешены три объекта: труба металлическая, труба пластмассовая, фрагмент костных отложений, представленные на



Рис. 7: Подстилающий слой и объекты



Рис. 8: Прибор в полной комплектации

рисунке 7.

Затем «искусственный котлован» засыпан полностью песком. Глубина залегания первого объекта составляет 21 см, глубина залегания второго объекта составляет 19 см, и наконец глубина залегания третьего объекта — 20 см. Расстояние между первым и вторым объектом — 6,5 см, а расстояние между вторым и третьим объектом составляет — 8,8 см.

На рисунке 8, представлен опытный образец георадара в рабочем состоянии.

Передающая и приемная антенна (см. колокола вверху), расположены по осевой симметрии, перпендикулярной расположению объектов.

3 Экспериментальных объектов на учебно-лабораторном полигоне

В рамках научного проекта был исследован учебный лабораторный полигон, находящейся в 76 км. от города Астаны в северо-западном направлении. Подобные экспериментальные исследования были проведены и изучены в статье [4], в которой на основе интерпретации радарограмм, полученных с помощью прибора «Зонд-12» были установлены приближенные позиции (по глубине залегания) искусственных «мишеней»: пенка руды, бочка металлическая. Для устранения этих погрешностей различные мишени были помещены в котлован удовлетворяющим следующим требованиям: размеры объектов в четыре раза меньше длины котлована; в два раза меньше ширины котлована, а также по глубине залегания порядка 1,5 раза.

Точная схема размеров котлована приведена на рисунке 9.

Известен факт, что в суглинке сигналы от георадилокационных систем затухают, либо вовсе теряются, в связи с этим дно котлована засыпано песчаной средой. В котлован имеющую уже песчаную подошву размещены реальные: «Канализационные пластиковые трубы»; «Металлическая труба»; «Фрагменты костных отложений», представленные на рисунке 10.



Рис. 9: Котлован (745/245/190). Почва стенок и днище-суглинка



Рис. 10: Мишени, на днище котлована

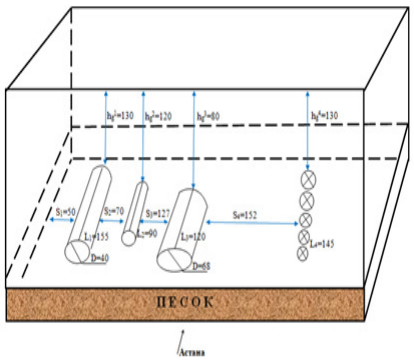


Рис. 11: Реальные параметры расположения объектов

Ниже на рисунке 11, представлены реальные размеры мишени, а также их расположение по глубине, ширине, а также по длине относительно реальных размеров котлована.

Котлован вместе с расположенными объектами, указанных выше, был засыпан песком, и выровнен с поверхностью земляного покрова.

Список литературы

[1] Искаков К.Т., Боранбаев С.А., Туенбаев О., Грамыка А., Узаккызы Н. Технические характеристики и основные компоненты опытного образца георадиолокационной системы // Вестник ЕНУ им. Л.Н. Гумилева. — 2016. — №6.

[2] Искаков К.Т., Кусаинова А.Т., Научно-технические основы систем георадиолакации // Материалы международной научной конференции «Информатика и прикладная математика», посвященной 25-летию Независимости Республики Казахстан и 25-летию Института информационных и вычислительных технологий. 21–24 сентября 2016. — г. Алматы 2016. — С. 269–275.

[3] Турарова М.К., Пархоменко А.В., Оралбекова Ж.О., Жумажанов Б.Ж., Жунусов К.Д. Инженерно-технические приемы определения глубины зондирования опытного образца георадилокационной системы // Вестник ЕНУ им. Л.Н. Гумилева. — 2016. — №6.

[4] Искаков К.Т., Кусаинова А.Т., Турарова М.К. Экспериментальные исследования георадиолокационными методами. // Вестник ЕНУ им. Л.Н. Гумилева. — 2015. №6. —С. 124–128.

Искаков Казизат Такуадинович — д.ф.-м.н., профессор кафедры "Вычислительная техника Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева;
e-mail: kazizat@mail.ru;
Боранбаев Самат Акшибаевич — старший преподаватель кафедры "Вычислительная техника Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева;
e-mail: boranbaevsa@mail.ru;
Кусаинова Айнур Толеубековна — докторант Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева;
e-mail: ainurkussainova89@gmail.com;
Туенбаев Озат Кунапьянович — старший преподаватель Казахского национального университета им. Аль-Фараби;
e-mail: ozatt@mail.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

О МЕТОДЕ ВЫСОКОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРЯМЫХ И ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ГРАВИТАЦИОННОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ В СФЕРИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ

С. И. Кабанихин, И. М. Куликов, М. А. Шишленин

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 517.968

В статье представлен новый гидродинамический программный код AstroPhi 2.0 для численного моделирования
В работе описан новый численный метод высокого порядка точности для решения уравнений гравитационной газовой динамики, записанных в виде решения прямой и обратной задачи, в сферической симметрии. Метод основан на комбинации метода крупных частиц, метода Годунова и кусочно-параболического метода на локальном шаблоне. Приведены результаты верификации численного метода, результаты численного решения прямой задачи коллапса Эврарда, а также подходы к решению обратной задачи.

Ключевые слова: Numerical simulation, High order accurate numerical method, Compu-tational astrophysics, Direct and inverse problems, Evrard collapse problem.

Введение

Динамика большинства астрофизических течений происходит в течение нескольких миллионов лет, поэтому наблюдения за ними доступны лишь в настоящий момент времени, а основным вопросом является нахождение некоторого класса начальных данных, из которых может получиться наблюдаемая конфигурация астрофизических объектов. Основным способом решения таких задач является подбор начальных данных, приводящих в рамках рассматриваемой модели к качественному соответствию наблюдаемым данным. Такой подход достаточно трудоемкий и неформализуемый, поэтому актуальной проблемой является решение обратной задачи динамики астрофизических объектов. Существенная трехмерность и нестационарность астрофизических задач даже при использовании суперкомпьютеров в настоящее время не позволяет решать такие обратные задачи в полной постановке. В связи с этим рассматриваются некоторые упрощенные (прежде всего с точки зрения мерности пространства) постановки , которые с одной стороны адекватно описывают динамику астрофизического объекта, а с другой позволяют разрешить обратную задачу.

Процессы коллапса астрофизических объектов в настоящее время активно исследуются теоретически в связи с появлением значительного числа наблюдательных данных. Явление коллапса имеет место как на начальной стадии звездной эволюции, так и на конечной стадии эволюции звезд (взрывы сверхновых с коллапсирующим ядром) [1]. В настоящей работе в качестве такой задачи рассматривается задача коллапса звезды в постановке Эврарда [2] в сферической симметрии. Задача Эврарда активно исследуется многими авторами и является основной тестовой задачей для численных методов и их программных реализаций, которые используются для моделирования образования звезд [3].

Основной фокус данной статьи — описание методологии решения прямой и обратной задачи коллапса астрофизических объектов, в том числе: численного метода высокого порядка точности для решения уравнений гравитационной газовой динамики, его верификации на задаче о разлете газа в вакуум, решение прямой задачи Эврарда и описание подхода к формулировке и решению обратной задачи. Для решения прямой и

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ для молодых ученых МК — 1445.2017.9, грантов РФФИ 15-01-00508, 16-07-00434, 17-51-540004, 16-29-15120, 16-01-00755.

обратной задачи коллапса Эварда самогравитирующего газа в одномерных сферических координатах разработан и реализован численный метод решения, основанный на комбинации метода разделения операторов, метода крупных частиц, метода С.К. Годунова и кусочно-параболического метода на локальном шаблоне.

1 Уравнения гравитационной газовой динамики в сферических координатах

Запишем уравнения гравитационной газовой динамики в операторной форме:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\rho\\ \rho\vec{u}\\ E+\frac{\rho\vec{u}^2}{2}\end{pmatrix}+\nabla\cdot\begin{pmatrix}\rho\vec{u}\\ \rho\vec{u}\vec{u}+p\\ \left(E+\frac{\rho\vec{u}^2}{2}+p\right)\vec{u}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\ \rho\nabla\Phi\\ \rho\vec{u}\cdot\nabla\Phi\end{pmatrix}=0 \tag{1}$$

где ρ — плотность, $\vec{u}$ — вектор скорости, E — внутренняя энергия газа, p — давление газа, Φ — гравитационный потенциал. Внутренняя энергия E и давление p связаны уравнением состояния идеального газа:

$$p=E(\gamma-1) \tag{2}$$

где γ — показатель адиабаты. Система уравнений дополнена уравнением Пуассона для гравитационного потенциала:

$$\triangle\Phi=4\pi G\rho \tag{3}$$

где G — гравитационная постоянная. Для формулировки прямой и обратной задачи коллапса мы будем рассматривать неконсервативную форму уравнений (1), (2) и (3) в сферической симметрии. Таким образом, получим следующие решаемые уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\rho\\ \rho u\\ p\end{pmatrix}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix}\rho u r^2\\ \rho u^2 r^2\\ p u r^2\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\ \frac{\partial p}{\partial r}+\rho\frac{\partial\Phi}{\partial r}\\ (\gamma-1)p\frac{1}{r^2}\frac{\partial u r^2}{\partial r}\end{pmatrix}=0 \tag{4}$$

Уравнение Пуассона записывается в виде:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Phi}{\partial r}\right)=4\pi G\rho \tag{5}$$

Такая форма уравнений является прямым следствием законов сохранения и более удобная для формулировки обратной задачи, а с учётом того, что в коллапсе отсутствуют сильные ударные волны не вносит значительной погрешности в закон сохранение полной (сумма внутренней, кинетической и потенциальной) энергии в численном решении.

2 Описание численного метода решения

В основе численного метода решения будем использовать метод крупных частиц (в зарубежной литературе такой подход в основном называется "operator splitting approach"), в котором система (4) разбивается на два этапа: эйлеров этап, на котором решаются уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\rho\\ \rho u\\ p\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\ \frac{\partial p}{\partial r}+\rho\frac{\partial\Phi}{\partial r}\\ (\gamma-1)p\frac{1}{r^2}\frac{\partial u r^2}{\partial r}\end{pmatrix}=0 \tag{6}$$

и лагранжев этап, на котором решаются уравнения в виде:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\rho r^2\\ \rho u r^2\\ p r^2\end{pmatrix}+\frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix}\rho r^2 u\\ \rho u r^2 u\\ p r^2 u\end{pmatrix}=0 \tag{7}$$

Последний вид (7) уравнений лагранжевого этапа нам более удобен для организации единой вычислительной процедуры. Уравнение Пуассона решается на отдельном этапе.

2.1 Эйлеров этап численного метода

Для аппроксимации пространственных производных на эйлеровом этапе численного метода используется решение задачи на каждой границе между расчетными ячейками. Для этого перепишем систему (4) без учета градиента гравитационного потенциала в следующем квазилинейной форме:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\rho\\u\\p\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}u&\rho&0\\0&u&\rho^{-1}\\0&\gamma p&u\end{pmatrix}\frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix}\rho\\u\\p\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\frac{2}{r}\rho u\\0\\\frac{2\gamma}{r}pu\end{pmatrix}=0 \tag{8}$$

Исключая из последней системы (8) члены, связанные с адвективным переносом, который мы учтем на лагранжевом этапе, получим следующую систему уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}u\\p\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0&\rho^{-1}\\\gamma p&0\end{pmatrix}\frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix}u\\p\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\\frac{2\gamma}{r}pu\end{pmatrix}=0 \tag{9}$$

Система (9) решается на каждой границе между ячейками в два этапа: на первом решается "плоская" задача Римана для уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}u\\p\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0&\rho^{-1}\\\gamma p&0\end{pmatrix}\frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix}u\\p\end{pmatrix}=0 \tag{10}$$

на втором этапе добавляется правая часть, связанная с использованием сферических координат:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}u\\p\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\\frac{2\gamma}{r}pu\end{pmatrix}=0 \tag{11}$$

Будем также предполагать, что в каждой ячейке построена локальная парабола [4, 5]. Тогда итоговые формулы для аппроксимации величин скорости U и давления P на границе между левой (L) и правой (R) ячейками имеют вид:

$$U=\frac{u_L(-\lambda\tau)+u_R(\lambda\tau)}{2}+\frac{p_L(-\lambda t)-p_R(\lambda t)}{2}\sqrt{\frac{(\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R})^2}{\gamma(\rho_L^{3/2}+\rho_R^{3/2})(p_L\sqrt{\rho_L}+p_R\sqrt{\rho_R})}} \tag{12}$$

$$P=\frac{p_L(-\lambda\tau)+p_R(\lambda\tau)}{2}+\frac{u_L(-\lambda t)-u_R(\lambda t)}{2}\sqrt{\frac{\gamma(\rho_L^{3/2}+\rho_R^{3/2})(p_L\sqrt{\rho_L}+p_R\sqrt{\rho_R})}{(\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R})^2}}- \tag{13}$$

$$-\frac{2\tau\gamma}{r}\cdot\frac{p_L\sqrt{\rho_L}+p_R\sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R}}\cdot\frac{u_L\sqrt{\rho_L}+u_R\sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R}}$$

$$\lambda=\sqrt{\frac{\gamma(p_L\sqrt{\rho_L}+p_R\sqrt{\rho_R})}{\rho_L^{3/2}+\rho_R^{3/2}}}$$

$$q_L(-\lambda\tau)=q_i^R-\frac{\lambda\tau}{2h}\left(\triangle q_i-q_i^6\left(1-\frac{2\lambda\tau}{3h}\right)\right)$$

$$q_R(\lambda\tau)=q_i^L+\frac{\lambda\tau}{2h}\left(\triangle q_i+q_i^6\left(1-\frac{2\lambda\tau}{3h}\right)\right)$$

где τ — шаг по времени, выбираемый из условия Куранта, h — шаг по пространству. Алгоритм вычисления значений q_i^L, q_i^R, $\triangle q_i$, q_i^6 подробно описан в работе [6]. Формулы (12, 13) используются для аппроксимации производных в уравнениях (6). Для аппроксимации градиента гравитационного потенциала используется центральная разность, в связи с тем, что гравитационный потенциал суть гладкая функция.

2.2 Лагранжев этап численного метода

На лагранжевом этапе происходит адвективный перенос гидродинамических параметров и все уравнения на лагранжевом этапе имеют вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(fr^2\right)+\frac{\partial}{\partial r}\left(fr^2u\right)=0$$

где f — это функции плотности, импульса или давления газа. Для решения уравнений используется аналогичный, что и на эйлеровом этапе подход. Для вычисления потока $F = fr^2u$ при $\lambda = |u|$ используется формула:

$$F = u \times \begin{cases} f_L(-\lambda\tau)r^2, u \geq 0 \\ f_R(\lambda\tau)r^2, u < 0 \end{cases} \tag{14}$$

где $f_L(-\lambda\tau)$ и $f_R(\lambda\tau)$ — кусочно-параболические функции для величины f и скорость на интерфейсе между ячейками вычисляется по формуле:

$$u = \frac{u_L\sqrt{\rho_L} + u_R\sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \tag{15}$$

Для построения кусочно-параболического решения используется аналогичная процедура, которая приведена в предыдущем разделе.

2.3 Решение уравнения Пуассона

Уравнение Пуассона в одномерной постановке может быть решено алгебраическим прямым методом, например методом прогонки. Для этого аппроксимируем уравнение Пуассона на трехточечном шаблоне:

$$\Phi_{i+1}\left(\frac{r^2_{i+1/2}}{h^2}\right) - \Phi_i\left(\frac{r^2_{i+1/2}}{h^2} + \frac{r^2_{i-1/2}}{h^2}\right) + \Phi_{i-1}\left(\frac{r^2_{i-1/2}}{h^2}\right) = 4\pi G r_i^2 \rho_i \tag{16}$$

с граничными условиями:

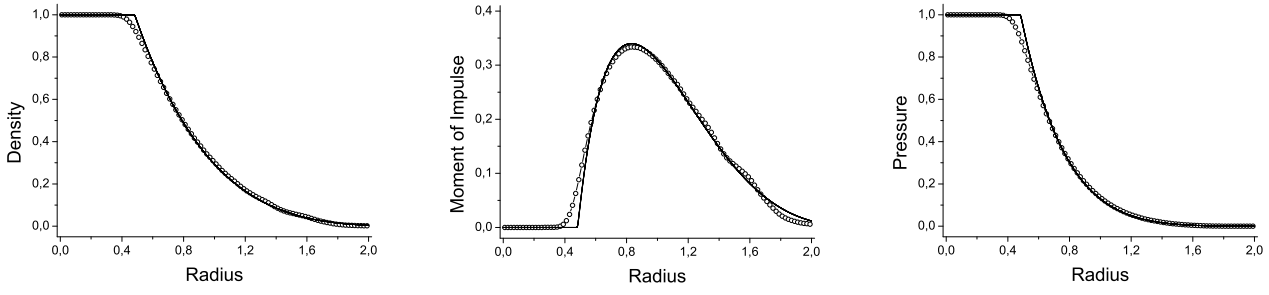
$$\Phi_0 = \Phi_1 \qquad \Phi_N = -M/r_N$$

где M — масса газа в области.

3 Задача о сферически симметричном разлете газа в вакуум

Для верификации численного метода решения уравнений газовой динамики будем рассматривать сферически симметричный разлёт статического в начальный момент времени газового шара, ограниченного радиусом $R = 1$ и имеющий равномерное распределение плотности $\rho = 1$ и давления $p = 1$. Результаты моделирования разлёт газового облака на момент времени $t = 0.4$ в вакуум приведены на рисунке (3).

Из рисунка видно, что контактный разрыв движется по направлению от центра газового шара, за ним идёт волна разрежения. Численное решение имеет небольшую диссипацию в области стыковки волны разрежения и невозмущенной области, а также небольшие колебания численного решения плотности и импульса после контактного разрыва, что по всей видимости связано со способом деления на функцию плотности на границе газ-вакуум и возникающие отсюда отражения с малой амплитудой.



(a) (b) (c)

Рис. 1: Результаты моделирования на момент времени $t = 0.4$ миллионов лет. Плотность — (a), импульс — (b), давление — (c). Численное решение нарисовано кружками, точное решение нарисовано тонкой линией.

4 Задача Эврарда

Задача коллапса Эврарда является одним из основных тестов для проверки качества SPH методов, при этом достаточно мало эйлеровых численных методов было апробировано на этой задаче, хотя такие тесты были сделаны [7]. Интерес к задаче коллапса Эврарда связан с тем, что в начальные моменты времени происходит резкое сжатие самогравитирующей газовой сферы, затем быстрый нагрев центральной области и образование ударной волны.

В качестве начальных данных задана самогравитирующая сфера при $G = 1$, ограниченная радиусом $R = 1$. Профиль плотности задается в виде $\rho(r) = 1/(2\pi r)$, профиль давления задается в виде $p(r) \sim \rho^{\gamma}$, $E_0 = 0.05$ — начальная внутренняя энергия газа, $\gamma = 5/3$ — показатель адиабаты. Поведение каждого вида энергий приведены на рисунке (4). В момент времени $t = 0.7$ происходит наибольшее сжатие, после которого начинается процесс расширения с образованием ударной волны. В графике полной энергии в этот момент времени образуется некоторый провал, который затем частично компенсируется, это связано с проблемой пространственного разрешения для описания сколлапсированного шара даже в случае использования одномерных сферических координат. Стоит отметить, что такая погрешность достаточно мала и устраняется до необходимого предела с помощью измельчения пространственной сетки.

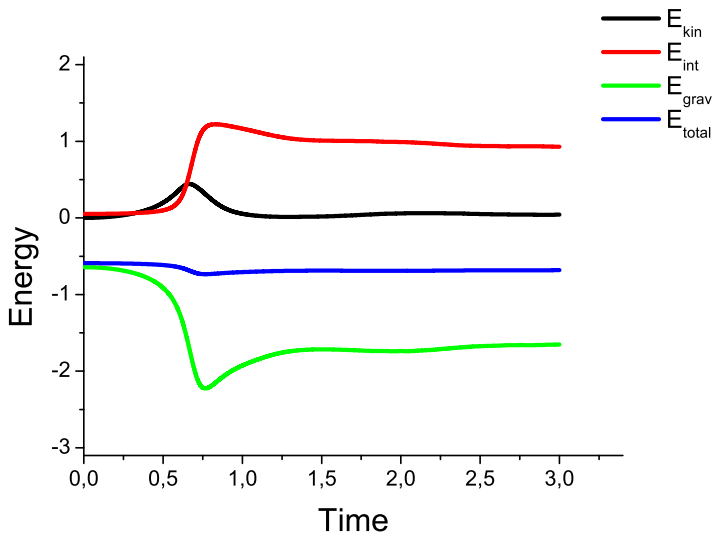


Рис. 2: Поведение различных видов энергий: кинетической (черная линия), внутренняя (красная линия), потенциальная (зеленая линия) и полная (синяя линия).

5 Задача Седова

Задача Седова о точечном взрыве в астрофизике формулируется как задача о взрыве сверхновой. Для моделирования задачи о точечном взрыве будем рассматривать область $[-0.5; 0.5]^3$, показатель адиабаты $\gamma = 5/3$, начальную плотность в области $\rho_0 = 1$, и начальное давление $p_0 = 10^{-5}$. В момент времени $t = 0$ выделяется внутренняя энергия $E_0 = 0.6$. Область взрыва ограничена радиусом $r_{central} = 0.02$. Для вычислительного эксперимента использовалась расчетная сетка 100^3. Смоделированный профиль плотности и момента импульса на момент времени $t = 0.05$ изображен на рисунке (3). Задача Седова о точечном взрыве является стандартным тестом, проверяющим способность метода и его реализации воспроизводить сильные ударные волны с большими числами Маха. Скорость звука фоновой среды пренебрежимо мала, поэтому число Маха достигает значения $M = 1432$. Авторский численный метод достаточно хорошо воспроизводит положение ударной волны, а также профиль плотности и импульса.

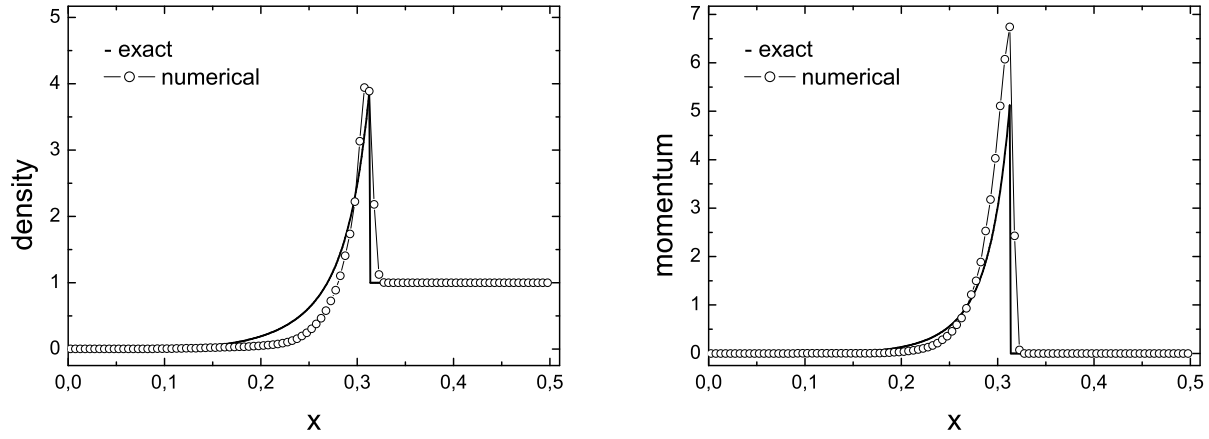


Рис. 3: Плотность (слева) и момент импульса (справа), полученные при численном решении задачи Седова о точечном взрыве. Сплошной линией изображено точное решение

6 Метод решения обратной задачи взрыва сверхновой звезды

Рассмотрим постановку прямой задачи для системы (4), (5):

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\rho\\ \rho u\\ p\end{pmatrix}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix}\rho u r^2\\ \rho u^2 r^2\\ p u r^2\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\ \frac{\partial p}{\partial r}+\rho\frac{\partial \Phi}{\partial r}\\ (\gamma-1)p\frac{1}{r^2}\frac{\partial u r^2}{\partial r}\end{pmatrix}=0, \tag{17}$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial \Phi}{\partial r}\right)=4\pi G\rho \tag{18}$$

с начальными условиями:

$$\rho(r,0)=q_1(r),\qquad p(r,0)=q_2(r),\qquad u(r,0)=q_3(r) \tag{19}$$

и граничными условиями

$$\frac{\partial \rho(0,t)}{\partial r}=0,\qquad \rho(R,t)=\rho_R(t), \tag{20}$$

$$\frac{\partial p(0,t)}{\partial r}=0,\qquad p(R,t)=p_R(t), \tag{21}$$

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial r}=0,\qquad u(R,t)=u_R(t). \tag{22}$$

Должны выполняться условия согласования в начальный момент времени:

$$\frac{\partial \rho(0,0)}{\partial r}=0,\qquad \frac{\partial p(0,0)}{\partial r}=0,\qquad \frac{\partial u(0,0)}{\partial r}=0 \tag{23}$$

Обратная задача заключается в определении начального положения $q_1(r)$, $q_2(r)$, $q_3(r)$ по заданной дополнительной информации в наблюдаемый сейчас момент времени T:

$$\rho(r,T)=f_1(r),\qquad p(r,T)=f_2(r),\qquad u(r,T)=f_3(r). \tag{24}$$

Для решения нелинейной обратной задачи (17), (18), (19), (24) будем минимизировать целевой функционал [9, 11]

$$J(\vec{q})=\int_0^R\Big[\big(\rho(r,T;\vec{q})-f_1(r)\big)^2+\big(p(r,T;\vec{q})-f_2(r)\big)^2+\big(u(r,T;\vec{q})-f_3(r)\big)^2\Big]\,\mathrm{dr} \tag{25}$$

методом градиентного спуска

$$\vec{q}^{(n+1)} = \vec{q}^{(n)} - \alpha_n J'(\vec{q}^{(n)}),$$

где $\vec{q} = (q_1, q_2, q_3)$, $\vec{q}^{(0)}$ — начальное приближение, α_n — параметр спуска, $J'(\vec{q}^{(n)}) = (J_1'(\vec{q}^{(n)}), J_2'(\vec{q}^{(n)}), J_3'(\vec{q}^{(n)}))$ — градиент функционала.

Алгоритм метода будет состоять из следующих этапов

1. Задаем начальное приближение $\vec{q}^{(0)}(r) = (q_1^{(0)}(r), q_2^{(0)}(r), q_3^{(0)}(r))$.

2. Предполагаем, что приближенное решение решение обратной задачи на n шаге мы нашли. Покажем как определить решение на шаге $n+1$.

3. Решаем прямую задачу

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \rho^{(n)} \\ \rho^{(n)}u^{(n)} \\ p^{(n)} \end{pmatrix} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix} \rho^{(n)}u^{(n)}r^2 \\ \rho^{(n)}{u^{(n)}}^2 r^2 \\ p^{(n)}u^{(n)}r^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\partial p^{(n)}}{\partial r} + \rho^{(n)}\frac{\partial \Phi^{(n)}}{\partial r} \\ (\gamma-1)p^{(n)}\frac{1}{r^2}\frac{\partial u^{(n)}r^2}{\partial r} \end{pmatrix} = 0, \tag{26}$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial \Phi^n}{\partial r}\right) = 4\pi G\rho^n, \tag{27}$$

$$\rho^{(n)}(r,0) = q_1^{(n)}(r), \qquad p^{(n)}(r,0) = q_2^{(n)}(r), \qquad u^{(n)}(r,0) = q_3^{(n)}(r), \tag{28}$$

$$\frac{\partial \rho^{(n)}}{\partial r}(0,t) = 0, \qquad \rho^{(n)}(R,t) = \rho_R(t), \tag{29}$$

$$\frac{\partial p^{(n)}}{\partial r}(0,t) = 0, \qquad p^{(n)}(R,t) = p_R(t), \tag{30}$$

$$\frac{\partial u^{(n)}}{\partial r}(0,t) = 0, \qquad u^{(n)}(R,t) = u_R(t). \tag{31}$$

4. Решаем сопряженную задачу

$$\frac{\partial \psi_1^{(n)}}{\partial t} - \psi_2^{(n)}\frac{\partial u^{(n)}}{\partial t} + u^{(n)}\left[\frac{\partial \psi_1^{(n)}}{\partial r} - \psi_2^{(n)}\frac{\partial u^{(n)}}{\partial r}\right] + \\ + \frac{1}{r^2}\frac{\partial\left(r\psi_2^{(n)}\right)}{\partial r} + \frac{\Phi^{(n)}}{r^2}\frac{\partial\left(r^2\psi_2^{(n)}\right)}{\partial r} + 4\pi G\psi_4^{(n)} = 0, \tag{32}$$

$$\frac{\partial \psi_3^{(n)}}{\partial t} + u^{(n)}\frac{\partial \psi_3^{(n)}}{\partial r} - \frac{\gamma-1}{r^2}\psi_3^{(n)}\frac{\partial\left(r^2u^{(n)}\right)}{\partial r} = 0, \tag{33}$$

$$\rho^{(n)}\frac{\partial \psi_2^{(n)}}{\partial t} + \rho^{(n)}\frac{\partial \psi_1^{(n)}}{\partial r} + \rho^{(n)}u^{(n)}\frac{\partial \psi_2^{(n)}}{\partial r} + p^{(n)}\frac{\partial \psi_3^{(n)}}{\partial r} + (\gamma-1)\frac{\partial\left(p^{(n)}\psi_3^{(n)}\right)}{\partial r} = 0, \tag{34}$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial \psi_4^{(n)}}{\partial r}\right) - \rho^{(n)}\frac{\partial(r^2\psi_2^{(n)})}{\partial r} = 0, \tag{35}$$

$$\psi_1^{(n)}(r,T) = \frac{2}{r^2}\left[\rho^{(n)}(r,T) - f_1(r)\right], \tag{36}$$

$$\psi_3^{(n)}(r,T) = \frac{2}{r^2}\left[p^{(n)}(r,T) - f_2(r)\right], \tag{37}$$

$$\psi_2^{(n)}(r,T) = \frac{2}{r^2\rho^{(n)}(r,T)}\left[u^{(n)}(r,T) - f_3(r)\right], \tag{38}$$

$$\psi_j^{(n)}(0,t) = \psi_j^{(n)}(R,t) = 0, \qquad j = 1,2,3, \tag{39}$$

$$\frac{\partial \psi_4^{(n)}}{\partial r}(0,t) = 0, \qquad \psi_4^{(n)}(R,t) = 0. \tag{40}$$

5. Считаем градиент функционала по следующим формулам

$$J_1'(\vec{q}^{(n)}) = r^2\psi_1^{(n)}(r,0), \tag{41}$$

$$J_2'(\vec{q}^{(n)}) = r^2\psi_3^{(n)}(r,0), \tag{42}$$

$$J_3'(\vec{q}^{(n)}) = r^2\rho^{(n)}(r,0)\psi_2^{(n)}(r,0). \tag{43}$$

6. Находим приближенное решение на следующем шаге

$$q_1^{(n+1)} = q_1^{(n)} - \alpha_1 J_1'(\vec{q}^{(n)}), \tag{44}$$

$$q_2^{(n+1)} = q_2^{(n)} - \alpha_2 J_2'(\vec{q}^{(n)}), \tag{45}$$

$$q_3^{(n+1)} = q_3^{(n)} - \alpha_3 J_3'(\vec{q}^{(n)}), \tag{46}$$

где $\alpha_j > 0$, $j = 1, 2, 3$.

7. Если выполняется критерий остановки $J(\vec{q}^{(n+1)}) < \varepsilon$, где ε заданная точность, то считаем, что $\vec{q}^{(n+1)}$ является приближенным решением обратной задачи.

При численном решении задачи могут быть использованы различные виды учета априорной информации [10, 12–15].

6.1 Задача Седова о точечном взрыве, как доминирующий процесс при взрыве сверхновой

В качестве априорной информации для обратной задачи взрыва сверхновой помимо знаний о наблюдаемом профиле можно использовать априорную информацию о физике процесса. Сам процесс взрыва сверхновой достаточно хорошо приближается задачей о точечном взрыве (задача Седова). Поэтому по профилю светимости (см. например классическую работу [8]) однозначно можно восстановить профиль плотности (как квадратный корень функции светимости) и, следовательно, энергию взрыва. Конечно, мы не сможем в этом случае восстановить все начальные данные звезды. В контексте задаче о взрыве сверхновой такая информация и не нужна, так как именно энергия взрыва определяет процессы образования тяжелых элементов. Обогащение межзвездной средой новыми элементами — это и есть основная задача взрыва сверхновых звезд.

Заключение

Описан новый численный метод высокого порядка точности для решения уравнений гравитационной газовой динамики, записанных в виде решения прямой и обратной задачи, в сферической симметрии. В основе численного метода — комбинация метода крупных частиц, метода Годунова и кусочно-параболического метода на локальном шаблоне. Численный метод верифицирован на задаче о разлете газового шара в вакуум. Приведено численное решение прямой задачи коллапса Эврарда. Сформулирован подход к решению обратной задачи взрыва сверхновой звезды.

Список литературы

[1] Ardeljan N., Bisnovatyi-Kogan G., Moiseenko S. *An implicit Lagrangian code for the treatment of nonstationary problems in rotating astrophysical bodies*, Astronomy and Astrophysics, **115** (1996), 573–594.

[2] Evrard A. *Beyond N-body: 3D cosmological gas dynamics*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, **235** (1988), 911–934.

[3] Springel V. *E pur si muove: Galilean-invariant cosmological hydrodynamical simulations on a moving mesh*, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, **401** (2010), 791–851.

[4] Popov M., Ustyugov S. *Piecewise parabolic method on local stencil for gasdynamic simulations*, Computational Mathematics and Mathematical Physics, **47** (2007), 1970–1989.

[5] Popov M., Ustyugov S. *Piecewise parabolic method on a local stencil for ideal magnetohydrodynamics*, Computational Mathematics and Mathematical Physics, **48** (2008), 477–499.

[6] Collela P., Woodward P.R. *The Piecewise Parabolic Method (PPM) Gas-Dynamical simulations*, Journal of Computational Physics, **54** (1984), 174–201.

[7] Kulikov I., Chernykh I., Snytnikov A., Glinskiy B., Tutukov A. *AstroPhi: A code for complex simulation of dynamics of astrophysical objects using hybrid supercomputers*, Computer Physics Communications, **186** (2015), 71–80.

[8] Colgate S., McKee C. *Early supernova luminosity*, The Astrophysical Journal, **157** (1969), 623-644.

[9] Lukyanenko, D.V., Shishlenin, M.A., Volkov, V.T. Solving of the coefficient inverse problems for a nonlinear singularly perturbed reaction-diffusion-advection equation with the final time data (2018) Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 54, pp. 1339-1351.

[10] Belonosov, A., Shishlenin, M. Regularization methods of the continuation problem for the parabolic equation (2017) Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 10187 LNCS, pp. 220-226.

[11] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A., Nurseitov, D.B., Nurseitova, A.T., Kasenov, S.E. Comparative Analysis of Methods for Regularizing an Initial Boundary Value Problem for the Helmholtz Equation. (2014) Journal of Applied Mathematics, 2014, article 786326.

[12] Kabanikhin, S.I., Gasimov, Y.S., Nurseitov, D.B., Shishlenin, M.A., Sholpanbaev, B.B., Kasenov, S. Regularization of the continuation problem for elliptic equations. (2013) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 21 (6), pp. 871-884.

[13] Kabanikhin, S.I., Nurseitov, D.B., Shishlenin, M.A., Sholpanbaev, B.B. Inverse problems for the ground penetrating radar. (2013) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 21 (6), pp. 885-892.

[14] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Regularization of the decision prolongation problem for parabolic and elliptic elliptic equations from border part (2014) Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications, 2 (2), pp. 81-91.

[15] Kabanikhin S.I., Shishlenin M.A. Quasi-solution in inverse coefficient problems. Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 16(7) (2008), 705–713.

Кабанихин Сергей Игоревич — член-корр. РАН, профессор, д.ф.-м.н., Директор Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: kabanikhin@sscc.ru;
Куликов Игорь Михайлович — д.ф.-м.н., Ученый секретарь Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: kulikov@ssd.sscc.ru;
Шишленин Максим Александрович — д.ф.-м.н., И.о. зам. директора по научной работе Института вычислительной
математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: mshishlenin@ngs.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ОБ ОДНОЙ МОДИФИКАЦИИ УРАВНЕНИЯ ГЕЛЬФАНДА — ЛЕВИТАНА

С. И. Кабанихин[1,2,3], Н. С. Новиков[1,2], М. А. Шишленин[1,2,3]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[3] *Институт математики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 517.968

В работе рассматривается двумерная обратная задача определения коэффициента волнового уравнения. В работе предложена модификация метода Гельфанда — Левитана, позволяющая свести задачу к решению однопараметрического семейства линейных интегральных уравнений. Численное решение интегральных уравнений проведено с помощью дискретизации, сведения задачи к СЛАУ и использовании стохастического проекционного метода.

Ключевые слова: обратные задачи, интегральные уравнения, численные методы.

Введение

Данная работа посвящена исследованию одного численного метода решения коэффициентных обратных задач для гиперболических уравнений. Задачи такого рода возникают в том числе при поиске новых месторождений полезных ископаемых и при изучении повышения эффективности эксплуатации месторождений и заключаются в определении свойств среды (например, местоположение и форма неоднородностей) на основе измерения на поверхности (или в скважине) отражённых неоднородностями среды волн. В этом случае решение обратных задач является важной частью первичной обработки данных сейсмических наблюдений и позволяет получить информацию о строении среды.

В настоящее время существуют различные методы решения таких задач, подробный обзор которых можно найти, например, в работе [3]. Одним из наиболее популярных на сегодняшний день является метод полного обращения волновых полей [1, 2] (full waveform inversion), основанный на минимизации разности между моделируемым откликом среды и данными измерений. В связи с этим важной проблемой исследования упругих сред является большой размер области, в которой необходимо производить высокоточные вычисления. Даже для сравнительно небольшого участка 2 км x 2 км x 2 км решение прямой задачи сейсморазведки является очень сложной проблемой, а поскольку большинство современных методов решения обратных задач основаны на итерационных процедурах,то даже количество операций, требуемых для проведения нескольких итераций, может привести к неконтролируемым ошибкам. Это обстоятельство осложняется сильной некорректностью обратных задач, которое заключается в неединственности решения, а также в неустойчивости, которая сильно возрастает с глубиной.

Данная работа посвящена методу И.М. Гельфанда — Б.М. Левитана — М.Г. Крейна. Одной из основных его особенностей является тот факт, что метод не требует многократного прямого моделирования. С различными результатами, связанными с методом, а также с кратким обзором других алгоритмов, относящихся к классу прямых методов, можно ознакомиться в работах [5, 9, 10, 11, 12, 13]. Стоит упомянуть, что в последнее время в геофизике появляются работы, опирающиеся на решение уравнения Марченко [14], но на данный момент в них рассматриваются лишь одномерные постановки.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 16-29-15120, 15-01-09230).

1 Двумерный аналог уравнения Гельфанда — Левитана

Рассмотрим следующее семейство задач:

$$L_q u^{(k)}(x,y,t) \equiv u^{(k)}_{tt} - \Delta_{x,y} u^{(k)} + q(x,y)u^{(k)} = 0,\ x \in \mathbb{R},\ y \in \mathbb{R},\ t > 0,\ k \in \mathbb{Z}; \tag{1}$$

$$u^{(k)}|_{t=0} = 0, \quad u^{(k)}_t|_{t=0} = \delta(x)e^{iky},\ x \in \mathbb{R},\ y \in \mathbb{R},\ k \in \mathbb{Z}; \tag{2}$$

$$u^{(k)}|_{x=0} = f^{(k)}(y,t), \quad u^{(k)}_x|_{x=0} = 0, \quad y \in \mathbb{R},\ t > 0,\ k \in \mathbb{Z}. \tag{3}$$

Будем рассматривать обратную задачу определения функции $q(x,y)$, удовлетворяющей системе соотношений (1)–(3), по известным данным обратной задачи — функциям $f^{(k)}(y,t), k \in \mathbb{Z}$. Для решения этой задачи мы используем двумерный аналог метода Гельфанда — Левитана, что позволяет свести обратную задачи (1)–(3) к параметрическому семейству линейных интегральных уравнений. Задача может быть сведена к решению следующего семейства линейных интегральных уравнений [12, 13]:

$$\widetilde{w}^{(k)}(x,y,t) + \int\limits_{-x}^{x} \sum_m \widetilde{w}^{(m)}(x,y,s) f_m^{(k)\prime}(t-s)ds = -\frac{1}{2}\left[f^{(k)\prime}(y,t-x) + f^{(k)\prime}(y,t+x)\right], \tag{4}$$

$$x \in (0,T), t \in (-x,x), y \in (-\pi,\pi), k \in \mathbb{Z}$$

Здесь $f_m^{(k)\prime}(t)$ — коэффициенты разложения функций $f^{(k)\prime}(y,t)$ в ряд Фурье. Кроме того, функции $f^{(k)\prime}(y,t)$ (а, следовательно, и $f_m^{(k)\prime}(t)$) являются четными функциями переменной t. При этом решение обратной задачи может быть получено следующим образом:

$$q(x,y) = 4\frac{d}{dx}\widetilde{w}^{(0)}(x,y,x-0),\ x \in [0,T]$$

$$q(-x,y) = q(x,y),\ x \in [0,T]$$

Для решения двумерного уравнения Гельфанда — Левитана рассмотрим проекцию всех входящих функций на конечномерное подпространство, соответствующее конечным суммам Фурье по переменной y:

$$w^{(k)}(x,y,t) = \sum_{m=-N}^{N} w_m^{(k)}(x,t)e^{imy}$$

Параметр N играет роль параметра регуляризации. Переходя к коэффициентам Фурье в уравнении Гельфанда — Левитана, получим:

$$\widetilde{W}(x,t) + \int\limits_{-x}^{x} \widetilde{W}(x,s)F'(t-s)ds = -\frac{1}{2}\left[F'(t-x) + F'(t+x)\right], x > 0, t \in (-x,x).$$

Здесь $W_{km} = W_m^{(k)}(x,t), F_{km}(t) = f_m^{(k)}(t)$ — матрицы размера $2N+1$.

Важным вопросом является вопрос выбора параметра регуляризации N. С одной стороны, с ростом параметра N увеличивается количество восстанавливаемых гармоник функции $w(x,y,t)$, а тем самым, увеличивается точность восстановления искомой функции $q(x)$. Необходимость максимального использования имеющейся информации о решении особенно актуальна в силу того, что геофизические данные, как правило, не отличаются больших набором изучаемых частот. С другой стороны, восстановление высокочастотных гармоник, необходимое при увеличении параметра N, приводит к трудностям, связанным с устойчивостью методов к ошибкам, содержащимся в высокочастотных данных. В данной работе предпринята попытка частично сгладить это противоречие за счёт аналитического подхода.

Рассмотрим функцию $\hat{u}^{(k)}(x,y,t)$, связанную с решением прямой задачи $u^{(k)}(x,y,t)$ соотношением

$$\hat{u}^{(k)}(x,y,t) = e^{iky}u^{(k)}(x,y,t) \tag{5}$$

Функция $\hat{u}^{(k)}$ удовлетворяет тогда следующему набору соотношений:

$$\hat{u}^{(k)}_{tt} = \hat{L}_q\hat{u}^{(k)}(x,y,t) \equiv \hat{u}^{(k)}_{xx} + \hat{u}^{(k)}_{yy} - q(x,y)\hat{u}^{(k)} - k^2\hat{u}^{(k)} + 2ik\hat{u}^{(k)}_y,$$

$$x \in \mathbb{R},\ y \in \mathbb{R},\ t > 0,\ k \in \mathbb{Z};$$

$$\hat{u}^{(k)}|_{t=0} = 0, \quad \hat{u}^{(k)}_t|_{t=0} = \delta(x),\ x \in \mathbb{R},\ y \in \mathbb{R},\ k \in \mathbb{Z};$$

$$\hat{u}^{(k)}|_{x=0} = g^{(k)}(y,t), \quad \hat{u}^{(k)}_x|_{x=0} = 0, \quad y \in \mathbb{R},\ t > 0,\ k \in \mathbb{Z}.$$

Здесь $g^{(k)}(y,t) = e^{iky} f^{(k)}(y,t)$. По аналогии с работой [12], можно показать, что функция $\hat{u}^{(k)}$, в частности, представляется в следующем виде:

$$\hat{u}^{(k)} = \frac{1}{2}\theta(t-x) + \tilde{u}^{(k)}(x,y,t), \tag{6}$$

где $\tilde{u}^{(k)}(x,y,t)$ — гладкая функция. Кроме того,

$$\hat{u}^{(k)}(x,y,t) = 0,\ t \in (-x,x)$$

Далее, рассмотрим функцию

$$v^{(k)}(x,y,t) = e^{iky} w^{(k)}(x,y,t) \tag{7}$$

Получим следующие соотношения для $v^{(k)}(x,y,t)$:

$$v_{tt}^{(k)} = \hat{L}_q v^{(k)}(x,y,t) x > 0,\ y \in \mathbb{R},\ t \in \mathbb{R},\ k \in \mathbb{Z};,$$
$$v^{(k)}|_{x=0} = \delta(t), \quad v_t^{(k)}|_{t=0} = 0,\ x \in \mathbb{R},\ y \in \mathbb{R},\ k \in \mathbb{Z};$$

Выделим сингулярную часть функции $v^{(k)}(x,y,t)$:

$$v^{(k)} = \frac{1}{2}\left[\delta(t-x) + \delta(t+x)\right] + \tilde{v}^{(k)}(x,y,t), \tag{8}$$

Для регулярной части $\tilde{v}^{(k)}(x,y,t)$ верно следующее:

$$\tilde{v}^{(k)}(x,y,x-0) = \frac{1}{4}\left[xk^2 + \int_0^x q(\xi,y)d\xi\right] \tag{9}$$

Функции $\hat{u}^{(k)}$ и $v^{(k)}(x,y,t)$ связаны соотношением:

$$\hat{u}^{(k)} = \int \sum_m v^{(m)}(x,y,s) e^{imy} g_{m+k}^{(k)}(t-s)ds \tag{10}$$

Здесь предполагается, что функции $g^{(k)}(y,t)$ продолжены нечетным образом в область $t < 0$. Далее, переходя в этом соотношении к функции $\tilde{v}^{(k)}(x,y,t)$, можно получить следующее:

$$\int_{-x}^{x} \sum_m \tilde{v}^{(m)}(x,y,s) e^{imy} g_{m+k}^{(k)}(t-s)ds = -\frac{1}{2} e^{-iky}\left[g^{(k)}(y,t-x) + g^{(k)}(y,t+x)\right],$$
$$t \in (-x,x),\ x > 0,\ y \in \mathbb{R}, k \in \mathbb{Z}$$

Дифференцируя это выражение и учитывая разрыв функций $g^{(k)}(y,t)$ при $t = 0$, связанный с нечётным продолжением данных, получим интегральное уравнение второго рода:

$$\widetilde{v}^{(k)}(x,y,t) + \int_{-x}^{x} \sum_m \widetilde{v}^{(m)}(x,y,s) e^{i(m-k)y} {g_{m+k}^{(k)}}'(t-s)ds = -\frac{1}{2}\left[{g^{(k)}}'(y,t-x) + {g^{(k)}}'(y,t+x)\right], \tag{11}$$
$$x \in (0,T), t \in (-x,x), y \in (-\pi,\pi), k \in \mathbb{Z}$$

Решение обратной задачи связано с решением уравнения (11) следующим образом:

$$q(x,y) = 4\frac{d}{dx}\tilde{v}^k(x,y,x-0) - k^2. \tag{12}$$

2 Численный метод решения

С различными аспектами численного решения уравнений типа Гельфанда — Левитана в двумерном случае можно ознакомиться в работах [4, 7, 6, 15].В данной работе мы получим численное решение двумерного аналога уравнения Гельфанда — Левитана с помощью дискретизации, сведения интегрального уравнения к СЛАУ и использования стохастического проекционного метода (рандомизированный метод Качмажа). Рассмотрим задачу нахождения решения системы линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b, \tag{13}$$

где A — прямоугольная $m \times n$ матрица полного ранга, $m \geq n$, и $b \in \mathbb{R}^m$. Обозначим a_i — i-ю строку матрицы, а a_i^T — транспонированный к a_i вектор-столбец.
Классическая схема метода Качмажа задаётся следующим образом [16]:

$$x_{k+1} = x_k + \frac{b_i - (a_i \cdot x_k)}{\|a_i\|_2^2} a_i^T, \tag{14}$$

Здесь под $(a_i \cdot x_k)$ понимается стандартное скалярное произведение, а под $\|a_i\|_2$ — Евклидова норма. При этом строки a_i матрицы A перебираются циклически: $i = k \bmod m + 1$. Следует отметить, что в ряде работ происходит деление на микро- и макро-итерации, где одна макро-итерация заключается в последовательном применении (14) для всех строк исходной системы $i = 1, \ldots, m$ [16].
Следует отметить, что алгоритм Качмажа имеет наглядную геометрическую интерпретацию. Используя обозначения для строк матрицы, система (13) может быть переписана следующим образом:

$$(Ax)_i = (x, a_i^T) = a_i \cdot x = b_i, \ i = 1, ..., m. \tag{15}$$

Каждое из уравнений (15) задаёт в $\mathbb{R}^N$ гиперплоскость. В случае невырожденности системы (13) все эти гиперплоскости имеют единственную общую точку пересечения, соответствующую решению x. Учитывая это, итерационный процесс (14) заключается в проектировании текущего приближение x_k на гиперплоскость, соответствующую i-му уравнению системы. Таким образом, начиная с некоторого начального приближения x_0, мы получим последовательность точек, которая сходится к точке пересечения гиперплоскостей — решению системы (13) в силу простых геометрических соображений.
Обозначим теперь $\|A\|_2$ — спектральную норму матрицы A , а $\|A\|_F$ — норму Фробениуса. Обозначим также A^{-1} — левую обратную к A матрицу (в предположении, что она существует). Тогда число обусловленности матрицы A задаётся следующим образом:

$$k(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2.$$

Определим также другую версию числа обусловленности, задаваемую Фробениусовой нормой матрицы A:

$$\kappa(A) = \|A\|_F \|A^{-1}\|_2.$$

Имеет место соотношение:

$$1 \leq \frac{\kappa(A)}{\sqrt{n}} \leq k(A). \tag{16}$$

Стохастический проекционный метод основан на рандомизации итерационного процесса (14) путём выбора следующей строки не в циклическом порядке, а случайным образом. Общая схема метода выглядит следующим образом [17]:

$$x_{k+1} = x_k + \omega_k E \frac{b_{\nu(i)} - (a_{\nu(i)} \cdot x_k)}{\|a_{\nu(i)}\|^2} a_{\nu(i)}^T, \tag{17}$$

Здесь $\nu(i) \in (1, 2, ...m)$ — случайный номер строки, ω_k — некоторые параметры, E — усреднение по некоторому числу индексов $\nu(i)$. В простейшем случае схема (17) преобразуется к следующему виду:

$$x_{k+1} = x_k + \frac{b_{\nu(i)} - (a_{\nu(i)} \cdot x_k)}{\|a_{\nu(i)}\|^2} a_{\nu(i)}^T \ . \tag{18}$$

Базовый подход к выбору случайного индекса $\nu(i)$ заключается в выборе номера строки с помощью равномерного распределения на множестве $(1, \ldots, m)$. В работах T. Strohmer'a и Р. Вершинина [18] предложен

другой подход, основанный на выборе той или иной строки с вероятностью, пропорциональной её норме $\|a_{\nu(i)}\|_2^2$. Ими доказана следующая теорема:

Теорема 2.5 [18]. Пусть x — решение системы (13). Выберем некоторое произвольное начальное приближение x_0 и рассмотрим итерационный процесс (18), где ν — случайный индекс, выбранный из множества $(1, \ldots, m)$ следующим образом:

$$\nu = i \text{ с вероятностью } p_i = \frac{\|a_i\|_2^2}{\sum_{j=1}^{m} \|a_j\|_2^2}.$$

Тогда последовательность x_k, задаваемая алгоритмом (18), сходится к решению системы (13), и средняя ошибка может быть оценена следующим образом:

$$E\|x_k - x\|_2^2 \leq \left(1 - \kappa(A)^{-2}\right)^k \cdot \|x_0 - x\|_2^2. \tag{19}$$

Теорема 2.5 даёт возможность оценить вычислительную сложность алгоритма. Зададим необходимую точность ε и рассмотрим вопрос нахождения решения x_k, такого, что

$$E\|x_k - x\|_2^2 \leq \varepsilon^2 \|x_0 - x\|_2^2.$$

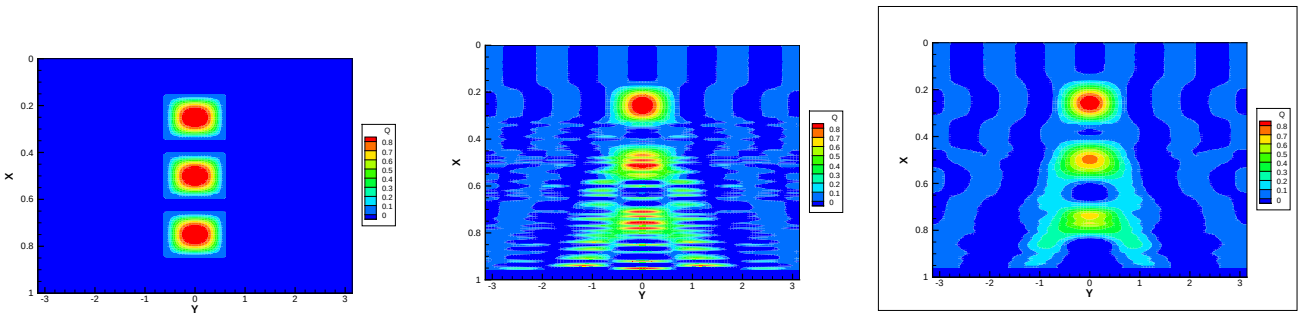
В силу оценки (19) среднее число итераций, необходимое для достижения точности ε, может быть оценено следующим образом:

$$Ek_\varepsilon \leq \frac{2\log \varepsilon}{\log\left(1 - \kappa(A)^{-2}\right)} \approx 2\kappa(A)^2 \log \frac{1}{\varepsilon}.$$

Далее, учитывая, что нормы строк $\|a_i\|_2^2$ могут быть вычислены до начала итерационного процесса, каждая итерация требует вычисления скалярного произведения, а также умножения вектора на константу и сложения двух векторов. Тем самым вычислительная сложность каждой итерации процесса (18) есть $O(n)$. Далее, если матрица A является хорошо обусловленной, то $k(A) = O(1)$, а следовательно, учитывая (16), $\kappa(A)^2 = O(n)$. Таким образом, в данных предположениях относительно обусловленности матрицы предложенный алгоритм требует $O(n^2)$ операций для сходимости решения к точному.

3 Результаты

В этом разделе представлены результаты расчётов. На рисунке 1 представлено точное решение (слева), решение, построенное с помощью метода Гельфанда — Левитана (в центре), и сглаженное решение (справа). Необходимость сглаживания обусловлена тем, что стохастический проекционный метод вносит случайные флуктуации в решение уравнения Гельфанда — Левитана, влияние которых на решение обратной задачи усиливается в силу численного дифференцирования, стоящего за формулой (12). На рисунке 2 представлена



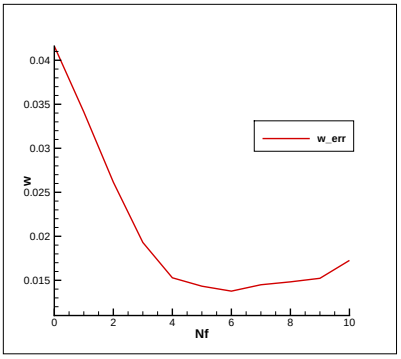
Точное решение

Проекц. метод — решение без сглаживания.

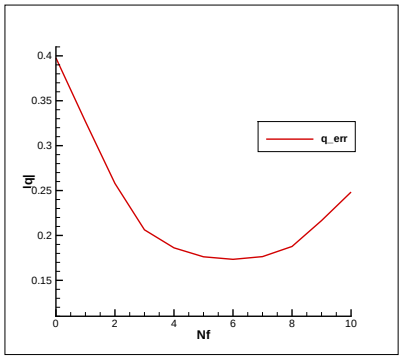
Проекц. метод — сглаженное решение.

Рис. 1: Влияние сглаживания решения уравнения Гельфанда — Левитана на точность решения обратной задачи.

зависимость точности решения от количества восстанавливаемых гармоник Фурье. Видно, что количество восстанавливаемых гармоник является параметром регуляризации, что подчёркивает дополнительную важность более качественного учета данных, соответствующих большим значениям параметра N.



Погрешность решения уравнения Гельфанда — Левитана $||w_{true} - w_{calc}||$.



Погрешность решения обратной задачи $||q_{true} - q_{calc}||$ для разных значений N.

Рис. 2: Зависимость точности решения от количества восстанавливаемых коэффициентов Фурье.

Список литературы

[1] Tarantola A. Inverse problem theory and methods for model parameter estimation. Cambridge University Pr.; 2005.

[2] Fichtner A. Full seismic waveform modelling and inversion. Springer Science & Business Media; 2010

[3] Аникиев Д. В. и др. Методы обращения сейсмических волновых полей //Seismic Technology. — 2014. — Т. 11. — №. 1. — С. 38–58.

[4] Kabanikhin, S.I., Novikov, N.S., Oseledets, I.V., Shishlenin, M.A. Fast Toeplitz linear system inversion for solving two-dimensional acoustic inverse problem // (2015) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 23 (6), pp. 687–700.

[5] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Two-dimensional analogs of the equations of Gelfand, Levitan, Krein, and Marchenko // (2015) Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications, 3 (2), pp. 70–99.

[6] Kabanikhin, S.I., Sabelfeld, K.K., Novikov, N.S., Shishlenin, M.A. Numerical solution of the multidimensional Gelfand-Levitan equation // (2015) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 23 (5), pp. 439–450.

[7] Kabanikhin, S.I., Sabelfeld, K.K., Novikov, N.S., Shishlenin, M.A. Numerical solution of an inverse problem of coefficient recovering for a wave equation by a stochastic projection methods. // (2015) Monte Carlo Methods and Applications, 21 (3), pp. 189–203.

[8] Kabanikhin, S.I., Nurseitov, D.B., Shishlenin, M.A., Sholpanbaev, B.B. Inverse problems for the ground penetrating radar (2013) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 21 (6), pp. 885–892.

[9] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Numerical algorithm for two-dimensional inverse acoustic problem based on Gel'fand-Levitan-Krein equation // (2011) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 18 (9), pp. 979–995.

[10] Kabanikhin, S., Shishlenin, M. Quasi-solution in inverse coefficient problems // (2008) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 16 (7), pp. 705–713.

[11] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Boundary control and Gel'fand-Levitan-Krein methods in inverse acoustic problem // (2004) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 12 (2), pp. 125–144.

[12] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Comparative analysis of boundary control and Gel'fand-Levitan methods of solving inverse acoustic problem // (2003) Inverse Problems in Engineering Mechanics IV, pp. 503–512.

[13] Kabanikhin, S.I., Scherzer, O., Shishlenin, M.A. Iteration methods for solving a two dimensional inverse problem for a hyperbolic equation // (2003) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 11 (1), pp. 87–109.

[14] Wapenaar K, Thorbecke J, Van Der Neut J, et al. Marchenko imaging. // Geophysics. 2014b;79(3):WA39–WA57

[15] Н.С. Новиков, Сравнительный анализ численных методов решения двумерного аналога уравнения Гельфанда — Левитана // Сибирские электронные математические известия, Труды 5й международной молодёжной научной школы — конференции "Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач с. 132–144, 2014

[16] Ильин В.П., Об итерационном методе Качмажа и его обобщениях // Сиб. журн. индустр. матем., 9(3), стр. 39–49, 2006

[17] K. Sabelfeld, N. Loshchina, Stochastic iterative projection methods for large linear systems // Monte Carlo Methods Appl. 16 (2010), 343–359

[18] T. Strohmer and R. Vershynin, A randomized Kaczmarz algorithm with exponential convergence // Journal of Fourier Analysis and Applications, vol. 15 (2009), 262–278.

Сергей Игоревич Кабанихин — д.ф.-м.н., директор Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: ksi@sscc.ru;
Никита Сергеевич Новиков — м.н.с. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: novikov-1989@yandex.ru;
Максим Александрович Шишленин — с.н.с. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Институт математики СО РАН;
e-mail: mshishlenin@ngs.ru.
Дата поступления — 30 апреля 2017 г.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ, ЗАВИСЯЩИХ ОТ ВРЕМЕНИ, В ДИНАМИЧЕСКИХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧАХ ПО НЕЛОКАЛЬНЫМ ДАННЫМ

С. И. Кабанихин[1,2,3], М. А. Шишленин[1,2,3]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск*

[3] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.63

В данной работе предложены алгоритмы решения обратных задач определения старшего коэффициента, зависящего от времени, по нелокальной дополнительной информации интегрального типа. Для приближенного решения нелинейных обратных задач построен градиентный метод минимизации целевого функционала. Получены формулы градиента функционала с использованием решения соответствующих сопряженных задач.
Ключевые слова: коэффициентная обратная задача, гиперболическое уравнение, параболическое уравнение, нелокальные данные.

Введение

В настоящее время опубликовано много работ, посвященных задаче нахождения коэффициентов параболического уравнения [26], в том числе, для случая, когда коэффициент зависит только от времени [21–23]. Дополнительной относительно решения прямой задачи информацией может быть значение решения задачи в какой-либо точке или на границе области [9]. В некоторых случаях, дополнительное условие задается в виде интеграла по области (нелокальное условие). Обратные задачи с нелокальными условиями возникают в теплопереносе, термоэластичности, управлении, химической кинетике, медицине и т.д. [1–4, 6, 10, 18].

В данной работе предложены алгоритмы решения обратных задач определения старшего коэффициента, зависящего от времени, по нелокальной дополнительной информации интегрального типа. Для приближенного решения нелинейных обратных задач построен градиентный метод минимизации целевого функционала. Получены формулы градиента функционала с использованием решения соответствующих сопряженных задач.

1 Обратная задача для параболического уравнения

Одним из перспективных направлений в медицине является лечение с помощью полимерных пленок, содержащих лекарственные вещества (ЛВ). Такие пленки должны продолжительное время поддерживать требуемый уровень лекарственного вещества в крови или тканях пациента [13, 14, 23]. Если пренебречь процессами растворения или разрушения полимера, то основным механизмом высвобождения ЛВ из пленки будет диффузия. Одной из важнейших характеристик, влияющей на выход ЛВ из полимерной пленки, является коэффициент диффузии пленки, который меняется со временем и в общем случае неизвестен.

Пусть относительно решения $u(x,t)$ прямой задачи ($\sigma(x) \geq \sigma_0 > 0$, $q(t) \geq q_0 > 0$)

$$q(t)u_t = \operatorname{div}(\sigma(x)\nabla u), \qquad x \in \Omega \in \mathbb{R}^n, \quad t \in (0,T), \tag{1}$$

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 17-51-540004, 16-29-15120, 16-01-00755) и Министерством образования и науки Республики Казахстан (проект 1746/GF4).

$$u(x,0) = u_0(x), \qquad x \in \Omega, \tag{2}$$

$$u|_{\partial\Omega} = 0, \qquad t \in (0,T), \tag{3}$$

задана нелокальная дополнительная информация

$$\int\limits_\Omega u(x,t)\mathrm{d}x = f(t), \qquad t \in (0,T). \tag{4}$$

В обратной задаче (1)—(4) требуется определить коэффициент диффузии $q(t)$.

Решение коэффициентной обратной задачи будем искать, минимизируя целевой функционал

$$J(q) = \int\limits_0^T \left[\int\limits_\Omega u(x,t;q)\mathrm{d}x - f(t) \right] \mathrm{d}t$$

методом простой итерации

$$q^{(k+1)}(t) = q^{(k)}(t) - \alpha J'\left(q^{(k)}\right)(t).$$

Здесь $\alpha > 0$ параметр спуска, а градиент функционала определяется по формуле [17, 19, 25]

$$J'(q)(t) = \int\limits_\Omega u_t(x,t)\psi(x,t)\mathrm{d}x,$$

в которой $\psi(x,t)$ — решение сопряженной задачи:

$$\left(q(t)\psi\right)_t = -\operatorname{div}\left(\sigma(x)\nabla\psi\right) - 2\left[\int\limits_\Omega u(x,t)\mathrm{d}x - f(t)\right], \qquad x \in \Omega, \quad t \in (0,T);$$

$$\psi(x,T) = 0, \qquad x \in \Omega,$$

$$\psi|_{\partial\Omega} = 0, \qquad t \in (0,T).$$

Отметим, что предложенный оптимизационный алгоритм можно применить в случае, когда дополнительная информация (4) задается только в отдельные моменты времени t_j, $j = 1, 2, \ldots, K$:

$$\int\limits_\Omega u(x,t_j)\mathrm{d}x = f(t_j), \qquad t = t_j,\ j = 1,2,\ldots,K.$$

Изменится только постановка сопряженной задачи:

$$\left(q(t)\psi\right)_t = -\operatorname{div}\left(\sigma(x)\nabla\psi\right), \qquad x \in \Omega, \quad t \in (0,T),\ t \neq t_j,\ j = 1,\ldots,K,$$

$$\left[q(t)\psi\right]_{t=t_j} = -2\left[\int\limits_\Omega u(x,t_j)\mathrm{d}x - f(t_j)\right], \qquad x \in \Omega, \quad j = 1,\ldots,K,$$

$$\psi(x,T) = 0, \qquad x \in \Omega,$$

$$\psi|_{\partial\Omega} = 0, \qquad t \in (0,T).$$

Здесь $\left[q(t)\psi\right]_{t=t_j}$ означает скачок функции $q(t)\psi(x,t)$ в точке $t = t_j$.

2 Обратная задача для гиперболического уравнения

Приложения сейсмики, электродинамики, акустической томографии приводят к проблемам определения коэффициентов, зависящих от времени, по некоторым нелокальным данным. В настоящее время теория нелокальных задач интенсивно развивается и является важным разделом уравнений в частных производных

[7, 11, 16, 20, 24]. В данном разделе мы построим оптимизационный метод восстановления коэффициента, зависящего от времени для гиперболического уравнения.

Пусть относительно решения $u(x,t)$ прямой задачи ($\rho(x) \geq \rho_0 > 0$, $q(t) \geq q_0 > 0$)

$$q(t)u_{tt} = \Delta u - \nabla \ln \rho(x)\, \nabla u, \qquad x \in \Omega \in \mathbb{R}^n, \quad t \in (0,T), \tag{5}$$

$$u(x,0) = u_0(x), \qquad x \in \Omega, \tag{6}$$

$$u|_{\partial\Omega} = 0, \qquad t \in (0,T), \tag{7}$$

задана нелокальная дополнительная информация

$$\int\limits_\Omega u(x,t)\mathrm{d}x = f(t), \qquad t \in (0,T). \tag{8}$$

В обратной задаче (5)—(8) требуется определить скорость распространения волн $q(t)$.

Приближенное решение коэффициентной обратной задачи будем искать, минимизируя целевой функционал

$$J(q) = \int\limits_0^T \left[\int\limits_\Omega u(x,t;q)\mathrm{d}x - f(t) \right] \mathrm{d}t \to \min_q$$

градиентным методом.

Градиент функционала определяется по формуле [5,15]

$$J'(q^{(k)})(t) = -\int\limits_\Omega u_t^{(k)}(x,t)\psi_t^{(k)}(x,t)\mathrm{d}x.$$

Отметим, что предложенный оптимизационный алгоритм можно применить в случае, когда дополнительная информация (8) задается только в отдельные моменты времени t_j, $j = 1, 2, \ldots, K$:

$$\int\limits_\Omega u(x,t_j)\mathrm{d}x = f(t_j), \qquad t = t_j,\ j = 1,2,\ldots,K.$$

Изменится только постановка сопряженной задачи:

$$\left(q^{(k)}(t)\psi^{(k)}\right)_{tt} = \Delta\psi^{(k)} - \nabla \ln \rho(x)\, \nabla\psi^{(k)}, \qquad x \in \Omega, \quad t \in (0,T);$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}\Big(q(t)\psi\Big)\right]_{t=t_j} = -2\left[\int\limits_\Omega u(x,t_j)\mathrm{d}x - f(t_j)\right], \qquad x \in \Omega, \quad j = 1,\ldots,K,$$

$$\psi^{(k)}(x,T) = 0, \qquad x \in \Omega,$$

$$\psi^{(k)}|_{\partial\Omega} = 0, \qquad t \in (0,T).$$

Здесь $\left[\frac{\partial}{\partial t}\Big(q(t)\psi\Big)\right]_{t=t_j}$ означает скачок производной по переменной t функции $q(t)\psi(x,t)$ в точке $t = t_j$.

Алгоритм решения коэффициентной обратной задача для волнового уравнения состоит из следующих этапов:

1. Задаем начальное приближение $q^{(0)}(t)$.
2. Предположим, что приближенное решение $q^{(k)}(t)$ известно и покажем, как определить $q^{(k+1)}(t)$.
3. Решаем прямую задачу:

$$q^{(k)}(t)u_{tt}^{(k)} = \Delta u^{(k)} - \nabla \ln \rho(x)\, \nabla u^{(k)}, \qquad x \in \Omega, \quad t \in (0,T);$$

$$u^{(k)}(x,0) = u_0(x);$$

$$u^{(k)}|_{\partial\Omega} = 0.$$

4. Решаем сопряженную задачу:

$$\left(q^{(k)}(t)\psi^{(k)}\right)_{tt} = \Delta\psi^{(k)} - \nabla \ln \rho(x)\, \nabla\psi^{(k)} - 2\left[\int\limits_{\Omega} u^{(k)}(x,t)\mathrm{d}x - f(t)\right], \qquad x \in \Omega, \quad t \in (0,T);$$

$$\psi^{(k)}(x,T) = 0, \qquad x \in \Omega,$$

$$\psi^{(k)}|_{\partial\Omega} = 0, \qquad t \in (0,T).$$

5. Определяем градиент функционала

$$J'(q^{(k)})(t) = -\int\limits_{\Omega} u_t^{(k)}(x,t)\psi_t^{(k)}(x,t)\mathrm{d}x.$$

6. Находим $q^{(k+1)}(t)$ по формуле

$$q^{(k+1)}(t) = q^{(k)}(t) - \alpha J' q^{(k)}(t).$$

Здесь $\alpha > 0$ параметр спуска.

Отметим, что можно существенно уменьшить число итераций, учитывая априорную информацию об искомом решении [8, 12].

3 Заключение

В данной работе предложены алгоритмы решения обратных задач определения старшего коэффициента, зависящего от времени, по нелокальной дополнительной информации интегрального типа. Для приближенного решения нелинейных обратных задач построен градиентный метод минимизации целевого функционала. Получены формулы градиента функционала с использованием решения соответствующих сопряженных задач.

Список литературы

[1] Cannon, J.R., Yin, H.-M. Numerical Solutions of Some Parabolic Inverse Problems // Numer. Methods Partial Differential Equations. 1990. V. 6. P. 177—191.

[2] Cannon J.R., Rundell W. Recovering a Time Dependent Coefficient in a Parabolic Differential Equation // J. Math. Anal. Appl. 1991. V. 160. P. 572–582.

[3] Bouziani A. Mixed problem with integral conditions for a certain parabolic equation // Journal of Applied Mathematics and Stochastic Analisys. 1996. V. 9. P. 323–330.

[4] Ivanchov N.I. On the Determination of the Time-Dependent Leading Coefficient in a Parabolic Equation // Siberian Mathematical Journal. 1998. V. 39, iss. 3. P. 465–475.

[5] Kabanikhin S.I., Scherzer O., Shishlenin M.A. Iteration methods for solving a two dimensional inverse problem for a hyperbolic equation // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2003. V. 11, iss. 1. P. 87–109.

[6] Dehghan M. Identification of a Time-Dependent Coefficient in a Partial Differential Equation Subject to an Extra Measurement // Numer. Methods Partial Differential Equations. 2005. V. 21. P. 611–622.

[7] Kozhanov A.I., Pulkina L.S. On solvability of boundary value problems with a nonlocal boundary condition of integral form for many-dimensional hyperbolic equations // Difference Equations. 2006. V. 42, iss. 9. P. 1166–1179.

[8] Kabanikhin S.I., Shishlenin M.A. Quasi-solution in inverse coefficient problems // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2008. V. 16, iss. 7. P. 705–713.

[9] Kabanikhin S.I. Definitions and examples of inverse and ill-posed problems // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2008. V. 16, iss. 4. P. 317–357.

[10] Liao W., Dehghan M., Mohebbi A. Direct Numerical Method for an Inverse Problem of a Parabolic Partial Differential Equation // Journal of Computational Applied Mathematics. (2009). V. 232. P. 351–360.

[11] Denisov A.M. Inverse Problem for a Hyperbolic Equation with Nonlocal Boundary Condition Containing a Delay Argument // Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics. 2011. V. 280, iss. 1. P. S80–S87.

[12] Кабанихин С.И., Шишленин М.А. Об использовании априорной информации в коэффициентных обратных задачах для гиперболических уравнений // Тр. ИММ УрО РАН. 2012. Т. 18, № 1. С. 147–164.

[13] Vilar G., Tulla-Puche J., Albericio F. Polymers and drug delivery systems // Current Drug Delivery. 2012. V. 9, iss. 4. P. 367–394.

[14] Shaik M. R., Korsapati M., Panati D. Polymers in controlled drug delivery systems // Int.J.Pharm.Sei. 2012. V. 2, iss. 4. P. 112–116.

[15] Kabanikhin S.I., Nurseitov D.B., Shishlenin M.A., Sholpanbaev B.B. Inverse problems for the ground penetrating radar // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2013. V. 21, iss. 6. P. 885–892.

[16] Kirichenko S.V. On a boundary value problem with dime nonlocal conditions for one-dimensional hyperbolic equation // Vestn. Samar. Gos. Univ. Ser. of Natural Sciences. 2013. V. 6, iss. 107. P. 31–39.

[17] Kabanikhin S.I., Gasimov Y.S., Nurseitov D.B., Shishlenin M.A., Sholpanbaev B.B., Kasenov S. Regularization of the continuation problem for elliptic equations // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2013. V. 21, iss. 6. P. 871–884.

[18] Onyejekwe O.N. Determination of two-time dependent coefficients in a parabolic partial differential equation by homotopy analysis method // International Journal of Applied Mathematical Research. 2014. V. 3, iss. 2. P. 161–167.

[19] Kabanikhin S.I., Shishlenin M.A. Regularization of the decision prolongation problem for parabolic and elliptic elliptic equations from border part // Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications. 2014. V. 2, iss. 2. P. 81–91.

[20] Isgandarova G.N. On an inverse boundary value problem with time nonlocal conditions for one-dimensional hyperbolic equation // Transactions of NAS of Azerbaijan, Issue Mathematics. 2015. V. 35, iss. 4. P. 95–101.

[21] Hussein M., Lesnic D., Ismailov M.I. An inverse problem of finding the time-dependent diffusion coefficient from an integral condition // Mathematical Methods in the Applied Sciences. 2016. V. 39, iss. 5. P. 963–980.

[22] Вабищевич П.Н., Клибанов М.В. Вычислительная идентификация стар- шего коэффициента параболического уравнения // Дифференциальные уравнения. 2016. Т. 52, № 7. С. 896–903.

[23] Губайдуллин И.М., Жалнин Р.В., Масягин В.Ф., Тишкин В.Ф., Шуршина А.С. Применение разрывного метода Галеркина для решения обратной задачи диффузии лекарственных веществ из хитозановых пленок // Журнал СВМО. 2016. Т. 18, No. 2. С. 94–105.

[24] Бейлин А.Б., Пулькина Л.С. Задача о колебаниях стержня с неизвестным условием его закрепления на части границы // Вестник самарского университета. Естественнонаучная серия. 2017. Т. 23, № 2. С. 7–14.

[25] Belonosov A., Shishlenin M. Regularization methods of the continuation problem for the parabolic equation // Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). 2017. 10187 LNCS. P. 220–226.

[26] Lukyanenko D.V., Shishlenin M.A., Volkov V.T. Solving of the coefficient inverse problems for a nonlinear singularly perturbed reaction-diffusion-advection equation with the final time data // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2018. V. 54. P. 1339–1351.

Сергей Игоревич Кабанихин — д.ф.-м.н., член-корреспондент РАН,
директор Института вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН;
г.н.с. Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: kabanikhin@sscc.ru;
Максим Александрович Шишленин — д.ф.-м.н.,
с.н.с. Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН,
с.н.с. Института вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: mshishlenin@ngs.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

КОЭФФИЦИЕНТНЫЕ ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ С ДАННЫМИ ВНУТРИ ОБЛАСТИ

С. И. Кабанихин[1,2,3], М. А. Шишленин[1,2,3]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск*

[3] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.63

В математических моделях биологии, экономики и социальных наук возникают коэффициентные обратные задачи для параболических уравнений с данными заданными внутри области. Искомые коэффициенты могут характеризовать такие важные характеристики как фондовооруженность, производительность труда, потребление, межличностные взаимодействия и т.д. Данные, заданные внутри области, как правило характеризуют либо некоторую референтную группу (социальный опрос), либо данные измеряемые на некотором временном-пространственном промежутке. В статье предлагается приближенный метод решения нелинейной коэффициентной обратной задачи для параболического уравнения, основанный на градиентном методе минимизации целевого функционала. Построен градиент функционала на основе решения соответствующих сопряженных задач.

Ключевые слова: коэффициентная обратная задача, математические модели экономики, социальные процессы, параболическое уравнение, данные заданные внутри области.

1 Введение. Постановка задачи

В математических моделях биологии [5, 10, 15, 18], экономики [1, 7, 11], социальных наук [2–4] и экологии [16] возникают коэффициентные обратные задачи для параболических уравнений с данными заданными внутри области [8]. Искомые коэффициенты могут характеризовать такие важные характеристики как фондовооруженность, производительность труда, потребление, межличностные взаимодействия и т.д. Данные, заданные внутри области, как правило характеризуют либо некоторую референтную группу (социальный опрос), либо данные измеряемые на некотором временном-пространственном промежутке. В статье предлагается приближенный метод решения нелинейной обратной задачи для параболического уравнения основанный на градиентном методе минимизации целевого функционала. Построен градиент функционала на основе решения соответствующих сопряженных задач.

Пусть относительно решения $u(x,t)$ прямой задачи в области $\Omega = \{(x,t) : x \in (0,L), t \in (0,T)\}$

$$u_t = a(x,t)u_{xx} + b(x,t)u_x + c(x,t)u, \qquad (x,t) \in \Omega, \tag{1}$$

$$u(x,0) = u_0(x), \qquad x \in (0,L), \tag{2}$$

$$u_x|_{x=0} = u_x|_{x=L} = 0, \qquad t \in (0,T), \tag{3}$$

задана дополнительная информация на подмножестве области Ω:

$$u(x,t) = f(x,t), \qquad (x,t) \in \omega \subseteq \Omega. \tag{4}$$

В обратной задаче (1)—(4) требуется определить коэффициенты уравнения $a(x,t)$, $b(x,t)$ и $c(x,t)$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 17-51-540004, 16-29-15120, 16-01-00755) и Министерством Образования и Науки Республики Казахстан (проект 1746/GF4).

Обозначим $q(x,t) = \big(a(x,t), b(x,t), c(x,t)\big)$. Решение коэффициентной обратной задачи (1)—(4) будем искать, минимизируя целевой функционал

$$J(q) = \iint\limits_{\omega} \big(u(x,t;q) - f(x,t)\big)^2 \mathrm{d}\omega$$

методом простой итерации

$$q^{(k+1)}(t) = q^{(k)}(t) - \alpha J'\left(q^{(k)}\right)(t).$$

Здесь $\alpha > 0$ параметр спуска, а градиент функционала определяется по формуле

$$J'(q)(x,t) = \Big(u_{xx}(x,t)\psi(x,t), u_x(x,t)\psi(x,t), u(x,t)\psi(x,t)\Big),$$

в которой $\psi(x,t)$ — решение сопряженной задачи [6, 13, 14, 17]:

$$\begin{gathered} \psi_t + (a\psi)_{xx} - (b\psi)_x + c\psi = 2\chi(x,t)\big[u(x,t) - f(x,t)\big], \qquad (x,t) \in \Omega, \\ \psi(x,T) = 0, \qquad x \in \Omega, \\ \Big[\big(a\psi\big)_x + \psi\Big]\Big|_{x=0} = \Big[\big(a\psi\big)_x + \psi\Big]\Big|_{x=L} = 0, \qquad t \in (0,T). \end{gathered} \tag{5}$$

Здесь

$$\chi(x,t) = \begin{cases} 1, & \text{если } (x,t) \in \omega; \\ 0, & \text{если } (x,t) \notin \omega. \end{cases}$$

Отметим, что можно существенно уменьшить число итераций, учитывая априорную информацию об искомом решении [9, 12].

Пусть область ω задается гладкой непрерывной кривой $x = \varphi(t)$, $t \in [0,T]$. Дополнительная информация задана в следующем виде:

$$u\big(\varphi(t), t\big) = f(t), \qquad t \in (0,T).$$

В этом случае решение коэффициентной обратной задачи (1)—(4) будем искать, минимизируя целевой функционал

$$J(q) = \int\limits_0^T \Big(u\big(\varphi(t), t; q\big) - f(t)\Big)^2 \mathrm{d}t.$$

Тогда уравнение (5) в сопряженной задаче примет следующий вид:

$$\psi_t + (a\psi)_{xx} - (b\psi)_x + c\psi = 2\delta\big(x - \varphi(t)\big)\big[u(x,t) - f(t)\big], \qquad (x,t) \in \Omega.$$

Здесь $\delta\big(x - \varphi(t)\big)$ — дельта-функция Дирака.

Заключение

В статье предлагается приближенный метод решения нелинейной коэффициентной обратной задачи для параболического уравнения основанный на градиентном методе минимизации целевого функционала. Построен градиент функционала на основе решения соответствующих сопряженных задач.

Список литературы

[1] Brock W.A., Malliaris A.G. Differential Equations, Stability and Chaos in Dynamic Economics. Advanced Textbooks in Economics Editors C.J. Bliss, M.D. Intriligator. North-Holland. 1996.

[2] Flierl G., Grunbaum D., Levin S., Olson D. From individual to aggregations: the interplay between behaviour and physics // J theor Biol. 1999. V. 196. P. 397–454.

[3] Despland E., Simpson S.J. The role of food distribution and nutritional quality in behavioural phase change in the desert locust // Animal Behaviour. 2000. V. 59. P. 643–652.

[4] Mogilner A., Edelstein-Keshet L. Mutual interactions, potentials, and individual distance in a social aggregation. Preprint, 2001.

[5] Murray J.D. Mathematical Biology: I. An Introduction. Third Edition. Springer. 2002.

[6] Kabanikhin S.I., Scherzer O., Shishlenin M.A. Iteration methods for solving a two dimensional inverse problem for a hyperbolic equation // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2003. V. 11, iss. 1. P. 87–109.

[7] Wei-Bin Zhang. Differential Equations, Bifurcations, and Chaos in Economics. Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences, Vol. 68. Ritsumeikan Asia Pacific University, Japan. World Scientific. 2005.

[8] Kabanikhin S.I. Definitions and examples of inverse and ill-posed problems // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2008. V. 16, iss. 4. P. 317–357.

[9] Kabanikhin S.I., Shishlenin M.A. Quasi-solution in inverse coefficient problems // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2008. V. 16, iss. 7. P. 705–713.

[10] Patel T., Mehta M.N., Pradhan Y.H. The Numerical Solution of Burger's Equation Arising into the Irradiation of Tumour Tissue in Biological Diffusing System by Homotopy Analysis Method // Asian Journal of Applied Sciences, 2012.

[11] Садовничий В.А., Акаев А.А., Коротаев А.В., Малков С.Ю. Моделирование и прогнозирование мировой динамики. Москва. 2012.

[12] Кабанихин С.И., Шишленин М.А. Об использовании априорной информации в коэффициентных обратных задачах для гиперболических уравнений // Тр. ИММ УрО РАН. 2012. Т. 18, № 1. с. 147–164.

[13] Kabanikhin S.I., Nurseitov D.B., Shishlenin M.A., Sholpanbaev B.B. Inverse problems for the ground penetrating radar // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2013. V. 21, iss. 6. P. 885–892.

[14] Kabanikhin S.I., Shishlenin M.A. Regularization of the decision prolongation problem for parabolic and elliptic elliptic equations from border part // Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications. 2014. V. 2, iss. 2. P. 81–91.

[15] Пененко А.В., Николаев С.В., Голушко С.К., Ромащенко А.В., Кирилова И.А. Численные алгоритмы идентификации коэффициента диффузии в задачах тканевой инженерии // Математическая биология и биоинформатика. 2016. Т. 11, № 2. С. 426–444.

[16] Пененко А.В., Пененко В.В., Цветова Е.А. Последовательные алгоритмы усвоения данных в моделях мониторинга качества атмосферы на базе вариационного принципа со слабыми ограничениями // Сибирский журнал вычислительной математики. 2016. Т. 19, № 4. С. 401–418.

[17] Belonosov A., Shishlenin M. Regularization methods of the continuation problem for the parabolic equation // Lecture Notes in Computer Science. 2017. 10187 LNCS. P. 220–226.

[18] Lukyanenko D.V., Shishlenin M.A., Volkov V.T. Solving of the coefficient inverse problems for a nonlinear singularly perturbed reaction-diffusion-advection equation with the final time data // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2018. V. 54. P. 1339–1351.

Сергей Игоревич Кабанихин — д.ф.-м.н., член-корреспондент РАН,
директор Института вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН;
г.н.с. Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: kabanikhin@sscc.ru;
Максим Александрович Шишленин — д.ф.-м.н.,
с.н.с. Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН,
с.н.с. Института вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: mshishlenin@ngs.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПЕРЕНОСА СОЛНЕЧНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ВОДНОЙ СРЕДЕ, ОБУСЛОВЛЕННЫХ МНОГОКРАТНЫМ РАССЕЯНИЕМ С УЧЕТОМ МОРСКОГО ВОЛНЕНИЯ

Е. Г. Каблукова[1], С. М. Пригарин[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.64, 519.245, 535.3

Методом Монте — Карло моделируется радиационный режим в системе «океан — атмосфера». Для описания взволнованной водной поверхности используется фацетная модель. Отражение и преломление излучения на поверхности раздела вода — воздух моделируются по формулам Френеля. В работе исследуются освещенность, потоки и угловые распределения излучения на различных уровнях и водной толще при различных отражающих свойствах подстилающей поверхности и силе волнения на море. Изучаются различные эффекты, которые могут возникать за счет многократного рассеяния излучения, отражения от подстилающей поверхности и полного отражения на границе раздела вода — воздух.

Ключевые слова: перенос излучения, облачность, морское волнение, статистическое моделирование

Введение

При решении целого ряда задач радиационной энергетики системы океан — атмосфера, а также проблем теории климата и метеорологии, актуальной является задача решения уравнения переноса со случайными граничными условиями в неоднородных средах. Сложность решения такого рода задач преодолевается применением методов статистического моделирования стохастической структуры ветрового волнения поверхности океана, гидрофизических характеристик и соответствующих процессов переноса солнечного излучения.

В настоящей работе путем численного решения уравнения переноса методами Монте — Карло изучаются особенности распространения солнечного излучения в водной среде, влияние облачного слоя (капельного и кристаллического), свойств подстилающей поверхности и скорости ветра на потоки излучения и угловые распределения интенсивности излучения в водной среде малой толщины. Достаточно часто при решении такого рода задач и задач лазерного зондирования для описания взволнованной водной поверхности применяется фацетная модель [1], [2], в которой граница раздела вода — воздух представляет собой случайную поверхность, составленную из набора элементарных площадок, центры которых лежат в одной плоскости, а нормали к ним распределены по гауссовскому закону при нулевой взаимной корреляцией в различных точках поверхности. Данная модель является достаточно простой и дает хорошее приближение. Определению зависимостей вероятностных характеристик уклонов морской поверхности от скорости ветра посвящено большое количество работ (см. например, [3]–[7]).

Данная работа является продолжением работы авторов [8], в которой изучалось влияние отражения солнечного излучения подстилающей поверхностью на радиационные поля в жидкокапельных облаках с детерминированной вертикальной стратификацией и различными микрофизическими характеристиками.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты N 15-01-00783, 16-01-00145) и программы фундаментальных исследований Президиума РАН I.33П.

1 Постановка задачи и описание модели

Предполагается, что система «океан — атмосфера» освещается потоком фотонов единичной интенсивности в направлении ω_0. Угол между вертикальной осью Oz и направлением на источник излучения $-\omega_0$ обозначен через θ_0.

Методом Монте — Карло вычислялись угловые распределения интенсивности излучения $\Phi(z,\mu,\varphi)$, значения пространственной освещенности $\Phi_0(z) = \int_0^{2\pi}\int_{-1}^{1}\Phi(z,\mu,\varphi)d\mu d\phi$, потоки излучения в верхнюю $\Phi_{up}(z) = \int_0^{2\pi}\int_0^{1}\Phi(z,\mu,\phi)d\mu d\varphi$ и нижнюю полусферы $\Phi_{dn}(z) = \int_0^{2\pi}\int_{-1}^{0}\Phi(z,\mu,\phi)d\mu d\varphi$ на различных горизонтальных уровнях z. Здесь μ — косинус угла между осью Oz и направлением, противоположным к направлению излучения, φ — азимутальный угол. Система «океан — атмосфера» задана в рамках плоскопараллельной горизонтально-однородной модели с коэффициентом ослабления $\sigma_{ext}(z)$, альбедо однократного рассеяния кванта излучения $q(z)$ и нормированной индикатрисой рассеяния $g(z,\theta)$, где θ — угол рассеяния. Рассматривается монохроматическое излучение видимого диапазона.

Значительный объем оптических характеристик водоемов для длины волны излучения $\lambda = 0.52$ мкм, полученных экспериментальным путем в различных районах Земли, представлен в работах [9], [10]. В таблице 1 отражены значения коэффициентов ослабления σ_{ext} и альбедо однократного рассеяния q видимого излучения, а также места проведения измерений и номера индикатрис рассеяния из работ [9], [10], используемые в наших расчетах. Эти характеристики соответствуют экстремальным и средним значениям коэффициентов ослабления видимого излучения из рассмотренного массива данных. Рис.1 иллюстрирует поведение индикатрис рассеяния, номера линий на рисунках соответствуют номерам из первого столбца таблицы 1.

Таблица 1. Коэффициенты ослабления излучения σ_{ext}, альбедо однократного рассеяния q морской водой для $\lambda = 0.52$ мкм

N	N в [9], [10]	место измерений	σ_{ext}, m^{-1}	q
1	14 [9]	Средиземное море	0.1151	0.8001
2	11 [10]	Черное море	1.1052	0.8522
3	1 [9]	Южный океан	0.5572	0.7356

Таблица 2. Дисперсии уклонов морской поверхности σ_x^2 и σ_y^2 для скорости ветра v

v, м/с	σ_x^2	σ_y^2
1	0.0044	0.0028
5	0.0156	0.0084
10	0.0293	0.0145

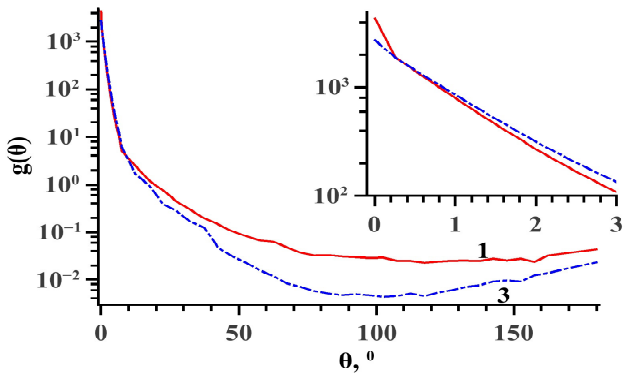


Рис. 1: Индикатрисы рассеяния видимого излучения морской водой

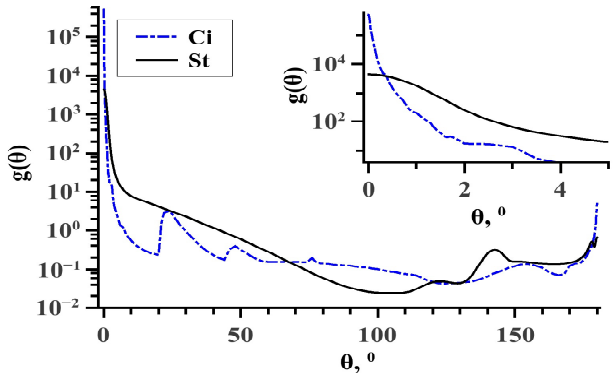


Рис. 2: Индикатрисы рассеяния излучения для $\lambda = 0.52$ мкм слоистым (St) и перистым (Ci) облаками

В качестве рассеивающей облачной среды используются модели полидисперсных жидкокапельных St и кристаллических Ci облаков из [11]. На рис. 2 представлено поведение индикатрис рассеяния для данных моделей облаков.

Для моделирования случайного поля, имитирующего морскую поверхность, используется фацетная модель, в которой предполагается, что водная поверхность состоит из элементарных площадок (фацетов), центры которых расположены на одном уровне $z = h$, а уклоны имеют заданную плотность распределения $p(z_x, z_y)$, где z_x и z_y — тангенсы углов между площадкой и осями Ox и Oy, соответственно. При этом счи-

тается, что распределение уклонов в двух различных точках не зависят друг от друга. Предполагается, что вероятностное распределение уклонов поверхности является гауссовским.

Существуют различные аппроксимации зависимостей вероятностных характеристик наклонов от скорости ветра. Одной из первых работ, посвященных измерению статистических характеристик уклонов морской поверхности, является работа Кокса и Манка [3]. В работах [4], [6] представлены результаты подобных измерений, полученных с помощью лазерного уклономера, в [5] — с помощью спутниковых изображений, [7] — с помощью СВЧ — радиометров. В наших расчетах используются значения дисперсии уклонов площадок взволнованной морской поверхности σ_x^2 и σ_y^2 вдоль и поперек направления ветра, вычислены согласно формулам из [7] (см. таблицу 2). Преломление и отражение излучения на границе вода — воздух моделировались по формулам Френеля. Предполагалось также, что подстилающая поверхность с вероятностью Q диффузно отражает падающее излучение по закону Ламберта.

2 Численный метод решения уравнения переноса

Известно, что интенсивность излучения Ф связана с плотностью столкновений $\phi(z,\omega)$ следующим соотношением $\phi(z,\omega) = \sigma_{ext}\Phi$. Плотность столкновения в приближении лучевой оптики можно описать стационарным интегральным уравнением переноса [12] со стохастическим ядром, определяющим плотность перехода марковской цепи случайных столкновений фотонов в дисперсной среде

$$\phi(\mathbf{x}) = \int_X \frac{q(z')\sigma(z)\exp(-\tau(r',r))g(z',(\omega',\omega))}{2\pi|r'-r|^2}\delta\left(\omega - \frac{r-r'}{|r-r'|}\right)\phi(\mathbf{x}')d\mathbf{x}' + f(\mathbf{x}),\ \ \mathbf{x} = (r,\omega) \in \mathbf{X} = R^3 \times \Omega.$$

Здесь $r = (x,y,z)$ — геометрические координаты положения фотона, Ω — единичная сфера направлений, ω' и ω — направления движения фотона до и после рассеяния, соответственно, $f(\mathbf{x}) = \sigma(z)\exp(-\tau(r_0,r))\ \delta(\omega - \omega_0)$ — плотность распределения первых столкновений нерассеянных частиц непосредственно от источника, $\tau(r',r) = \int_0^{|r-r'|}\sigma(r' + s\frac{r-r'}{|r-r'|})ds$, — оптическое расстояние между точками r, r', δ — дельта-функция Дирака.

Для оценки интенсивности $\Phi(z_l,\omega)$ на горизонтальном уровне z_l в малом телесном угле $\omega \in d\omega$ необходимо вычислить среднее количество фотонов, пересекших горизонтальный уровень z_l в направлениях $d\omega$. Для этого моделируется случайная цепь Маркова в фазовом пространстве $\mathbf{X}$ в соответствии с некоторой начальной плотностью $p_1(\mathbf{x})$, переходной плотностью $p(\mathbf{x}',\mathbf{x})$ и со случайным номером обрыва N, и вычисляются величины:

$$\Phi(z_l,\omega)d\omega \approx \mathbf{E}\sum_{n=1}^{N} Q_n h_{z_l}(r_n,\omega_n),\ \ h_{z_l}(r_n,\omega_n) = \begin{cases} 1, & z_{n-1} < z_l \le z_n,\ \omega_{n-1} \in d\omega \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Весовые множители Q_n в соответствии с теорией методов Монте — Карло определяются выражениями

$$Q_1 = \frac{f(\mathbf{x})}{p_1(\mathbf{x})},\ Q_n = Q_{n-1}\frac{k(\mathbf{x}_{n-1},\mathbf{x}_n)}{p(\mathbf{x}_{n-1},\mathbf{x}_n)}.$$

При пересечении границы раздела «воздух - вода» свет может испытать зеркальное отражение, либо преломление. Интенсивности преломленного и отраженного света определяются формулами Френеля. При моделировании траекторий на границе раздела с вероятностью R разыгрывается отражение, с вероятностью $1-R$ — преломление, где коэффициент R определяется по формуле [12]:

$$R = \frac{(A-B)^2(A^2B^2+C^2)}{(A+B)^2(AB+C)^2},$$

здесь $A = cos(\theta_{inc}) = -(\omega,s)$ косинус угола падения, s — нормаль к поверхности, внешняя относительно падающего луча, $B = (n_{21}^2 - 1 + A^2)^{1/2}$, n_{21} — относительный показатель преломления при переходе из одной среды в другую, $C = 1 - A^2$. Предполагается, что $n_{21}^2 - 1 + A^2 \ge 0$, иначе происходит полное отражение и $R = 1$.

3 Результаты численных экспериментов

Для того чтобы оценить влияние подстилающей поверхности на особенности радиационного режима в водной среде, численные эксперименты были проведены для небольшой толщины водного слоя $H_w = 5$ м и различных значений альбедо дна. Во всех представленных численных экспериментах испускаемое излучение направлено вертикально вниз $\theta_0 = 0$. На рис. 3 представлена пространственная освещенность $\Phi_0(z)$ на различных оптических глубинах водного слоя $\tau_w = \sigma_{ext}(z_w - z)$, ($z_w$ и z — высоты границы раздела вода-воздух и рассматриваемого горизонтального уровня) для значений альбедо подстилающей поверхности $Q = 1, 0.5, 0$. Величины пространственной освещенности Φ_0 для случая безоблачной атмосферы обозначены сплошными линиями с символами. В случае, когда в атмосфере находится жидкокапельное облако с оптической толщиной $\tau_{St} = 5$, значения Φ_0 обозначены пунктирными линиями. Отдельные символы определяют пространственную освещенность в водной среде, при наличии атмосфере кристаллического облака с оптической толщиной $\tau_{Ci} = 0.5$. В данном примере оптические характеристики воды соответствуют модели 1 из таб. 1.

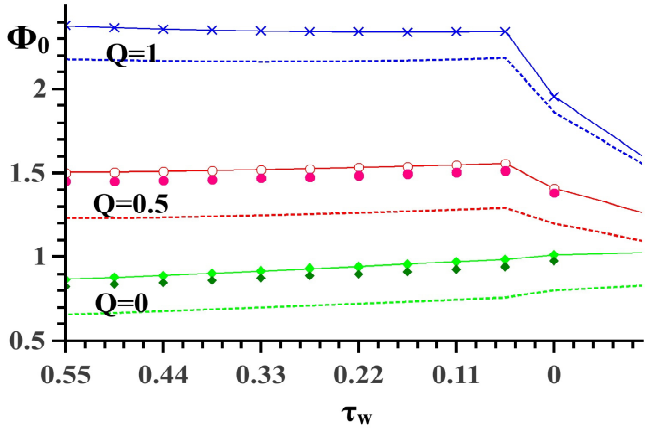


Рис. 3: Зависимость пространственой освещенности Φ_0 в водном слое от оптической глубины τ_w для различных значений альбедо подстилающей поверхности Q. Пояснения см. в тексте

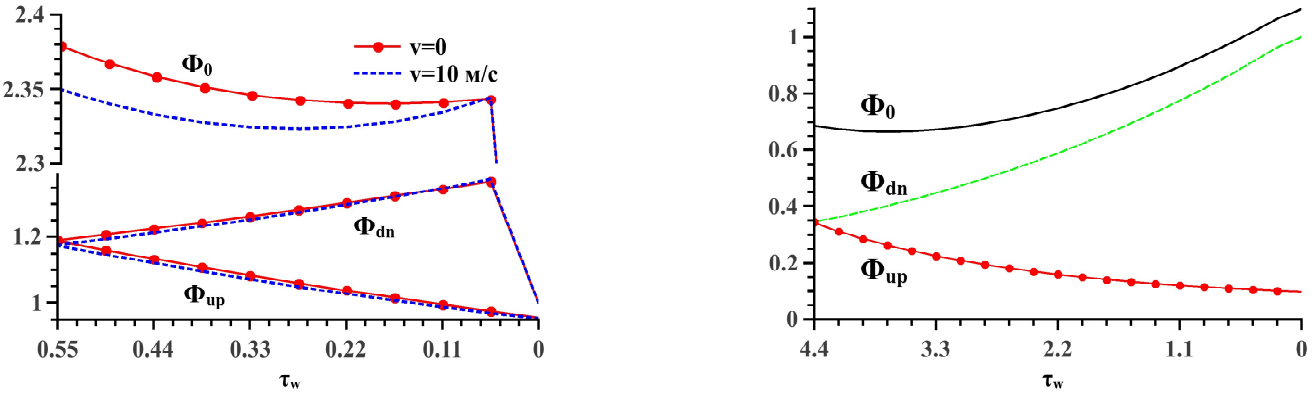
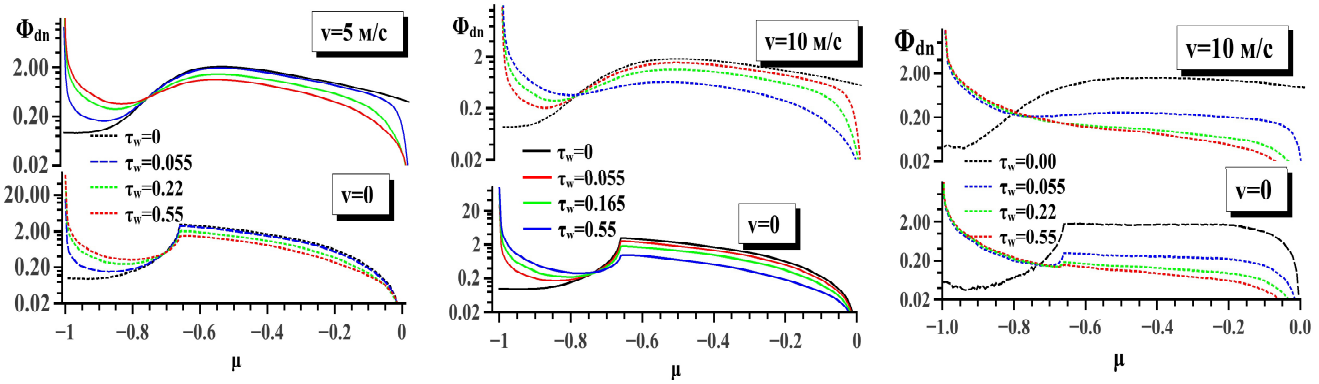


Рис. 4: Зависимость Φ_0, потоков излучения в верхнюю Φ_{up} и нижнюю Φ_{dn} полусферы от τ_w для плоской границы раздела вода-воздух и случайной модели водной поверхности при скорости ветра $v = 10$ м/с, $Q = 1$, $\theta_0 = 0$. а) оптическая толщина водного слоя равна $\tau = 0.55$, б) $\tau = 4.4$.

Проведено сравнение поведения пространственной освещенности $\Phi_0(\tau_w)$ в случаях плоской водной поверхности и случайной взволнованной поверхности для различных скоростей ветра. На рис. 4а) представлена зависимость $\Phi_0(\tau_w)$ от оптической глубины для скорости ветра $v = 10$ м/с и плоской водной поверхности

(обозначено как $v = 0$) в случае полного отражения излучения от морского дна $Q = 1$, оптическая толщина водного слоя равна $\tau = 0.55$, вариант безоблачной атмосферы. Видно, что при приближении ко дну пространственная освещенность начиная с некоторой глубины возрастает. При увеличении дисперсий уклонов водной поверхности значения $\Phi_0(\tau_w)$ у дна меньше, чем для гладкой поверхности воды на несколько процентов. Для больших оптических толщин водного слоя ($\tau_w = 4.4$) поведение пространственной освещенности на различных глубинах $\Phi_0(\tau_w)$, а также потоков излучения вверх $\Phi_{up}(\tau_w)$ и вниз $\Phi_{dn}(\tau_w)$ приведены на рис. 4б (случай $Q = 1$). В данном примере зависимость пространственной освещенности от скорости ветра практически отсутствует.

От скорости ветра существенно зависят угловые распределения интенсивности излучения. На рис. 5 изображены зависимости интенсивности излучения от косинуса зенитного угла μ: $\Phi(z,\mu) = \int_0^{2\pi} \Phi(z,\mu,\varphi)d\varphi$, нормированные на 1, на различных оптических глубинах τ_w для моделей морского волнения при скорости ветра v (в м/с) и альбедо подстилающей поверхности $Q = 1$ (а), $Q = 0.5$ (б), $Q = 0$ (в). Как и на предыдущем рисунке, $v = 0$ соответствует плоской водной поверхности. В угловых распределениях учитывалось излучение, испытавшее хотя бы одно рассеяние или отражение от границы. Как видно из графиков, угловые распределения интенсивности излучения имеют локальные максимумы, соответствующие углу полного отражения на границе раздела вода — воздух. С ростом скорости ветра и с увеличением оптической глубины эти локальные максимумы сглаживаются.



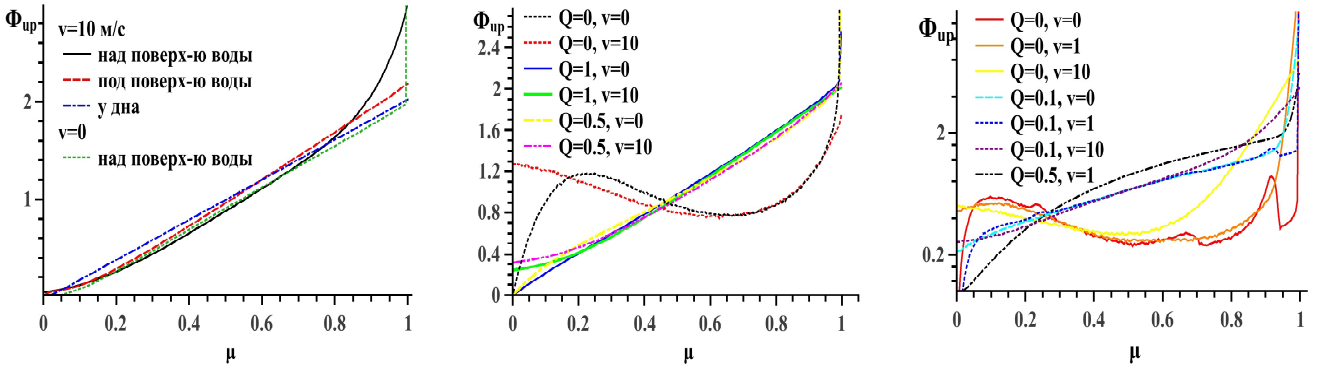
а) б) в)

Рис. 5: Зависимость углового распределения интенсивности излучения в нижнюю полусферу от косинуса зенитного угла μ для различных оптических глубин τ_w и скорости ветра v а) $Q = 1$, б) $Q = 0.5$ в) $Q = 0$

Наличие облаков над водной поверхностью слабо влияет на поведение угловых распределений интенсивности излучения в верхнюю полусферу $\Phi_{up}(z,\mu)$ внутри водного слоя. На эти распределения основной эффект оказывают свойства подстилающей поверхности. На рис. 6 представлены распределения интенсивности $\Phi_{up}(z,\mu)$ в отсутствии морского волнения и при скорости ветра 10 м/с. Рис. 6а иллюстрирует особенности $\Phi_{up}(z,\mu)$ для безоблачной атмосферы, когда альбедо подстилающей поверхности $Q = 0.5$. Поведение плотности угловых распределений в верхнюю полусферу непосредственно под поверхностью воды и у дна изображены штриховыми и штрих-пунктирными линиями. Аналогично ведут себя эти распределения и для облачной атмосферы для альбедо подстилающей поверхности $Q > 0.1$. Видно, что функция $\Phi_{up}(z,\mu)$ над поверхностью воды имеет дельта-образный максимум в точке $\mu = 1$, который сглаживается при увеличении балла волнения водной поверхности. На рис. 6б изображено поведение углового распределения $\Phi_{up}(z,\mu)$, уходящего от поверхности воды, в случае, когда в атмосфере находится слой жидкокапельного облака с оптической толщиной $\tau_{st} = 5$ для различных Q. Видно что, для плоской границы раздела двух сред, как и для безоблачной атмосферы, существует пик интенсивности уходящего вверх излучения в точке $\mu = 1$. Чем меньше альбедо подстилающей поверхности и чем больше тангенсы уклонов волн на водной поверхности, тем большая часть излучения распространяется в направлениях близких к $\mu = 0$. На рис. 6в представлена зависимость $\Phi_{up}(z,\mu)$ от μ, в случае, когда над водным слоем расположен слой кристаллического облака с оптической толщиной $\tau_{ci} = 0.5$. При значительном поглощении излучения на дне водоема в случае плоской границы раздела вода-воздух функция $\Phi_{up}(z,\mu)$ над поверхностью воды имеет несколько локальных максимумов, соответствующих зеркальному отражению от поверхности. Даже при минимальном волнении $v = 1$ м/с все локальные максимумы сглаживаются.

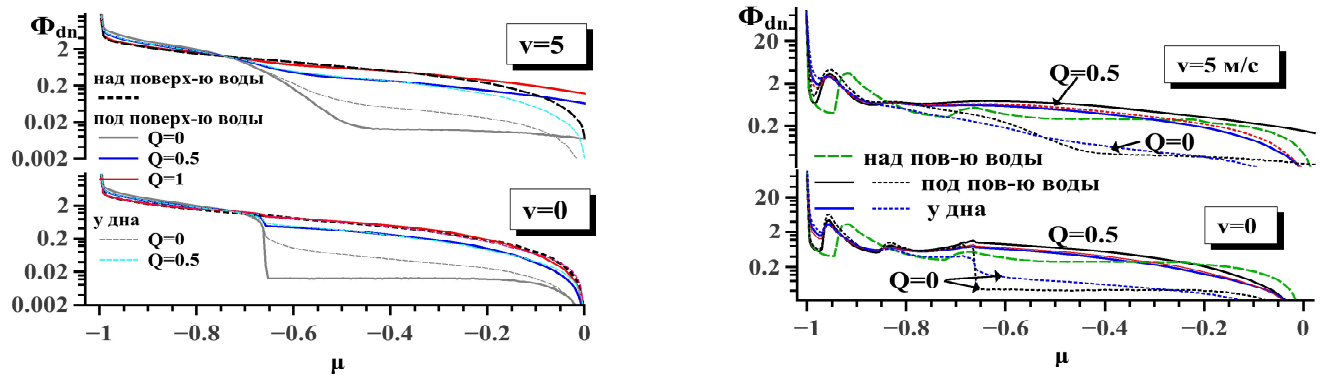
Присутствие облачного слоя малой оптической толщины оказывает значительный эффект на угловые

распределения интенсивности излучения в нижнюю полусферу в водном слое. На рис. 7 представлены плотности угловых распределений интенсивности излучения в нижнюю полуплоскость $\Phi_{dn}(z,\mu)$, зависящие от косинуса зенитного угла μ для различных значений альбедо подстилающей поверхности: на рисунке 7а — при наличии жидкокапельного облака с $\tau_{st} = 5$ в атмосфере, на рисунке 7б — при наличии кристаллического облака с $\tau_{ci} = 0.5$. Для $Q > 0$ поведение $\Phi_{dn}(z,\mu)$ слабо меняется при перемещении от поверхности воды к основанию водоема. Для $Q = 0$ и облачной атмосферы наблюдается резкое уменьшение интенсивности излучения для $\mu > -0.65$. Видно, что с увеличением скорости ветра сглаживаются все пики в угловых распределениях интенсивности излучения под поверхностью воды.



а) б) в)

Рис. 6: а) Зависимость от косинуса зенитного угла μ величины $\Phi_{up}(z,\mu)$ для плоской ($v = 0$) и случайной границы раздела вода-воздух при скорости ветра v для безоблачной атмосферы (а), значения $\Phi_{up}(z,\mu)$ над границей раздела вода — воздух для облачной атмосферы: с облаком St (б), и облаком Ci (в)



а) б)

Рис. 7: Зависимость углового распределения интенсивности излучения $\Phi_{dn}(z,\mu)$ в нижнюю полусферу от косинуса зенитного угла μ над и под поверхностью воды при наличии в атмосфере жидкокапельного облака (а), и кристаллического облака (б)

Заключение

С помощью численного моделирования методом Монте — Карло исследованы особенности радиационного режима водного слоя малой оптической толщины для различных состояний атмосферы: безоблачной атмосферы, в присутствии жидкокапельного и кристаллического облачного слоя, для различных баллов волнения водной поверхности.

Представлено поведение пространственной освещенности в зависимости от глубины погружения в водоеме для различных значений альбедо дна водоема. Показано, что для альбедо подстилающей поверхности,

близкого к 1, пространственная освещенность имеет локальный максимум у дна, если к тому же оптическая толщина водоема мала ($\tau_w = 0.5$), то пространственная освещенность максимальна у дна водоема.

Рассчитаны угловые распределения интенсивности излучения над и под поверхностью воды. Показано, что для гладкой границы раздела вода — воздух ярко выражены локальные максимумы плотности распределения интенсивности излучения у поверхности воды, соответствующие углу полного отражения. При отсутствии отражения излучения от подстилающей поверхности, данные локальные максимумы исчезают при приближении к основанию водоема. Для альбедо подстилающей поверхности $Q \geq 0.5$ и небольших оптических толщин водоема рассматриваемые локальные максимумы наблюдаются и в нижних слоях водоема. Увеличение скорости ветра в модели ветрового волнения водной поверхности приводит к сглаживанию рассматриваемых локальных максимумов углового распределения излучения на всех уровнях под поверхностью воды.

Изучено влияние жидкокапельных и кристаллических облаков на угловые распределения интенсивности излучения. Отмечено, что за счет перераспределения направления излучения облаками и особенностей отражения и преломления излучения на водной границе появляются локальные максимумы в распределении интенсивности излучения. Показано, что увеличение значений дисперсий наклонов поверхностей волн приводит к сглаживанию угловых распределений интенсивности излучения.

Список литературы

[1] Каргин Б.А., Креков Г.М., Крекова М.М. Влияние взволнованной водной поверхности на характеристики лидарного сигнала. // Оптика атмосферы и океана. 1992. Т. 5. № 03. С. 292–299.

[2] Ракимгулов, К. Б. Статистическое моделирование поля оптического излучения в системе «океан-атмосфера» // дис. на соиск. уч. степени к. ф.-м. н., Новосибирск, 1993.

[3] Cox C., Munk W. Measurement of the Roughness of the Sea Surface from Photographs of the Sun's Glitter // Journal of the optical society of America, 1954, V. 44, N 11.

[4] Hughes B.A., Grant H.L., Chappell R.W.A. A fast response surface - wave slope meter and measured wind-wave components // Deep-Sea Res.— 1977.— v.24, N 12.— P.1211–1223.

[5] Breon F.M., Henriot N. Spaceborne observations of ocean glint reflectance and modeling of wave slope distributions // J. Geoph. Res.— 2006.— v.111, C06005. doi:10.1029/2005JC003343.

[6] Христофоров Г.И., Запевалов А.С., Бабий М.В. Статистические характеристики уклонов морской поверхности при разных скоросстях ветра // Океанология. — 1992. т. 32 вып. 3 — с. 452–459.

[7] Данилычев М.В, Кутуза Б.Г., Николаев А.Г. Развитие радиационной модели взволнованной морской поверхности на основе данных эксперимента по измерению рассеянного СВЧ радиоизлучения Солнца // Современные проблемы дистанционного зондирования земли из космоса, 2006. В.3 Т.2.

[8] E. G. Kablukova, S. M. Prigarin Monte Carlo simulation of specific features of radiation regime in clouds caused by underlying surface // Proc. SPIE 10035, 22nd International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics, 100351N (November 29, 2016); doi: 10.1117/12.2248976.

[9] Mankovsky V.I., Haltrin V.I. Light Scattering Phase Functions Measured in Waters of Mediterranean Sea // OCEANS 2002 MTS-IEEE Proceedings, vol.4, IEEE N 02CH37362C.

[10] Mankovsky V.I., Haltrin V. I., Phase Functions of Light Scattering Measured in Waters of World Ocean and Lake Baykal // 2002 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium and the 24th Canadian Symposium on Remote Sensing Proceedings, 2002, Canada, Library of Congress Number: 2002 105858, Paper I2E09 1759.

[11] Hess M., Koepke P., Schult I. Optical Properties of Aerosols and Clouds: The Software Package OPAC // Bulletin of the American Meteorological Society, 1998, Vol. 79, No. 5.

[12] Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А., Дарбинян Р.А., Каргин Б.А., Елепов Б.С. Метод Монте — Карло в атмосферной оптике // М.: Наука,1976.

Каблукова Евгения Геннадьевна — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: kablukovae@sscc.ru;
Сергей Михайлович Пригарин — д.ф.-м.н., вед. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: smp@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СЕЙСМИЧЕСКИХ ВОЛН ДЛЯ УПРУГИХ СРЕД С СУЩЕСТВЕННО НЕОДНОРОДНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ЗНАЧЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ

Д. А. Караваев

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 550.34

Рассматривается решение задачи численного моделирования распространения упругих волн в двухмерно неоднородных средах с использованием разностного метода. В работе проводится исследование работы численного алгоритма на различных модельных примерах. Разработана программа для проведения расчетов сейсмических полей на графических устройствах. Представлены результаты восстановления геометрии и распределения значений упругих параметров по разреженным данным, а также результаты расчетов поля сейсмических волн для части Байкальской рифтовой зоны. Моделирование проводилось с использованием вычислительных ресурсов центра коллективного пользования Сибирского суперкомпьютерного центра.

Ключевые слова: моделирование, сейсмические волны, рифтовая зона, разностная схема.

Введение

Одним из геофизических объектов представляющих значимость и актуальность для исследований является Байкальская рифтовая зона. На данный момент известны две непохожие друг на друга скоростные модели, построенные по результатам геофизических экспериментов Baikal Explosion Seismic Transect и Program for the Array Seismic Study of Continental Lithosphere, показывающие строение для юга Байкальской рифтовой зоны [1], [2]. Важной задачей является верификация предложенных моделей, построенных по тем или иным предположениям. Отметим, что сотрудниками ИВМиМГ СО РАН были проведены экспериментальные геофизические работы на Байкальском профиле, протяженностью несколько сотен километров, и получены экспериментальные данные в виде сейсмограмм. Данная работа представляет собой исследовательскую работу направленную на разработку алгоритмического и программного инструментария для моделирования распространения сейсмических волн в двумерно неоднородных изотропных упругих средах. Адаптированный численный алгоритм и разработанное программное обеспечения для расчета волновых полей и построения двухмерных моделей изотропных упругих сред помогает в проведении теоретических экспериментов. В работе предлагается описание постановки прямой динамической задачи геофизики для двухмерного варианта расчетов. Предлагается вниманию описание используемого конечно-разностного алгоритма численного моделирования полного сейсмического поля. С использованием разработанного программно-алгоритмического обеспечения проведены тестовые расчеты на модельных примерах. Результаты численных экспериментов показываю сходимость решения для выбранного разностного сеточного метода численного моделирования. Также проведение модельных экспериментов было необходимо для выбора оптимального количества точек разностной схемы на минимальную длину волны для получения приемлемой точности и вида результатов. В работе предлагаются вниманию результаты экспериментов в виде снимков волнового поля и теоретических сейсмограмм. Впервые проведены расчеты полного волнового поля для восстановленной по скважинным данных модели Байкальской рифтовой зоны и получены теоретические сейсмограммы. В работе также решаются задачи связанные с разработкой инструментария для восстановления модели неоднородной среды

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 15-07-06821, 16-07-01052, 17-07-00872).

по разреженным скважинным данным. Такие данные содержат информацию о значениях скоростных и плотностных параметров на выделенных горизонтах наблюдения. Для выполнения такой задачи реализовано программное обеспечение с использованием сплайн интерполяции для создания моделей и определения распределения значений упругих параметров на расчетной сетке. Разработан скрипт для Matlab, который позволяет провести подготовку и верифицировать данные. Для верификации алгоритма и разработанного программного обеспечения использовались вычислительные ресурсы центра коллективного пользования Сибирского суперкомпьютерного центра.

1 Постановка задачи

Решение прямой задачи геофизики связано с решением системы уравнений теории упругости. Для данной работы задача ставиться в терминах компонент скоростей перемещений и напряжений. В работе рассматривается только двумерный случай, поэтому присутствуют две компоненты скоростей перемещений Ux, Uz и три компоненты напряжений σ_{xx}, σ_{zz}, σ_{xz}. В постановку задачи входят параметры упругой среды, которые не зависят от значений искомых компонент и являются двумерными функциями координат, это параметры Ламе λ, μ и плотность rho. Задача моделирования распространения упругих волн в двумерной среде решается в прямоугольной системе координат, где ось Ox направлена слева направо, ось Oz сверху вниз. Область расчетов представляет собой прямоугольную область, в верхней част которого располагается свободная поверхность, на которой реализуются граничные условия. Задача решается при соответствующих нулевых начальных и граничных условиях.

2 Численный метод

Для численной реализации решения системы теории упругости для двумерных неоднородных упругих сред выбран конечно-разностный метод. Такой выбор связан с геометрической структурой основного исследуемого объекта. Напомним, что таковым является геофизическая модель рифтовой зоны, которая обладает очень «пестрым» рисунком распределения значений упругих параметров, при этом переходы между отдельными зонами с различными значениями параметров являются сглаженными.

Для проведения численных расчетов адаптирована конечно-разностная схема четвертого порядка аппроксимации по пространству (Levander [3]). Схема на сдвинутых сетках построены таким образом, что напряжения σ_{xx}, σ_{zz} располагаются на свободной поверхности, рис. 1 (Moczo [4]).

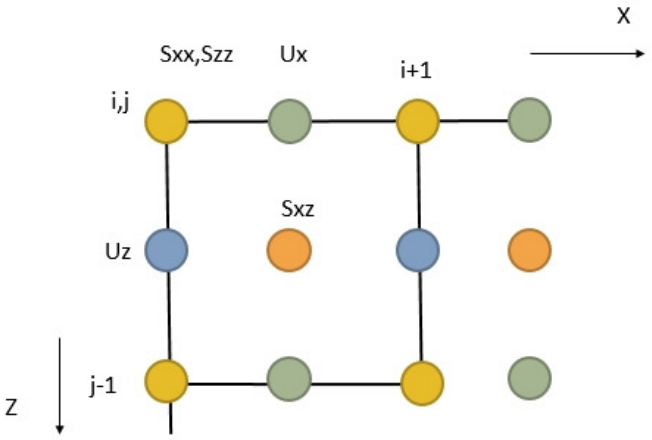


Рис. 1: Расположение основных компонент на сетке

Отметим, что при проведении моделирования могут возникать нежелательные отраженные волны от границ расчетной области. Для снижения/ исключения подобных эффектов в работе использован метод реализации поглощающих границ Perfectly Matched Layers [5]. Новизна предлагаемого подхода для решения задачи теории упругости состоит в программной реализации, которая создана для проведения расчётов на графических процессорах.

3 Исследование работы численного алгоритма

В разделе рассматривается работа алгоритма численного моделирования сейсмических полей в двумерно неоднородных упругих средах и его программной реализации. Для проведения численных экспериментов для различных моделей упругих сред разработана вычислительная программа для графических процессоров. В данной реализации программа рассчитана на использование одного графического процессора. Распараллеливание расчетов производится с использованием технологии Nvidia CUDA. Для проведения расчетов используются ресурсы Центра коллективного пользования Сибирского суперкомпьютерного центра СО РАН в составе которого находятся вычислительные узлы с картами Nvidia GPU Tesla с 8 ГБ оперативной памяти. С технической стороны в параллельных вычислениях использовались 512 ядер GPU, при этом создавалось 1024 параллельных потока. Верификации работы численного алгоритма и программы проводилась на тестовых моделях изотропных упругих сред: однородная, слоистая неоднородная с горизонтальной ориентацией расположения слоев. В программе предусмотрена возможность использования различных типов источников сейсмических волн: точечный, вертикальная сила.

Вначале было проведено исследование для модели однородной среды. Цель исследования была понять какой оптимальное количество точек на минимальную длину волны достаточно выбрать для получения приемлемых результатов, а также проверит сходимость при увеличении числа точек сетки на минимальную длину волны. Была выбрана модель с протяженностью 50 км х 20 км с парметрами V_p= 5.2 км/с, V_s= 3.0 км/с, rho= 2.0 г/см^3. Рассматривались предложенные типы источников с несущей частотой 7 Гц. Источник располагался в 2 км от начала координат и на свободной поверхности в случае использования источника типа вертикальная сила и заглублен на одну длину волны в случае применения точечного источника. Во всех расчетах этой работы расположение системы возбуждения и наблюдения выбиралось одинаковым. Сейсмоприемники располагались на одной линии на свободной поверхности с шагом между ними в 5 км, и отступом первого сейсмоприемника на 5 км от источника по оси X.

По результатам проведенных модельных расчетов можно наблюдать сходимость решения, рис. 2. Видно, что происходит уточнение и формирование более четкого контура фронта сейсмических волн на основных типах волн (прямая, поверхностная). Можно предположить, что для проведения дальнейших расчетов и получения результатов приемлемой точности необходимо брать более 50 точек дискретизации разностной схемы на минимальную длину волны.

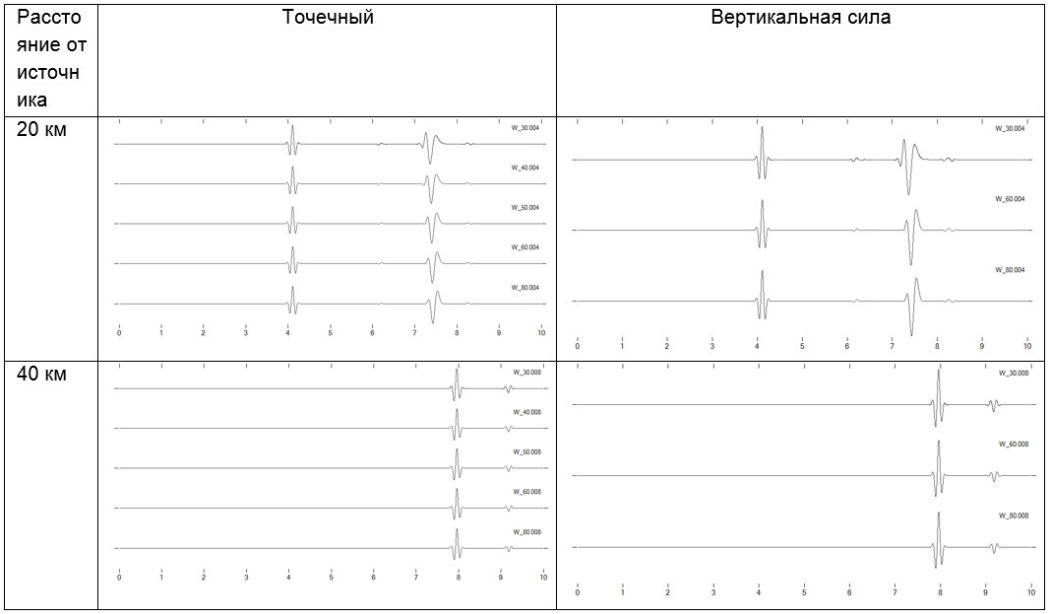


Рис. 2: Сейсмограммы для Uz компоненты на разных расстояниях и для разных типов источников сейсмических волн

Далее была построена слоистая модель с преимущественно горизонтальным расположением слоев, рис. 3. Каждый слой представляет однородную среды со своими значениями упругих параметров. Такая ориентация выбрана с тем, чтобы иметь сходство с представлением о строении рифтовой зоны. Также значения

скоростных характеристик и плотности выбраны с приближением к модели рифтовой зоны, слой 1: V_p= 5.2 км/с, V_s= 3.0 км/с, rho= 2.0 г/см^3, слой 2: V_p= 6.0 км/с, V_s= 3.45 км/с, rho= 2.0 г/см^3, слой 3: V_p= 6.2 км/с, V_s= 3.6 км/с, rho= 2.0 г/см^3, слой 4: V_p= 6.65 км/с, V_s= 3.85 км/с, rho= 2.0 г/см^3. Значения минимальной скорости S волн была выбрана 3.0 км/с, значение максимальной скорости P волн было выбрано 8.2 км/с. Результаты расчетов для источника типа "вертикальная сила"для 80 точек на длину волны представлены в виде снимков волнового поля, рис. 4, и теоретических и сейсмограмм для Uz компоненты сейсмического поля на рис. 5.

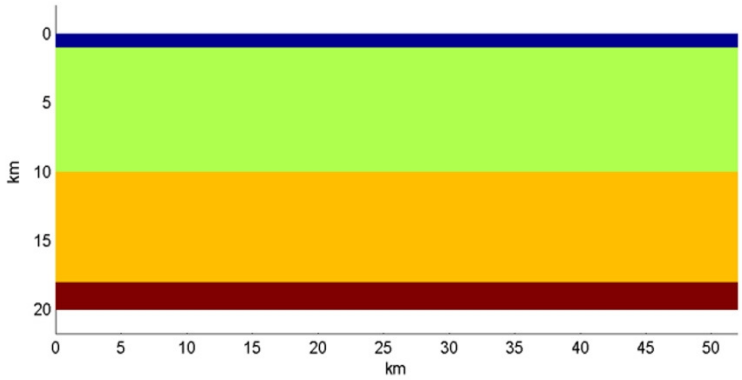


Рис. 3: Слоистая модель

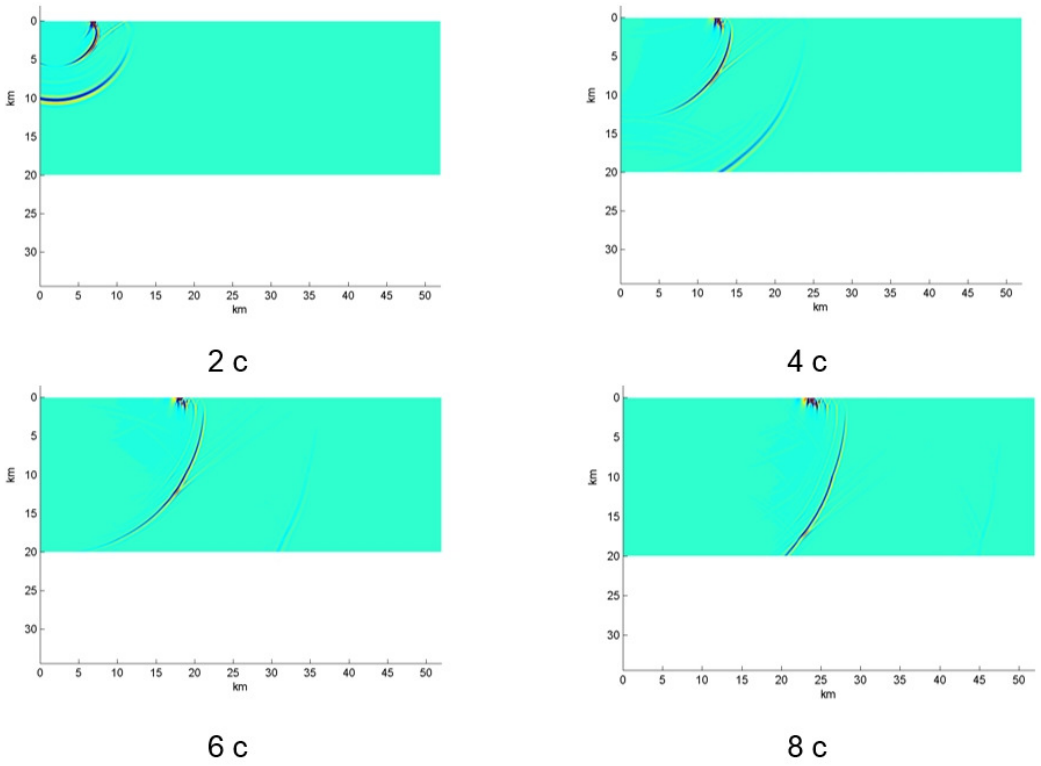


Рис. 4: Снимки волнового поля для Uz компоненты для слоистой модели

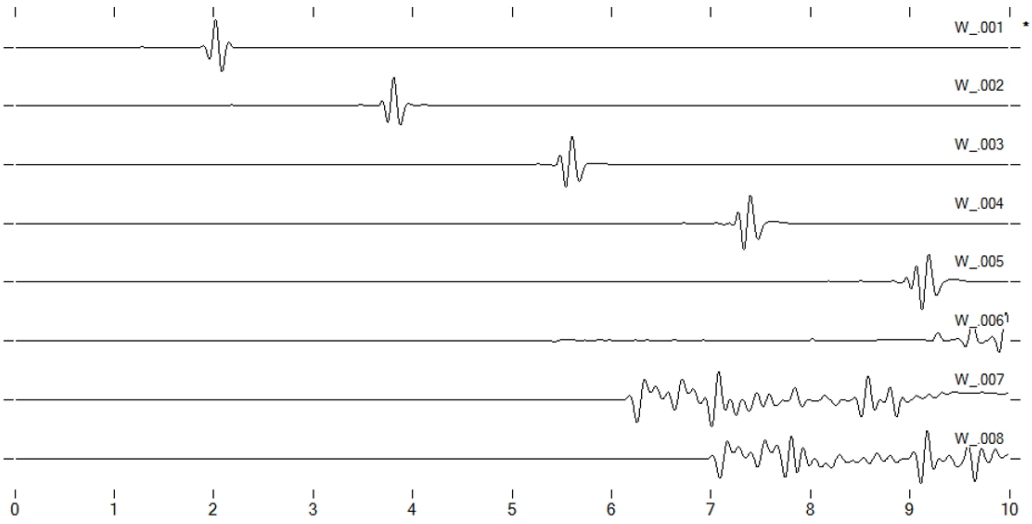


Рис. 5: Теоретические сейсмограммы для Uz компоненты для слоистой модели

4 Моделирование для рифтовой зоны

Используя разработанный инструментарий для построения неоднородных моделей упругих сред была воссоздана модель рифтовой зоны, рис. 6. Для этого используется алгоритм сплайн интерполяции [6, 7].В качестве входных данных и опорных точек были предоставлены скважинные данные с информацией о скоростях продольной и поперечной волн, также плотности пород на выделенных глубинах. Отличительная особенность такой модели состоит в достаточно пестром рисунке распределения значений упругих характеристик и наличием неконтрастных переходов между отдельными зонами. Используя разностный метод численного моделирования распространения упругих волн и разработанную программную реализацию были получены теоретические сейсмограммы и снимки волнового поля для части рифтовой зоны, рис. 7, рис. 8. Говориться именно о части, т.к. вся модель не проходит по количеству необходимой оперативной памяти для расчетов на одном графическом процессоре. Поэтому рассмотрена часть модели размером 50 км x 20 км. Минимальная скорость S волн составила 3.0 км/с , максимальное значение скорости P волн составило 8.2 км/с и были выбраны из общей модели. Эти значения очень близки по величине к значениям для слоистой модели. Наблюдаемая картина в значительной степени отличается от картины волнового поля для слоистой модели.

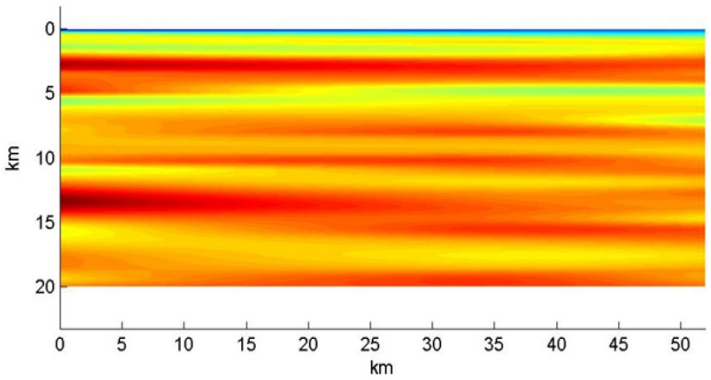


Рис. 6: Модель рифтовой зоны. Распределение значений скорости P волн.

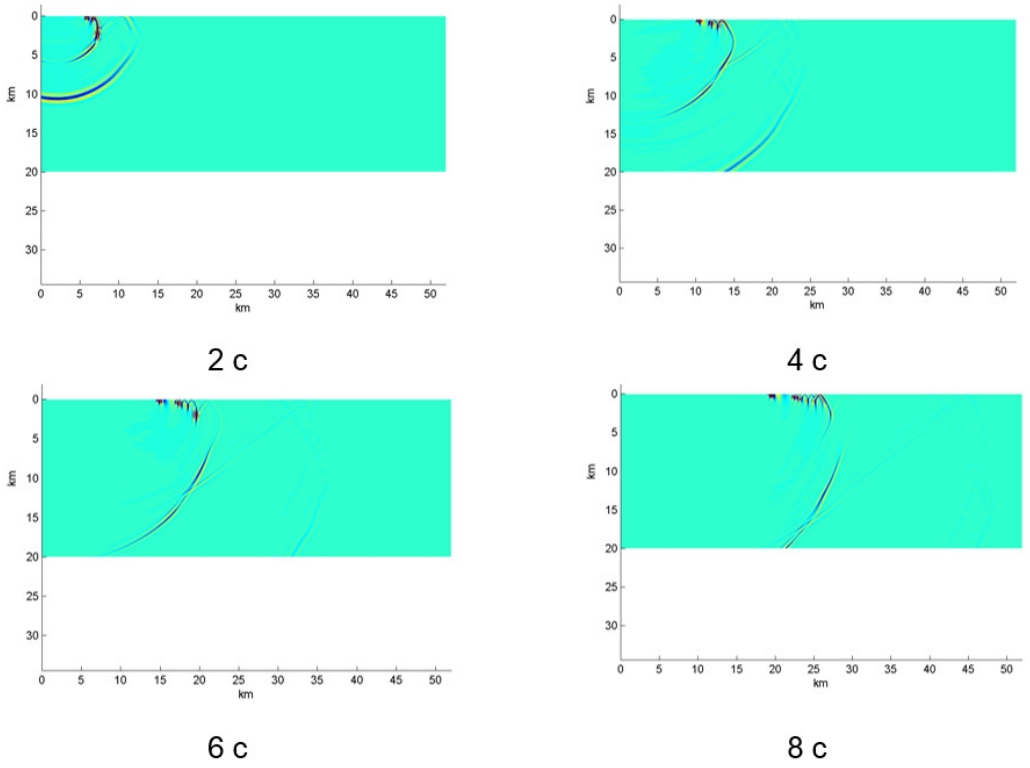


Рис. 7: Снимки волнового поля для Uz компоненты для модели рифтовой зоны

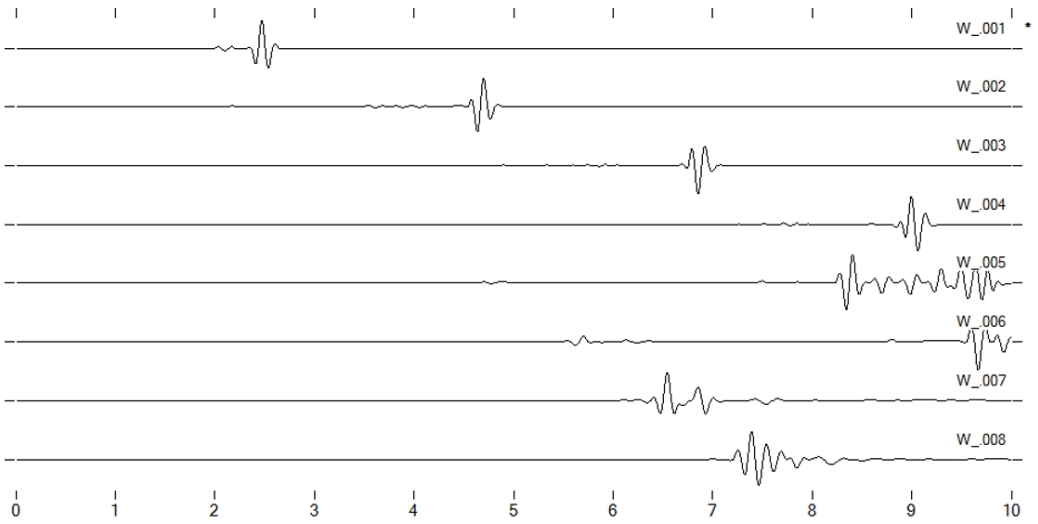


Рис. 8: Теоретические сейсмограммы для Uz компоненты для модели рифтовой зоны

Заключение

В работе представлена постановка задачи теории упругости по моделированию полного волнового поля для двухмерных неоднородных упругих сред. Предложен численный алгоритм для расчета сейсмического поля на основе разностного метода и реализации граничных условий на свободной поверхности. Предложен способ создания и восстановления моделей упругих сред при наличии разреженных начальных скважинных

данных о скоростных и плотностных свойствах среды на заданных горизонтах. На основе экспериментальных данных воссоздана модель рифтовой зоны. Для исследования работы численного алгоритма расчета волновых полей и верификации программы проведены модельные расчеты. Проведены эксперименты по выбору оптимального количества точек разностной схемы на минимальную длину волны для проведения расчетов. Расчеты проводились с использованием вычислительных ресурсов Центра коллективного пользования сибирского суперкомпьютерного центра. Представлены результаты экспериментов в виде снимков волновых полей и теоретических сейсмограмм. Разработано алгоритмическое и программное обеспечение для проведения моделирования распространения сейсмических волн в двухмерно неоднородных средах.

Список литературы

[1] Nielsen C., Thybo H., Lower crustal intrusions beneath the southern Baikal Rift Zone: Evidence from full-waveform modelling of wide-angle seismic data // Tectonophysics, 2009, C. 298–318

[2] В.В. Мордвинова, А.А. Артемьев Трехмерная модель юга Байкальской рифтовой зоны и сопредельных территорий по обменным волнам // Геология и геофизика, 2010, т. 51, 6, С. 887–904

[3] Levander A. Fourth-order finite difference P-SV seismograms // Geophysics, 53, 1988, P. 1425–1436

[4] Moczo P., Robertsson J., Eisner L. The finite-difference Time-Domain Method for Modeling of Seismic Wave propagation // Advances in Geophysics, Vol. 48, 2007. P. 106

[5] Komatitsch D., Martin R. An unsplit convolutional perfectly matched layer improved at grazing incidence for the seismic wave equation // Geophysics, 72, no.5, 2007. SM155–SM167

[6] https://ww2.odu.edu/ agodunov/computing/programs/book2/Ch01/spline.f90

[7] http://ww2.odu.edu/ agodunov/computing/programs/fmm/spline.f

Караваев Дмитрий Алексеевич — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: kda@opg.sscc.ru.
Дата поступления — 15 мая 2017 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСА МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ С УЧЕТОМ ИХ ГОДОВОЙ НЕСТАЦИОНАРНОСТИ

Н. А. Каргаполова[1,2], В. А. Огородников[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.6

В работе предложена стохастическая модель комплекса из трех метеорологических элементов: индикатора наличия/отсутствия осадков в течение суток, минимальной и максимальной суточной температуры. Модель построена в предположении годовой нестационарности рассматриваемых метеопроцессов. Для моделирования индикаторного ряда используется латентный гауссовский процесс, а моделирование рядов температуры осуществляется в предположении гауссовости их одномерных распределений. При этом параметры распределений являются функциями времени. В работе также приведены аналитические преобразования уравнений, связывающих корреляционные функции латентного гауссовского и индикаторного процессов, позволяющие существенно сократить время вычислений значений корреляционной функции латентного процесса при заданных значениях корреляционной функции индикаторного.

Ключевые слова: стохастическое моделирование, нестационарный случайный процесс, приземная температура воздуха, индикатор осадков.

Введение

При решении многих прикладных задач в таких областях науки, как океанология, гидрология, агрометеорология, популяционная биология, достаточно часто требуется знание статистических свойств различных метеорологических процессов. Так, например, бывает необходимо оценивать вероятности возникновения сочетаний метеорологических элементов, благоприятных для распространения лесных пожаров, вероятности появления заморозков в весенне-летний период, среднее число засушливых дней и др. Во многих случаях в силу статистической ненадёжности оценок по малым выборкам исследование таких явлений по реальным данным является затруднительным, и поэтому приходится использовать различные стохастические модели.

В связи с этим в последние десятилетия бурное развитие переживает прикладная область математики, связанная с разработкой так называемых “генераторов погоды”. По своей сути “генераторы” являются пакетами программ, позволяющими численно моделировать длинные ряды случайных чисел, обладающих статистическими свойствами, повторяющими основные свойства реальных метеорологических рядов или их комплексов. Чаще всего моделируются ряды приземной температуры воздуха, суточного минимума и максимума температуры, количество осадков и количество солнечной радиации [2, 3, 9, 10, 11]. С помощью “генераторов погоды” моделируют не только одномерные случайные ряды, но случайные поля, с опорными точками, соответствующими местоположениям метеостанций [4, 5]. Каждый “генератор погоды” имеет временной интервал (несколько суток, месяц, год), на котором он “работает” наилучшим образом, и вне которого он дает неправдоподобные результаты. Так, например, известные “генераторы” WGEN [9, 10] и LARS [11] дают хорошие результаты при моделировании на относительно коротких временных интервалах (порядка 1 месяца), но неприменимы для моделирования метеорологических процессов на годовом интервале, поскольку они созданы в предположении стационарности метеопроцессов, а на годовом интервале метеорологические процессы сильно нестационарны.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 15-01-01458-а, 16-01-00145-а, 16-31-00038-мол-а, 16-31-00123-мол-а) и гранта Президента РФ (МК-659.2017.1).

В данной работе предложена стохастическая модель комплекса из 3 метеорологических элементов (минимальной и максимальной суточной приземной температуры воздуха и индикатора осадков), пригодная для моделирования временных рядов комплексов этих метеоэлементов на интервале годовой длины. Модель основана на специальном нелинейном преобразовании гауссовских временных рядов, при котором за счет выбора параметров модели учитывается годовая нестационарность реального процесса, связанная с вращением Земли вокруг Солнца.

1 Алгоритм моделирования

В этом параграфе будет дано формальное описание модели, а также описаны предположения, в которых модель была построена.

Моделирование будет опираться на гипотезу о том, что одномерные распределения минимальной и максимальной температуры в каждые сутки являются нормальными, при этом параметры этих распределения изменяются день ото дня. Эта гипотеза хорошо согласуется с реальными данными, собранными на различных метеостанциях России (проверка гипотезы о нормальном распределении проводилась на основе реальных данных наблюдений с помощью критерия χ^2).

Опишем формально правила и алгоритмы, по которым проводилось моделирование. Строится процесс $M = \left(\vec{I}^T,\ \vec{A}^T,\ \vec{E}^T\right)$, где $\vec{I}^T = (I_1, I_2, \ldots, I_N)^T$ — вектор минимальной суточной температуры в течение года, $\vec{A}^T = (A_1, A_2, \ldots, A_N)^T$ — вектор максимальной суточной температуры, $\vec{E}^T = (E_1, E_2, \ldots, E_N)^T$ — вектор индикаторов наличия/отсутствия осадков. Если $E_j = 1$, то считаем что в сутки номер j осадки наблюдались, если $E_j = 0$, то в сутки номер j осадки отсутствовали. Считаем число N дней в году неизменным и равным 365. Основная моделирующая формула имеет вид

$$\begin{array}{l} I_j = \sigma_j^I \xi_j^I + \mu_j^I, \\ A_j = \sigma_j^A \xi_j^A + \mu_j^A, \\ E_j = \left\{ \begin{array}{l} 1,\ \xi_j^E \le c_j, \\ 0,\ \xi_j^E > c_j, \end{array} \right. \end{array} \tag{1}$$

где векторы

$$\left(\begin{array}{c} \mu_1^I \\ \mu_2^I \\ \vdots \\ \mu_N^I \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} \mu_1^A \\ \mu_2^A \\ \vdots \\ \mu_N^A \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} \sigma_1^I \\ \sigma_2^I \\ \vdots \\ \sigma_N^I \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} \sigma_1^A \\ \sigma_2^A \\ \vdots \\ \sigma_N^A \end{array} \right)$$

есть векторы средних значений и среднеквадратических отклонений минимальной и максимальной температуры, значения компонент которых оценены по реальным данным. Пороговые значения c_j для каждого $j = 1, 2, \ldots, N$ определяются из уравнения

$$P\left(E_j = 1\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{c_j} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt = p_j,$$

где вероятности p_j наличия осадков в j-е сутки оценены по реальным данным. Отметим, что равенство $c_i = 0$ выполняется тогда и только тогда, когда $p_i = \frac{1}{2}$, неравенство $c_i > 0$ выполняется только при $p_i > \frac{1}{2}$, а неравенство $c_i < 0$ — только при $p_i < \frac{1}{2}$. Все дальнейшие рассуждения приведены для случая $p_j \neq 0$ и $p_j \neq 1$ при $j = 1, 2, \ldots N$. Величины $\left(\xi_j^I, \xi_j^A, \xi_j^E\right)$есть компоненты совместного гауссовского ряда $\Omega = \left(\left(\vec{\xi}^I\right)^T, \left(\vec{\xi}^A\right)^T, \left(\vec{\xi}^E\right)^T\right)$ с нулевым средним и такой специально выбранной корреляционной матрицей

$$G = \left(\begin{array}{ccc} G_{II} & G_{IA} & G_{IE} \\ G_{AI} & G_{AA} & G_{AE} \\ G_{EI} & G_{EA} & G_{EE} \end{array} \right),$$

что процесс M обладает корреляционной матрицей

$$R = \left(\begin{array}{ccc} R_{II} & R_{IA} & R_{IE} \\ R_{AI} & R_{AA} & R_{AE} \\ R_{EI} & R_{EA} & R_{EE} \end{array} \right),$$

определяемой на основе реальных данных. Индекс XY у блоков G_{XY}, R_{XY} означают, что эти блоки составлены из взаимных коэффициентов корреляции между значениями метеоэлементов X и Y во все возможные моменты времени i и j, где $X, Y \in \{I, A, E\}$, $i, j = 1, 2, \ldots N$. Отметим, что матрицы R и G имеют размерность $3N \times 3N$, т.е. 1095×1095.

Возникает вопрос о том, как определить матрицу G такую, чтобы построенный согласно преобразованию (1) процесс обладал необходимой корреляционной матрицей R. Отметим, что в работе [6] был рассмотрен аналог преобразования (1) в более простом случае.

Определим последовательно все блоки матрицы G через R и p_j (т.е. выпишем уравнения относительно всех элементов каждого из блоков матрицы G). Очевидно, что

$$\begin{gathered} G_{II} = R_{II}, \\ G_{AA} = R_{AA}, \\ G_{IA} = R_{IA}, \\ G_{AI} = R_{AI}. \end{gathered}$$

Обозначим элементы матриц R_{EE} и G_{EE}, стоящие на пересечении i-ой строки и j-го столбца через $r_{EE}(i,j)$ и $g_{EE}(i,j)$, $i, j = 1, 2, \ldots, N$. Очевидно, что $r_{EE}(i,i) = g_{EE}(i,i) = 1$, $i = 1, 2, \ldots, N$. Из определения коэффициента корреляции и определения процесса $\vec{E}^T$ следует выполнение равенств

$$r_{EE}(i,j) = \frac{P(E_i = 1, E_j = 1) - p_i p_j}{\sqrt{p_i(1-p_i)}\sqrt{p_j(1-p_j)}}$$

для $i, j = 1, 2, \ldots, N$. При этом

$$P(E_i = 1, E_j = 1) = P\left(\xi_i^E \le c_i, \xi_j^E \le c_j\right) = F(c_i, c_j, g_{EE}(i,j)), \tag{2}$$

где

$$F(h,k,\rho) = \frac{1}{2\pi\sqrt{1-\rho^2}} \int\limits_{-\infty}^{h}\int\limits_{-\infty}^{k} \exp\left(-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left(x^2 - 2\rho xy + y^2\right)\right) dxdy.$$

Равенства (2) позволяют численно определить значение всех элементов матрицы G_{EE}. Для того чтобы упростить вычисления при естественном предположении $|g_{EE}(i,j)| \ne 1$ вне диагонали матрицы G_{EE}, можно воспользоваться формулами Оуэна [1, 8]

$$F(c_i, c_j, g_{EE}(i,j)) = \frac{1}{2}\Phi(c_i) + \frac{1}{2}\Phi(c_j) - T(c_i, a_1) - T(c_j, a_2) + \frac{1}{2},$$

если $c_i \ge 0$, $c_j \ge 0$ или $c_i < 0$, $c_j < 0$, и

$$F(c_i, c_j, g_{EE}(i,j)) = \frac{1}{2}\Phi(c_i) + \frac{1}{2}\Phi(c_j) - T(c_i, a_1) - T(c_j, a_2),$$

если $c_i < 0$, $c_j \ge 0$ или $c_i \ge 0$, $c_j < 0$, где

$$\begin{gathered} \Phi(c_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_0^{c_i} \exp\left(-t^2/2\right) dt, \\ T(c,a) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_0^{a} \exp\left(-\frac{c^2(1+t^2)}{2}\right) \frac{dt}{1+t^2}, \\ a_1 = \frac{c_j - c_i g_{EE}(i,j)}{c_i\sqrt{1 - g_{EE}^2(i,j)}}, \; a_2 = \frac{c_i - c_j g_{EE}(i,j)}{c_j\sqrt{1 - g_{EE}^2(i,j)}}. \end{gathered}$$

С учетом этих формул и равенств

$$p_i = \frac{1}{2} + \Phi(c_i), \; i = 1, 2, \ldots, N$$

уравнения для нахождения $g_{EE}(i,j)$ при $c_i > 0$, $c_j > 0$ или $c_i < 0$, $c_j < 0$ (т.е. при выполнении условия $c_i c_j > 0$) принимают вид

$$r_{EE}(i,j) = \frac{\frac{1}{2}p_i + \frac{1}{2}p_j - p_i p_j}{\sqrt{p_i(1-p_i)}\sqrt{p_j(1-p_j)}} - \frac{T(c_i, a_1) + T(c_j, a_2)}{\sqrt{p_i(1-p_i)}\sqrt{p_j(1-p_j)}},$$

а при $c_i < 0$, $c_j > 0$ или $c_i > 0$, $c_j < 0$ (т.е. при выполнении условия $c_i c_j < 0$)

$$r_{EE}(i,j) = \frac{\frac{1}{2}p_i + \frac{1}{2}p_j - \frac{1}{2} - p_i p_j}{\sqrt{p_i(1-p_i)}\sqrt{p_j(1-p_j)}} - \frac{T(c_i,a_1) + T(c_j,a_2)}{\sqrt{p_i(1-p_i)}\sqrt{p_j(1-p_j)}}.$$

Если же одно или оба пороговых значения равны 0, то используя равенства

$$F(0,0,g_{EE}(i,j)) = \frac{1}{4} + \frac{\arcsin g_{EE}(i,j)}{2\pi},$$
$$T(0,a) = \frac{arctg(a)}{2\pi},$$
$$T(h,a) = -T(h,-a)$$

можно получить следующие соотношения:

1) при $c_i = 0$, $c_j = 0$

$$r_{EE}(i,j) = \frac{2\arcsin g_{EE}(i,j)}{\pi}.$$

2) при $c_i = 0$, $c_j \neq 0$

$$r_{EE}(i,j) = -\frac{2T\left(c_j, -\frac{g_{EE}(i,j)}{\sqrt{1-g_{EE}^2(i,j)}}\right)}{\sqrt{p_j(1-p_j)}},$$

3) при $c_i \neq 0$, $c_j = 0$

$$r_{EE}(i,j) = -\frac{2T\left(c_i, -\frac{g_{EE}(i,j)}{\sqrt{1-g_{EE}^2(i,j)}}\right)}{\sqrt{p_i(1-p_i)}}.$$

Для того чтобы определить элементы матрицы G_{IE}, необходимо воспользоваться соотношениями вида

$$r_{IE}(i,j) = \frac{EI_iE_j - EI_iEE_j}{\sqrt{DI_i}\sqrt{DE_j}} = -\frac{g_{IE}(i,j)}{\sqrt{2\pi p_j(1-p_j)}}\exp\left(-c_j^2/2\right).$$

Матрицы G_{EI}, G_{AE}, G_{EA} определяются аналогичным образом.

После того как матрица G полностью определена, можно приступать к моделированию гауссовского процесса Ω и последующему построению процесса M согласно основной моделирующей формуле (1). Моделирование гауссовского процесса с заданной корреляционной матрицей осуществляется с помощью широко известных алгоритмов, например, алгоритмов на основе спектрального или LL^T−разложения корреляционной матрицы [7]. Заметим, что в следствии вычислительных ошибок при вычислении элементов матрицы G, эта матрица может оказаться не положительно определенной. В таком случае перед моделированием гауссовского процесса необходимо провести процедуру регуляризации матрицы G [7]. Численные эксперименты показали, что при вычислении матрицы G указанным выше способом, в ряде случаев эта матрица оказывается не только отрицательно определенной, но и существенно искажается при применении регуляризации на основе искажения спектра матрицы. Поиск других способов регуляризации в таких случаях является задачей, которую ещё предстоит решить.

По смыслу минимальной и максимальной температуры в каждой моделируемой реализации во все моменты времени $j = 1, 2, \ldots, N$ должно выполняться неравенство $I_j \leq A_j$. Однако моделирующая формула (1) выполнение этого неравенства не гарантирует. На практике, поскольку $\mu_j^I << \mu_j^A$ и σ_j^I, σ_j^A относительно невелики, вероятность события $I_j > A_j$ мала, поэтому реализации, в которых требуемое неравенство не выполняется, можно "отбрасывать", т.е. не включать в выборку, по которой производится проверка адекватности модели и дальнейшие исследования.

2 Численные эксперименты

Описанная в предыдущем параграфе модель была применена для моделирования нестационарных совместных временных рядов метеоэлементов на ряде станций, расположенных на территории России. Верификация модели показала, что для этих станций модель дает удовлетворительные результаты. В качестве примера, рассмотрим такую характеристику как среднее число дней в месяце, когда минимальная температура ниже

0^oC, а максимальная — выше. Эта характеристика не является входным параметром модели, поэтому может быть использована для верификации. В табл. 1 приведены значения этой характеристики для различных месяцев, полученные оценкой по реальным данным и по ансамблю модельных траекторий. Как видно из табл. 1, модель воспроизводит данную характеристику с точностью до статистической погрешности.

Таблица 1: Среднее число дней с $I_j < 0, A_j > 0$. Санкт-Петербург.

Месяц	Среднее число дней	
	Реальные данные	Модельные данные
Октябрь	4.7	4.9
Ноябрь	8.9	9.1
Декабрь	5.7	5.3
Январь	9.3	9.4
Февраль	7.7	7.4
Март	16.3	16.8

Поскольку верификация модели прошла успешно, в дальнейшем эта модель будет использована для оценки вероятностей возникновения неблагоприятных сочетаний метеоэлементов (например, длительных периодов с высокой минимальной температурой и отсутствием осадков в летнее время, больших суточных колебаний температуры в зимний период и др.)

Список литературы

[1] Смирнов Н.В., Большев Л.Н. Таблицы для вычислений функции двумерного нормального распределения // Изд. АН СССР, 1962.

[2] Furrer E.M., Katz R.W. Generalized linear modeling approach to stochastic weather generators // Clim. Res. 2007. V. 34, iss. 2. P. 129–144.

[3] Kargapolova N.A., Ogorodnikov V.A. Inhomogeneous Markov chains with periodic matrices of transition probabilities and their application to simulation of meteorological processes // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling. 2012. V. 27, iss. 3. P. 213–228.

[4] Kleiber W., Katz R. W., Rajagopalan B. Daily spatiotemporal precipitation simulation using latent and transformed Gaussian processes // Water Resources Research. 2012. V. 48.

[5] Ogorodnikov V.A., Kargopolova N.A., Seresseva O.V. Numerical stochastic model of spatial fields of daily sums of liquid precipitation // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling. 2013. V. 28, iss. 2. P. 187–200.

[6] Ogorodnikov V.A., Khlebnikova E.I., Kosyak S.S. Numerical stochastic simulation of joint non-Gaussian meteorological series // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling. 2009. V. 24, iss. 5. P. 467–480.

[7] Ogorodnikov V.A., Prigarin S.M. Numerical Modelling of Random Processes and Fields: Algorithms and Applications // the Netherlands, Utrecht: VSP, 1996.

[8] Owen D.B. Table for computing bivariate normal probabilities // Ann. Math. Statist. 1956. V. 27, iss. 4. P. 1075–2000.

[9] Richardson C. W. Stochastic simulation of daily precipitation, temperature and solar radiation // Water Resour. Res. 1981. V. 17. P. 182–190.

[10] Richardson C. W., Wright D. A. WGEN: A Model for Generating Daily Weather Variables // U. S. Department of Agriculture, Agricultural Research Service, ARS-8, 1984.

[11] Semenov M.A., Barrow E.M. LARS-WG: A Stochastic Weather Generator for Use in Climate Impact Studies. User Manual // Harpenden, 2002.

Нина Александровна Каргаполова — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: nkargapolova@gmail.com;
Василий Александрович Огородников — д.ф.-м.н., гл.науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: ova@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 15 мая 2017 г.

РЕШЕНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ — КАРЛО ЗАДАЧ АЭРОКОСМИЧЕСКОГО ОПТИЧЕСКОГО ЗОНДИРОВАНИЯ ОКЕАНА

А. Б. Каргин[1], Б. А. Каргин[1,2], С. М. Пригарин[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*
[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 551.52+519.245

Приведено описание численной статистической модели переноса оптического излучения в приближении лучевой оптики в системе океан — атмосфера для полной и упрощённой "фацетной" моделей случайной взволнованной поверхности океана. Работа выполнена в связи с обоснованием аналоговых и весовых алгоритмов в статистическом моделировании прямых задач пассивного и активного аэрокосмического зондирования океана. Рассмотренные модели, наряду с методом Монте — Карло, могут быть полезны для анализа поля оптического излучения также и другими численными или аналитическими методами, имеющими дело с уравнением переноса. Приведено несколько примеров результатов численных экспериментов.

Ключевые слова: метод Монте — Карло, уравнение переноса, оптика атмосферы и океана, дистанционное оптическое зондирование океана.

Введение

Поле оптического излучения системы океан — атмосфера в значительной мере формируется под воздействием взволнованной морской поверхности, отражающей и преломляющей приходящее электромагнитное излучение. Характерная особенность этого воздействия обусловлена случайным характером ветрового волнения морской поверхности. В силу этого строгое решение подавляющего числа прямых и обратных задач оптики системы океан — атмосфера возможно лишь в статистической формулировке. Математическая суть таких задач заключается в вычислении соответствующих функционалов от решения уравнения переноса излучения, заданных на случайном поле, каковым является взволнованная морская поверхность. Метод Монте — Карло впервые был применен к расчету переноса солнечной радиации в системе атмосфера-океан, по-видимому, в [1], где для описания взволнованной поверхности моря принята так называемая плоская "фацетная" модель, в которой граница раздела вода-воздух представляет собой случайную поверхность, составленную из набора элементарных площадок, центры которых лежат в одной плоскости, а нормали к ним распределены с заданной одноточечной функцией распределения. Расчеты в [1] были выполнены на основе прямого моделирования процесса переноса излучения. Результаты расчетов в [1] получены, таким образом, в пренебрежении эффектами затенения и переотражения излучения элементами поверхности. В работе [2] статистические характеристики взволнованной морской поверхности уже рассмотрены для более адекватной спектральной модели ветрового волнения, которая позволяет методом Монте — Карло учесть также и эффекты затенения и переотражения излучения элементами поверхности. В [3] выписано интегральное стационарное уравнение переноса излучения в среде со случайно-неоднородной преломляющей границей и предложен весовой алгоритм решения этого уравнения методом Монте — Карло. Настоящая работа посвящена усовершенствованию и практической реализации этого алгоритма в связи с решением прикладных задач пассивного и активного аэрокосмического зондирования океана в рамках ряда целевых грантов.

Работа выполняется при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 15-01-00894 и 16-01-00145) и Программы фундаментальных исследований Президиума РАН I.33П.

1 Постановка задачи

Рассмотрим слой $0 \le z \le H$ трехмерного пространства, заполненный рассеивающим и поглощающим оптическое излучение веществом. Введем обозначения: $r_\perp = (x, y)$ — проекция радиус-вектора $r = (x, y, z)$ на горизонтальную плоскость XOY; $\omega = (a, b, c)$ — единичный вектор направления с направляющими косинусами a, b и c; Ω — множество всех направлений с $c \in [-1, 1]$; $\Omega_+ = \{\omega : (\omega, k) \ge 0\}$, $\Omega_- = \{\omega : (\omega, k) < 0\}$, $k = (0, 0, 1)$. Обозначим через $\varsigma(r_\perp)$ случайную функцию, описывающую отклонения взволнованной морской поверхности S относительно среднего уровня $z = h$ в зависимости от горизонтальных координат $r_\perp = (x, y)$, так что выражение $z = h + \zeta(x, y)$ является уравнением поверхности S. Относительно функции $\varsigma(r_\perp)$ будем предполагать, что она однозначна и непрерывно дифференцируема по координатам x, y. В дальнейшем функция $\varsigma(r_\perp)$ будет рассматриваться как одна из реализаций взволнованной морской поверхности, которая, очевидно, зависит от скорости приповерхностного ветра v. Плоскости $z = 0$ и $z = H$ совпадают с дном моря и верхней границей атмосферы соответственно. При попадании на плоскость $z = 0$ излучение испытывает диффузное (ламбертовское) отражение, которое будем характеризовать альбедо $A(r_\perp)$. Попадая на поверхность раздела двух сред S излучение испытывает зеркальное отражение и преломление по закону Френеля с коэффициентом преломления воды относительно воздуха n. Обозначим через X фазовое пространство координат, направлений и времени: $X = R \times \Omega \times T = \{x = (r, \omega, t) :\ x, y \in (-\infty, +\infty),\ z \in [0, H];\ \omega \in \Omega;\ t \in [0, T]\,;\ dx = dr\, d\omega\, dt\}$. Определим в этом пространстве функцию $f(x)$, являющуюся плотностью столкновений квантов излучения в рассеивающей и поглощающей среде и удовлетворяющую интегральному уравнению переноса

$$f(x) = \int_X k(x', x) f(x') dx' + \psi(x) \quad \text{или} \quad f = Kf + \psi, \tag{1}$$

где $\psi(x)$ — плотность первых столкновений. Обозначим через $I_\varphi(\varsigma)$ некоторый линейный функционал от решения уравнения (1) для заданной реализации случайной поверхности $\varsigma(r_\perp)$: $I_\varphi(\varsigma) = (f(x|\varsigma), \varphi(x))$, где $\varphi(x) \ge 0$. Задача состоит в вычислении среднего по реализациям $\varsigma(r_\perp)$ значения функционала $I_\varphi(\varsigma)$: $\overline{I}_\varphi = \langle I_\varphi(\varsigma) \rangle = \int [\int_X f(x|\varsigma)\varphi(x) dx] dP(\varsigma)$. Для завершения постановки задачи необходимо к уже названным входным параметрам h, H, n, v и $A(r_\perp)$ добавить оптические характеристики рассеивающей среды $\sum(r)$ и $\sum_s(r)$ — пространственные распределения соответственно коэффициентов ослабления и рассеяния излучения, $g(r, \mu)$ — индикатрису рассеяния ($\mu = (\omega', \omega) \in [-1, 1]$) и определить оператор, описывающий в приближении лучевой оптики локальное воздействие взволнованной поверхности океана на излучение

$$\begin{aligned} I(r, \omega)|_{r \in S} = &\int_\Omega R(\omega', s(r_\perp)) I((r_\perp, h + \varsigma(r_\perp)), \omega') \delta(\omega' - \omega_{refl}(\omega, s(r_\perp))) d\omega' - \\ &- \frac{1}{n^2} \int_\Omega (1 - R(\omega', s(r_\perp))) I((r_\perp, h + \varsigma(r_\perp)), \omega') \delta(\omega' - \omega_{refr}(\omega, s(r_\perp))) d\omega', \end{aligned} \tag{2}$$

где ω' — направление падения луча на поверхность S, $R(\omega, s)$ — коэффициент отражения Френеля, $s(r_\perp) = (k - e(r_\perp))/\sqrt{1 + |e(r_\perp)|^2}$ — внешняя нормаль к поверхности S в точке $r = (r_\perp, h + \varsigma(r_\perp))$, $e(r_\perp) = \nabla_r \varsigma(r_\perp)$, $\omega_{refl}(\omega, s) = \omega - 2(\omega, s)s$, $\omega_{refr}(\omega, s) = \gamma(\omega + \beta s)$, $\beta = (\omega', s) - sign(\omega', s)\sqrt{n^2 - 1 + (\omega', s)^2}$,

$$\gamma = \begin{cases} 1/n, & (\omega', s) \le 0, \\ n, & (\omega', s) > 0. \end{cases}$$

Аббревиатуры *refl* и *refr* означают соответственно отражение и преломление. В силу закона полного внутреннего отражения при $0 \le (\omega', s) \le \frac{\sqrt{n^2 - 1}}{n}$ полагаем $R(\omega', s) \equiv 1$.

2 Статистические модели радиационного поля и взволнованной морской поверхности

В [3] были получены точные выражения для ядра $k(x', x)$ уравнения (1), соответствующие стационарной задаче переноса оптического излучения в системе океан — атмосфера со случайно-неоднородной преломляющей и отражающей излучение поверхностью океана в приближении лучевой оптики в случае освещения системы бесконечно широким потоком солнечного излучения. Стационарный вариант уравнения переноса соответствует задаче пассивного оптического зондирования системы океан — атмосфера. В случае решения задачи активного лазерного зондирования системы океан — атмосфера нетрудно выписать выражение для ядра уравнения (1), соответствующее нестационарной постановке (см., например, [4]). Интегральное уравнение (1) с ядром из работы [3] и соотношением (2) полностью моделирует поле стационарного оптического

излучения в плоской системе океан — атмосфера с учетом всех оптических явлений, связанных с наличием случайно-неоднородной умеренно взволнованной поверхности океана — отражения, преломления, переотражения, затенения одних элементов поверхности другими, полного внутреннего отражения излучения под поверхностью океана. Точность данной модели ограничена только точностью задания входных параметров задачи — оптических характеристик среды и точностью статистического описания случайно-неоднородной поверхности океана. В теоретических работах, посвященных исследованию статистических свойств ветрового волнения морской поверхности, его, как правило, описывают либо в рамках упомянутой "фацетной" модели, либо однородным гауссовым случайным полем возвышений относительно среднего уровня. В первом случае поверхность раздела S представляет собой набор элементарных площадок с центрами в плоскости $z = h$, а внешние нормали к площадкам являются взаимонезависимыми единичными векторами $n = (n_x, n_y, n_z)$, плотность распределения которых к поверхности S определяется двумерной гауссовой плотностью распределения уклонов элементарных площадок с параметрами, зависящими от скорости ветра над поверхностью океана:

$$p(z_x, z_y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x(v)\sigma_y(v)} \exp(-(\frac{z_x}{\sigma_x(v)})^2 - (\frac{z_y}{\sigma_y(v)})^2),$$

$$n_x = \frac{-z_x}{\sqrt{z_x^2 + z_y^2 + 1}}, \quad n_y = \frac{-z_y}{\sqrt{z_x^2 + z_y^2 + 1}}, \quad n_z = \frac{1}{\sqrt{z_x^2 + z_y^2 + 1}},$$

v — скорость ветра. Во втором случае в дискретных моделях (например, в модели [3]) случайная поверхность задается совместной плотностью распределения возвышений $P_\varsigma(\varsigma_1, \cdots, \varsigma_m)$, $\varsigma_1 = \varsigma(r_\perp^{(1)}), \cdots, \varsigma_m = \varsigma(r_\perp^{(m)})$, $m = 1, 2, \cdots$, которая определяется ковариационной матрицей $\{\mathrm{K}_{\varsigma,ij}\sigma_\varsigma^2\}$, $\mathrm{K}_{\varsigma,ij} = K_\varsigma(\triangle r_{ij})$ — корреляционная функция возвышений, $\triangle r_{ij} = |r_\perp^{(i)} - r_\perp^{(j)}|$, σ_ς^2 — дисперсия уклонения точек поверхности относительно среднего уровня. Таким образом, нормальное случайное поле возвышений полностью определяется корреляционной функцией $K_\varsigma(\triangle r)$. В прикладных расчетах в качестве функции K_ς часто используют функции $\exp\{-(\triangle r/\rho)^2\}$ и $\exp\{-(\triangle r/\rho)^2\}\cos(v\triangle r)$, где параметры ρ и v в совокупности с σ_ς определяют балл и форму волнения. Для моделирования непрерывных реализаций случайной поверхности в большинстве случаев применяются спектральные модели, например, модели, определяемые "частотным" и "угловым" спектрами (см. [2]). В настоящих расчётах при моделировании случайных реализаций взволнованной поверхности океана использовалась приближённая модель

$$\varsigma(x, y) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}(r_{ij}\cos(x\rho_i\cos\theta_j + y\rho_i\sin\theta_j + \phi_{ij}) + r'_{ij}\cos(x\rho_i\cos\theta_j - y\rho_i\sin\theta_j + \phi'_{ij})). \tag{3}$$

Здесь ρ_i — случайные величины, распределённые с плотностью, пропорциональной

$$\Psi_\rho(\rho) = 0.5(g/\rho)^{1/2}S(\sqrt{g\rho}) \tag{4}$$

в соответствующих множествах A_i, $A_i = [\rho^*(i-1)/(m-1), \rho^* i/(m-1))$, $i = 1, \ldots, m-1$, $A_m = [\rho^*, \infty)$, θ_j — случайные величины, распределённые в интервалах $B_j = [\pi(j-1)/2n, \pi j/2n)$ с плотностью, пропорциональной $Q = 2\cos^2\theta/\pi$, $\theta \in [-\pi/2, \pi/2]$, r_{ij} и r'_{ij} — случайные величины с распределением Рэлея, g — ускорение свободного падения, ϕ_{ij} и ϕ'_{ij} равномерно распределены на отрезке $[0, 2\pi]$.

$$a_{ij}^2 = \frac{2}{\pi}\int\limits_{A_i}\int\limits_{B_j} \cos^2\theta\Psi_\rho(\rho)d\theta\, d\rho. \tag{5}$$

Функция $S()$ в формуле (4) представляет собой "частотный" спектр (см. [2]). Пример реализации взволнованной поверхности океана представлен на рис. 1.

При сильном волнении на поверхности океана возникает пена, диффузно отражающая излучение. Для учета пены в данной модели введем в рассмотрение величину $P(v)$, представляющую собой долю единицы водной поверхности, покрытой пеной в зависимости от скорости приповерхностного ветра v, а также альбедо пены A_f. Не представляет принципиальных трудностей наряду с пеной учет так называемых барашков, появляющихся на поверхности при сильном ветровом волнении.

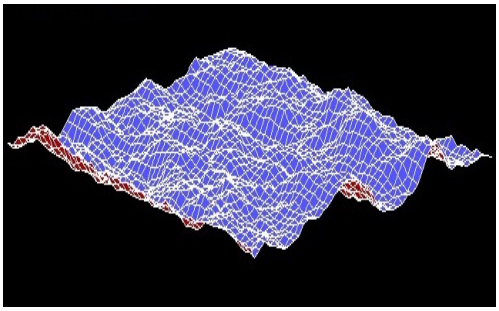


Рис. 1: Случайная реализация взволнованной поверхности океана

3 Некоторые результаты численного моделирования

В данных расчетах использованы алгоритмы метода Монте — Карло, подробное изложение которых для расчета поля интенсивности излучения в системе океан — атмосфера дано в [3, 4]. Отметим только, что в задаче пассивного зондирования были применены "локальная оценка по направлениям" и метод "коррелированной выборки" [4], а в задаче лазерного аэрокосмического зондирования использована модифицированная "локальная оценка" [6], учитывающая изменение интенсивности излучения, рассеянного толщей воды, после выхода из-под поверхности в результате преломления морской поверхностью. Данная локальная оценка позволяет выделить сигнал, пришедший с конкретной глубины, из общей интегральной по глубине информации о поле излучения, отраженного всей толщей воды. Это, в отличие от пассивных методов оптического зондирования океана, позволяет исследовать глубинную структуру тех или иных параметров океана. Указанные алгоритмы позволяют для заданного значения высоты Солнца Θ в задаче пассивного зондирования и заданных параметров лидара аэрокосмического базирования вычислять интенсивность $I(\theta)$ отраженного системой океан — атмосфера излучения на любой высоте над поверхностью океана одновременно для нескольких длин волн излучения λ, нескольких направлений визирования, нескольких значений v и различных концентраций гидрозоля, хлорофилла и желтого вещества в морской воде. Представленные ниже результаты получены со среднеквадратической погрешностью не более 5%. На рис. 2 приведены результаты расчетов интенсивности $I(\theta)$ наблюдаемого непосредственно над поверхностью океана излучения с длиной волны $\lambda = 0.5$ мкм, отраженного верхним слоем океана, в зависимости от угла наблюдения в плоскости солнечного вертикала и скорости приповерхностного ветра v при наличии и отсутствии пены. Относительное покрытие морской поверхности пеной $P(v)$ в зависимости от скорости ветра определялось из регрессионного соотношения $P(v) = 0.009v^3 - 0.3296v^2 + 4.5490v - 21.33$ ([7], стр. 68).

Для дисперсий уклонений точек морской поверхности относительно среднего уровня вдоль осей OX и OУ были приняты значения $\sigma_x^2 = 3.16 \cdot 10^{-3}v$ и $\sigma_y^2 = 0.003 + 1.92 \cdot 10^{-3}v$, v — скорость ветра в м/с. Ось OX направлена вдоль направления ветра. Высотный ход аэрозольного и молекулярного рассеяния и поглощения излучения в атмосфере взят из модели [5]. Индикатриса аэрозольного рассеяния вычислена по формулам теории Ми для сферических частиц с комплексным показателем преломления $1.55 - 0.01i$. Все значения $I(\theta)$ приведены в относительных единицах. За единицу принято среднее значение интенсивности излучения, регистрируемого в интервале направлений, составляющих угол от 1° до 2° с направлением в зенит при скорости ветра $v = 0$ (штиль). Заметим, что представленные на рис. 2 кривые несут информацию о состоянии поверхностного волнения, но являются помехой (фоном) при активном дистанционном исследовании глубинной структуры океана.

На рис. 3 представлены результаты расчётов интенсивности отражённого верхним слоем океана солнечного излучения (зенитное расстояние 30°) на длине волны $\lambda = 0.5$ мкм, регистрируемого угловым приёмником, расположенным на борту низколетящего (высота 400 м) самолёта, в зависмости от угла раствора приёмника. Синяя кривая соответствует направлению ветра в плоскости солнечного вертикала, красная кривая соответствует перпендикулярному направлению. Скорость ветра — 7 м/с. Результаты приведены в относительных единицах. За единицу принято значение интенсивности излучения при растворе приёмника 60 мин на красной кривой.

На рис. 4 представлены результаты расчётов интенсивности солнечного излучения, регистрируемого узкоугольным приёмником (раствор приёмника 1'), расположенным на спутнике на высоте 850 км, в зависимости от скорости приповерхностного ветра. Зенитное расстояние 30°. Результаты приведены раздельно для

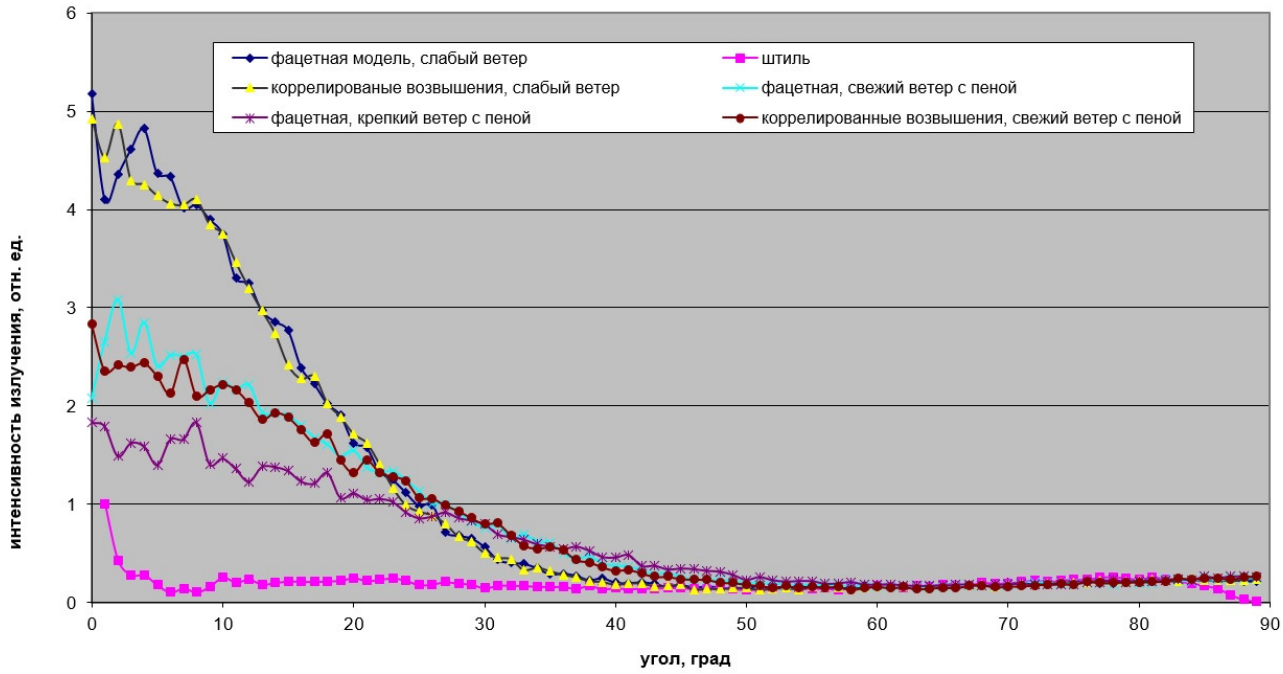


Рис. 2: Угловое распределение средней интенсивности излучения, отраженного верхним слоем океана в атмосферу в зависимости от скорости ветра для двух моделей ветрового волнения с учетом и без учета пены: слабый ветер — 5 м/с, свежий ветер — 10 м/с, крепкий ветер — 15 м/с, штиль — ветровое волнение отсутствует.

излучения, отражённого атмосферой (дымка), отражённого поверхностью океана и диффузного излучения, отражённого верхним слоем океана.

На рис. 5 представлены результаты расчётов интенсивности излучения, отражённого системой океан — атмосфера и зарегистрированного точечным приёмником с апертурой 1' на спутнике в зависимости от угла склонения Солнца для двух направлений движения ветра: синяя кривая — ветер в плоскости солнечного вертикала, красная кривая соответствует направлению ветра перпендикулярно плоскости солнечного вертикала.

В заключение отметим, что представленные на рис. 2–5 результаты расчётов свидетельствуют о весьма высокой чувствительности интенсивности излучения, регистрируемого как в самолётном, так и в спутниковом вариантах, к вариациям скорости приповерхностного ветра, а также к геометрическим условиям наблюдений. Это показывает, что указанные факторы необходимо принимать во внимание при решении практических задач аэрокосмического оптического зондирования верхнего слоя океана.

Список литературы

[1] Plass G.N., Kattawar G.W. "Radiative Transfer in an Atmosphere-Ocean System", Appl. Opt., Vol. 8, No. 2, pp. 455–466, 1969.

[2] Kargin B.A., Prigarin S.M. "Numerical modeling of random fields in the problems of atmosphere-ocean optics", Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, Vol. 11, No. 4, pp. 323–341, 1996.

[3] Kargin B.A., Rakimgulov K.B. "A weighting Monte Carlo method for modelling the optical radiation field in the ocean-atmosphere system", Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, Vol. 7, No. 3, pp. 221–240, 1992.

[4] Marchuk G.I., Mikhailov G.A., Nazaraliev M.A., Darbinian R.A., Kargin B.A., Elepov B.S., Monte Carlo methods in atmospheric optics, Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, p.286, 1980.

[5] Elterman L. UV, Visible and IR attenuation for altitudes to 50 km, Bedford, Massachussets: Air Force Cambridge Research Laboratories, Report AFCRL-68-0153, p. 50, 1968.

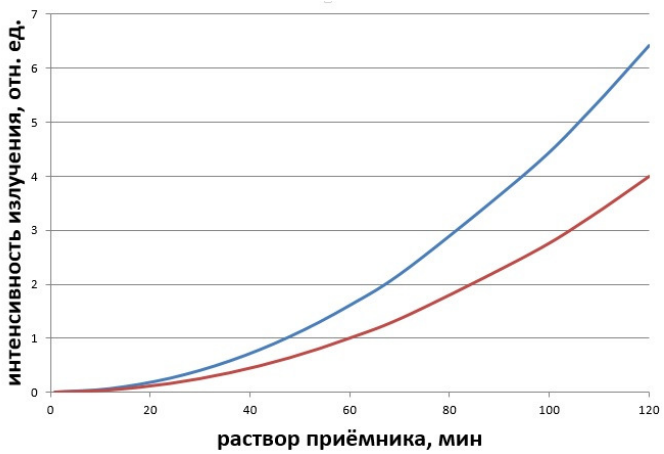


Рис. 3: Интенсивность отражённого излучения в зависимости от угла раствора приёмника (“самолётный” вариант).

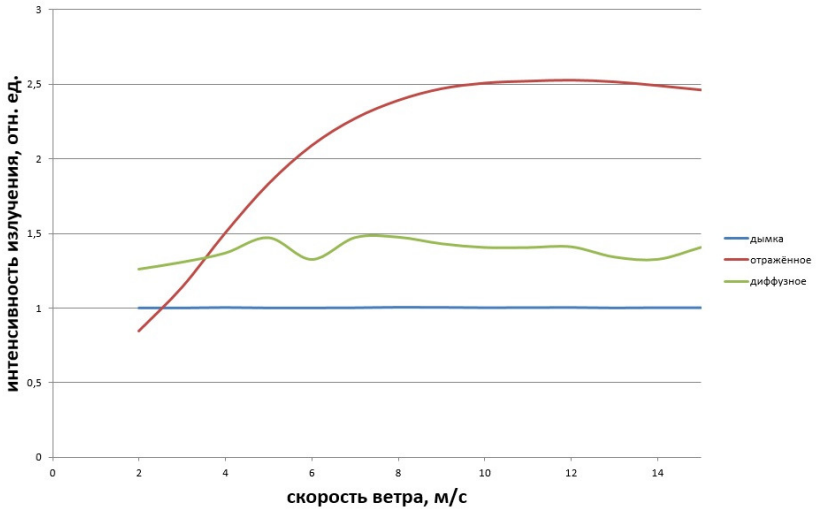


Рис. 4: Интенсивность излучения в зависимости от скорости ветра (“спутниковый” вариант).

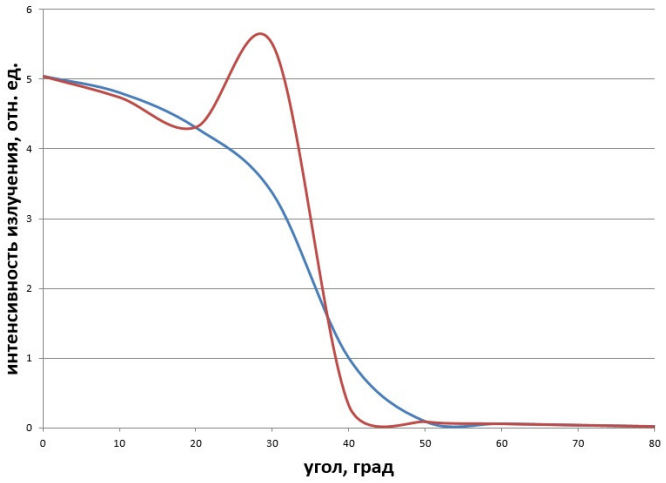


Рис. 5: Интенсивность излучения в зависимости от угла склонения Солнца (“спутниковый вариант”).

[6] Rakimgulov K.B., Ukhinov S.A. “Local estimates in Monte Carlo method for the ocean-atmosphere system with a random interface”, Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, Vol. 9, No. 6, pp. 547–564, 1994.

[7] Бортковский Р. С. Пространственно-временные характеристики барашков и пятен пены, образующихся при обрушении ветровых волн. Метеорология и гидрология №5, 1987.

Арсений Борисович Каргин — ведущий инженер Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: arseny@academ.org;
Борис Александрович Каргин — д.ф.-м.н., зав. лабораторией Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: bkargin@osmf.sscc.ru;
Сергей Михайлович Пригарин — д.ф.-м.н., вед. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: smp@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

МНОГОСПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРОЕКЦИИ В ЗАДАЧЕ УТОЧНЕНИЯ ГРАНИЦ НА ИЗОБРАЖЕНИЯХ В ТОМОГРАФИИ

И. Г. Казанцев

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.652

В работе рассматривается задача восстановления изображений по рентгеновским проекциям, регистрируемым детекторами высокого спектрального разрешения. Для неизвестного распределения коэффициента ослабления f внутри среды, источника A и детектора B на поверхности просвечиваемого тела, интегральная модель формирования данных имеет вид лучевого преобразования в каждом спектральном диапазоне. Рассматривается задача реконструкции f итерационными методами по многомерным проекционным данным $p(f, A, B)$, регистрируемым множеством пар источник-детектор (A, B). Геометрия просвечивания определяет матрицу системы, а правая часть представлена взвешенными суммами определенных элементов изображения. Целью работы является улучшение качества реконструкции, уменьшение артефактов и уточнение границ на реконструкции при малом числе направлений просвечивания. Применен хорошо адаптируемый к различным геометриям просвечивания итерационный метод Качмажа, на каждой итерации осуществляется минимизация полной вариации градиента реконструируемого изображения. Проведены модельные численные эксперименты.

Ключевые слова: томография, итерационные методы, многоспектральные изображения.

Введение

В работе рассматривается задача восстановления изображений по рентгеновским проекциям, регистрируемым детекторами высокого спектрального разрешения. Предложены подходы комплексирования изображений в нескольких спектральных диапазонах, получаемых при реконструкции изображений в томографии. Метод основан на сведении двумерной полной вариации, многократно вычисляемой в итерациях оптимизационных алгоритмов томографии, к набору одномерных процедур выделения границ. Исследуемые методы применимы, помимо томографии, также и в обработке многоспектральной информации дистанционного спутникового зондирования земной поверхности.

1 Модель

Идеализированная интегральная модель рентгеновской компьютерной томографии хорошо известна. Для известного распределения линейного коэффициента ослабления $f(x, y, z)$ среды, источника A и детектора B малых размеров, модель формирования данных имеет вид лучевого преобразования Радона:

$$p(A, B) = \int_A^B f(x, y, z)dl. \tag{1}$$

Здесь dl — элемент длины на линии AB. Задача состоит в реконструкции f по данным $p(A, B)$, регистрируемым большим множеством пар «источник — детектор», организованных в проекции. Итерационные методы рассматривают задачу восстановления изображений (1) как дискретную линейную систему $Ax = b$,

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-07-00066) и Программы I.33П Президиума РАН (проект № 0315-2015-0012).

где проекционные данные b (дискретный аналог p) являются взвешенными суммами определенных элементов (пикселов) изображения, лексикографически представленного в виде вектора x. Одним из активно используемых на практике методов является алгоритм Качмажа, известный также как ART (Algebraic reconstruction techniques) [1], использующий построчную обработку проекционной матрицы и потому экономный. В этой работе рассматривается итерационный двумерный случай, где ART модифицирован на основе методов условной минимизации полной вариации (TV — total variation), с целью улучшения качества реконструкции, уменьшения артефактов и уточнения границ на реконструкции при малом числе направлений просвечивания. Предполагается, что объекты имеют кусочно-постоянные коэффициенты ослабления. Это проявляется в скачкообразном изменении значений восстанавливаемой функции от объекта (фона) к объекту, что наблюдается во многих задачах томографии и обработки изображений. Предполагается, что эти скачки имеют место в одних и тех же областях изображений для всех спектральных каналов (Рис. 1).

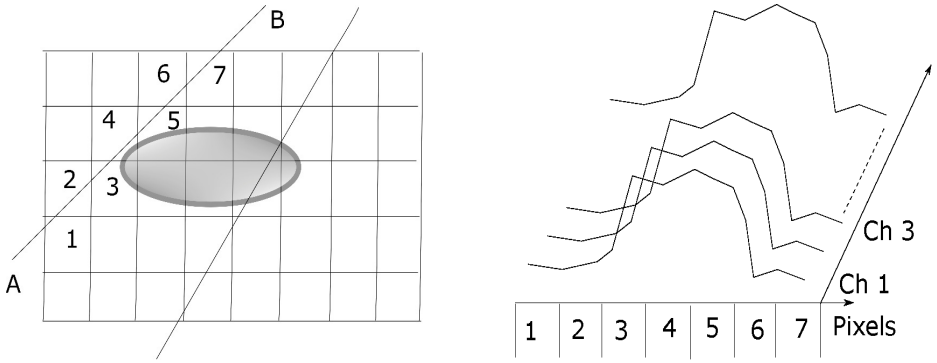


Рис. 1: Дискретная модель томографии: (Слева): Геометрическая модель прохождения луча AB через цифровое изображение размером 5×8 пикселов. Пикселы, пересекаемые лучом, обозначены вдоль луча как отсчеты (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7) и составляют дискретную ступенчатую аппроксимацию отрезка. Фон представлен отсчетами 1, 2, 6, 7, а объект — отсчетами 3, 4, 5. (Справа): Профили значений линейного коэффициента ослабления вдоль луча AB для различных энергий проникающего излучения в каналах Ch 1, Ch 2, Ch3, ...

2 Численный метод

Пусть A_m — вектор-строка ($m = 1, \ldots, M$) матрицы A длиной N; b — вектор-столбец правой части длиной M; λ — параметр релаксации; $nIter$ — число итераций ART. Очередная итерация метода ART имеет вид

$$x_{ART}^{(k+1)} = x_{ART}^{(k)} + \lambda \frac{\langle A_m, x_{ART}^{(k)} \rangle}{\langle A_m, A_m^T \rangle} A_m^T. \tag{2}$$

Модуль градиента двумерного изображения x вычисляется в пикселе (s,t) по формуле

$$|\nabla x_{s,t}| = \sqrt{(x_{s,t} - x_{s-1,t})^2 + (x_{s,t} - x_{s,t-1})^2}. \tag{3}$$

Целевой функцией выбрана L_1 — норма градиента, называемая полной вариацией (total variation — TV) изображения x:

$$||x||_{TV} = \sum_{s,t} |\nabla x_{s,t}| = \sum \sqrt{(x_{s,t} - x_{s-1,t})^2 + (x_{s,t} - x_{s,t-1})^2}. \tag{4}$$

Задача условной оптимизации формулируется так: найти изображение x

$$x = \operatorname{argmin} ||x||_{TV}$$

с ограничениями:

$$Ax = b,\ x \geq 0.$$

Полученный алгоритм называется ART-TV и имеет входные параметры: матрица A размером $M \times N$; вектор-столбец правой части b длины M; λ — параметр релаксации ART; α – параметр минимизации TV; $nIter$ — число итераций ART; nTV — число итераций цикла минимизации полной вариации. Результат алгоритма: восстановленное изображение $x^{(nIter)}$. Псевдокод представлен на Рис. 2.

1: **function** ART-TV (A, b, M, N, λ, α, $nIter$, nTV)
2: $x^{(0)} \leftarrow 0$
3: **for** $k \leftarrow 1$ **to** $nIter$ **do**
4: $x^{(k)} \leftarrow x^{(k-1)}$
5: $x^{ART} \leftarrow x^{(k)}$
6: **for** $m \leftarrow 1$ **to** M **do**
7: $x^{ART} \leftarrow x^{ART} + \lambda \dfrac{\langle A_m, x^{ART} \rangle}{\langle A_m, A_m^T \rangle} A_m^T$
8: **end for**
9: $x^{POS} \leftarrow max(0, x^{ART})$
10: $\beta \leftarrow || x^{POS} - x^{ART} ||_2$
11: $x^{TV} \leftarrow x^{POS}$
12: **for** $q \leftarrow 1$ **to** nTV **do**
13: $dx^{TV} \leftarrow \nabla_x ||x||_{TV}$
14: $dx^{TV} \leftarrow dx^{TV} / || dx^{TV} ||_2$
15: $x^{TV} \leftarrow x^{TV} - \alpha \cdot \beta \cdot dx^{TV}$
16: **end for**
17: $x^{(k)} \leftarrow max(0, x^{TV})$
18: **end for**
19: **return** $x^{(nIter)}$
20: **end function**

Рис. 2: Алгоритм ART-TV

3 Результаты

Проведены вычислительные эксперименты с реконструкциями по 20 проекциям методом ART-TV (Рис. 3 и 4). Использовалась минимизация полной вариации в двух вариантах — по всему изображению (известный подход) и по наборам пикселов, лежащих на лучах просвечивания (предлагаемый в этой работе). Во втором подходе все формулы вычисления вариаций модифицированы на одномерный случай. Идея состоит в снижении размерности полной вариации и управляемой сегментации границ и скачков на многоспектральных реконструкциях. На данный момент изображения обрабатываются раздельно для каждого канала. Литература по обнаружению скачков в одномерных сигналах пополняется постоянно и появляется много новых эффективных методов [2].

Если имеется K спектральных каналов регистрации, а текущий луч пересекает поле изображения в L пикселах, то можно исследовать матрицы одномерных профилей (Рис. 1) размером $K \times L$ для совместного анализа границ на многоспектральной информации, поскольку границы областей объективно существуют одновременно в определенном пикселе на всех каналах.

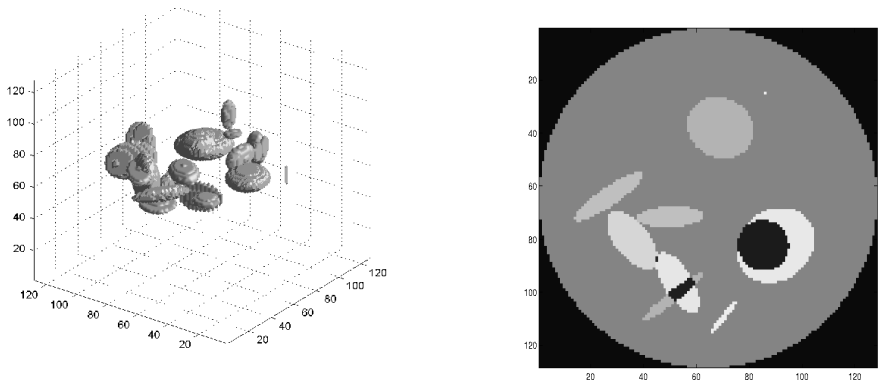


Рис. 3: Дискретная модель. (Слева) Фантом $128 \times 128 \times 128$. (Справа) Изображение центрального горизонтального слоя трехмерного фантома.

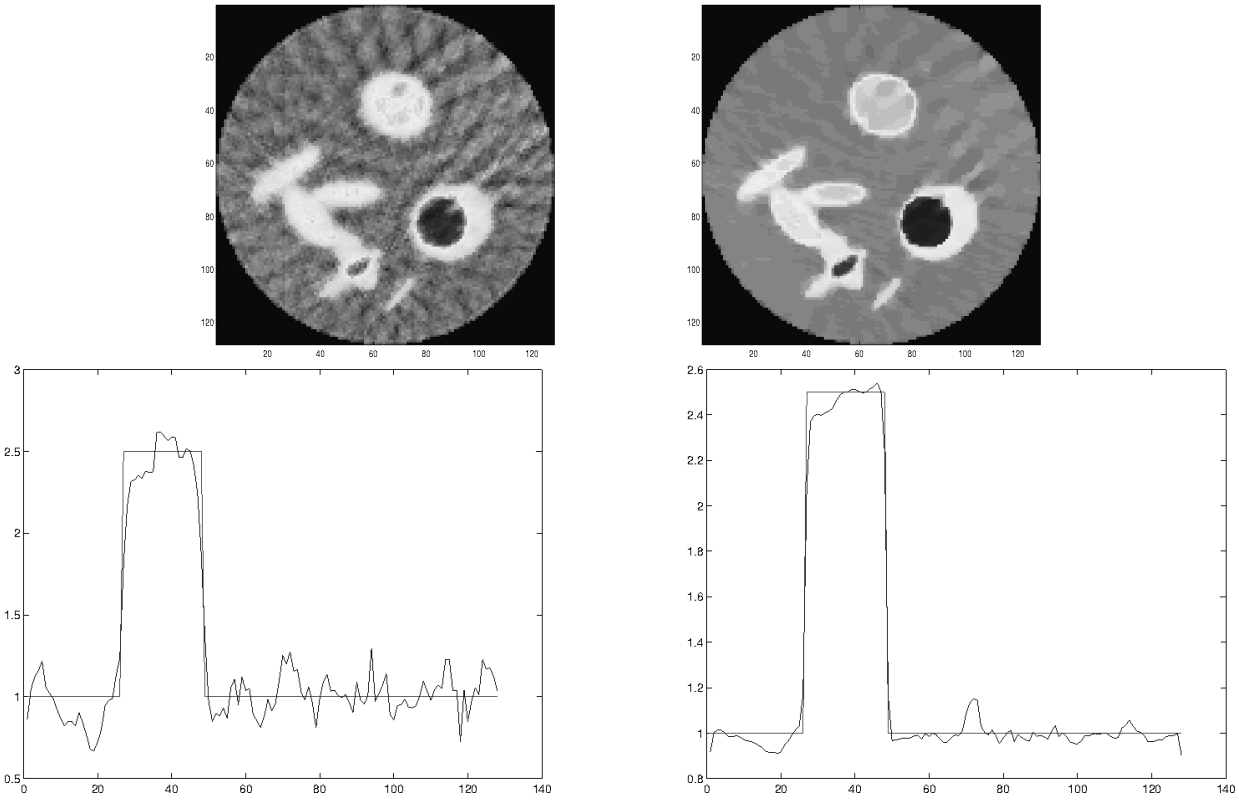


Рис. 4: Две реконструкции фантома вычислены по 20 проекциям каждая с 384 детекторами, в результате пяти ART итераций и пяти итераций при минимизации TV. (Верхний ряд слева) Минимизация полной вариации, традиционно вычисленной на всем двумерном изображении. Нормализированная среднеквадратичная ошибка восстановления равна 0.07. (Верхний ряд справа) Минимизация осуществлена на одномерных массивах пикселов, посещаемых лучом просвечивания. Нормализированная среднеквадратичная ошибка равна 0.05. (Нижний ряд) Сравниваются профили центральных столбцов фантома, состоящего из ступенчатых функций, и реконструкций с вычислением полной вариации на всем изображении (слева) и на одномерных фрагментах (справа), соответственно реконструкциям в верхнему ряду.

Заключение

В работе получены следующие результаты. Применен хорошо адаптируемый к различным геометриям просвечивания и теоретически точный алгебраический итерационный метод ART-TV, в котором на каждой итерации осуществляется минимизация полной вариации градиента реконструируемого изображения и его подобластей. Рассматриваемые подходы могут быть применены в задаче улучшения границ на многоспектральных данных дистанционного зондирования введением одномерной обработки на линейных подобластях изображений.

Список литературы

[1] Sidky E.Y., Pan X. Image reconstruction in circular cone-beam computed tomography by constrained, total-variation minimization // Physics in Medicine and Biology. 2008. V. 53. P. 4777–4807.

[2] Condat L. A Direct Algorithm for 1-D Total Variation Denoising // IEEE Signal Processing Letters. 2013. V. 20. P. 1054–1057.

Иван Гаврилович Казанцев — д.ф.-м.н., ст. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: kig@ooi.sscc.ru;
Дата поступления — 24 мая 2017 г.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ, УЛУЧШАЮЩИХ СХОДИМОСТЬ АНСАМБЛЕВОГО ФИЛЬТРА КАЛМАНА

Е. Г. Климова

Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 551.509.313

Ансамблевый фильтр Калмана является одним из популярных методов усвоения данных при моделировании процессов в атмосфере, водоемах, распространения загрязняющих веществ и т.д. Одной из проблем практической реализации ансамблевых фильтров Калмана является расходимость процедуры усвоения данных со временем из-за убывания дисперсий ошибок оценивания. Существует несколько подходов к решению этой проблем: применение корректирующего параметра (inflation factor) как мультипликативного, так и аддитивного, задание случайной ошибки модели (stochastic forcing), а также адаптивные процедуры коррекции дисперсий ошибок прогноза. В статье рассматривается общий подход к анализу эффективности таких процедур. Подход основан на формуле для отклонения элемента ансамбля от среднего по ансамблю значения. Свойства процедур, регулирующих сходимость, исследуются для стохастического ансамблевого фильтра Калмана как аналитически, так и с помощью численных экспериментов с 1-мерной моделью Лоренца.

Ключевые слова: усвоение данных, ансамблевый фильтр Калмана, расходимость фильтра Калмана, коррекция ковариационных матриц.

Введение

Лидирующим направлением в работах, посвященных применению фильтра Калмана при усвоении данных, является ансамблевый подход, впервые предложенный в работе [4]. Ансамблевый подход позволяет вычислять матрицы ковариаций ошибок оценивания для нелинейных прогностических моделей. В этом случае рассматривается вариант обобщенного фильтра Калмана, в котором ковариации ошибок прогноза оцениваются с помощью ансамбля прогнозов.

В ансамблевом фильтре Калмана можно выделить два подхода: «стохастический фильтр» и «детерминированный фильтр». В настоящее время проводится большое количество исследований по сравнению стохастических и детерминированных ансамблевых фильтров. Важной проблемой, возникающей при реализации ансамблевого фильтра Калмана, является проблема расходимости фильтра. При этом под расходимостью понимается рост среднеквадратической ошибки при убывании нормы ковариационной матрицы. Такое поведение может быть свойственно и классическому фильтру Калмана, у которого теоретически, при отсутствии шумов модели, норма ковариационной матрицы стремится к нулю. Различные приемы, позволяющие бороться с этим эффектом, разработаны в классических монографиях Jazwinsky [6], [2]. Современные методы, улучшающие сходимость ансамблевого фильтра Калмана, изложены в [7].

В данной работе рассматривается подход к анализу поведения по времени отклонения среднего по ансамблю значения (ансамбль возмущений) и соответствия его поведению теоретической ошибки оценки, основанный на общей асимптотической формуле для отклонения элемента ансамбля от среднего по ансамблю значения. Исследуется влияние на асимптотическое поведение по времени ансамбля возмущений основных приемов, улучшающих сходимость ансамблевого фильтра Калмана: применение аддитивного корректирующего параметра, мультипликативного параметра и адаптивной оценки этих параметров в процедуре усвоения данных.

1 Ансамблевый фильтр Калмана

Запишем нелинейную динамическую систему в виде уравнения процесса

$$x_k^t = f(x_{k-1}^t) + \eta_{k-1}^t \tag{1}$$

и уравнения наблюдений

$$y_k = h(x_k^t) + \varepsilon_k^t.$$

где η_{k-1}^t — вектор "шумов модели", ε_k^t — вектор ошибок наблюдений, x_k^t — вектор оцениваемых переменных в момент времени t_k, ε_k^t и η_{k-1}^t — Гауссовские случайные переменные: $E[\varepsilon_k^t \left(\varepsilon_k^t\right)^T] = R_k^t$, $E[\eta_{k-1}^t \left(\eta_{k-1}^t\right)^T] = Q_{k-1}^t$. Будем считать x_k^t истинным значением.

Стохастический ансамблевый фильтр Калмана состоит из ансамбля прогнозов $\{x_k^{f,n}, n = 1, \cdots, N\}$

$$x_k^{f,n} = f(x_{k-1}^{a,n}) + \eta_{k-1}^n \tag{2}$$

и ансамбля анализов $\{x_k^{a,n}, n = 1, \cdots, N\}$

$$x_k^{a,n} = x_k^{f,n} + K_k(y_k^n + \varepsilon_k^n - h(x_k^{f,n})). \tag{3}$$

Для осуществления стохастического фильтра Калмана требуется задание ансамбля ошибок наблюдений $\{\varepsilon_k^n, n = 1, \cdots, N\}$ а также ансамбля ошибок прогноза $\{dx_k^{f,n} = x_k^{f,n} - \overline{x_k^{f,n}},\ n = 1, \cdots, N\}$, где $\overline{x_k^{f,n}} \cong \frac{1}{N}\sum_{n=1}^N x_k^{f,n}$ и ансамбля шумов модели $\{\eta_{k-1}^n, n = 1, \cdots, N\}$:$E[\eta_{k-1}^n \left(\eta_{k-1}^n\right)^T] = Q_k$. Матрица K_k имеет вид

$$K_k = P_k^f H_k^T (H_k P_k^f H_k^T + R_k)^{-1},$$

где P_k^f и R_k — матрицы, оцениваемые по ансамблю

$$P_k^f \triangleq \frac{1}{N-1}\sum_{n=1}^N dx_k^{f,n} \left(dx_k^{f,n}\right)^T,\ R_k \triangleq \frac{1}{N-1}\sum_{n=1}^N \varepsilon_k^n \left(\varepsilon_k^n\right)^T,$$

H_k линеаризованный оператор $h(x_k^{f,n})$ относительно $\overline{x_k^{f,n}}$:

$$h(x_k) \cong h(\overline{x_k^{f,n}}) + H_k \varepsilon_k^f\ .$$

Зададим ошибку анализа $\{dx_k^{a,n} = x_k^{a,n} - \overline{x_k^{a,n}},\ n = 1, \cdots, N\}$, где $\overline{x_k^{a,n}} \cong \frac{1}{N}\sum_{n=1}^N x_k^{a,n}$. Тогда матрица ковариаций ошибок анализа может быть вычислена по формуле

$$P_k^a \triangleq \frac{1}{N-1}\sum_{n=1}^N dx_k^{a,n} \left(dx_k^{a,n}\right)^T.$$

Формулы (2)–(3) представляют собой стохастический ансамблевый фильтр Калмана. Эти формулы можно записать в следующем виде:

$$x_k^n = (I - K_k H_k)\left[f(x_{k-1}^n) + \eta_{k-1}^n\right] + K_k(y_k^n + \varepsilon_k^n),$$

где x_k^n — ансамбль оцениваемых переменных. Оптимальной оценкой в ансамблевом фильтре Калмана является среднее по ансамблю значение $\overline{x_k^n}$. Отклонение от среднего (spread) моделирует ошибку оценки $dx_k^n \triangleq x_k^n - \overline{x_k^n}$. Уравнение для отклонения от среднего имеет вид

$$dx_k^n = (I - K_k H_k)(f(x_{k-1}^n) - \overline{f(x_{k-1}^n)} + \eta_{k-1}^n) + K_k \varepsilon_k^n. \tag{4}$$

В то же время "теоретическая" ошибка оценки $dx_k^t \triangleq x_k^t - \overline{x_k^n}$ удовлетворяет уравнению

$$dx_k^t = (I - K_k H_k)(f(x_{k-1}^t) - \overline{f(x_{k-1}^n)} + \eta_{k-1}^n) + K_k \varepsilon_k^t. \tag{5}$$

Ансамблей анализов, соответствующих ковариационной матрице P_k^a и среднему значению $\overline{x_k^{a,n}}$ может быть множество. В частности, детерминированные фильтры вычисляют ансамбль полей с соответствующим средним значением и матрицей ковариаций. Однако, ансамбль анализов, задаваемый по формуле (3), имеет важное преимущество, состоящее в том, что уравнение для отклонения от среднего по ансамблю значения (4) будет иметь такой же вид, как и уравнение для теоретической ошибки оценки (5).

2 Асимптотическое поведение отклонения от среднего значения в ансамблевом фильтре Калмана

Запишем уравнение для отклонения от среднего в стохастическом фильтре Калмана в виде

$$dx_k^n = (I - K_k H_k)(F_k dx_{k-1}^n + \eta_{k-1}^n) + K_k \varepsilon_k^n. \tag{6}$$

Здесь вместо нелинейного оператора модели f берется линеаризованный оператор F_k. Это уравнение можно переписать как

$$dx_k^n = \Psi(k,0) dx_0^n + \sum_{i=1}^{k} \Psi(k,i) \left[K_i \varepsilon_i^n + (I - K_i H_i) \eta_{i-1}^n \right], \tag{7}$$

где $\Psi(k,i) \triangleq \prod_{j=i+1}^{k} (I - K_j H_j) F_j$, если $k > i$, $\Psi(k,k) \equiv I$. Отметим, что аналогичное уравнение для ошибки классического фильтра Калмана получено в работе [3]. Как видно из формул, для того, чтобы $\|\Psi(k,0)\| \to 0$ при $k \to \infty$ достаточно выполнения условия

$$\|(I - K_k H_k) F_k\| < 1 \tag{8}$$

на каждом шаге по времени. Это условие сходимости фильтра Калмана приводится в монографии Anderson et al. [2]. В этом случае со временем начальное значение возмущения перестает оказывать влияние на текущее значение ансамбля возмущений, поскольку $\|\Psi(k,0)\| \to 0$ при $k \to \infty$.

Ошибка оценки, равная отклонению среднего значения от "истины" удовлетворяет аналогичному (6) уравнению

$$dx_k^t = (I - K_k H_k)(F_k dx_{k-1}^t + \eta_{k-1}^t) + K_k \varepsilon_k^t. \tag{9}$$

Как видно из уравнений для dx_k^n (6) и dx_k^t (9), моделируемая ошибка оценки близка к "теоретической" ошибке, если случайные векторы моделируемых ошибок наблюдений и шумов модели имеют те же ковариационные матрицы, что и истинные.

3 Способы улучшения сходимости ансамблевого фильтра Калмана

В современных методах усвоения данных, основанных на ансамблевом фильтре Калмана, рассматривается множество способов улучшения сходимости алгоритма [7]. Выделим среди них наиболее часто используемые:

1. мультипликативный корректирующий параметр (multiplicative inflation);
2. аддитивный корректирующий параметр (additive inflation);
3. адаптивная оценка корректирующих параметров (adaptive inflation).

Асимптотическая формула для ансамбля возмущений (7) позволяет проанализировать влияние каждого из этих способов. Рассмотрим модификацию ансамбля возмущений после шага прогноза в общем виде:

$$\widetilde{dx}_k^n = (I - K_k H_k)(\alpha_k F_k dx_k^n + \alpha_k \eta_{k-1}^n + \beta_k^n) + K_k \varepsilon_k^n,$$

где α_k — заданный параметр, β_k^n — случайный вектор с заданной ковариационной матрицей. Тогда асимптотическая формула для стохастического фильтра будет иметь вид

$$\widetilde{dx}_k^n = \tilde{\Psi}(k,0) dx_0^n + \sum_{i=1}^{k} \tilde{\Psi}(k,i) \left[\tilde{K}_i \varepsilon_i^n + (I - \tilde{K}_i H_i) \alpha_i \eta_{i-1}^n + (I - \tilde{K}_i H_i) \beta_{i-1}^n \right],$$

где $\tilde{\Psi}(k,i) \triangleq \prod_{j=i+1}^{k} (I - \tilde{K}_j H_j) F_j \alpha_j$, $\tilde{K}_j$ вычислена по модифицированным ковариационным матрицам. Как легко видеть из приведенных формул, ансамбль возмущений, полученный после модификации, не соответствует ансамблю ошибок. В случае $\beta_k^n = 0$ получаем вариант мультипликативного корректирующего параметра (multiplicative inflation). Рассмотрим вариант $\alpha_k = 1$, $\beta_k^n = \delta Q_k \xi^n$, где

$$\delta Q_k = (\alpha_k^2 - 1) P_k^f, \tag{10}$$

ξ^n — Гауссовский случайный вектор $N(0, I)$, I — единичная матрица. В этом случае получим вариант аддитивного корректирующего параметра (additive inflation), при котором ковариационные матрицы будут совпадать, а вид ансамбля возмущений отличаться. Также из асимптотических формул, приведенных в этом пункте, следует, что в случае аддитивного корректирующего параметра поведение ансамбля возмущений стохастического фильтра ближе к поведению ошибки, чем в случае мультипликативного корректирующего параметра (матрицы $\tilde{\Psi}$ и $\tilde{\Psi}_t$ совпадают).

4 Адаптивные алгоритмы

Популярным подходом к улучшению сходимости фильтра Калмана, предлагаемым в классической литературе, является адаптивная оценка матрицы ковариаций «шумов модели» по данным о невязках [6]. Классический адаптивный алгоритм оценки матрицы ковариаций Q, предлагаемый в этой монографии, является аналогом подхода, называемого «additive inflation». При этом дисперсии ковариационной матрицы уточняются с учетом данных о невязках.

Существует большое количество адаптивных алгоритмов оценки корректирующего параметра в ансамблевом фильтре Калмана [7]. Рассмотрим один из алгоритмов адаптивного уточнения дисперсий прогнозируемых ансамблей по данным о невязках (residuals) в ансамблевом фильтре Калмана. Пусть в точках наблюдений *“i”* в момент времени t_k известны невязки $r_{k,i} = y_{0,i} - H\bar{x}_k^f$. Предположим, по аналогии с алгоритмом, предложенным в [6], что $r_{k,i}^2 = \left(\sigma_{k,i}^f\right)^2 + \varepsilon_{0,i}^2$. То есть, данные о невязках в точках наблюдений содержат информацию о дисперсиях ошибок прогноза (с учетом «шумов модели»). Будем оценивать среднее по области значение мультипликативного корректирующего параметра как

$$\alpha^2 = \frac{\left\langle r_{k,i}^2 - \overline{\varepsilon_{0,i}^2} \right\rangle}{\left\langle \left(\sigma_{k,i}^f\right)^2 \right\rangle}, \tag{11}$$

где $\langle . \rangle$ — среднее по области значение. В этом случае этот параметр не является константой, а оценивается в каждый момент усвоения, при этом возможны случаи, когда он становится меньше 1, либо намного больше 1. Если полученное значение отрицательно, будем считать его равным 1. Так как невязки вычисляются по данным о прогнозе, адаптивная оценка мультипликативного параметра осуществляется на шаге прогноза. Этот алгоритм является аналогом алгоритма, предложенного в [10] для детерминированного фильтра Калмана. Предлагаемый способ уточнения дисперсий учитывает также дисперсию «шумов модели», которые, как правило, неизвестны.

Таким образом, могут быть рассмотрены варианты адаптивного уточнения дисперсий в виде аддитивного корректирующего параметра или мультипликативного корректирующего параметра.

5 Численные эксперименты

В численных экспериментах использовался вариант стохастического ансамблевого фильтра Калмана, предложенный в [8], который реализован в виде квадратного корня (ансамблевый π-алгоритм). Этот алгоритм обладает свойством локальности, то есть, вычисление ансамбля ошибок анализа производится в каждом узле сетки независимо. Алгоритм является экономичным: все арифметические операции осуществляются с матрицами размерность которых равна размерности ансамбля. Описание метода реализации этого алгоритма, использованного в численных экспериментах, приводится в [1].

Численные эксперименты проводились с моделью Lorenz-96 [9]. Уравнения модели имеют вид:

$$\frac{d\mathrm{x_j}}{dt} = (\mathrm{x_{j+1}} - \mathrm{x_{j-2}})\mathrm{x_{j-1}} - \mathrm{x_j} + \mathrm{F_0},\ \mathrm{j} = 1, \cdots, \mathrm{J}$$
$$\mathrm{x_{-1}} = \mathrm{x_{J-1}},\ \mathrm{x_{J+1}} = x_1,$$

где $\mathrm{x_1}, \cdots, \mathrm{x_J}$ (J=40) — прогнозируемые переменные. Это одна из простейших возможных систем, которая воспроизводит свойства многих атмосферных моделей. Для решения системы уравнений используется конечно-разностная схема Рунге-Кутты 4-го порядка точности. Шаг по времени $\Delta\mathrm{t} = 0.05$, что соответствует 6 часам (t=1 принимается за 5 суток), $\mathrm{F_0}$=8. Для моделирования “истины” в численных экспериментах

по усвоению данных, так же как в [9] рассматривалось начальное значение $x_0^{\mathrm{t}} \cong \mathrm{N}(\mathrm{F}_0/4; \mathrm{F}_0/2)$ и проводился расчет на $\mathrm{N_t}$ шагов по времени. Через $N(a,b)$ обозначена случайная величина, распределенная по нормальному закону с математическим ожиданием, равным a и дисперсией, равной b. В численных экспериментах в качестве начальных данных для "истины" брался прогноз на $\mathrm{N_t}$=1000 шагов по времени. Для получения начальных данных для прогноза по модели $\hat{x}_0$ к «истинным» начальным данным добавлялось возмущение $x_d(0) = x_t(0) + \delta,\ \delta \sim \mathrm{N}(0, \mathrm{s}_0)$.

Для организации численных экспериментов задавались: ансамбль начальных полей $x^{\mathrm{n}}(0) = x_d(0) + \delta^{\mathrm{n}},\ \delta^{\mathrm{n}} \sim \mathrm{N}(0, \mathrm{s}_0),\ \mathrm{n} = 1, \cdots, \mathrm{N_{ens}}$; наблюдения $y_0 = x_t(0) + \delta_0,\ \delta_0 \sim \mathrm{N}(0, \varepsilon_0)$; ансамбль наблюдений с возмущениями $y_0^{\mathrm{n}} = y_0 + \delta_0^{\mathrm{n}},\ \delta_0^{\mathrm{n}} \sim \mathrm{N}(0, \varepsilon_0),\ \mathrm{n} = 1, \cdots, \mathrm{N_{ens}}$. Во всех экспериментах "шумы модели" $\eta^{\mathrm{n}} = 0$, при моделировании "истины" $\eta^{\mathrm{t}} = 0.01$. Через $\mathrm{N_{ens}}$ обозначено число элементов ансамбля. Данные наблюдений считались известными во всей области интегрирования. Прогноз осуществлялся в течение N_t=3000 шагов по времени, усвоение проводилось на каждом шаге по времени и через каждые четыре шага по времени. Численные эксперименты проводились для значений $\mathrm{s}_0 = \varepsilon_0 = 1$, $\mathrm{N_{ens}}$=20.

Во всех численных экспериментах рассматривался вариант $R = \varepsilon_0^2 I$. При анализе в узле сетки l брались данные наблюдений из интервала $(l - id, l + id)$. При этом при анализе в узле сетки l вместо матрицы R бралась матрица $\tilde{R} = R \circ e^{-0.5(\rho_{il}/bc)^2}$, где ρ_{il} — расстояние между узлом сетки и наблюдением, "$\circ$" — знак поэлементного умножения. В проводимых экспериментах брались значения $id = 5,\ bc = 5\Delta x$ (Δx — шаг сетки).

Численные эксперименты проводились для 10 вариантов «истины», все оценки вычислялись как среднее по этим 10 вариантам. Рассматривались следующие оценки:

$$rms = \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\left\{\frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L}(\overline{x_{k,i}} - x_{k,i}^{t})^2\right\}^{1/2},$$

среднеквадратическая ошибка, средняя по K=10 вариантам вычислений (k — номер варианта, i — номер узла сетки), в каждом варианте задаются случайные значения ошибок начальных данных, ошибок данных наблюдений и ансамбля возмущений в начальный момент времени. Если рассматривать "истину" как случайную величину, то значение rms соответствует следу ковариационной матрицы ошибки (ковариация оценивается по выборке из 10 значений).

$$sp = \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\left\{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left[\frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L}(\overline{x_{k,i}^{n}} - x_{k,i}^{n})^2\right]^{1/2}\right\},$$

среднее значение следа ковариационной матрицы, вычисленной по ансамблю (n — номер элемента ансамбля).

Оценки rms и spвычислялись на каждом шаге по времени. Также вычислялись средние значения этих оценок по временному интервалу $\{1001, \cdots 3000\}$:

$$\overline{rms} = \frac{1}{N_t - 1001}\sum_{m=1001}^{N_t} rms_m,$$

$$\overline{sp} = \frac{1}{N_t - 1001}\sum_{m=1001}^{N_t} sp_m.$$

Кроме того, вычислялось значение корреляции между rms и sp на этом временном интервале.

С описанным выше ансамблевым π-алгоритмом были проведены численные эксперименты в одинаковых условиях. Модификация ансамбля возмущений проводится после шага прогноза. В первой серии экспериментов данные наблюдений задавались на каждом шаге по времени, во второй серии — на каждом четвертом. В каждой серии проводилось 4 эксперимента:

1. Эксперимент 1 — при усвоении использовался мультипликативный параметр 1.1 после шага прогноза.
2. Эксперимент 2 — при усвоении использовался аддитивный параметр, соответствующий мультипликативному параметру 1.1 (формула (10)).
3. Эксперимент 3 — при усвоении использовался мультипликативный параметр, оцениваемый адаптивно так, как это описано в п.5 (формула (11)).

4. Эксперимент 4 — при усвоении использовался аддитивный параметр, соответствующий адаптивному мультипликативному параметру (формула (10)).

На рис. 1 приводятся значения средних по времени *rms* (*rm*) и *sp* (*sp*), а также коэффициента корреляции (*cr*), полученных в экспериментах 1–4 в первой и второй сериях экспериментов. Как видно из этого рисунка, использование аддитивного параметра увеличивает корреляцию между *rms* и *sp* по сравнению с мультипликативным параметром. Во второй серии экспериментов адаптивный алгоритм уменьшает среднеквадратическую ошибку. Кроме того, адаптивный алгоритм повышает коэффициент корреляции во всех экспериментах, при этом сами значения *rms* увеличиваются.

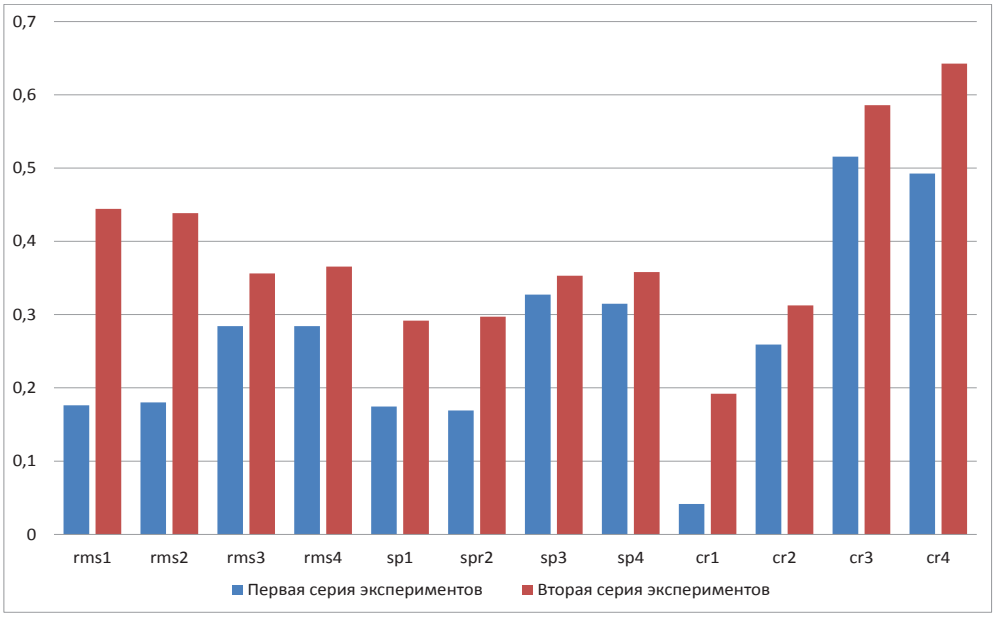


Рис. 1: Среднеквадратическая ошибка (*rms*), след ковариационной матрицы (*sp*) и коэффициент корреляции между *rms* и *sp* (*cr*).

Заключение

В работе исследуются основные факторы, влияющие на поведение ансамбля возмущений в ансамблевом фильтре Калмана. Получена общая формула для ансамбля возмущений в стохастическом ансамблевом фильтре Калмана. Рассмотрено влияние применения различных способов улучшения сходимости на асимптотическое поведение ансамблевого фильтра Калмана. Из проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

1. применение аддитивного корректирующего параметра и мультипликативного корректирующего параметра близко по смыслу и оказывает похожее влияние на поведение ковариационных матриц, в то же время оно изменяет общую формулу для ансамбля возмущений;

2. асимптотическая формула для ансамбля возмущений при использовании аддитивного корректирующего параметра ближе к асимптотической формуле для ошибки оценки, чем при использовании мультипликативного корректирующего параметра;

3. адаптивный алгоритм увеличивает корреляцию по времени между следом ковариационной матрицы и среднеквадратической ошибкой оценки.

Список литературы

[1] Климова Е.Г Экономичный алгоритм усвоения данных, основанный на стохастическом ансамблевом фильтре Калмана // Труды Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики. 2015», 19–23 октября 2015 г., г. Новосибирск. 2015. С. 339–344.

[2] Anderson, B., Moore, J. Optimal filtering. Prentice-Hall, 1979.

[3] Cohn, S.E., Dee, D.P. . Observability of discretizes partial differential equations // SIAM J. Numer. Anal. 1988. V. 25, iss. 3, P. 586–617.

[4] Evensen, G. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics // Journal Geophysical Research. 1994. V. 99, P. 10143–10162.

[5] Evensen, G. Data assimilation. The ensemble Kalman filter, Spriger-Verlag, Berlin Heideberg, 2009.

[6] Jazwinski, A.H. Stochastic processes and filtering theory. Academic Press, New York, 1970.

[7] Houtekamer, H.L. Zhang, F. Review of the ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation // Monthly Weather Review. 2016. V. 144, P. 4489–4532.

[8] Klimova E. A suboptimal data assimilation algorithm based on the ensemble Kalman filter // Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society. 2012. V. 138, P. 2079–2085.

[9] Lorenz, E.N., Emanuel, K.A. Optimal sites for supplementary weather observations: simulation with a small model // Journal of the Atmospheric Sciences. 1998. V. 55, P. 399–414.

[10] Wang, X., Bishop, C.H. A comparison of breeding and ensemble transform Kalman filter ensemble forecast schemes // Journal of the Atmospheric Sciences. 2003. V. 60, P. 1140–1158.

Екатерина Георгиевна Климова — д.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: klimova@ict.nsc.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ МАТРИЦЫ АЭРОЗОЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ ПО НАЗЕМНЫМ НАБЛЮДЕНИЯМ ПОЛЯРИЗОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А. С. Корда[1], С. А. Ухинов[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.676+535.361:535.51

Рассматривается задача восстановления матрицы аэрозольного рассеяния атмосферы по наблюдениям поляризованного излучения в альмукантарате Солнца. Предложены итерационные алгоритмы, основанные на измерениях первых трех компонент вектора Стокса и численном статистическом моделировании переноса поляризованного излучения. Для обоснования сходимости методов разработан алгоритм расчета матриц Якоби операторов перехода итерационных методов. Проведены тестовые расчеты, показывающие сходимость методов при определенных параметрах среды. Численно исследовано влияние ошибки начальных данных на восстановление компонент матрицы рассеяния.

Ключевые слова: методы Монте — Карло, перенос излучения, матрица рассеяния, поляризация излучения, обратные задачи.

Введение

Рассматривается процесс переноса поляризованного изучения в рассеивающей и поглощающей среде. Для описания поляризационных свойств света воспользуемся способом, предложенным Дж. Г. Стоксом в 1852 г., который является наиболее распространенным и удобным. Стоксом были введены четыре параметра: I, Q, U, V, имеющие размерность интенсивности, определяющие в совокупности интенсивность, степень поляризации, плоскость поляризации и степень эллиптичности излучения. Они будут рассматриваться как компоненты вектор-параметра Стокса $\mathbf{\Phi} = \big(I, Q, U, V\big)^T$ в четырехмерном функциональном пространстве. Для них выполняются соотношения: $I \geq 0, \quad I^2 \geq Q^2 + U^2 + V^2$. Естественный свет является неполяризованным, т.е. $Q = U = V = 0$. Для эллиптически поляризованного света $I^2 = Q^2 + U^2 + V^2$.

Для стационарных задач компоненты стоксовских вектор-функций зависят от пяти переменных: $\mathbf{\Phi} = \mathbf{\Phi}(x)$, $x \in X$, где $X = R \times \Omega, R \subseteq \mathbf{R}^3$ — пространство координат, $\Omega = \{\omega \in \mathbf{R}^3 : |\omega| = 1\}$ — пространство единичных векторов направлений. В основе математической модели переноса поляризованного излучения лежит феноменологическое предположение о том, что с каждым "фотоном" ассоциируется вектор Стокса, который при рассеянии преобразуется заданной матрицей рассеяния (см., например, [3]).

Стационарное интегро-дифференциальное векторное уравнение переноса поляризованного излучения имеет следующий вид:

$$\omega \nabla \mathbf{\Phi} + \sigma \mathbf{\Phi} = \int_\Omega \sigma_s P(\omega', \omega, r) \mathbf{\Phi}(r, \omega')\, d\omega' + \mathbf{f_0}(r, \omega),$$

или $\mathbf{L\Phi} + \sigma\mathbf{\Phi} = \mathbf{S\Phi} + \mathbf{f_0}$, где σ_s — сечение(коэффициент) рассеяния, $\sigma = \sigma_s + \sigma_c$, σ_c — сечение поглощения; $\mathbf{f_0}$ — вектор-функция источника излучения, $P(\omega', \omega, r)$ — матричная функция рассеяния, которая определяется соотношением $P(\omega', \omega, r) = L(\pi - i_2)R(\omega', \omega, r)L(-i_1)$, где L — специальная матрица поворота, $R = \{r_{ij}\}$ — матрица рассеяния [3]; i_1 и i_2 — углы между плоскостью рассеяния ω, ω' и плоскостями ω', s и

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проектов 15-01-00894 а, 17-01-00823 а).

ω, s соответственно, s — единичный вектор, определяющий плоскость отсчета параметров электромагнитной волны [3], обычно равный $(0,0,1)$ в плоскопараллельной геометрии среды и $r/|r|$ — в сферической.

Для изотропной среды матрица рассеяния имеет блочно-диагональный вид:

$$R(\mu, r) = \frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & 0 & 0 \\ r_{21} & r_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_{33} & r_{34} \\ 0 & 0 & -r_{43} & r_{44} \end{pmatrix},$$

где $\mu = (\omega', \omega)$ — косинус угла рассеяния. Когда рассеивающие частицы являются однородными сферами, добавляются дополнительные условия симметричности $r_{11} = r_{22}, r_{12} = r_{21}, r_{33} = r_{44}, r_{34} = r_{43}$, то есть, в данном случае матрица рассеяния определяется четырьмя компонентами. Если в среде присутствуют оба типа рассеяния, матрица R представляется как средневзвешенное от соответствующих матриц молекулярного рассеяния R_m и аэрозольного рассеяния R_a :

$$R(\mu, r) = \frac{R_a(\mu, r)\sigma_a(r) + R_m(\mu)\sigma_m(r)}{\sigma_a(r) + \sigma_m(r)}, \tag{1}$$

где σ_a, σ_m — сечения аэрозольного и молекулярного рассеяния соответственно, $\sigma_s = \sigma_a + \sigma_m$.

1 Постановка задачи и условные обозначения.

В настоящей работе ставится задача восстановления матрицы рассеяния по наблюдениям вектора Стокса в альмукантарате Солнца, то есть в различных направлениях ω_i, составляющих с зенитом тот же угол θ_s, что и направление на Солнце. Были разработаны алгоритмы восстановления компонент $r_{11}(\mu)$ и $r_{12}(\mu)$ матрицы $R(\mu)$, получены формулы для расчета матриц Якоби операторов перехода построенных методов и проведены вычисления для различных параметров среды и численное исследование сходимости методов. Ранее в работах [1, 5, 6] рассматривалась задача восстановления индикатрисы рассеяния атмосферы $r_{11}(\mu)$ по наземным наблюдениям яркости неба в альмукантарате Солнца.

Для решения данной задачи, помимо наблюдений вектора Стокса, необходимо иметь оптические параметры среды (сечения поглощения, аэрозольного и молекулярного рассеяния, альбедо подстилающей поверхности) на момент проведения эксперимента. Далее будем предполагать, что эти параметры нам известны.

Наблюдение ведется с поверхности Земли в K направлениях ω_i^*, каждое из которых задается зенитным углом θ_s и азимутальным углом φ_i: $(\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_K) = (0, \varphi_2, \ldots, 180)$. То есть, первое из этих направлений обращено к Солнцу $\omega_1^* = -\omega_s$. Обозначим $\theta_1, \ldots, \theta_K$ — углы однократного рассеяния, т.е. θ_i — это угол между i-тым и первым направлением: $0^o = \theta_1 < \theta_2 < \ldots < \theta_K = 2\theta_s < 180^o$. Для увеличения интервала изменения углов однократного рассеяния, естественно выбирать варианты наблюдения, где угол θ_s близок к 90^o. С другой стороны возникает проблема, что при выборе таких наклонных направлений удобная для расчетов плоская модель атмосферы не подходит. Оптимальным вариантом является выбора угол θ_s в пределах от 72^o до 82^o. На промежутке $[-1, 1]$ выбираются узлы $\mu_1 = 1 > \mu_2 > \ldots > \mu_{\bar{K}} = -1$ таким образом, что $\mu_i = \cos\theta_i = (\omega_s, -\omega_i^*), i = 1, \ldots, K$; число узлов $\bar{K} > K$, оставшиеся узлы $\mu_{K+1} > \ldots > \mu_{\bar{K}} = -1$ выбираются независимо от направлений наблюдения.

Индикатриса рассеяния $\tilde{g_1}(\mu) = r_{11}(\mu)$ и вторая компонента матрицы рассеяния $\tilde{g_2}(\mu) = r_{12}(\mu)$ задаются в этих узлах,

$$\tilde{g_1}(\mu_i) = g_{1,i}, \tilde{g_2}(\mu_i) = g_{2,i,}, \quad i = 1, \ldots, \bar{K},$$

а в промежуточных точках интерполируются линейно с помощью базовых кусочно-линейных функций. Обозначим $g = (g_1, g_2)$ — расширенный вектор значений компонент матрицы рассеяния.

Поскольку $\tilde{g_1}(\mu)$ является индикатрисой, то есть функцией плотности распределения случайного косинуса μ угла рассеяния, для нее должны выполняться условиям:

$$\tilde{g_1}(\mu) \geq 0, \quad \int_{-1}^{1} \tilde{g_1}(\mu) d\mu = 1.$$

В нашем случае, то есть для индикатрисы, полученной с помощью линейной интерполяции между узлами μ_i, эти условия можно записать так:

$$\tilde{g_1}(\mu_i) \geq 0, i = 1, \ldots, \bar{K}, \quad \sum_{i=1}^{\bar{K}-1} (\mu_i - \mu_{i+1})(\tilde{g_1}(\mu_i) + \tilde{g_1}(\mu_{i+1}))/2 = 1.$$

Матрица рассеяния представляется как средневзвешенное от матриц молекулярного и аэрозольного рассеяния, соответственно полная индикатриса и вторая компонента матрицы рассеяния также представляют собой средневзвешенное от соответствующих компонент искомой матрицы аэрозольного рассеяния и известной матрицы молекулярного рассеяния. Из представления (1) имеем $r_{1i}(\mu) = \frac{\sigma_a}{\sigma_s} r_{1i,a}(\mu) + \frac{\sigma_m}{\sigma_s} r_{1i,m}(\mu)$; $r_{11,m}(\mu) = \frac{3}{8}(1+\mu^2), r_{12,m}(\mu) = -\frac{3}{8}(1-\mu^2)$ — первая и вторая компоненты известной молекулярной (рэлеевской) матрицы рассеяния, $r_{11,a}(\mu)$, $r_{12,a}(\mu)$ — искомые компоненты аэрозольной матрицы рассеяния, построенные по вектору значений $\{g_i\}_{i=1}^{K}$; $F_i(g) = (F_{1,i}, F_{2,i}, F_{3,i}, F_{4,i})$ — вектор Стокса в направлении наблюдения ω_i: $F_i(g) = F_i^{(1)}(g) + F_i^{(2)}(g) + F_i^{(A)}(g)$; $F_i^{(1)}(g)$ — вектор Стокса однократно рассеянного излучения; $F_i^{(A)}(g)$ — вектор Стокса "подсветки" подстилающей поверхностью; $F_i^{(2)}(g)$ — вектор Стокса многократно рассеянного излучения при нулевом альбедо А; F_i^* — измеренный вектор Стокса, $i = 1, ...K$.

Параметры Стокса однократно рассеянного излучения вычисляются аналитически, т.к. во всех направлениях наблюдения атмосферная толща одинакова:

$$F_{1,i}^{(1)} = C r_{11}(\mu_i), F_{2,i}^{(1)} = C \cos 2i_2(\mu_i) r_{12}(\mu_i), F_{3,i}^{(1)} = C \sin 2i_2(\mu_i) r_{12}(\mu_i). \tag{2}$$

Здесь i_2 – угол между плоскостью рассеяния $-\omega_i, -\omega_s$ и плоскостью ω_i, s; $s = (0,0,1), \mu = (\omega_s, \omega_i)$; $\cos i_2(\mu_i) = -\frac{\cos\theta_s}{\sin\theta_s}\sqrt{\frac{1-\mu_i}{1+\mu_i}}$; $C = \frac{\tau_s}{2\pi\mu_0}\exp(-\frac{\tau}{\mu_0})$, где $\mu_0 = \cos\theta_s$ — параметр альмукантарата, τ — полная оптическая толща атмосферы, то есть $\tau = \int_0^H \sigma(z)dz$, τ_s — оптическая толща атмосферы по-рассеянию, H — высота атмосферы. Заметим, что в данном случае $\tau_s = \tau_m + \tau_a$, где τ_m и τ_a — оптические толщины по молекулярному и аэрозольному типам рассеяния соответственно.

2 Методы решения

Восстановление матрицы рассеяния проводится в два этапа. Теоретически, возможно построить алгоритм для одновременного восстановления первой и второй компонент, однако, на практике он получается очень неустойчивым и расходится из-за ошибок вычисления. Поэтому, оптимально сначала найти приближение первой компоненты матрицы рассеяния, полагая вторую нулевой, а затем, с уже вычисленной первой компонентой найти приближение второй. Заметим, что вектор Стокса однократно рассеянного излучения (2) зависит только от первой и второй компонент матрицы рассеяния, соответственно, для тонкого слоя, то есть в приближении однократного рассеяния в котором решается задача, вектор Стокса слабо зависит от третьей и четвертой компонент матрицы рассеяния, что подтверждается численными расчетами. Исходя из этого, полагаем блок матрицы, соответствующий третьей и четвертой компоненте, равным единичной матрице. Итак, на первом этапе восстанавливается индикатриса рассеяния с помощью одного из приведенных ниже методов. На этом шаге неизвестная матрица аэрозольного рассеяния R_a полагается диагональной и изотропной, то есть поляризация излучения аэрозолем не учитывается:

$$R_a(\mu) = \begin{pmatrix} \tilde{g}_{a,1}(\mu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{g}_{a,1}(\mu) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Аддитивный метод восстановления индикатрисы [1]:

$$g_1^{(k+1)} = C^{-1}[F^* - F_2(g_1^{(k)}) - F_A(g_1^{(k)})] = G_{ad}(g_1^{(k)}). \tag{4}$$

Уточненный (сравнительно с [4], [7]) мультипликативный метод:

$$g_1^{(k+1)} = \frac{F_1(g_1^{(k)})}{C} \cdot \frac{F^*}{F(g_1^{(k)})} = G_{mult}(g_1^{(k)}). \tag{5}$$

Если функция $F_1(g)/F(g)$ не зависит от g, что в какой-то степени выполняется при $A = 0$ и достаточно малом τ, то мультипликативный метод сходится за один шаг. Для аддитивного метода так же имеет место сходимость при $F(g) - F_1(g) \equiv const$.

Заметим, что величина $F_A(g)$ слабо зависит от g из геометрических соображений. Исходя из этого в [8] был предложен *комбинированный метод*:

$$g_1^{(k+1)} = \frac{F_1(g_1^{(k)})}{C} \cdot \frac{F^* - F_A(g_1^{(k)})}{F(g_1^{(k)}) - F_A(g_1^{(k)})} = G(g_1^{(k)}). \tag{6}$$

Он сходится за один шаг, если $F_A(g)$ и $F_1(g)/[F(g) - F_A(g)]$ не зависят от g_1. Здесь в соотношениях (4), (5), (6) и далее все операции покомпонентные.

Поляризация излучения молекулами воздуха учитывается полностью с помощью известной матрицы рэлеевского рассеяния. Полная матрица рассеяния $R(\mu)$ строится как средневзвешенное от матрицы молекулярного рассеяния и матрицы аэрозольного рассеяния. Рассмотрим процесс восстановления индикатрисы по шагам:

П.0. Нормировкой первой компоненты вектора Стокса "измеренных яркостей" F^* получаем первое приближение вектора узловых значений индикатрисы рассеяния: $g_1^{(k)} = C^{-1}F_1^*, k = 0$.

П.1. Выделяем приближение вектора узловых значений индикатрисы аэрозольного рассеяния из приближенного вектора узловых значений полной индикатрисы:

$$g_{a,1,i}^{(k)} = \frac{\sigma_s}{\sigma_a} g_{1,i}^{(k)} - \frac{\sigma_m}{\sigma_a} r_{11,m}(\mu_i).$$

С помощью интерполяции кусочно-линейными функциями и последующей нормировки по этому вектору строится индикатриса $\tilde{g}_{1,a}(\mu)$ и матрица рассеяния $R(\mu)$. Решаем прямую задачу с помощью локальной векторной оценки "по направлению" метода Монте — Карло с полученной матрицей рассеяния $R(\mu)$, таким образом, находим вектора $F(g^{(k)}), F_1(g^{(k)}), F_A(g^{(k)}), F_2(g^{(k)})$.

П.2. Вычисляем следующее приближение $g_1^{(k+1)}$ по формуле, соответствующей выбранному методу (4), (5), (6). Идем на П.1. и продолжаем процесс до сходимости итераций в пределах точности вычислений.

На втором этапе переходим к восстановлению второй компоненты $r_{12}(\mu) = \tilde{g}_2(\mu)$ матрицы рассеяния. Полагаем, что при этом неизвестная матрица аэрозольного рассеяния имеет блочно-диагональный вид:

$$R_a(\mu) = \begin{pmatrix} \tilde{g}_{a,1}(\mu) & \tilde{g}_{a,2}(\mu) & 0 & 0 \\ \tilde{g}_{a,2}(\mu) & \tilde{g}_{a,1}(\mu) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Для решения этой задачи на основе представления (2) были построены следующие алгоритмы.

Аддитивный метод по второй или третьей компоненте:

$$g_{2,i}^{(k+1)} = \frac{F_{2,i}^* - F_{2,i}(g_2^{(k)}) + g_{2,i}^{(k)} C \cos 2i_2(\mu_i)}{C \cos 2i_2(\mu_i)} = G_{ad,2}(g_2^{(k)}). \tag{8}$$

$$g_{2,i}^{(k+1)} = \frac{F_{3,i}^* - F_{3,i}(g_2^{(k)}) + g_{2,i}^{(k)} C \sin 2i_2(\mu_i)}{C \sin 2i_2(\mu_i)} = G_{ad,3}(g_2^{(k)}). \tag{9}$$

Комбинированный метод по второй/третьей компоненте вектора Стокса (m=2 или m=3):

$$g_{2,i}^{(k+1)} = g_{2,i}^{(k)} \cdot \frac{F_{m,i}^* - F_{m,i}^{(A)}(g_2^{(k)})}{F_{m,i}(g_2^{(k)}) - F_{m,i}^{(A)}(g_2^{(k)})} = G_m(g_{2,i}^{(k)}). \tag{10}$$

Полная матрица рассеяния $R(\mu)$ строится как так же, как при восстановлении индикатрисы рассеяния. Алгоритм решения:

П. 0. Из второй компоненте вектора Стокса “измеренных яркостей” F^* получаем начальное приближение $g_2^{(k)}, k = 0$ вектора узловых значений второй компоненты матрицы рассеяния: $g_{2,i}^{(k)} = \dfrac{F_{2,i}^*}{C \cos 2i_2(\mu_i)}$.

П. 1. Из приближенного значения вектора узловых значений второй компоненты матрицы рассеяния выделяем приближение вектора узловых значений второй компоненты матрицы аэрозольного рассеяния:

$$g_{a,2,i}^{(k)} = \frac{\sigma_s}{\sigma_a} g_{2,i}^{(k)} - \frac{\sigma_m}{\sigma_a} r_{12,m}(\mu_i).$$

По этому вектору с помощью линейной интерполяции строится функция $\tilde{g}_{2,a}(\mu)$ и матрица $R(\mu)$. Для второй компоненты матрицы рассеяния нет условий нормировки, как в случае восстановления индикатрисы, однако, из физических соображений полагаем, что $r_{12}(\mu)$ монотонно убывает в хвосте и не имеет резких скачков, поэтому при их появлении в процессе расчетов значения в этих узлах полагаются равными 0. Как и в случае восстановления индикатрисы рассеяния, решаем прямую задачу методом Монте — Карло с полученной матрицей рассеяния и вычисляем F, F_A, F_1, F_2. Здесь так же, как и при восстановлении первой компоненты матрицы, применяется локальная векторная оценка “по направлению” метода Монте — Карло.

П. 2. Вычисляем следующее приближение $g_2^{(k+1)}$ по формуле, соответствующей выбранному методу (8), (9), (10) . Далее идем на П.1 и продолжаем итерации до сходимости или расходимости алгоритма.

3 Результаты

Для всех приведенных методов восстановления $r_{11}(\mu)$ и $r_{12}(\mu)$ были проведены тестовые расчеты, показавшие сходимость методов при определенных параметрах среды, см. Рис.1.

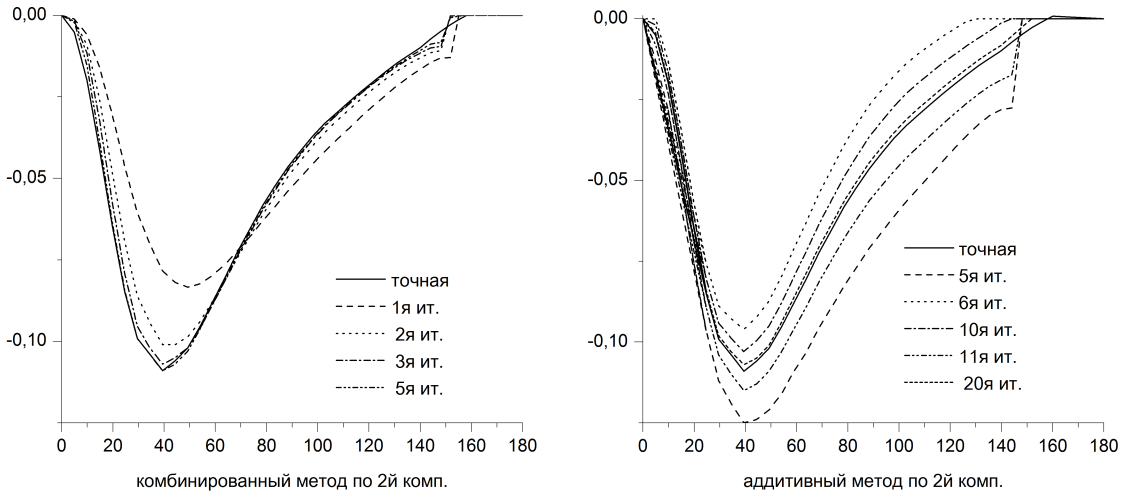


Рис. 1: Результаты восстановления компоненты $r_{12}(\mu)$ по 2-ой компоненте комбинированным (слева) и аддитивным (справа) методами; A=0.5, $\tau_a = 0.15$, $\tau_m = 0.05$.

Для обоснования сходимости итерационного метода, то есть для существования неподвижной точки g^* и сходимости к ней итераций $g^{(k)}$, достаточно выполнения условия, что спектральный радиус матрицы Якоби оператора перехода G меньше единицы [2, 5]. В [5] приводятся формулы для расчета $G'(g^*)$ для методов восстановления индикатрисы рассеяния, то есть для оператора перехода методов, определяющихся формулами (4), (5), (6). В данной работе были получены аналогичные формулы для методов восстановления второй компоненты матрицы рассеяния, определяющихся формулами (8), (9), (10). Формулы расчета матриц Якоби были получены с помощью дифференцирования векторных оценок метода Монте — Карло. Затем были проведены расчеты спектральных радиусов, что позволило численно проверить сходимость методов.

Таблица 1: Спектральный радиус и норма для матриц Якоби операторов перехода итерационных методов восстановления $r_{12}(\mu)$. $\tau_m = 0.05, A = 0.5$

τ_a	Метод восстановления					
	Комб. m=2		Комб. m=3.		Аддитивный	
	Сп.рад.	Норма	Сп.рад.	Норма	Сп.рад.	Норма
0,5	0,957	1,503	0,875	1,524	3,856	4,266
0,3	0,953	1,235	0,653	1,799	1,821	2,002
0,15	0,868	0,967	0,701	1,630	0,907	0,983
0,05	0,856	0,898	0,762	0,786	0,414	0,460

В Таблице 1 приведены результаты расчетов спектрального радиуса и нормы матриц Якоби при $\tau_m = 0.05, A = 0.5$ для методов восстановления второй компоненты матрицы рассеяния. Отметим, методы восстановления второй компоненты матрицы рассеяния более чуствительны к увеличению оптической толщины слоя, то есть сходимость методов восстановления $r_{12}(\mu)$ имеет место для более тонких слоев, чем методов восстановления индикатрисы рассеяния. И так же, как для методов восстановления индикатрисы рассеяния, для очень тонких оптических толщин аддитивный метод сходится быстрее, однако при увеличении толщины слоя он начинает расходиться, в то время как комбинированный и мультипликативный методы сходятся.

Так же было проведено исследование зависимости сходимости методов от ошибки измерений. Для всех приведенных методов были проведены тестовые расчеты, при которых сначала задача решалась по точным начальным данным, полученным решением прямой задачи, а затем по начальным данным с добавленной случайной ошибкой, распределенной по нормальному закону. Методы восстановления индикатрисы оказались более устойчивы к ошибкам начальных данных, для них расчеты показали, что случайная погрешность 1% в начальных данных дает до 1% погрешности в начальных узлах, где индикатриса принимает максимальные значения, и до 8–10% в хвосте, где значения индикатрисы малы и погрешность восстановления значительно больше. Методы восстановления второй компоненты матрицы рассеяния r_{12} также показали устойчивость, однако они более чувствительны к ошибкам начальных данных. Например, для комбинированного метода по 2-ой компоненте погрешность начальных данных 1% дает в среднем 3% погрешности, а для аддитивного метода — 5–7%.

Список литературы

[1] Антюфеев В. С., Михайлов Г. А., Лифшиц Г. Ш., Иванов А. И. Определение аэрозольных индикатрис рассеяния безоблачной атмосферы в спектральных областях $0.55 \div 2.4$ мкм. //Изв. АН СССР. Сер. ФАО. 1980. Т. 16. N 2. С. 146–155. СО АН СССР, 1988.

[2] Красносельский М. А., Вайникко Г. М., Забрейко П. П., Рутицкий Я. Б., Стеценко В. Я. Приближенное решение операторных уравнений. — М.: Наука, 1969.

[3] Марчук Г. И., Михайлов Г. А., Назаралиев М. А. и др. Метод Монте–Карло в атмосферной оптике. — Новосибирск: Наука, 1976.[Engl.transl.: Springer - Verlag, 1980]

[4] Антюфеев В. С., Назаралиев М. А. Обратные задачи атмосферной оптики. Новосибирск: Изд-во ВЦ СО АН СССР, 1988.

[5] Ухинов С. А., Чимаева А. С. Обоснование сходимости для алгоритмов метода Монте — Карло восстановления индикатрисы рассеяния с учетом поляризации.// Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. Новосибирск, 2011. Т. 14. N 1. С. 101–114.

[6] Chimaeva A.S., Mikhailov G.A., Ukhiniov S. A. Monte Carlo algorithms for reconstructing a scattering phase function with polarization taken into account // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, 2009. Vol. 24. N 5. P. 455–465.

[7] Михайлов Г. А. Некоторые задачи теории и приложений методов Монте — Карло. Новосибирск: Препринт ВЦ СО АН СССР, 1978.

[8] Михайлов Г. А., Ухинов С. А., Чимаева А. С. Алгоритмы метода Монте — Карло для восстановления индикатрисы рассеяния с учетом поляризации.// Доклады Академии Наук, 2008, том 423, №2, с. 161–164.

[9] Ухинов С. А., Чимаева А. С. Определение второй компоненты матрицы аэрозольного рассеяния по наземным измерениям поляризованного излучения в альмукантарате Солнца методом Монте — КарлоКарло // Сб. материалов междунар. конф. «Кубатурные формулы, методы Монте — Карло и их приложения», 4–7 июля 2011, Красноярск. С. 111–115.

Анна Сергеевна Корда — к.ф.-м.н., мл. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: asc@osmf.sscc.ru;
Сергей Анатольевич Ухинов — д.ф.-м.н., вед. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: sau@sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ОСОБЕННОСТИ РАСЧЕТА ПРОЦЕССА ВЫТЕСНЕНИЯ НЕФТИ ГАЗОМ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ВЕРСИИ ПРОГРАММЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ

А. В. Королев[1], В. А. Бахтин[2], Н. В. Поддерюгина[2]

[1] *Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, 117218, Москва*

[2] *Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 125047, Москва*

УДК 681.3.06

Рассматривается модель многофазной многокомпонентной фильтрации с применением уравнений состояния. Предлагается численный метод решения неявный по давлению и явный по концентрациям компонентов (насыщенностям), позволяющий надежно рассчитывать процессы с образованием зон смесимости. Описывается опыт применения DVM-системы для создания параллельной версии программы для трехмерного моделирования многокомпонентной фильтрации при разработке месторождений нефти и газа.

Ключевые слова: модель многокомпонентной фильтрации, вытеснение нефти газом, смесимость, автоматизация разработки параллельных программ, DVM-система.

Введение

Изучение процессов вытеснения нефти, протекающих при закачке в пласт двуокиси углерода, азота, газов высокого давления немыслимо без применения композиционных моделей фильтрации. Они часто используются при моделировании залежей, содержащих легкие углеводороды (конденсат и газ) в том случае, когда необходимо точнее описывать массообмен между фазами. Система дифференциальных уравнений в частных производных решается с применением численного метода неявного по давлению и явного по составу (мольной плотности). Расчет равновесных составов фаз выполняется с применением эффективного алгоритма, основанного на использовании метода с минимумом переменных [1], позволяющего надежно рассчитывать варианты вытеснения со смесимостью вытесняющего и вытесняемого агентов.

Данный подход к решению задач многокомпонентной многофазной изотермической фильтрации реализован в виде численной трехмерной модели и программы на языке Фортран-DVMH [2]. Оценка эффективности различных реализаций параллельной версии программы с использованием DVM-системы выполнялась на расчетах вариантов разработки нефтяной залежи системой добывающих и нагнетательных скважин при закачке в пласт «сухого» газа и «жирного» (обогащенного промежуточными фракциями) газа [3].

1 Многокомпонентная многофазная изотермическая фильтрация

Система уравнений изотермической фильтрации представляет собой комбинацию уравнений материального баланса и некоторых ограничений, связывающих основные переменные [3]:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\phi\left(\xi_o S_o x_i + \xi_g S_g y_i\right)\right] + div\left(\xi_o x_i \vec{W}_o + \xi_g y_i \vec{W}_g\right) - q_i = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N_c, \tag{1}$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-29-15105).

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\phi\xi_w S_w\right] + div\left(\xi_w \vec{W}_w\right) - q_w = 0, \tag{2}$$

$$\vec{W}_\alpha = -kk_{r\alpha}\mu_\alpha^{-1}\left(grad\ P_\alpha + \rho_\alpha g\ grad\ D\right), \quad \alpha = o, g, w, \tag{3}$$

$$f_i^o - f_i^g = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N_c, \tag{4}$$

$$\sum_{i=1}^{N_c} x_i = 1, \quad \sum_{i=1}^{N_c} y_i = 1, \tag{5}$$

$$S_o + S_g + S_w = 1, \tag{6}$$

$$P_o - P_w = P_{cwo}, \quad P_g - P_o = P_{cog}, \quad P_g - P_w = P_{cwo} + P_{cog}. \tag{7}$$

Здесь N_c — общее число компонентов в нефтяной и газовой фазах, k и ϕ — соответственно абсолютная проницаемость и пористость пласта, t — время, P_α — давление в фазе α, S_α — насыщенность фазой α, x_i и y_i — мольная концентрация i-ого компонента соответственно в нефтяной и газовой фазе, ξ_α, μ_α, ρ_α — мольная плотность, динамическая вязкость, массовая плотность фазы α, P_{cwo}, P_{cog} — капиллярные давления в системе нефть-вода и в системе нефть-газ соответственно, $k_{r\alpha}$ — относительная проницаемость для фазы α, q_i, q_w — плотность источников и стоков для компонентов и воды, $D(x, y, z)$ — превышение точки пласта над некоторой горизонтальной плоскостью, g — ускорение силы тяжести, f_i^o и f_i^g — летучести компонентов в нефтяной и газовой фазах.

Исходная система (1)–(3) с учетом соотношений (7) преобразуется к виду:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}[\phi\left(\xi_o S_o x_i + \xi_g S_g y_i\right)] - div\left[\xi_o x_i k k_{ro}\mu_o^{-1}\left(grad\, P + \rho_o g\ grad\ D\right) + \right.\\ &\left.+\xi_g y_i k k_{rg}\mu_g^{-1}\left(grad\, P - grad\, P_{cgo} + \rho_g g\ grad\, D\right)\right] - q_i = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N_c,\end{aligned} \tag{8}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[\phi\xi_w S_w] - div\ \left[\xi_w k k_{rw}\mu_w^{-1}\left(grad\, P - grad\, P_{cwo} + \rho_w g\, grad\, D\right)\right] - q_w = 0. \tag{9}$$

Уравнения материального баланса компонентов для углеводородных фаз (8) могут быть представлены в виде:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}[\phi\ z_i\left(\xi_o S_o + \xi_g S_g\right)] - div\left[\xi_o x_i k k_{ro}\mu_o^{-1}\left(grad\ P + \rho_o g_grad\ D\right) + \right.\\ &\left.+\xi_g y_i k k_{rg}\mu_g^{-1}\left(grad(P - P_{cgo}) + \rho_g g\ grad\ D\right)\ \right] - q_i = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N_c\end{aligned} \tag{10}$$

$$z_i = x_i L + y_i V, \quad i = 1, 2, \ldots, N_c, \quad L = \frac{\xi_o S_o}{\xi_o S_o + \xi_g S_g}, \quad V = \frac{\xi_g S_g}{\xi_o S_o + \xi_g S_g}, \quad \sum_{i=1}^{N_c} z_i = 1, \tag{11}$$

где P — давление в нефтяной фазе, L и V — мольные доли жидкой и газовой фаз, а z_i — мольная концентрация i-го компонента в углеводородной системе.

Указанное представление удобно в случае применения вычислительной схемы IMPECS (неявное давление, явные концентрации компонентов и насыщенности). Уравнение для давления получают суммированием по уравнений (10) и сложением суммы с уравнением (9) для воды. Иногда уравнение (9) берется с весом θ:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t}[\phi\left(\xi_o S_o + \xi_g S_g + \theta\xi_w S_w\right)] - div\left[\xi_o k k_{ro}\mu_o^{-1}\left(grad\ P + \rho_o g\, grad\, D\right) + \right.\\ &+\xi_g k k_{rg}\mu_g^{-1}\left(grad(P - P_{cgo}) + \rho_g g\ grad\, D\right) + \\ &\left.+\theta\xi_w k k_{rw}\mu_w^{-1}\left(grad(P - P_{cwo}) + \rho_w g\ grad\ D\right)\right] - q_o - q_g - \theta\, q_w = 0.\end{aligned} \tag{12}$$

Используется неявная разностная схема относительно давления на новом временном слое. Поскольку получающиеся уравнения нелинейны, применяется линеаризация по Ньютону; производными по мольным концентрациям при этом пренебрегаем.

Затем по явной схеме для уравнения (10) определяются мольные плотности компонентов, а следовательно, и их мольные доли z_i. Потом с помощью методов расчета фазовых равновесий углеводородная смесь при известных P, T, z_i расщепляется на нефтяную и газовую фазы и определяются x_i, y_i , L и V. С применением уравнений (2) и (11) последовательно определяются насыщенности S_w, S_o и S_g.

Система дифференциальных уравнений и ограничений, описывающих изотермическую композиционную модель фильтрации нефти, газа и воды, решается при заданных начальных и граничных условиях.

Применение аппарата уравнений состояния для многокомпонентной смеси позволяет получить внутренне согласованные равновесные составы и плотности фаз. Наиболее широко в нефтегазовой отрасли применяются уравнения состояния Пенга–Робинсона, Редлиха–Квонга, Соаве–Редлиха–Квонга. Эти уравнения при моделировании применяют в обобщенной форме с помощью уравнения Мартина:

$$Z^3 + E_2 Z^2 + E_1 Z + E_0 = 0. \tag{13}$$

$$\xi_\alpha = \frac{P}{Z_\alpha RT}, \quad \alpha = o, g. \tag{14}$$

$$f_i^o(P, T, x_1, x_2, \dots x_{Nc}) - f_i^g(P, T, y_1, y_2, \dots y_{Nc}) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N_c. \tag{15}$$

$$x_i = \frac{z_i}{1 + (K_i - 1)\, V}, \quad y_i = \frac{K_i z_i}{1 + (K_i - 1)\, V}, \quad K_i = \frac{y_i}{x_i}, \quad i = 1, 2, \dots N_c. \tag{16}$$

$$g\,(V) = \sum_{i=1}^{N_c} (y_i - x_i) = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i\,(K_i - 1)}{1 + V\,(K_i - 1)} = 0. \tag{17}$$

Решение уравнений (15) относительно равновесных составов жидкости и газа можно реализовать следующим итерационным способом. Начальное приближение для констант равновесия K_i берётся с предыдущего шага по времени. Затем при известных z_i на новом временном слое решается уравнение (17) относительно мольной доли газа V. Мольные доли компонентов в жидкой и газовой фазах определяются по соотношениям (16). Если найденные значения не удовлетворяют уравнениям равновесия (15), то есть, если не выполняется с необходимой точностью условие:

$$\sum_{i=1}^{N_c} \left(\frac{f_i^o}{f_i^g} - 1\right)^2 < \varepsilon, \tag{18}$$

то с использованием метода последовательной подстановки производится новая оценка констант равновесия:

$$K_i^{l+1} = K_i^l \, \frac{f_i^o}{f_i^g}, \; i = 1, 2, \dots, N_c, \tag{19}$$

где l — номер итерации. Итерационный процесс продолжается с новым решением уравнения парожидкостного уравнения (17). И так далее, до достижения условия (18).

Возможны случаи, когда решение достигается при $V < 0$ или $V > 1$. Это означает, что пластовая углеводородная система находится в однофазном состоянии, жидком или газообразном, соответственно. Найденные мольные доли компонентов отвечают составам равновесных жидкости и газа, для которых выполняется условие материального баланса: $z_i = x_i L + y_i V$, $i = 1, 2, \dots, N_c$, $L = 1 - V$.

Бывают случаи, когда в процессе поиска решения системы уравнений равновесия, соответствующего двухфазному состоянию смеси ($0 < V < 1$), значение V на итерациях становится больше единицы или меньше нуля. Это, в частности, может происходить из-за грубости начального приближения коэффициентов распределения, входящих в уравнение (17). Часто такая ситуация возникает при расчете фазовых равновесий вблизи точек кипения или точек росы. Метод последовательной подстановки может использоваться в качестве метода, обеспечивающего попадание приближения в близкую окрестность решения. Далее эффективнее использовать итерационный метод Ньютона–Рафсона с минимумом переменных с более быстрой, квадратичной сходимостью [1, 3].

2 Примеры расчетов вытеснения нефти газом

Описанный выше подход к решению задач многокомпонентной многофазной изотермической фильтрации реализован в виде численной трехмерной модели и программы на языке Fortran-DVMH.

Для сравнительной оценки затрат времени выполнениязличных фрагментов программы рассмотрены два варианта, соответствующие разработке нефтяной залежи системой добывающих и нагнетательных скважин (пятиточечная система с плотностью 50 га/скв) при закачке в пласт сухого и жирного газа.

В исходном состоянии пластовые флюиды представлены «связанной» водой (вода неподвижна, в фильтрации не участвует) и нефтью, которая описывается девятикомпонентной системой, представленной индивидуальными компонентами, начиная с метана (CH4), этана (C2H6) и т.д., и кончая псевдокомпонентами, соответствующими наиболее тяжелым фракциям нефти (C15, C20). Составы нефти и газов (сухого и жирного) представлены в таблице 1. Варианты с закачкой газа различного состава соответствуют значительно отличающимся друг от друга процессам вытеснения нефти газом.

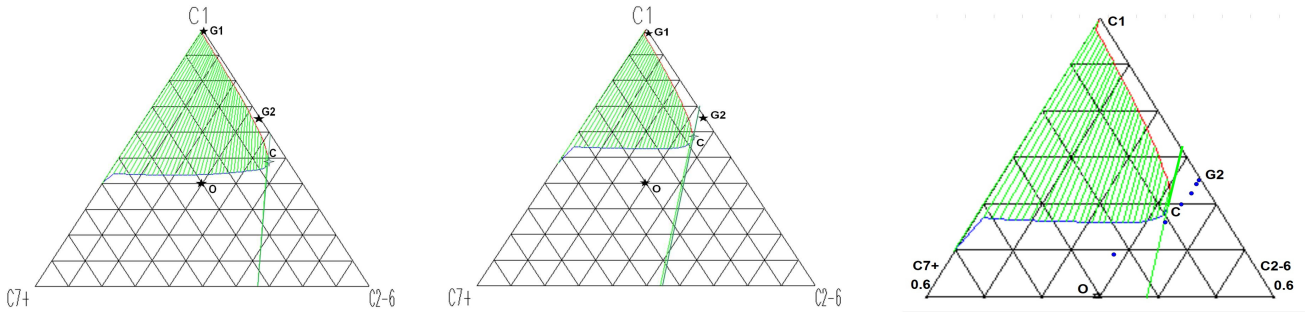
Таблица 1:

М.доля	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C10	C15	C20
O	0,4000	0,0800	0,0700	0,0450	0,0250	0,0750	0,1050	0,1000	0,1000
G1	0,9992	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
G2	0,6500	0,1250	0,1100	0,0650	0,0345	0,0140	0,0005	0,0005	0,0005

Вариант с закачкой сухого газа характеризуется формированием в окрестности нагнетательных скважин двухфазной области совместного течения нефти и газа все более расширяющейся по мере увеличения объема закачанного газа. При этом газ в пласте будет значительно различаться по составу: он близок к составу закачиваемого газа вблизи нагнетательных скважин и в значительной степени обогащен промежуточными фракциями вблизи фронта вытеснения.

В случае закачки жирного газа происходит конденсация промежуточных компонентов в нефть, что создает возможность ее смесимости с газом, закачиваемым через нагнетательные скважины. То есть, формируются составы смеси, отвечающие однофазному, закритическому состоянию флюида. Вблизи к этой области жидкая и газовая фазы пластового флюида сближаются по составу и физическим свойствам (плотность, вязкость), снижается величина поверхностного натяжения между двумя фазами, меняется характер вытеснения нефти газом (меняется вид кривых относительных фазовых проницаемостей и капиллярного давления, снижается величина остаточной нефтенасыщенности при вытеснении нефти газом).

Различный характер вытеснения нефти газами различного состава может быть проиллюстрирован с помощью треугольных диаграмм, на которых девятикомпонентные составы приближенно представлены трехкомпонентными, где интегрированы легкие (C1), промежуточные (C2–C6) и тяжелые (C7+) компоненты. На диаграммах для пластовой температуры T= 98°C представлены области двухфазного состояния пластовой системы для трех величин пластового давления: начального (P=244 атм, рис. 1а) и двух других значений — P=375 атм (рис. 1б) и P=385 атм (рис. 1в), более близких к давлению нагнетания газа (P=400 атм). На диаграммах нанесены также составы сухого (G1) и жирного (G2) газов, начальный состав пластовой нефти (O) и критические точки C. Линии, отделяющие области двухфазного и однофазного состояния флюидов, соответствуют точкам кипения и точкам росы при заданных температуре и давлении; они сходятся в критической точке C. Нанесены также отрезки прямых линий, соединяющие равновесные составы жидкой и газовой фазы (коноды). Проведены касательные прямые в критической точке, соответствующие предельным положениям конод при их приближении к критической точке.



а) б) в)

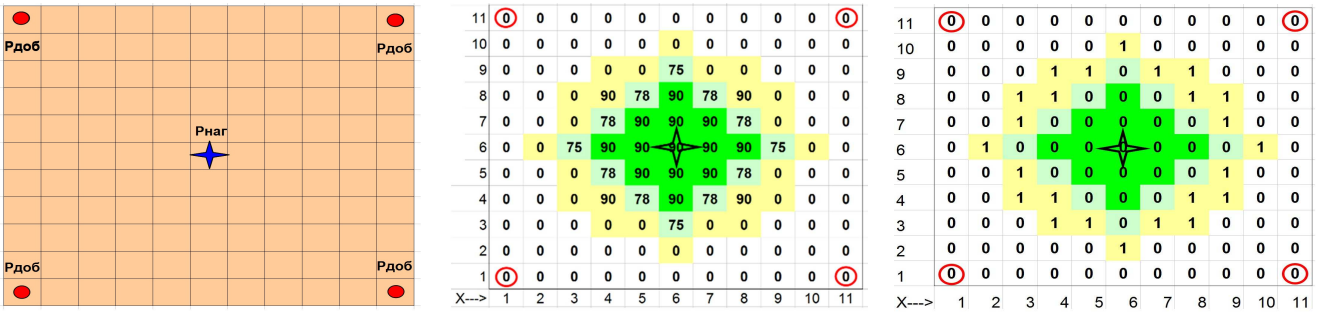
Рис. 1: Фазовые диаграммы при T=98°C, P=244 атм (а), 350 атм (б) и 385 атм (в).

Расчетные варианты для различных составов нагнетаемого газа характеризуются различным положением точек G1, G2 и O по отношению к касательной, разделяющей докритическую и закритическую области. Для сухого газа точки G1 и O лежат в докритической области по одну сторону от касательной во всем диапазоне пластовых давлений. Для жирного газа точки G2 и O при высоких давлениях лежат по разные стороны от касательной и для некоторых смесей нагнетаемого газа и пластовой нефти жидкая фаза, остающаяся за фронтом вытеснения может смешиваться с набегающим газом, оставаясь в однофазном (закритическом) состоянии.

В вычислительном плане различие в составах нагнетаемого газа приводит к разным логическим схемам: закачка сухого газа сопровождается образованием двухфазной области и в расчете фазовых равновесий составы фаз на прошлом временном слое являются хорошим начальным приближением для процедуры определения составов на новом временном слое; при закачке жирного газа возможно попадание составов в закритическую область. Эту ситуацию нужно идентифицировать, сохраняя при этом «хорошее» приближение для дальнейшего его использования при возможном возвращении в докритическую область (при соответствующем изменении состава смеси и/или давления).

Параметры залежи: толщина пласта — 10 м, абсолютная проницаемость — 10,4 мД, пористость — 0,09. Расстояние между нагнетательными и добывающими скважинами (при квадратной сетке разбуривания) — 707 м, шаг разностной сетки по X и Y — 100 м, шаги по Z — 1 м, 4*2 м, 1 м (рис. 2а). Начальное давление в пласте, а в дальнейшем и забойное давление на добывающих скважинах — 244 атм, давление на забое нагнетательных скажин — 400 атм. Начальная водонасыщенность в пласте соответствует неподвижной воде и составляет 10%.

На рис. 2б,в на элементах симметрии показаны распределения газонасыщенности и зон докритического (0) и закритического (1) состояния углеводородной системы на t=6 лет при закачке в пласт жирного газа.



а) б) в)

Рис. 2: Элемент симметрии 5-точечной системы разработки. Распределения газонасыщенности (%) и зон докритического (0) и закритического (1) состояния углеводородной системы на t=6 лет.

Динамика пластового давления и нефтенасыщенности отслеживается с помощью профилей, построенных по значениям в блоках сетки, взятых по диагонали от добывающей скважины к нагнетательной (рис. 3).

Изменение концентраций интегрированных компонентов C1, C2–C6 и C7+ показано на рис. 4. Траекторию, которую описывает состав смеси в процессе закачки жирного газа в блоках близких к нагнетательной скважине (блоки (5,5), (7,7), (5,7), (7,5)), можно проследить также на треугольной диаграмме рис. 1в). Она представлена последовательностью синих точек, идущих от состава начальной нефти (точка O) к составу нагнетаемого газа (точка G2).

3 Разработка параллельной версии программы

Распараллеливание программы в модели DVMH можно разделить на следующие этапы:

а) Распределение данных (массивов) и вычислений (параллельных циклов).

б) Определение и спецификация удаленных данных (данные, которые вычисляются на одном процессоре, а используются на других).

в) Определение вычислительных регионов (последовательности операторов, циклов) для выполнения на ускорителях.

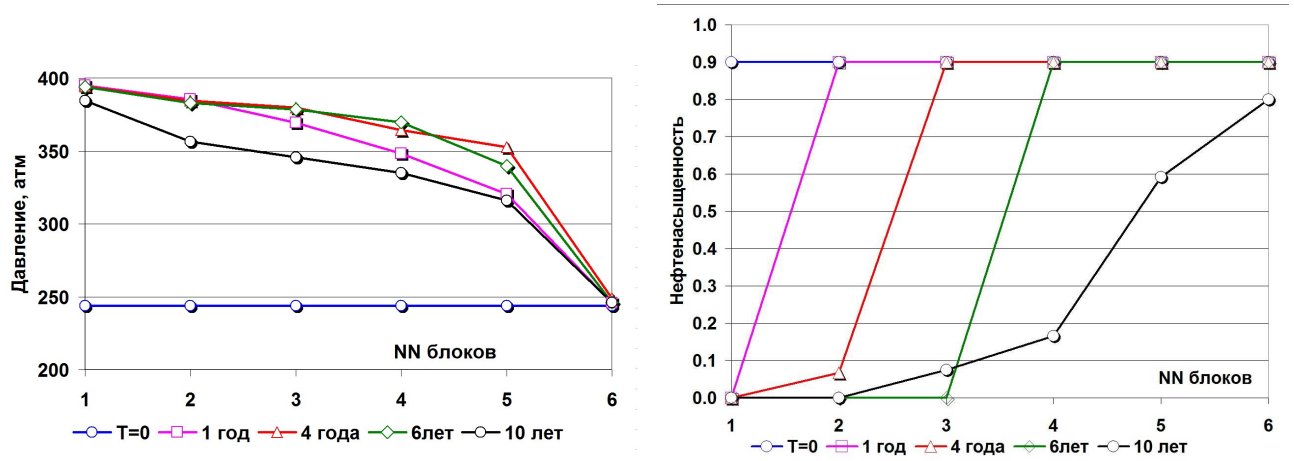


Рис. 3: Распределение давления и нефтенасыщенности в блоках сетки

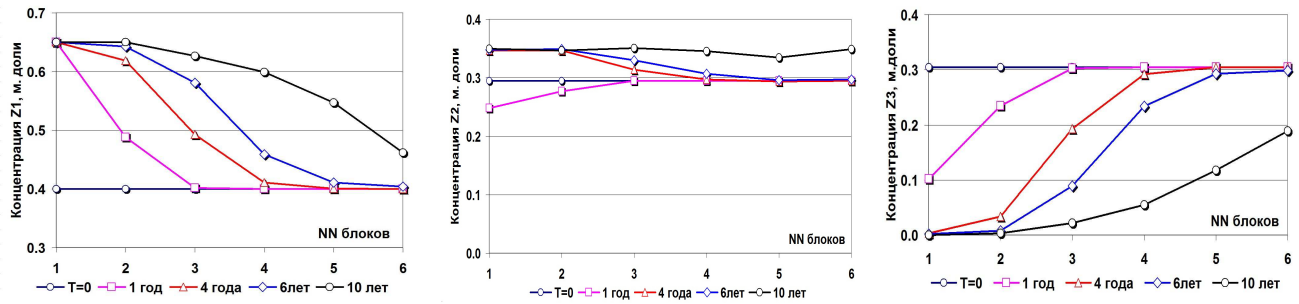


Рис. 4: Распределение концентраций в блоках сетки

г) Управление перемещением данных между памятью ЦПУ и памятями ускорителей.

Основная сложность разработки параллельной программы для кластера — необходимость принятия глобальных решений по распределению данных и вычислений с учетом свойств всей программы, а затем выполнения кропотливой работы по модификации программы и ее отладке. Большой объем программного кода, многомодульность, многофункциональность затрудняет принятие решений по согласованному распределению данных и вычислений.

Для решения данной проблемы использовался метод инкрементального, или частичного распараллеливания. Идея этого метода заключается в том, что распараллеливанию подвергается не вся программа целиком, а ее части (области распараллеливания) — в них заводятся дополнительные экземпляры требуемых данных, производится распределение этих данных и соответствующих вычислений. Данные области строятся на основе значений времени, полученных с помощью профилирования последовательной программы.

Для взаимодействия с теми частями программы, которые не подвергались распараллеливанию, используются операции копирования исходных (нераспределенных) данных в дополнительные (распределенные) данные и обратно. Конечно, операции копирования могут снизить или вообще ликвидировать эффект от распараллеливания. Кроме того, до полного распараллеливания (пока не все массивы программы будут распределены) программе будет требоваться память и для распределенных, и для нераспределенных массивов, что может ограничивать размер решаемой задачи.

К достоинствам инкрементального распараллеливания можно отнести:

а) Возможность распараллелить не всю программу, а ее времяемкие фрагменты, упрощает работу программиста, так как существенно сокращается объем кода программы для анализа и распараллеливания.

б) Отказ от распараллеливания сложных фрагментов программы позволяет с большей вероятностью найти хорошие решения для выделенных областей распараллеливания.

в) Найденные решения могут быть использованы в качестве подсказки при распараллеливании других частей программы на следующих этапах.

Для более точной оценки затрат времени на выполнение отдельных блоков программы в расчетной модели элемент пятиточечной системы повторен многократно по направлениям X и Y; общий размер модели составляет 261x261x6=408 726 сеточных блоков, число добывающих скважин — 729, нагнетательных — 676. Скважины вступают в работу одновременно с соответствующими условиями управления. В заданных условиях решения обладают симметрией, что дает возможность контролировать правильность и точность расчетов при выборе метода решения СЛАУ и при задании параметров, определяющих точность расчета фазовых равновесий.

На рис. 5 показано время выполнения (в секундах) различных процедур программы для варианта расчета с закачкой жирного газа. Данные значения были получены на суперкомпьютере К-100 (ИПМ) с использованием анализатора производительности, который входит в состав DVM-системы. Если не учитывать процедуры, в которых выполняется ввод/вывод (REMAPI и REMAPR), то основное время занимают процедуры COMPOZ, SXYN, SXYDEF, LSOR. Эти процедуры и были распараллелены на первом этапе.

На рис. 6 показано время выполнения (в секундах) частично распараллеленной программы на суперкомпьютере К-100 при использовании различного числа вычислительных узлов для варианта расчета с закачкой жирного газа.

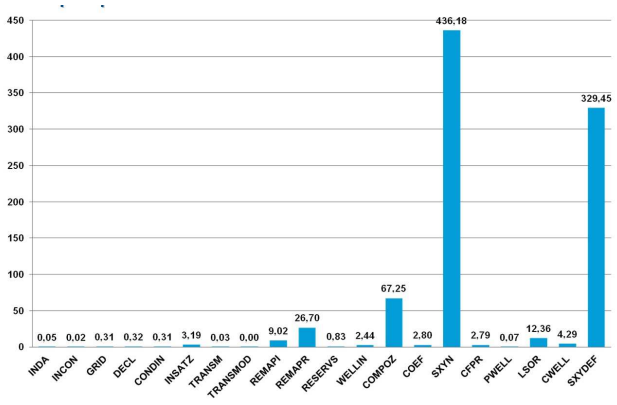


Рис. 5: Время выполнения различных процедур программы.

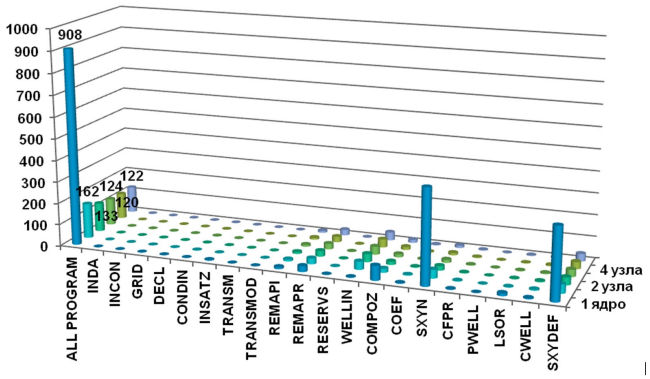


Рис. 6: Время выполнения частично распараллеленной программы на К-100.

При использовании 4-х вычислительных узлов К-100 программа ускоряется в 7,5 раз по сравнению с выполнением программы на одном ядре (время счета сокращается с 908 до 122 секунд). Дальнейшее увеличение числа используемых узлов приводит к замедлению программы. Основная причина — рост накладных расходов на копирование данных из распределенных массивов в исходные нераспределенные массивы, которое выполняется после завершения выполнения параллельной версии процедуры. Избавиться от операций копирования позволяет лишь полное распараллеливание программы. Найденные при распараллеливании основных процедур решения по распределению данных были использованы при распараллеливании других частей программы.

Полное распараллеливание программы позволяет запускать ее в различных режимах. Режим работы DVMH-программы, количество используемых нитей, графических процессоров задается при помощи переменных окружения и не требует перекомпиляции программы. На рис. 7 показано время выполнения 100 временных шагов для программы в режиме MPI/OpenMP на суперкомпьютерах MVS-10P (МСЦ), К-100 и Ломоносов (МГУ) при использовании от 1 до 8 вычислительных узлов для варианта расчета с закачкой жирного газа.

На каждом узле запускался 1 или 2 MPI-процесса, каждый из которых создавал 8 (для MVS-10P), 6 (для К-100) или 4 OpenMP-нити. Всего для расчетов использовалось до 128 ядер ЦПУ. При увеличении в 16 раз количества используемых ядер расчет ускоряется в 10–13 раз.

На рис. 8 показано время выполнения полного расчета программы на суперкомпьютере К-10 (ИПМ) при использовании графических ускорителей. Синим цветом отмечено время, полученное при использовании

только ядер ЦПУ, желтым – графических ускорителей, зеленым – при совместном использовании ядер ЦПУ и ускорителей.

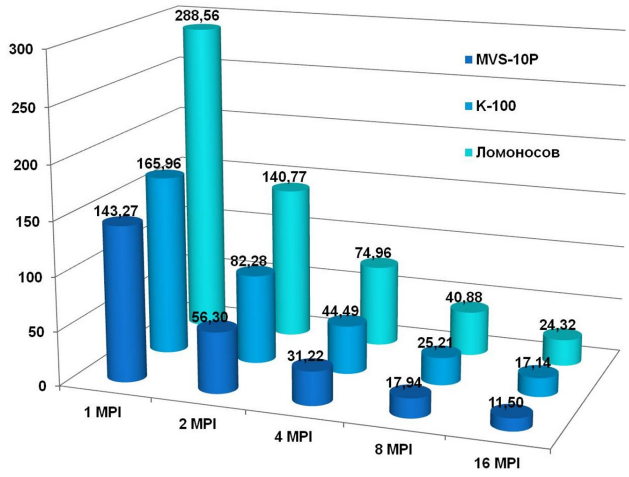


Рис. 7: Время выполнения 100 временных шагов для параллельной программы на разном числе узлов.

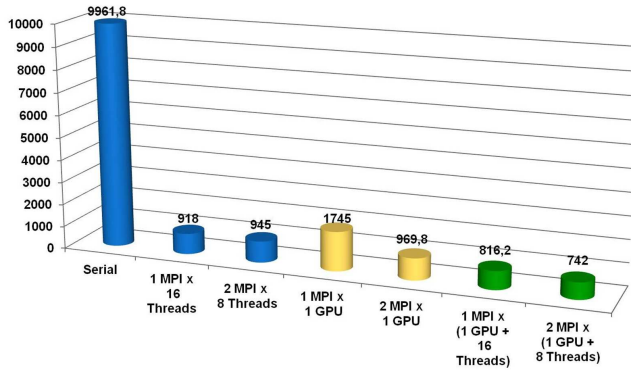


Рис. 8: Время выполнения программы в различных режимах на суперкомпьютере K-10.

Использование одного графического ускорителя позволяет ускорить выполнение программы в 4,6–5,7 раз по сравнению с выполнением на одном ядре. Но при этом программа выполняется медленнее чем, при использовании всех ядер ЦПУ узла. Основная причина — не удается сбалансировать нагрузку нитей (вычисления в различных точках сетки, вблизи которых находятся добывающие, нагнетательные скважины, существенно отличаются). Получить ускорение за счет использования графических ускорителей удается за счет совмещения вычислений на ЦПУ и ГПУ. В таком режиме программа ускоряется с 11698 секунд до 845 секунд на K-100; с 9961,8 секунд до 742 секунд на K-10. Таким образом, при использовании всех вычислительных устройств одного узла ускорение выполнения программы составляет 13,84 раза для K-100 и 13,42 раза для K-10 по сравнению с выполнением программы на одном ядре.

Заключение

С использованием DVM-системы разработана параллельная программа для трехмерного моделирования многокомпонентной многофазной фильтрации при разработке месторождений нефти и газа. Проведены расчеты вариантов вытеснения нефти с помощью закачки в пласт сухого и жирного газа. Иллюстрируютя результаты расчетов. Показана надежность и эффективность вычислительного алгоритма в расчетах процесса вытеснения нефти с образованием зон со смесимостью флюидов. DVMH-модель позволила создать эффективную параллельную программу для гетерогенных вычислительных кластеров, в узлах которых в качестве вычислительных устройств наряду с универсальными многоядерными процессорами могут использоваться ускорители (графические процессоры или сопроцессоры Intel Xeon Phi). При этом отображенные на узел вычисления могут автоматически распределяться между вычислительными устройствами узла с учетом их производительности.

Список литературы

[1] Королев А.В. Моделирование фазовых равновесий многокомпонентных систем с использованием уравнений состояния. Сб. трудов ВНИИ №87, 1984, с. 78–87.

[2] Бахтин В.А., Клинов М.С., Крюков В.А. и др. Расширение DVM-модели параллельного программирования для кластеров с гетерогенными узлами // Вестник Южно-Уральского университета, Серия «Математическое моделирование и программирование», Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2012, №18 (277), Выпуск 12, с. 82–92.

[3] Бахтин В.А., Королёв А.В., Поддерюгина Н.В. Создание параллельной версии программы для моделирования многокомпонентной фильтрации при разработке месторождений нефти и газа с использованием DVM-системы. Доклад на XVI международной конференции «Супервычисления и математическое моделирование», 3–7 октября 2016 г. в г. Сарове, Тезисы докладов, с. 27–28.

Александр Васильевич Королёв — к.т.н., ст. научн. сотр. Научно-исследовательского института системных исследований РАН;
e-mail: Alexandre.Korolev@mail.ru;
Владимир Александрович Бахтин — к.ф.-м.н., зав. сектором Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН;
e-mail: Bakhtin@Keldysh.ru;
Поддерюгина Наталия Викторовна — к.ф.-м.н., ст. научн.сотр. Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН;
e-mail: Konov@Keldysh.ru.
Дата поступления — 26 мая 2017 г.

АЛГОРИТМЫ РАСЩЕПЛЕНИЯ В МЕТОДЕ КОНЕЧНЫХ ОБЪЕМОВ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ — СТОКСА

В. М. Ковеня

Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.688

Для численного решения уравнений Эйлера и Навье — Стокса, записанных в интегральной форме, предложен класс неявных конечно-объемных алгоритмов предиктор-корректор, основанных на расщеплении уравнений на этапе предиктора. Возможность введения различных форм расщепления (по физическим процессам или пространственным направлениям) позволила построить класс экономичных алгоритмов, сведя решение исходной системы уравнений к независимому решению отдельных уравнений на дробных шагах и обеспечить запас устойчивости алгоритма в целом. Построенные схемы консервативны, обладают необходимой точностью, экономичны по числу операций на расчетную ячейку и допускают распараллеливание вычислений при их реализации на многопроцессорных вычислительных системах. Проведенные расчеты решения различных задач подтвердили теоретические оценки эффективности алгоритмов.

Ключевые слова: уравнения Навье — Стокса, метод конечных объемов, сверхзвуковые течения, ударные волны и скачки уплотнения.

Введение

Уравнения Навье — Стокса вязкого сжимаемого теплопроводного газа являются наиболее общей моделью при решении различных классов задач аэромеханики. Их решения характеризуется наличием областей больших градиентов, пограничных слоев и висячих скачков, отрывных зон и т. д., что накладывает жесткие требования на применяемые численные алгоритмы. Поэтому задача построения экономичных численных алгоритмов решения уравнений Навье — Стокса является актуальной и сегодня. Эти алгоритмы должны обладать необходимой точностью, иметь достаточный запас устойчивости, удовлетворять свойствам консервативности и другим требованиям. Важным свойством численного метода является его экономичность, понимаемая как минимизация числа арифметических операций при решении задач с заданной точностью и возможность его адаптации на многопроцессорных вычислительных системах. Некоторые подходы построения конечно-разностных и конечно-объемных алгоритмов приведены, например, в [1, 2, 3, 4, ?]. В последние десятилетия часто используется метод конечных объемов (см. [4, ?]), более удобный при решении многомерных задач в сложных, в том числе в многосвязных областях. В нем аппроксимация уравнений строится для каждой расчетной ячейки, их вид и формы легче адаптируются к границам подобластей.

Известно, что явные алгоритмы более просты в реализации, чем неявные, хотя они не являются экономичными в силу жестких ограничений на соотношение временного и пространственных шагов сетки [2, 3]. Неявные схемы свободны от этих ограничений или они значительно слабее, но при решении многомерных задач возникает необходимость обращения матриц большой размерности. Для построения эффективных алгоритмов широко используется методы расщепления и приближенной факторизации, позволяющие свести решение исходных уравнений к решению их одномерных аналогов (см. [2, 3, 5, 6]). В данной предлагается алгоритм типа предиктор-корректор при аппроксимации уравнений Эйлера и Навье — Стокса, записанных в интегральной форме, методом конечных объемов. На этапе предиктора могут вводиться различные формы расщепления, что позволяет свести решение системы расщепленных уравнений к решению отдельных уравнений и обеспечить запас устойчивости алгоритма в целом, а на этапе корректора аппроксимировать исходные уравнения в консервативной форме. Среди рассмотренных форм расщепления могут быть выбраны

те из них, которые обеспечивают максимальную устойчивость схем при минимальном влиянии расщепления на ее свойства. В отличие от классических неявных схем расщепления по направлениям, реализуемых векторными прогонками или итерациями, этот подход позволяет построить более экономичные алгоритмы по числу операций на отдельную ячейку, сведя их реализацию к скалярным прогонкам или схемам бегущего счета, а по скорости сходимости к стационарному решению он приближается к не факторизованным схемам. Получаемые схемы консервативны, что позволяет использовать их при решении стационарных и нестационарных задач, и обладают вторым (или более высоким) порядком аппроксимации. Отметим, что в целях повышения устойчивости алгоритмов порядок аппроксимации может быть различным на этапе предиктора и корректора. Предложенные алгоритмы были апробированы на решении ряда задач: о регулярном и нерегулярном отражении скачков в угловых конфигурациях и течении в канале (см. [7]).

1 Исходные уравнения. Расщепление уравнений по физическим процессам

Рассмотрим систему уравнения Навье — Стокса сжимаемого теплопроводного газа в интегральной форме в декартовых координатах

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_{\mathbf{V}} \mathbf{U}d\mathbf{V} + \int\limits_{\mathbf{S}} \mathbf{W}\mathbf{n}d\mathbf{S} = 0, \tag{1}$$

где $\mathbf{V}$ — замкнутая область, $S = \partial\mathbf{V}$, $\mathbf{n}$ — его поверхность и нормаль к ней, $\mathbf{U} = (\rho, \rho \mathrm{v}_1, \rho \mathrm{v}_2, \rho \mathrm{v}_3, E)^T$, $\mathbf{W} = (\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, \mathbf{W}_3)$ — вектор искомых функций и матрица потоков, состоящая из трех векторов-столбцов $\mathbf{W}_m = (\rho v_m,\ \rho v_1 v_m + P_1^m,\ \rho v_2 v_m + P_2^m,\ \rho v_3 v_m + P_3^m,\ v_m(E+p) - Q_m)^T$ $(m = 1,2,3)$, $P_l^m = \delta_l^m p - \sigma_l^m$, $E = \rho(e + v^2/2)$, $\sigma_j^i = \mu(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{\partial v_i}{\partial x_j}) - 2\delta_j^i(\mu/3)\operatorname{div} v$, $Q_j = \sum\limits_{l=1}^{3} v_l\sigma_j^l + \kappa\frac{\partial T}{\partial x_j}$, μ, κ — коэффициенты вязкости и теплопроводности [3]. Для замыкания системы уравнений (1) заданы уравнения состояния $p = p(\rho, e)$, $e = e(T)$. При $\kappa_0 = \mu = 0$ уравнения (1) переходят в уравнения Эйлера. Система уравнений (1) справедлива как для всей расчетной области, так и для отдельной её ячейки (рис. 1).

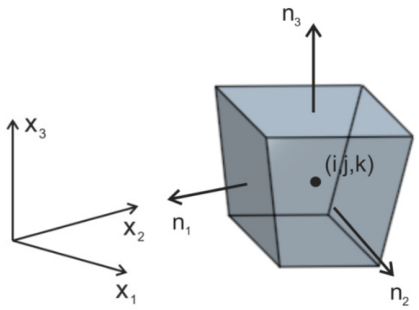


Рис. 1: Расчетная ячейка

Так как грани ячейки могут не совпадать с осями координат, то вводится локальная невырожденная система координат

$$q_l = q_l(x_m) \quad l, m = 1, 2, 3,$$

отображающая ячейку в единичный квадрат. Тогда $\frac{\partial}{\partial x_l} = \sum\limits_{m=1}^{3} z_l^m \frac{\partial}{\partial q_m}$, где $z_l^m = \frac{\partial q_l}{\partial x_m}$, и уравнения (1) сохраняют прежний вид с заменой σ_j^i, Q_j на их значения в новых координатах $\overline{\sigma}_j^i$, $\overline{Q}_m$. Вводя $S_m = \mathbf{S}n_m$, представим систему уравнений (1) для каждой ячейки в виде

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_{\omega}\mathbf{U}d\omega+\oint\limits_{S}\overline{\mathbf{W}}\mathbf{n}dS=0,\text{ где }\overline{\mathbf{W}}\cdot S\mathbf{n}=\overline{\mathbf{W}}\mathbf{S}=\begin{pmatrix}\rho V\\ \rho v_1V-\sigma_1+pS_1\\ \rho v_1V-\sigma_2+pS_2\\ \rho v_1V-\sigma_3+pS_3\\ (E+p)V-Q\end{pmatrix},\quad\begin{matrix}\sigma_l=\sum\limits_{m=1}^{3}\overline{\sigma}_m^lS_m\\ Q=\sum\limits_{m=1}^{3}\overline{Q}_mS_m\\ V=\sum\limits_{m=1}^{3}v_mS_m\end{matrix}\tag{2}$$

Так как операторы σ_l, Q в $\overline{\mathbf{W}}\mathbf{S}$ содержат производные по всем направлениям, то ведение расщепления по пространственным направлениям для уравнений Навье–Стокса не позволяет свести их к решению одномерных задач. Для построения экономичных схем перепишем (2) в виде

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_{\mathbf{V}}\mathbf{U}d\mathbf{V}+\oint\limits_{S}\widetilde{\mathbf{W}}d\mathbf{S}=\mathbf{F},\quad\mathbf{S}\widetilde{\mathbf{W}}=\begin{pmatrix}\rho V\\ \rho v_1V-\widetilde{\sigma}^1+pS_1\\ \rho v_1V-\widetilde{\sigma}^2+pS_2\\ \rho v_1V-\widetilde{\sigma}^3+pS_3\\ (E+p)V-\sigma-q\end{pmatrix}\tag{3}$$

В вектор $\mathbf{S}\widetilde{\mathbf{W}}$ включены часть диссипативных членов в уравнениях движения и энергии, содержащих производные только по нормали к площади граней $\mathbf{S}$ по каждому направлению, а все остальные члены перенесены в вектор $\mathbf{F}=\oint\limits_{\mathbf{S}}\widetilde{\mathbf{W}}d\mathbf{S}-\oint\limits_{\mathbf{S}}\overline{\mathbf{W}}d\mathbf{S}$. Введем расщепление оператора $\mathbf{S}\widetilde{\mathbf{W}}$ по физическим процессам

$$\mathbf{S}\widetilde{\mathbf{W}}=\mathbf{S}\widetilde{\mathbf{W}}_1+\mathbf{S}\widetilde{\mathbf{W}}_2,\quad\mathbf{S}\overline{\mathbf{W}}_1=\begin{pmatrix}0\\ pS_1\\ pS_2\\ pS_3\\ (p+\rho e)V-q\end{pmatrix},\quad\mathbf{S}\overline{\mathbf{W}}_2=\begin{pmatrix}\rho V\\ \rho v_1V-\widetilde{\sigma}_1\\ \rho v_2V-\widetilde{\sigma}_2\\ \rho v_3V-\widetilde{\sigma}_3\\ \rho v^2V/2-\sigma\end{pmatrix},$$

где вектор $\mathbf{S}\overline{\mathbf{W}}_1$ содержит члены с давлением в уравнениях движения, а в уравнении энергии часть газодинамических членов и членов с теплопроводностью q, а вектор $\mathbf{S}\overline{\mathbf{W}}_2$ — конвективные и вязкие члены в уравнениях движения и диссипативные члены σ в уравнении энергии. Тогда уравнения (3) могут быть переписаны в форме

$$\tfrac{\partial}{\partial t}\int\limits_{\mathbf{V}}\mathbf{U}d\mathbf{V}+\sum_{l=1}^{2}\oint\limits_{S}\widetilde{\mathbf{W}_l}d\mathbf{S}=\mathbf{F},\text{ или в виде,}$$

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_{\mathbf{V}}\mathbf{U}d\mathbf{V}+\oint\limits_{S}\widetilde{\mathbf{W}_1}d\mathbf{S}=\mathbf{F},\quad\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_{\mathbf{V}}\mathbf{U}d\mathbf{V}+\oint\limits_{S}\widetilde{\mathbf{W}_2}d\mathbf{S}=0,\tag{4}$$

слабо аппроксимирующим исходные уравнения (см. [3]).

2 Численный алгоритм

Решение уравнений (2), (4) будем искать в расчетной области $\mathbf{V}\times[0,T]$, где $\mathbf{V}$ — регулярная сетка, состоящая из ячеек-параллелепипедов $\omega=\mathbf{V}_{i,j,k}$ (рис. 1). Во временном интервале $[0,T]$ введем сетку с шагом τ. Вводя усреднение искомых функций по ячейке ω по формуле

$$\mathbf{U}=\frac{1}{\omega}\int\limits_{\omega}\mathbf{U}\,d\omega,\quad\mathbf{F}=\frac{1}{\omega}\int\limits_{\omega}\mathbf{F}\,d\omega,\tag{5}$$

аппроксимируем интегральные операторы $\int\limits_{S}\overline{\mathbf{W}}\,d\mathbf{S}$, $\int\limits_{S}\widetilde{\mathbf{W}_l}\,d\mathbf{S}$ симметричными или несимметричными операторами $\overline{\Omega}_h=\sum\limits_{m=1}^{3}\Delta_m^k(\mathbf{S}\overline{\mathbf{W}})$, $\widetilde{\Omega}_h=\sum\limits_{m=1}^{3}\Delta_m^k(\mathbf{S}\widetilde{\mathbf{W}})$ с порядком k. Здесь

$$\Delta^1_m(Sf) = S_{m+1/2}f_m - S_{m-1/2}f_{m-1},\ \ \overline{\Delta}^1_m(Sf)_m = S_{m+1/2}f_{m+1} - S_{m-1/2}f_m \quad \text{при} \quad v_m \geq 0,$$

$$\Delta^1_m(Sf) = S_{m+1/2}f_{m+1} - S_{m-1/2}f_m,\ \ \overline{\Delta}^1_m(Sf)_m = S_{m+1/2}f_m - S_{m-1/2}f_{m-1} \quad \text{при} \quad v_m \geq 0, \tag{6}$$

$$\Delta^2_m(Sf) = [S_{m+1/2}(f_{m+1} + f_m) - S_{m-1/2}(f_m + f_{m-1})]/2$$

Δ^1_m, $\overline{\Delta}^1_m$ — несимметричная (1) или Δ^2_m — симметричная (2) аппроксимация потоков в ячейке с первым или вторым порядком подобно [3]. Производные в операторах $\widetilde{\sigma}_l$, $\widetilde{q}_l$ в (3), (4) аппроксимируем симметричными разностями в центре ячейки.

Для численного решения уравнений (2), (4) рассмотрим конечно-объемную схему предиктор-корректор

$$\omega\frac{\mathbf{U}^{n+1/4} - \mathbf{U}^n}{\tau\alpha} + \sum_{m=1}^{3}\Delta^s_m(\mathbf{S}\widetilde{\mathbf{W}}^{n+1/2}_h) = 0,$$

$$\omega\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\tau} + \sum_{m=1}^{3}\Delta^k_m(\mathbf{S}\overline{\mathbf{W}}^{n+1/2}_h) = 0 \tag{7}$$

Она консервативна, нелинейная на этапе предиктора при $\alpha \neq 0$, и аппроксимирует уравнения Навье — Стокса (2) с порядком $O(\tau^2 + \tau h + h^2)$ при $\alpha = 0.5 + O(\tau)$, где $h = (\omega)^{1/3}$. Для повышения устойчивости алгоритма (7) порядок аппроксимации на этапе предиктора может быть выбран первый ($s = 1$), а на этапе корректора —второй ($k = 2$) или больший. В качестве искомых функций для уравнений газовой динамики удобнее рассматривать плотность, компоненты скорости (или проекции импульсов) и давление, для уравнений Навье — Стокса вместо давления можно выбирать температуру, т.к. именно для этих переменных задаются краевые условия. Построение алгоритма проведем для вектора $\mathbf{f} = (\rho, \rho v_1, \rho v_2, \rho v_3, p)^T$ и для уравнения состояния идеального газа $p = (\gamma - 1)\rho e$ подобно [3, 5]. Для других газодинамических переменных и уравнения состояния более общего вида численный алгоритм строится аналогично. Схема (7) на этапе предиктора нелинейная при $\alpha \neq 0$. Линеаризуем ее по формулам

$$\mathbf{U}^{n+1/2} = \mathbf{U}^n + \mathbf{A}^n(\mathbf{f}^{n+1/2} - \mathbf{f}^n) + O(\tau^2) = \mathbf{A}^n\mathbf{f}^{n+1/2} + O(\tau^2),\ \ \mathbf{A} = \partial\mathbf{U}/\partial\mathbf{f}$$

$$\widetilde{\mathbf{W}}^{n+1/2}_{lh} = \widetilde{\mathbf{W}}^n_{lh} + \widetilde{\mathbf{B}}^n_l(\mathbf{f}^{n+1/2} - \mathbf{f}^n) + O(\tau^2) = \widetilde{\mathbf{B}}^n_l\mathbf{f}^{n+1/2} + O(\tau^2),\ \ \widetilde{\mathbf{B}}_l = \partial\widetilde{\mathbf{W}}_l/\partial\mathbf{f}$$

Так как значения коэффициентов в операторах $\mathbf{A}^n$ и $\overline{\mathbf{B}}^n_l$ в ячейке ω в соответствии с усреднением (5) полагаются постоянными, то $(\mathbf{A}^n)^{-1}\widetilde{\mathbf{B}}^n_l = \mathbf{B}^n_l + O(h^2)$. Тогда с учетом линеаризации вместо (7) для численного решения уравнений Навье — Стокса (2) рассмотрим схему предиктор-корректор

$$\omega\frac{\mathbf{f}^{n+1/2} - \mathbf{f}^n}{\tau\alpha} + \sum_{l=1}^{2}\sum_{m=1}^{3}\Delta^s_m(\mathbf{S}\mathbf{B}^{n+1/2}_{lh}) = 0,$$

$$\omega\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\tau} + \sum_{m=1}^{3}\Delta^k_m(\mathbf{S}\overline{\mathbf{W}}^{n+1/2}_h) = 0, \tag{8}$$

где $\Delta_m\mathbf{S}\widetilde{\mathbf{B}}_{1h} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_3 \\ 0 & bS_1 & bS_2 & bS_3 & V - \Delta_m\eta_4 \end{pmatrix}\Delta_m$, $\Delta_m\mathbf{S}\mathbf{B}_2 = \Delta_m\begin{pmatrix} V & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V - \eta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V - \eta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V - \eta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$,

$$\eta_l = \xi^m_l S_m \Delta_m(1/\rho^n)\ (l = 1, 2, 3), \quad \eta_4 = S_m\kappa_0 z^m_m/\rho^n.$$

Как и (6), она консервативна и аппроксимирует уравнения (1) с тем же порядком, но является линейной.

Замечание 1. Известно, что симметричная аппроксимация операторов Δ^2_m может приводить к осцилляциям решения. Для их устранения введем, подобно [3], оператор сглаживания по каждому пространственному направлению второго порядка малости по формулам

$$\Delta_m g = g_{m+1/2} - g_{m-1/2} - sign(V_m)\cdot\left[\varepsilon_{m+1/2}\Delta_{m+1/2}g_m - \varepsilon_{m-1/2}\Delta_{m-1/2}g_m\right]. \tag{9}$$

Здесь V_m — проекция вектора скорости на нормаль к поверхности грани S_m, а

$$\varepsilon_m = \begin{cases} \dfrac{\left|\left(\Delta_{m+1/2} - \Delta_{m-1/2}\right)\right|}{t} \\ 0, \quad \text{если } t = 0 \end{cases}, \qquad \begin{array}{c} t = \left|\Delta_{m+1/2} g_m\right| + \left|\Delta_{m-1/2} g_m\right| \\ \varepsilon_{m\pm1/2} = \dfrac{\varepsilon_m + \varepsilon_{m\pm1}}{2} \end{array}$$

На этапе предиктора схема (8) может быть реализована матричными прогонками для каждой компоненты вектора $\mathbf{f}$. Этот подход неэкономичен и обычно используются различные итерационные алгоритмы [6], LUфакторизация операторов [6], расщепление уравнений по пространственным направлениям [2, 3, 4] или по физическим процессам и пространственным направлениям (как в [5] при построении конечно-разностных схем). Остановимся на последнем подходе и рассмотрим конечно-объемную схему

$$\begin{gathered} \omega\frac{\mathbf{f}^{n+1/12} - \mathbf{f}^{n}}{\tau\alpha} + \Delta_1^1(\mathbf{S}\mathbf{B}_1^n\mathbf{f}^{n+1/12}) = 0 \quad \ldots \quad \omega\frac{\mathbf{f}^{n+1/4} - \mathbf{f}^{n+3/12}}{\tau\alpha} + \Delta_3^1(\mathbf{S}\mathbf{B}_1^n\mathbf{f}^{n+1/4}) = 0 \\ \omega\frac{\mathbf{f}^{n+4/12} - \mathbf{f}^{n+3/12}}{\tau\alpha} + \Delta_1^1(\mathbf{S}\mathbf{B}_2^n\mathbf{f}^{n+4/12}) = 0 \quad \ldots \quad \omega\frac{\mathbf{f}^{n+1/2} - \mathbf{f}^{n+5/12}}{\tau\alpha} + \Delta_3^1(\mathbf{S}\mathbf{B}_2^n\mathbf{f}^{n+1/2}) = 0 \qquad (10) \\ \frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^{n}}{\tau} + \sum_{m=1}^{3}\Delta_m^2(\mathbf{S}\mathbf{W}_h^{n+1/2}) = 0 \end{gathered}$$

аппроксимирующую исходные уравнения с порядком $O(\tau^2 + \tau h + h^2)$, как и схема (8). Остановимся на её реализации. В силу структуры матрицы $S\mathbf{B}_1$ решение уравнений на первых трех дробных шагах схемы (10) находится скалярной прогонкой для давления, а остальные компоненты вектора $\mathbf{f}$ вычисляются явно. Покажем это, например, для первого дробного шага. На слое $n + 1/12$ уравнения представляются в виде

$$\begin{aligned} &\rho^{n+1/12} = \rho^n \\ &v_l^{n+1/12} = v_l^n - (r/\rho^n)\overline{\Delta}_1 S_l p^{n+1/12} \quad (l = 1, 2, 3) \\ &p^{n+1/12} - p^n + r[\sum_{l=1}^{3} b\Delta_1 S_l v_l^{n+1/12} + (V\Delta_1 - \Delta_1\eta_4\Delta_1(1/\rho^n)p^{n+1/12}] = 0 \end{aligned}$$

где $r = \tau\alpha/\omega$, $b = \gamma p^n$. Исключая скорости $v_l^{n+1/12}$ из уравнения для давления, получим

$$\{1 + r[V\,\Delta_1 - \Delta_1 S_l\eta_4\Delta_1(1/\rho^n) - rb\sum_{l=1}^{3}\overline{\Delta}_1(S_l/\rho^n)\Delta_1 S_l]\}p^{n+1/12} = p^n - rb\sum_{l=1}^{3}\Delta_l S_l v_l^n.$$

Его решение находится трехточечными скалярными прогонками, после чего явно вычисляются новые значения компоненты скорости. Два последующих дробных шагов вычисляются аналогично. Для 4–6-го дробных шагов схемы (10), как следует из вида матрицы $S\mathbf{B}_2^n$, система уравнений

$$\begin{aligned} &[I + r_1\Delta_m V]\, v\rho^{n+(4+m)/12} = \rho^{n+(3+m)/12} \\ &[I + r_1\Delta_m(V - \xi_l^m S_m\Delta_m)]\, v_l^{n+(4+m)/12} = v_l^{n+(3+m)/12} \quad (l = 1, 2, 3;\ m = 1, 2, 3) \\ &p^{n+(4+m)/12} = p^{n+1/4}\ ,\ r_1 = \tau\alpha/(\omega\rho^n). \end{aligned}$$

может быть решена скалярными прогонками на каждом дробном шаге независимо для первых четырех уравнений (при вычислении плотности и компонент скорости), а давление переносится с предыдущего шага. На этапе корректора в схеме (10) новые значения функций на слое $n + 1$ вычисляются по явным формулам. *Таким образом, реализация схемы* (10) *свелась к* $N \times m$ *скалярным прогонкам на этапе предиктора и явному вычислению на этапе корректора, где* N *— число уравнений,* m *— размерность задачи по пространству.* Рассмотренный алгоритм является экономичным по числу операций на узел сетки, обладает свойством консервативности для каждой расчетной ячейки. Для декартовой сетки он подобен разностной схеме с расщеплением по физическим процессам и пространственным направлениям [5] и, как следствие, обладает теми же свойствами — он безусловно устойчив в двумерном случае и условно устойчив в трехмерном. Наиболее эффективным представляется его использование при решении стационарных задач методом установления, когда параметр τ может выбираться лишь из условия наиболее быстрой сходимости. Апробация алгоритма проведена на решении ряда задач (см. [7]).

Заключение

Для численного решения уравнений Эйлера и Навье — Стокса предложены конечно-объемные алгоритмы типа предиктор-корректор с различными формами расщепления операторов. Возможность выбора на этапе предиктора различных форм расщепления и способов реализации алгоритма позволяет в рамках единого подхода рассматривать различные классы схем для численного решения многомерных задач. Предложенный алгоритм является экономичным по числу операций на узел сетки, обладает свойством консервативности и, как показали расчеты, является устойчивым в широком диапазоне параметров сетки.

Список литературы

[1] Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976. 400 с.

[2] Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 3-е изд., 1989.

[3] Ковеня В.М., Яненко Н.Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1981, 304 с.

[4] Vos J.B., Rizzi A., Darrac D., Hirschel E. H., Navier-Stokes solvers in European aircraft design, Progress in Aerospace Sciences, 38, 2002, p.601–697.

[5] Ковеня В.М. Алгоритмы расщепления при решении многомерных задач аэрогидродинамики. Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, 2014, 280 с.

[6] Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978, 614 с.

[7] Ковеня В.М., Бабинцев П.В. Алгоритмы расщепления в методе конечных объемов // Вычислительные технологии. – 2015, Т. 20, N 6. С. 65–84.

Виктор Михайлович Ковеня — д.ф.-м.н., г.н.с. Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: kovenya@ict.nsc.ru.
Дата поступления — 30 апреля 2017 г.

ПРИМЕНЕНИЕ СХЕМЫ КАБАРЕ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ

О. А. Ковыркина[1], В. В. Остапенко[1,2]

[1] *Институт гидродинамики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.63

Для численного решения квазилинейной гиперболической системы законов сохранения предложена модифицированная схема КАБАРЕ, сохраняющая монотонность разностного решения относительно инвариантов линейного приближения аппроксимируемой системы. В качестве конкретного примера рассмотрена аппроксимация системы законов сохранения теории мелкой воды. Приведены тестовые расчеты различных задач о распаде разрыва, иллюстрирующие возможности предлагаемой схемы при расчете разрывных решений с прерывными волнами.

Ключевые слова: гиперболическая система законов сохранения, монотонность схемы КАБАРЕ, теория мелкой воды, прерывные волны.

Введение

Для численного решения гиперболических уравнений была предложена трехслойная по времени и двухточечная по пространству схема Upwind Leapfrog [1], которая имеет второй порядок аппроксимации на гладких решениях, является явной и условно устойчивой при числах Куранта $r \in (0, 1]$. Детальный анализ этой схемы был проведен в работах [2] и [3], в которых с учетом кососимметричности своего пространственного шаблона она была названа схемой КАБАРЕ. Основные достоинства этой схемы связаны с тем, что она задана на компактном пространственном шаблоне, является обратимой по времени и точной при двух различных числах Куранта $r = 0.5, 1$, что наделяет ее уникальными диссипативными и дисперсионными свойствами [3]. Для численного моделирования гидродинамических течений широко применяется двухслойная по времени форма записи схемы КАБАРЕ [4]. Монотонность этой схемы при аппроксимации линейного уравнения переноса в одномерном случае изучалась в [5] и [6], а в двумерном — в [7]. Условия монотонности двухслойной по времени схемы КАБАРЕ, аппроксимирующей скалярный закон сохранения с выпуклым потоком, исследовались в [8] и [9].

В настоящей работе результаты, полученные в [5]–[9], использованы для построения схемы КАБАРЕ, аппроксимирующей квазилинейную гиперболическую систему законов сохранения и обеспечивающую сохранение монотонности разностного решения относительно инвариантов линейного приближения аппроксимируемой системы. В качестве конкретного примера рассмотрена аппроксимация схемой КАБАРЕ системы законов сохранения первого приближения теории мелкой воды. Приведены тестовые расчеты различных задач о распаде разрыва, иллюстрирующие монотонность и высокую точность построенной схемы при расчете разрывных решений с прерывными волнами.

1 Схема КАБАРЕ, аппроксимирующая гиперболическую систему законов сохранения

Рассмотрим задачу Коши для квазилинейной гиперболической системы законов сохранения

$$\boldsymbol{v}_t + \boldsymbol{f}(\boldsymbol{v})_x = 0, \quad \boldsymbol{v}(x, 0) = \tilde{\boldsymbol{v}}(x), \tag{1}$$

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-01-00333).

где $\boldsymbol{v}(x,t)$ — искомая, а $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{v})$ — заданная гладкая вектор-функции, содержащие m компонент. Недивергентная форма записи системы (1) имеет вид

$$\boldsymbol{v}_t + A(\boldsymbol{v})\boldsymbol{v}_x = 0, \quad A(\boldsymbol{v}) = f_{\boldsymbol{v}}(\boldsymbol{v}). \tag{2}$$

Гиперболичность системы (2) означает, что все собственные значения $\lambda_i(\boldsymbol{v})$ матрицы $A(\boldsymbol{v})$ действительны и соответствующие им левые собственные вектора $\boldsymbol{l}^i(\boldsymbol{v})$ образуют базис в пространстве $\mathbb{R}^m$. Будем предполагать, что каждая дифференциальная форма $\boldsymbol{l}^i(\boldsymbol{v})d\boldsymbol{v}$ интегрируема, в силу чего система (2) допускает запись в форме инвариантов

$$\frac{\partial w_i(\boldsymbol{v})}{\partial t} + \lambda_i(\boldsymbol{v})\frac{\partial w_i(\boldsymbol{v})}{\partial x} = 0, \quad i = \overline{1,m}, \tag{3}$$

где вектор инвариантов $\boldsymbol{w} = (w_1, w_2, ..., w_m)$ системы (2) связан с вектором базисных переменных $\boldsymbol{v}$ невырожденным преобразованием $\boldsymbol{w} = W(\boldsymbol{v})$.

Применяя результаты, полученные в [5]–[9], построим модификацию двухслойной по времени схемы КАБАРЕ [4], которая при аппроксимации задачи Коши для гиперболической системы законов сохранения (1) обеспечивает сохранение монотонности разностного решения относительно инвариантов линейного приближения этой системы. Схему КАБАРЕ будем строить на прямоугольной разностной сетке

$$\{x_j, t_n\}: \; x_j = j\Delta, \quad t_{n+1} = t_n + \tau_n, \; t_0 = 0, \tag{4}$$

в которой Δ — постоянный шаг сетки по пространству, а τ_n — шаг сетки по времени, определяемый из условия устойчивости

$$\tau_n = \frac{r\Delta}{\max\limits_{i,j} |(\lambda_i)^n_{j+1/2}|}, \tag{5}$$

где $r \in (0,1)$, $(\lambda_i)^n_{j+1/2} = \lambda_i(\boldsymbol{U}^n_{j+1/2})$. В этой схеме используются потоковые $\boldsymbol{u}^n_j = \boldsymbol{u}(x_j, t_n)$ и консервативные $\boldsymbol{U}^n_{j+1/2} = \boldsymbol{u}(x_{j+1/2}, t_n)$ векторные переменные, заданные соответственно в целых x_j и полуцелых $x_{j+1/2} = x_j + \Delta/2$ пространственных узлах сетки, где $\boldsymbol{u}$ — разностное решение, аппроксимирующее точное решение $\boldsymbol{v}$.

Пусть $\boldsymbol{u}^n_j$, $\boldsymbol{U}^n_{j+1/2}$ — известное численное решение задачи (1) на n-ом временном слое t_n, при $n = 0$ — сеточная аппроксимация начальной функции $\boldsymbol{v}(x)$. Применяя подход, предложенный в [8], численное решение $\boldsymbol{u}^{n+1}_j$, $\boldsymbol{U}^{n+1}_{j+1/2}$ на $(n+1)$-ом временном слое t_{n+1} будем находить по схеме КАБАРЕ в четыре этапа. На первом этапе по разностным уравнениям

$$\frac{\boldsymbol{U}^{n+1/2}_{j+1/2} - \boldsymbol{U}^n_{j+1/2}}{\tau_n/2} + \frac{\boldsymbol{f}^n_{j+1} - \boldsymbol{f}^n_j}{\Delta} = 0, \tag{6}$$

где $\boldsymbol{f}^n_j = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}^n_j)$, вычисляются значения консервативных переменных $\boldsymbol{U}^{n+1/2}_{j+1/2} = \boldsymbol{u}(x_{j+1/2}, t_{n+1/2})$. На втором этапе находятся значения потоков $\boldsymbol{f}^{n+1/2}_j = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}^{n+1/2}_j)$, которые применяются на третьем этапе для определения из разностных уравнений

$$\frac{\boldsymbol{U}^{n+1}_{j+1/2} - \boldsymbol{U}^n_{j+1/2}}{\tau_n} + \frac{\boldsymbol{f}^{n+1/2}_{j+1} - \boldsymbol{f}^{n+1/2}_j}{\Delta} = 0 \tag{7}$$

значений консервативных переменных $\boldsymbol{U}^{n+1}_{j+1/2}$ На четвертом этапе находятся значения потоковых переменных $\boldsymbol{u}^{n+1}_j$.

2 Вычисление потоков на втором этапе и потоковых переменных на четвертом этапе

В начале второго этапа по формулам

$$\boldsymbol{w}^n_j = W\left(\boldsymbol{u}^n_j\right), \quad \boldsymbol{w}^n_{j+1/2} = W\left(\boldsymbol{U}^n_{j+1/2}\right), \quad \boldsymbol{w}^{n+1/2}_{j+1/2} = W\left(\boldsymbol{U}^{n+1/2}_{j+1/2}\right) \tag{8}$$

определяются численные значения вектора инвариантов, которые используются для вычисления компонент этого вектора в целых узлах на временных слоях $(n+1/2)$ и $(n+1)$. Опишем процедуру этого вычисления

для некоторого инварианта w_i, переносимого со скоростью λ_i вдоль характеристик i-го семейства. Для краткости в приводимых ниже формулах индекс i будем опускать. Предварительное значение инварианта $\bar{w}_j^{n+1}$ определяется в зависимости от знаков скоростей характеристик

$$\lambda_{j-1/2}^{n+1/2} = \lambda\left(\boldsymbol{U}_{j-1/2}^{n+1/2}\right), \quad \lambda_{j+1/2}^{n+1/2} = \lambda\left(\boldsymbol{U}_{j+1/2}^{n+1/2}\right)$$

в ячейках, примыкающих к узлу j.

Сначала рассмотрим случай однонаправленных характеристик. При выполнении неравенств

$$\lambda_{j-1/2}^{n+1/2} > 0, \quad \lambda_{j+1/2}^{n+1/2} \geq 0 \tag{9}$$

предварительное значение инварианта $\bar{w}_j^{n+1}$ вычисляется по формуле $\bar{w}_j^{n+1} = 2w_{j-1/2}^{n+1/2} - w_{j-1}^n$, а при выполнении неравенств

$$\lambda_{j-1/2}^{n+1/2} \leq 0, \quad \lambda_{j+1/2}^{n+1/2} < 0, \tag{10}$$

по формуле $\bar{w}_j^{n+1} = 2w_{j+1/2}^{n+1/2} - w_{j+1}^n$, после чего находим $\bar{w}_j^{n+1/2} = \left(w_j^n + \bar{w}_j^{n+1}\right)/2$. При помощи стандартного двухстороннего ограничителя

$$F(u, m, M) = \begin{cases} m, & u \leq m, \\ u, & m \leq u \leq M, \\ M, & u \geq M, \end{cases}$$

значения $\bar{w}_j^{n+1/2}$ с учетом принципа максимума [6] корректируются по формуле

$$w_j^{n+1/2} = F\left(\bar{w}_j^{n+1/2}, m_j^n, M_j^n\right), \tag{11}$$

в которой

$$m_j^n = \min\left(w_{j-1/2}^n, \max(w_j^n, \varphi_{j-1/2}^n)\right), \quad M_j^n = \max\left(w_{j-1/2}^n, \min(w_j^n, \varphi_{j-1/2}^n)\right)$$

при выполнении неравенств (9) и

$$m_j^n = \min\left(w_{j+1/2}^n, \max(w_j^n, \psi_{j+1/2}^n)\right), \quad M_j^n = \max\left(w_{j+1/2}^n, \min(w_j^n, \psi_{j+1/2}^n)\right),$$

при выполнении неравенств (10), где

$$\varphi_{j-1/2}^n = \frac{w_{j-1/2}^n - \left(1 - \mu_{j-1/2}^{n+1/2}\right) w_{j-1}^n}{\mu_{j-1/2}^{n+1/2}}, \quad \psi_{j+1/2}^n = \frac{w_{j+1/2}^n - \left(1 - \mu_{j+1/2}^{n+1/2}\right) w_{j+1}^n}{\mu_{j+1/2}^{n+1/2}}, \quad \mu_{j\pm1/2}^{n+1/2} = \frac{\tau_n}{\Delta}|\lambda_{j\pm1/2}^{n+1/2}|.$$

В случае разнонаправленных расходящихся характеристик

$$\lambda_{j-1/2}^{n+1/2} \leq 0, \quad \lambda_{j+1/2}^{n+1/2} \geq 0, \tag{12}$$

полагаем, что $w_j^{n+1/2} = w_j^n$, а в случае разнонаправленных сходящихся характеристик

$$\lambda_{j-1/2}^{n+1/2} > 0, \quad \lambda_{j+1/2}^{n+1/2} < 0 \tag{13}$$

значение инварианта $w_j^{n+1/2}$ вычисляется по формуле $w_j^{n+1/2} = \left(w_j^n + \bar{w}_j^{n+1}\right)/2$, в которой

$$\bar{w}_j^{n+1} = \frac{\lambda_{j-1/2}^{n+1/2}(w_l)_j^{n+1} + |\lambda_{j+1/2}^{n+1/2}|(w_r)_j^{n+1}}{\lambda_{j-1/2}^{n+1/2} + |\lambda_{j+1/2}^{n+1/2}|}, \tag{14}$$

где

$$(w_l)_j^{n+1} = 2w_{j-1/2}^{n+1/2} - w_{j-1}^n, \quad (w_r)_j^{n+1} = 2w_{j+1/2}^{n+1/2} - w_{j+1}^n.$$

После вычисления вектора инвариантов $\boldsymbol{w}_j^{n+1/2}$ во всех узлах j полуцелого временного слоя, по формулам

$$\boldsymbol{f}_j^{n+1/2} = \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{u}_j^{n+1/2}\right), \quad \boldsymbol{u}_j^{n+1/2} = W^{-1}\left(\boldsymbol{w}_j^{n+1/2}\right), \tag{15}$$

где W^{-1} — оператор, обратный к оператору W, находятся численные значения потоков $\boldsymbol{f}_j^{n+1/2}$, которые на третьем этапе используются в разностном уравнении (7).

На четвертом этапе по формуле $\widetilde{\boldsymbol{w}}_j^{n+1} = 2\boldsymbol{w}_j^{n+1/2} - \boldsymbol{w}_j^n$ находится второе предварительное значение вектора инвариантов на $(n+1)$-ом временном слое. При условии (12) компоненты этого вектора корректируются по формуле $w_j^{n+1} = (w_{j-1/2}^{n+1} + w_{j+1/2}^{n+1})/2$, а при нарушении этого условия, т. е. при выполнении одного из трех условий (9), (10), (13), — по следующей формуле

$$w_j^{n+1} = F\left(\widetilde{w}_j^{n+1}, m_j^{n+1}, M_j^{n+1}\right), \tag{16}$$

в которой

$$m_j^n = \min\left(w_{j-1/2}^{n+1}, w_{j+1/2}^{n+1}\right), \quad M_j^n = \max\left(w_{j-1/2}^{n+1}, w_{j+1/2}^{n+1}\right),$$

где $w_{j-1/2}^{n+1}$ и $w_{j+1/2}^{n+1}$ – соответствующие компоненты векторов

$$\boldsymbol{w}_{j-1/2}^{n+1} = W\left(\boldsymbol{U}_{j-1/2}^{n+1}\right), \quad \boldsymbol{w}_{j+1/2}^{n+1} = W\left(\boldsymbol{U}_{j+1/2}^{n+1}\right).$$

После определения вектора инвариантов $\boldsymbol{w}_j^{n+1}$, по формуле

$$\boldsymbol{u}_j^{n+1} = W^{-1}\left(\boldsymbol{w}_j^{n+1}\right) \tag{17}$$

находится вектор потоковых переменных на $(n+1)$-ом временном слое.

Линейным приближением системы (2) относительно постоянного решения $\boldsymbol{v}_0 = \text{const}$ называется линейная гиперболическая система

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}_1}{\partial t} + A(\boldsymbol{v}_0)\frac{\partial \boldsymbol{v}_1}{\partial x} = 0, \tag{18}$$

получаемая в первом приближении по малому параметру $\varepsilon \ll 1$ при подстановке в систему (2) решения $\boldsymbol{v}(x,t) = \boldsymbol{v}_0 + \varepsilon \boldsymbol{v}_1(x,t)$. При записи в инвариантах $w_i(\boldsymbol{v}_1) = \boldsymbol{l}^i(\boldsymbol{v}_0)\boldsymbol{v}_1$ линейная система (18) представима в виде независимых линейных уравнений переноса

$$\frac{\partial w_i(\boldsymbol{v}_1)}{\partial t} + \lambda_i(\boldsymbol{v}_0)\frac{\partial w_i(\boldsymbol{v}_1)}{\partial x} = 0, \quad i = \overline{1,m}. \tag{19}$$

Если построенная схема КАБАРЕ аппроксимирует линейную гиперболическую систему (18), то входящий в нее численный поток $\boldsymbol{f}_j^n$ является линейной вектор-функцией $\boldsymbol{f}_j^n = A(\boldsymbol{v}_0)(\boldsymbol{v}_1)_j^n$. Умножая с учетом этого векторные разностные уравнения (6) и (7) слева на левый собственный вектор $\boldsymbol{l}$, соответствующий собственному значению λ матрицы $A(\boldsymbol{v}_0)$, получаем линейные разностные уравнения

$$\frac{w_{j+1/2}^{n+1/2} - w_{j+1/2}^n}{\tau_n/2} + \lambda\frac{w_{j+1}^n - w_j^n}{\Delta} = 0, \quad \frac{w_{j+1/2}^{n+1} - w_{j+1/2}^n}{\tau_n} + \lambda\frac{w_{j+1}^{n+1/2} - w_j^{n+1/2}}{\Delta} = 0,$$

аппроксимирующие соответствующее уравнение (19) и описывающие изменение численных значений инварианта $w = \boldsymbol{l}\boldsymbol{v}_1$ на первом и третьем этапах реализации схемы КАБАРЕ. Отсюда с учетом формул (8)–(17) и результатов работы [6] следует сохранение монотонности численных значений инварианта w при переходе с n-го на $(n+1)$-й временной слой. Это означает, что построенная схема КАБАРЕ сохраняет монотонность разностного решения относительно инвариантов линейного приближения аппроксимируемой системы.

3 Система уравнений теории мелкой воды

В качестве конкретной гиперболической системы (1) выберем систему уравнений первого приближения теории мелкой воды, для которой

$$\boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} h \\ q \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{v}) = \begin{pmatrix} q \\ q^2/h + gh^2/2 \end{pmatrix}, \tag{20}$$

где $h(t,x)$ и $q(t,x)$ — глубина и расход жидкости, g — ускорение свободного падения. При записи этой системы в форме инвариантов (3), получаем

$$\lambda_1 = v - c, \quad \lambda_2 = v + c, \quad w_1 = v - 2c, \quad w_2 = v + 2c,$$

где $v = q/h$ — горизонтальная скорость жидкости, $c = \sqrt{gh}$ — скорость распространения малых возмущений. Будем рассматривать для системы (1), (20) задачу Римана

$$\boldsymbol{v}(x,0) = \tilde{\boldsymbol{v}}(x) = \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{v}}_1, & x \le 0, \\ \tilde{\boldsymbol{v}}_0, & x > 0, \end{pmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{v}}_0 = \begin{pmatrix} h_0 \\ q_0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{v}}_1 = \begin{pmatrix} h_1 \\ q_1 \end{pmatrix}, \tag{21}$$

где h_0, q_0 и h_1, q_1 — некоторые постоянные значения глубины и расхода жидкости.

На всех приводимых далее рисунках пунктирной линией показан начальный уровень жидкости $h(x,0)$, а сплошной линией — глубина жидкости $h(x,t)$, получаемая из соответствующего точного решения в некоторый момент времени $t > 0$. Численные расчеты задачи Римана (21) для системы (1), (20) проводились по схеме КАБАРЕ на прямоугольной сетке (4) с пространственным шагом $\Delta = 10$ м, коэффициентом $r = 0.5$ в условии устойчивости Куранта (5) и значением ускорения свободного падения $g = 9.81$ м/с^2. Сеточные начальные данные, аппроксимирующие вектор-функцию (21), задавались по формулам

$$\boldsymbol{u}_j^0 = \tilde{\boldsymbol{v}}(x_j), \quad \boldsymbol{U}_{j+1/2}^0 = \frac{\boldsymbol{u}_j^0 + \boldsymbol{u}_{j+1}^0}{2} \ .$$

Для ячеек разностной сетки, в которых течение жидкости является докритическим

$$|v| < c \quad \Rightarrow \quad \lambda_1 < 0, \quad \lambda_2 > 0, \tag{22}$$

численные значения глубины $h_{j+1/2}^n$ изображены на рисунках кружками, а для ячеек, в которых течение является сверхкритическим

$$v > c \quad \Rightarrow \quad \lambda_1 > 0, \quad \lambda_2 > 0, \tag{23}$$

или

$$v < -c \quad \Rightarrow \quad \lambda_1 < 0, \quad \lambda_2 < 0, \tag{24}$$

эти значения показаны ромбиками.

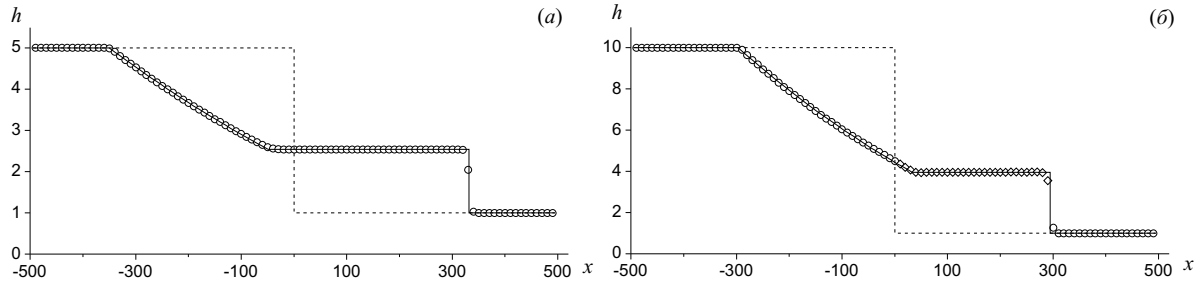


Рис. 1: Задача о разрушении плотины: $h_1 = 5$ м, $t = 50$ с $(а)$, $h_1 = 10$ м, $t = 30$ с $(б)$.

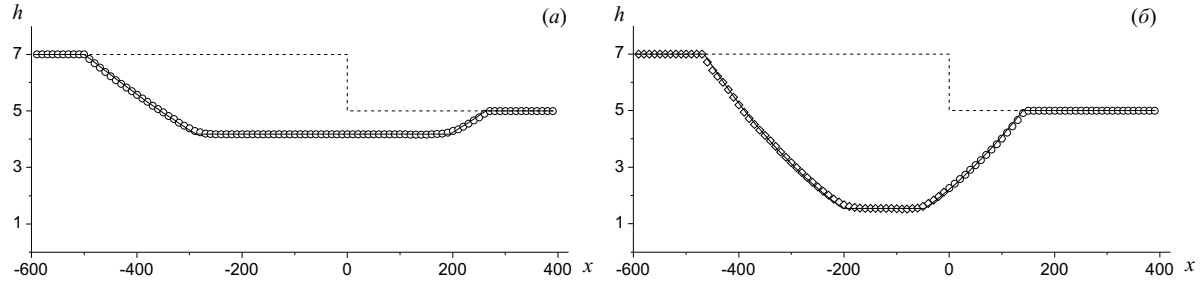


Рис. 2: Задача Римана с двумя волнами понижения: $v_1 = -5$ м/с, $t = 35$ с $(а)$, $v_1 = -15$ м/с, $t = 20$ с $(б)$.

На рис. 1 приведены результаты численного решения задачи о разрушении плотины, в которой начальные данные (21) удовлетворяют условиям $q_0 = v_0 = q_1 = v_1 = 0$, $h_1 > h_0 = 1$ м. В результате разрушения плотины в положительном направлении оси x распространяется ударная волна, которая через область постоянного течения соединяется с центрированной волной понижения. На рис. 1 $(а)$ показаны результаты

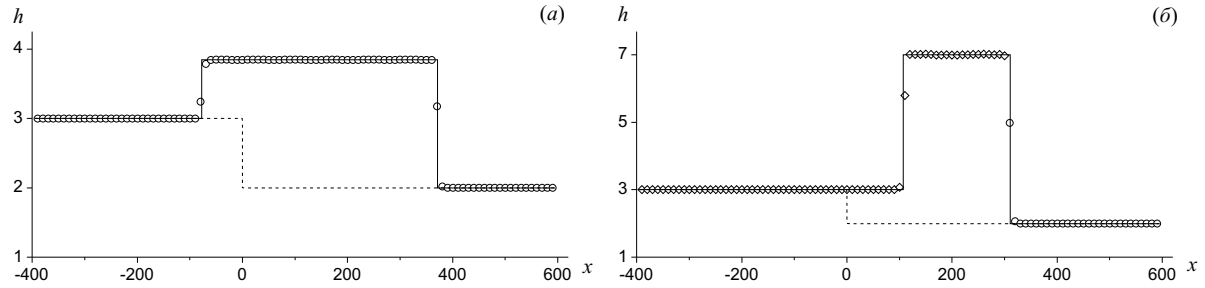


Рис. 3: Задача Римана с двумя ударными волнами: $v_1 = 5$ м/с, $t = 50$ с ($а$), $v_1 = 15$ м/с, $t = 25$ с ($б$).

расчета для начальной глубины $h_1 = 5$ м, когда течение жидкости во всей расчетной области является докритическим (22), а на рис. 1 ($б$) приведены результаты расчёта для $h_1 = 10$ м, когда существует область

$$\Omega_1 = \{(x,t):\ 0 < x < x_1(t),\ t > 0\}$$

сверхкритического течения (23) и двусвязная область

$$\Omega_2 = \{(x,t):\ -a < x < 0,\ x_1(t) < x < a,\ t > 0\}, \quad a = 500 \text{ м},$$

докритического течения (22), где линия $x = x_1(t)$ совпадает с фронтом ударной волны.

На рис. 2 приведены результаты численного решения задачи Римана (21), в которой

$$h_0 = 5 \text{ м}, \quad h_1 = 7 \text{ м}, \quad v_0 = q_0 = 0, \quad v_1 < 0, \quad q_1 < 0.$$

При выполнении неравенств $-2(c_0 + c_1) < v_1 < 2(c_0 - c_1) < 0$, где $c_0 = \sqrt{gh_0} = \sqrt{5g} \approx 7.00$ м/с и $c_1 = \sqrt{gh_1} = \sqrt{7g} \approx 8.29$ м/с, точное решение этой задачи представляет собой две расходящиеся центрированные волны понижения начального уровня жидкости. Результаты расчета для начальной скорости жидкости $v_1 = -5$ м/с приведены на рис. 2 ($а$), а для $v_1 = -15$ м/с — на рис. 2 ($б$).

Для решения, изображенного на рис. 2 ($а$), течение жидкости во всей расчетной области является докритическим (22), а для решения, показанного на рис. 2 ($б$), существует область $\Omega_3 = \{(x,t):\ x < 0,\ t > 0\}$ сверхкритического течения (24) и область $\Omega_4 = \{(x,t):\ x > 0,\ t > 0\}$ докритического течения (22).

На рис. 3 приведены результаты численного решения задачи Римана (21), в которой

$$h_0 = 2 \text{ м}, \quad h_1 = 3 \text{ м}, \quad v_0 = q_0 = 0, \quad v_1 > 0, \quad q_1 > 0.$$

При выполнении неравенства

$$v_1 > (h_1 - h_0)\sqrt{\frac{g(h_0 + h_1)}{2h_0h_1}} \approx 2.02 \text{ м/с}$$

точное решение этой задачи представляет собой две ударные волны.

Решение, показанное на рис. 3 ($а$), получено при начальной скорости $v_1 = 5$ м/с. В этом решении ударные волны после распада разрыва распространяются в разных направлениях и течение является докритическим (22) во всей расчетной области. Решение, приведенное на рис. 3 ($б$), получено при начальной скорости $v_1 = 15$ м/с. В этом решении ударные волны после распада разрыва распространяются в положительном направлении оси x, а расчетная область содержит подобласть

$$\Omega_5 = \{(x,t):\ b < x < x_4(t),\ t > 0\}, \quad b = -400 \text{ м},$$

сверхкритического течения (23) и подобласть

$$\Omega_6 = \{(x,t):\ x_4(t) < x < c,\ t > 0\}, \quad c = 600 \text{ м},$$

докритического течения (22), где линия $x = x_4(t)$ совпадает с фронтом ударной волны, расположенной правее.

Из рис. 1–3 следует, что построенная схема КАБАРЕ с достаточно высокой точностью передает как профили волн понижения, так и фронты ударных волн, сформировавшихся в результате распада начального разрыва. Причем эта точность одинаково высокая как в случае, когда течение является докритическим во всей расчетной области (рисунки с индексами ($а$)), так и в случае, когда есть области докритического и сверхкритического течений (рисунки с индексами ($б$)).

Заключение

В настоящей работе представлен модифицированный алгоритм схемы КАБАРЕ, аппроксимирующей пространственно одномерную гиперболическую систему законов сохранения (1), допускающую запись в инвариантах (3). Основные достоинства новой схемы заключаются в том, что она является монотонной относительно инвариантов линейного приближения аппроксимируемой системы, и с высокой точностью воспроизводит волны разрежения и локализует ударные волны, распространяющиеся с конечной скоростью. Этот алгоритм допускает естественное обобщение на более общие гиперболические системы законов сохранения (в том числе неоднородные и пространственно многомерные), которые, подобно уравнениям неизоэнтропической газовой динамики, не допускают введения полного набора инвариантов.

Список литературы

[1] Iserles A. Generalized leapfrog methods // IMA Journal of Numerical Analysis. 1986. V. 6. N. 3. P. 381–392.

[2] Головизнин В. М., Самарский А. А. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // Матем. моделир. 1998. Т. 10. № 1. С. 86–100.

[3] Головизнин В. М., Самарский А. А. Некоторые свойства разностной схемы "Кабаре"// Матем. моделир. 1998. Т. 10. № 1. С. 101–116.

[4] Головизнин В. М., Зайцев М. А., Карабасов С. А., Короткин И. А. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов. М.: Изд. МГУ, 2013.

[5] Ковыркина О. А., Остапенко В. В. О монотонности двухслойной по времени схемы Кабаре // Матем. моделир. 2012. Т. 24. № 9. С. 97–112.

[6] Ковыркина О. А., Остапенко В. В. О монотонности схемы КАБАРЕ, аппроксимирующей гиперболическое уравнение со знакопеременным характеристическим полем // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2016. Т. 56. № 5. С. 796–815.

[7] Ковыркина О. А., Остапенко В. В. О монотонности схемы КАБАРЕ в многомерном случае // Докл. АН. 2015. Т. 462. № 4. С. 385–390.

[8] Зюзина Н. А., Остапенко В. В. О монотонности схемы КАБАРЕ, аппроксимирующей скалярный закон сохранения с выпуклым потоком // Докл. АН. 2016. Т. 466. № 5. С. 513–517.

[9] Зюзина Н. А., Остапенко В. В. Монотонная аппроксимация схемой КАБАРЕ скалярного закона сохранения в случае знакопеременного характеристического поля // Докл. АН. 2016. Т. 470. № 4. С. 375–379.

Оляна Александровна Ковыркина — к.ф.-м.н., ст. науч. сотр. Института гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН;
e-mail: olyana@ngs.ru;
Владимир Викторович Остапенко — д.ф.-м.н., гл. науч. сотр. Института гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: Ostapenko_VV@ngs.ru.
Дата поступления — 29 мая 2017 г.

СУПЕРВЫЧИСЛЕНИЯ В ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ ГЕОФИЗИКИ — ЦУНАМИ

А. С. Козелков[1,2], Р. М. Шагалиев[1], С. М. Дмитриев[2], Ю. Н. Дерюгин[1], А. А. Куркин[2], Е. Н. Пелиновский[2]

[1] *Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики» (ФГУП «РФЯЦ — ВНИИЭФ»), 607188, Саров*

[2] *Нижегородский Государственный Технический Университет им. Р.А. Алексеева (НГТУ им. Р.Е. Алексеева), 603950, Нижний Новгород*

УДК 517.968

В работе представлен полностью неявный метод расчета уравнений Навье–Стокса для многофазных течений. Для задач геофизики, каковыми являются и волны цунами, масштаб существенно отличается от индустриального — это тысячи километров и часы протекания физического явления, которое необходимо моделировать. Применение классического метода SIMPLE, включающего явную составляющую, накладывает определенные ограничения как на шаг по времени, так и на сходимость решения. В индустриальных приложениях, это свойство алгоритма SIMPLE не столь критично из-за относительно малых времен расчета. В задачах же геофизики эти ограничения уже будут играть существенную роль. Описана параллельная реализация предложенного метода в пакете программ ЛОГОС, основанная на многосеточном методе , который позволяет существенно ускорить вычислительную процедуру с весьма эффективным распараллеливанием на нескольких тысячах процессоров

Ключевые слова: параллельная реализация, цунами, геофизика, многосеточный метод

Введение

Создание физико-математических моделей и вычислительных технологий для изучения движения жидкости и газа, в частности для описания таких грандиозных волн, как цунами, имеет большое значение, как с фундаментальной, так и с практической точки зрения. Среди природных стихий, катастрофических по своим последствиям для человечества, эти волны занимают особое место. Непосредственной причиной возникновения волн цунами чаще всего являются происходящие при землетрясениях изменения в рельефе океанического дна, приводящие к образованию крупных сбросов, провалов и т.п.. Доля таких цунами составляет около 80 %. К другим причинам возникновения цунами относятся оползни, вулканические извержения и метеорологические источники, составляющие около 6, 5 и 3 % соответственно от всех случаев зарегистрированных цунами. Около 6 % всех цунами относят к неизвестным источникам происхождения. Возможной причиной возникновения цунами также может служить падение небесных тел, обладающих, как правило, колоссальной кинетической энергией.

Цунами является относительно частым стихийным бедствием и занимает пятое месте по величине ущерба от природных стихий. Для смягчения последствий цунами, решения задач прогнозирования, необходимы комплексные исследования, направленные на изучение механизмов генерации волн цунами сейсмическими источниками, оползнями, вулканическими извержениями и падениями небесных тел. Необходима разработка адекватных физико-математических моделей распространения цунами в океане переменной глубины от источников различного типа, а также моделей взаимодействия цунами с инфраструктурой прибрежной зоны. Эти задачи охватывают широкий круг проблем механики сплошных сред, геофизики, гидродинамики и других разделов науки.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проекта №16-01-00267, №17-05-00067).

Современные методы исследования волн цунами основаны, как правило, на теории мелкой воды и её обобщениях. Уравнения нелинейной теории мелкой воды, реализованные численно, позволили смоделировать многие исторические цунами. Несмотря на достигнутые успехи, расчет характеристик цунами представляет собой достаточно трудную задачу, как из-за неопределенности параметров очага, так и из-за многочисленных дополнительных факторов, таких как, например, нелинейность и дисперсия. Поэтому очевиден переход к более сложным моделям описания цунами. Наиболее полной системой уравнений, позволяющей учесть особенности цунами на всех стадиях, начиная от выхода из источника до наката на берег, является система уравнений Навье–Стокса. В общем случае данная система не имеет аналитического решения, и все решения находятся численно. Проблема дискретизации уравнений Навье–Стокса, а также их численное решение составляют один из ключевых этапов математического моделирования. В настоящее время система уравнений Навье–Стокса для моделирования волн цунами практически не применяется. Для исследования всех аспектов возникновения и распространения цунами космогенного и оползневого происхождения вычислительные технологии по существу являются единственным инструментом для понимания процессов в планетарном масштабе. Многие из таких процессов, такие как высокоскоростные соударения и падения, плавление, излучение, обрушение, испарение и другие, невозможно воспроизвести в лабораторных условиях на Земле. Развитие существующих и построение новых физико-математических моделей для реалистичного моделирования этих процессов представляют достаточно актуальную и сложную проблему для современной математической физики и механики жидкости и газа. Уровень развития в этой области находится на самой начальной стадии, поскольку численные расчеты двумерных, а тем более трехмерных, физико-математических задач весьма трудоемки и сводятся к описанию лишь отдельных стадий и обособленных процессов.

Проблема описания цунами несейсмического происхождения включает ряд гидродинамических задач, для которых требуется развитие новых и адаптация уже существующих вычислительных технологий:

1. Возбуждение цунами несейсмического происхождения — падение небесного тела, эксплозивные извержения вулканов, сход в воду селей и оползней. На этой стадии необходимо выявить связь параметров в очаге с полем начального смещения водной поверхности.

2. Выяснение основных факторов, влияющих на распространение сильно нелинейных волн цунами в открытом океане, — взаимодействие с воздушными потоками и неровностями дна.

3. Обрушение и накат цунами на берег. Исследование особенностей шельфовой зоны, влияющей на усиление волны, а также воздействие волны на инфраструктуры побережья.

Существующие стратегии численного моделирования цунами несейсмического происхождения, как, впрочем, и сейсмического, подразумевают использование различных моделей на разных стадиях, от образования начального возмущения на поверхности до наката волн на сушу. Современный уровень развития вычислительных технологий, которые уже применяются в инженерной практике при проектировании высокотехнологичных технических изделий, позволяет перевести моделирование в проблеме цунами на качественно новый уровень. Адаптация и доработка существующих алгоритмов численного решения уравнений Навье–Стокса позволит объединить моделирование всех стадий цунами воедино, что, несомненно, скажется на качестве исследований процесса в целом. Уровень развития схем дискретизации позволит с достаточной детализацией описывать требуемые отдельные физические и амплитудные характеристики, а адаптация существующих суперкомпьютерных технологий ускорения расчета позволит в приемлемые сроки просчитать распространение цунами на любые расстояния. Накопленный к настоящему времени обширный фонд, содержащий разнообразные теоретические, численные экспериментальные материалы по методам решения уравнений Навье–Стокса, требует адаптации к проблеме моделирования волн цунами. Для изучения процессов и прогностического моделирования цунами несейсмического происхождения необходимо разработать вычислительную технологию, вбирающую весь существующий опыт вычислительной гидродинамики.

1 Описание модели

В работе представлен полностью неявный метод расчета уравнений Навье–Стокса для многофазных течений [1, 2]. Для задач геофизики, каковыми являются и волны цунами, масштаб существенно отличается от индустриального — это тысячи километров и часы протекания физического явления, которое необходимо моделировать. Применение классического метода SIMPLE, включающего явную составляющую, накладывает определенные ограничения как на шаг по времени, так и на сходимость решения. В индустриальных

приложениях, это свойство алгоритма SIMPLE не столь критично из-за относительно малых времен расчета. В задачах же геофизики эти ограничения уже будут играть существенную роль. Поэтому для адаптации этого метода к моделированию волн цунами в реальных акваториях Мирового океана, кроме обобщения его на случай многофазных течений, необходимо сделать полностью неявную модификацию, тем самым сняв жесткие ограничения на шаг по времени и повысив сходимость итерационного процесса. Описана параллельная реализация предложенного метода в пакете программ ЛОГОС, основанная на многосеточном методе [3, 4], который позволяет существенно ускорить вычислительную процедуру с весьма эффективным распараллеливанием на нескольких тысячах процессоров [5].

2 Результаты

2.1 Верификация метода

Представлены результаты верификации метода для расчета цунами оползневого Пипа на примере моделирования схода надводного и подводного оползня. Данные задачи являются международными тестами, имеющими экспериментальные данные. Схематично конфигурации экспериментов изображены на рис. 1.

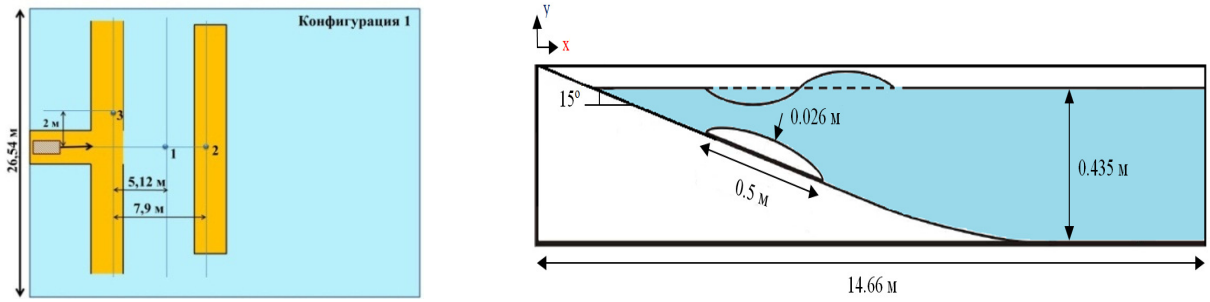


Рис. 1: Схема экспериментов: слева — надводный оползень (— расположение оползня, — расположение мареографов), справа — подводный оползень

Для моделирования в обоих случаях использовалась расчетная сетка, состоящая примерно из 10 млн. ячеек (рис. 2) и построенная по специальной технологии [2, 6]. В области схода оползня и распространения волны сетка имеет сгущение для более точного описания движения оползня и характеристик течения

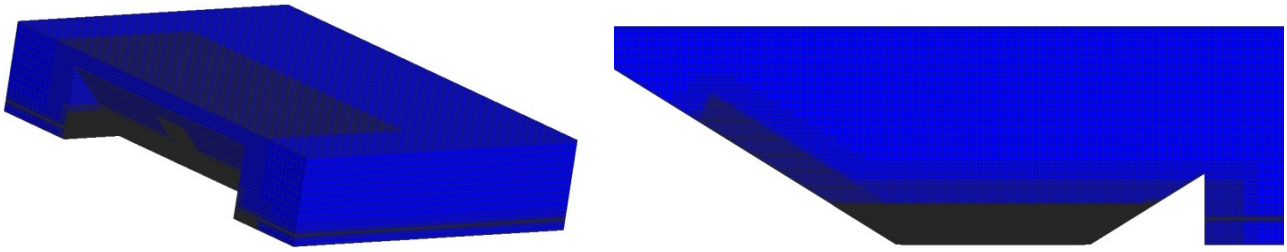


Рис. 2: Расчетная сетка (слева — общий вид, справа — сечение)

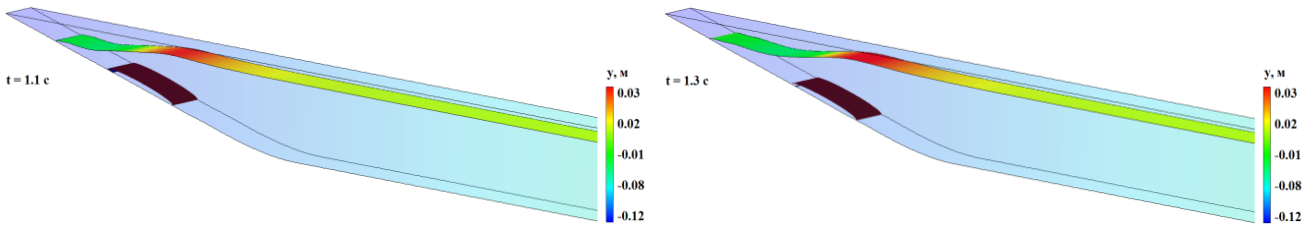


Рис. 3: Расчетная сетка (слева — общий вид, справа — сечение)

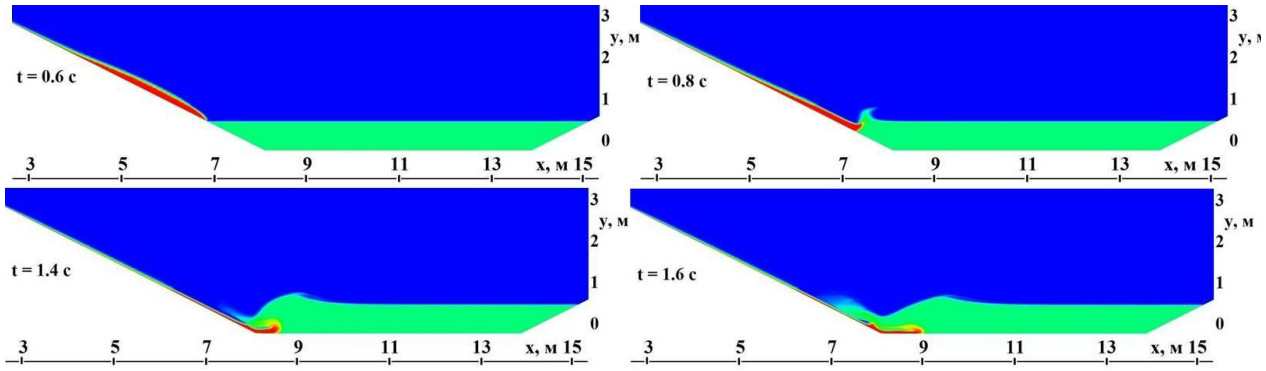


Рис. 4: Изменение уровня воды в бассейне при сходе надводного оползня

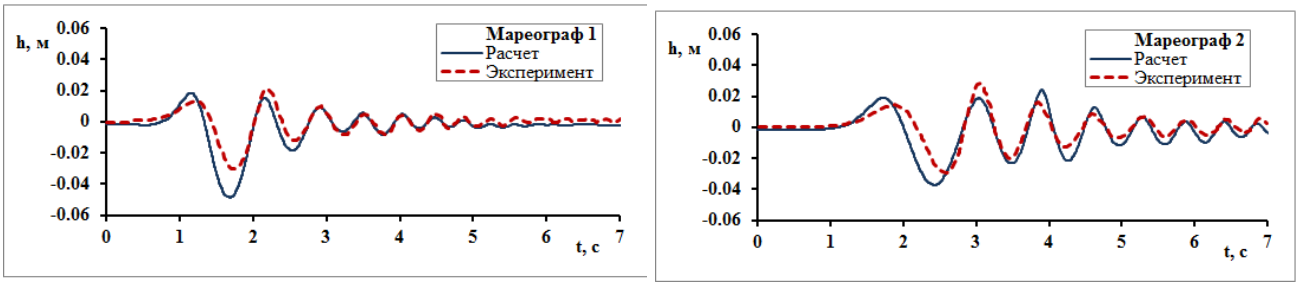


Рис. 5: Сравнение мареографных записей для схода подводного оползня)

Параметры всех трех фаз — воды, воздуха и оползня — выбирались в соответствии с натурными экспериментами. На рис. 3 приведены результаты моделирования схода поводного оползня, а на рис. 4 — надводного, а на рис. 5 и 6 сравнение мареографных записей, полученных в ходе эксперимента и расчета. Как видно из этих графиков, результаты моделирования достаточно неплохо согласуются с экспериментом.

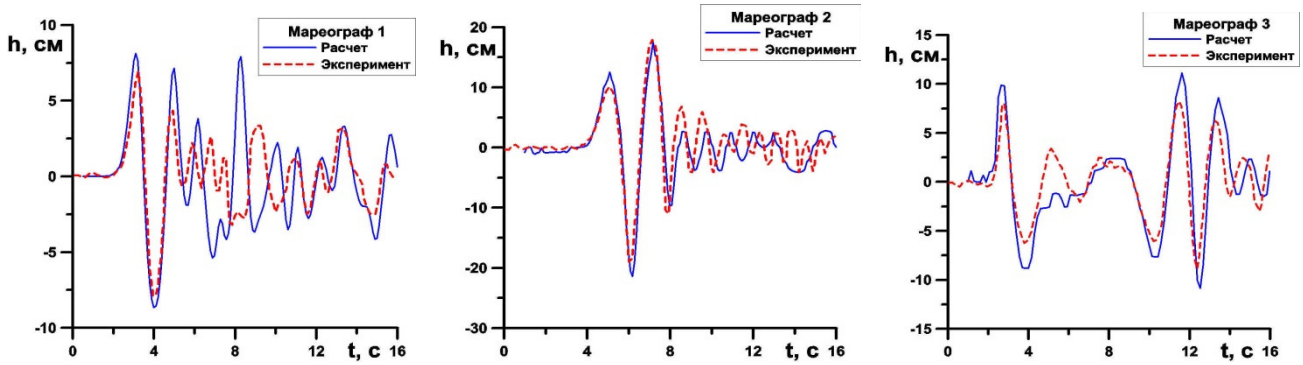


Рис. 6: Сравнение мареографных записей для схода надводного оползня

2.2 Монтсерратское цунами 2003 года

Представлены результаты моделирования Монтсерратского цунами 2003 года[7] на основе трех подходов — решения нелинейных уравнений мелкой воды (TUNAMI), решения уравнений нелинейно-дисперсионной теории (GEOWAVE) и решения уравнений Навье–Стокса (ЛОГОС). Результаты, полученные по всем трём методам с идентичным источником, сопоставляются между собой (рис. 7)

Получаемые в результате моделирования количественные характеристики волновой картины в бассейне можно оценить по мареографным данным (рис. 8). Наиболее близкое совпадение дают уравнения Навье–Стокса и уравнения нелинейно-дисперсионной теории. Первые приходящие волны на всех мареографах ре-

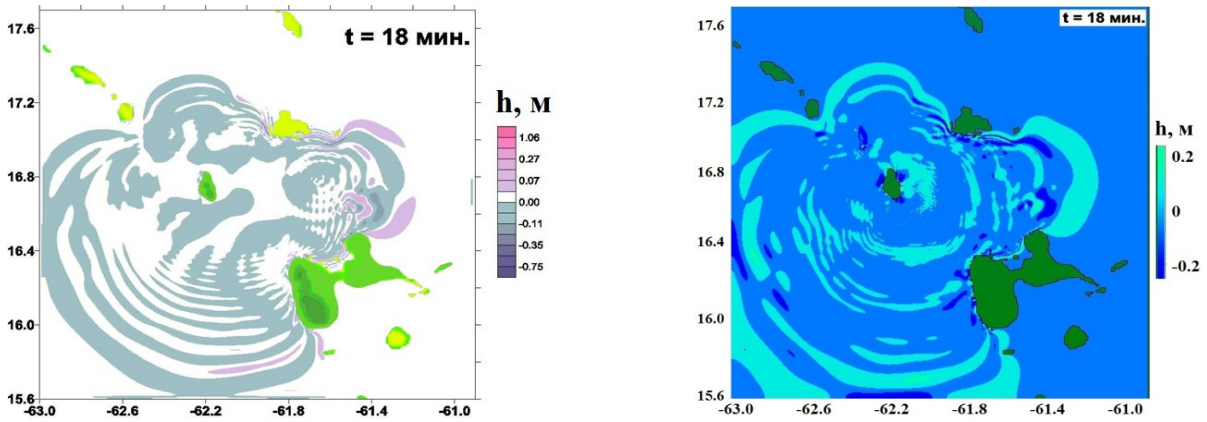


Рис. 7: Волновые картины распространения цунами на различные моменты времени — GEOWAVE (слева) и расчеты по ЛОГОС (справа)

гистрируются одинаково точно и примерно одной и той же высоты — результат, полученный по ЛОГОС, располагается где-то по «золотой» середине между TUNAMI и GEOWAVE. Во всех трех мареографах для первой волны «мелкая вода» дает чуть завышенный результат. Основные различия в высотах начинают наблюдаться позже, причем модели дают разные результаты. ЛОГОС и GEOWAVE дают практически схожий результат для «первых» волн отрицательной амплитуды, TUNAMI же «замечает» их гораздо позже.

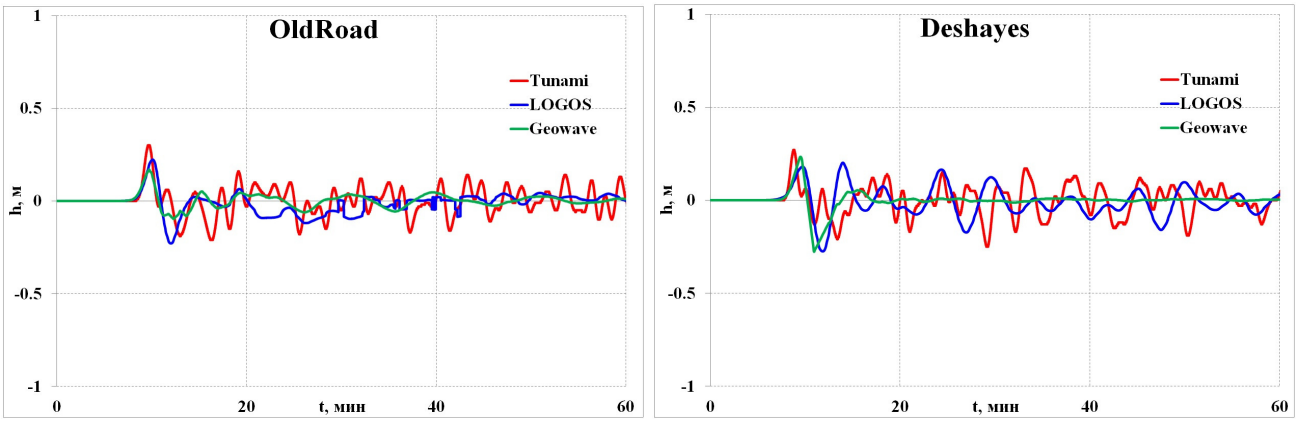


Рис. 8: Сравнение записей мареографов на острове Гваделупа и Антигуа

На рис. 9 продемострирована трехмерная волновая картина в области входа оползня. Как можно видеть, модель, основанная на уравнениях Навье–Стокса, дает более детальную картину схода, нежели ранее рассмотреные модели. Двигаясь по склону горы, оползень принимает форму его рельефа, точно огибая все его особенности.

2.3 Падение метеорита в озеро Чебаркуль в 2013 году

Представлены результаты моделирования падения метеорита в озеро Чебаркуль в 2013 году[8]. Численные эксперименты по генерации волн цунами проводились как на чистой воде, так и с учетом ледовой поверхности. Все параметры экспериментов соответсвовали наблюдаемому падению. Примерно через 30 секунд после падения волна достигает ближайшего берега и ее высота составляет около 10 см. На момент времени 45 секунд отчетливо видно отражение волны от берега. Через 90 секунд после падения волна практически затухает и до противоположного берега не доходит (рис. 10).

Для оценки разрушения ледового покрова и возможной зоны заплеска воды на поверхность льда представлены результаты моделирования идеализированного случая падения метеорита в уже пробитое отверстие на поверхности льда. При падении метеорита в отверстие высота образовавшегося султана составляет

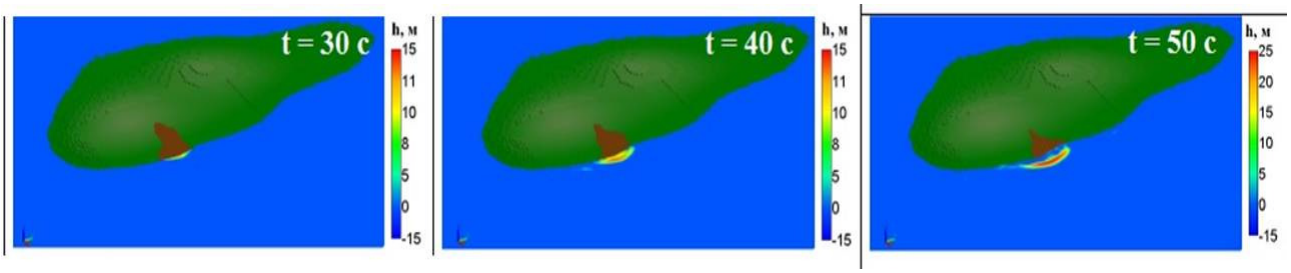


Рис. 9: Трехмерная картина схода оползня

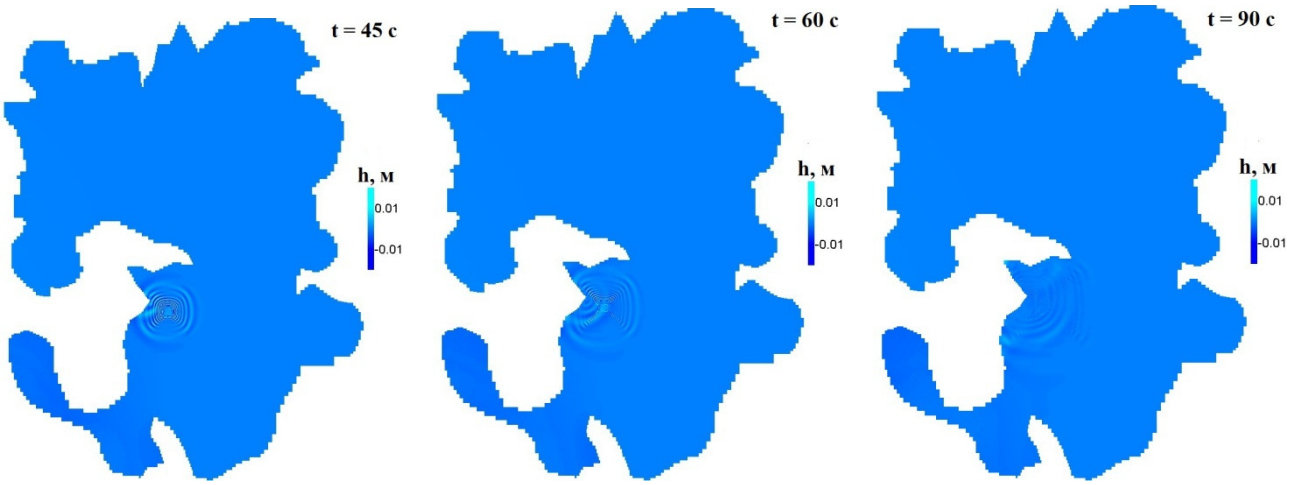


Рис. 10: Распространение цунами по озеру Чебаркуль

более десяти метров и наблюдается в момент времени 0.2 с. При этом султан поднимается практически вертикально вверх без уклона в какую-либо сторону. Большая часть этого султана состоит из брызг, а высота выброса основной массы воды составляет около 2,5 м (рис. 11).

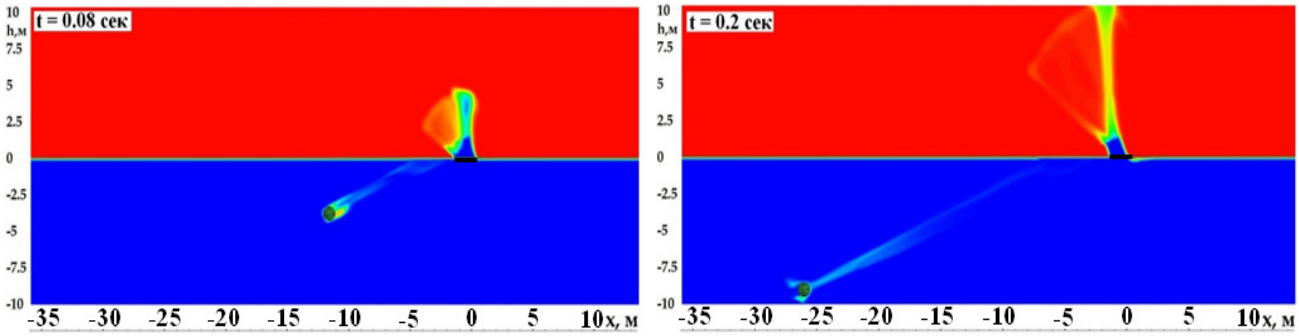


Рис. 11: Возмущение объемной доли (синим — вода, красным — воздух) в сечении расчетной области с учетом ледовой поверхности

Во время челябинского события размер образовавшейся полыньи был в несколько раз больше диаметра самого метеорита, то есть вокруг области падения наблюдалось разрушение ледового покрова на площади гораздо большей, чем площадь столкновения. Для анализа этого явления необходимо исследовать картину распределения давления в исследуемой области. На рис. 12 представлены картины распределения давления во всей расчетной области на разные моменты времени при прохождении метеоритом толщи воды.

Сразу после вхождения метеорита в жидкости наблюдается ударная волна, порождающая зону повышенного давления около ледовой поверхности (точка 4). Около самого тела жидкость движется ускоренно

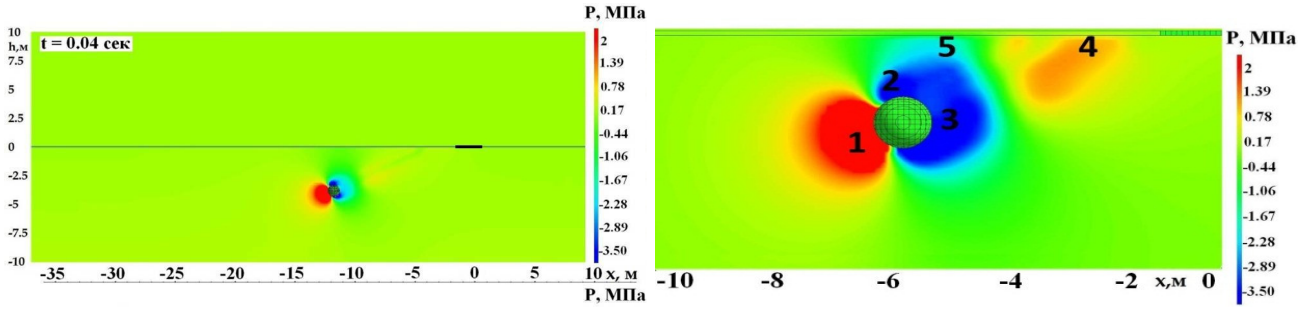


Рис. 12: Поле давления в расчетной области (горизонтальная линия — лед, черная короткая полоска — область входа)

от точки 1 (точка торможения) до точки 2 (и симметричная ей точка на другой стороне тела). В точке торможения давление максимально. По мере отдаления от середины тела (точка 2) происходит замедление движения и давление понижается, а на задней стороне тела (около точки 3) давление вновь повышается, но в очень узкой зоне. Картина распределения давления показывает зону возможного разрушения льда, которая состоит из двух областей — зоны повышенного давления в области ударной волны (точка 4) и зоны пониженного давления, образовавшейся после прохождения тела (точка 5). При этом в зоне повышенного давления возможное разрушение льда будет наблюдаться при выталкивании его вверх, а в зоне пониженного давления возможное разрушение будет происходить при движении его вниз. Оценку разрушения ледового покрова можно сделать на основе эмпирических данных и с большой долей вероятности можно утверждать, что в этом месте ледяной покров был разрушен в зоне, равной примерно 6 м от области непосредственного падения, т.е. общий размер полыньи, полученный в расчетах, составляет около 7 м, что хорошо согласуется с наблюдаемыми данными.

Список литературы

[1] Козелков А.С., Мелешкина Д.П., Куркин А.А., Тарасова Н.В., Лашкин С.В., Курулин В.В. Полностью неявный метод решения уравнений Навье–Стокса для расчета многофазных течений со свободной поверхностью // Вычислительные технологии, 2016, т. 21, №5, с. 4–76.

[2] Козелков А.С. Методика численного моделирования цунами оползневого типа на основе уравнений Навье–Стокса // Вычислительная механика сплошных сред, 2016, том 9, №2, стр. 218–236.

[3] Волков К.Н., Дерюгин Ю.Н., Емельянов В.Н., Карпенко А.Г., Козелков А.С., Тетерина И.В. Методы ускорения газодинамических расчетов на неструктурированных сетках. — Москва: Физматлит, 2013, 536с.

[4] Козелков А.С., Курулин В.В., Тятюшкина Е.С., Пучкова О.Л., Лашкин С.В. Реализация метода расчета вязкой несжимаемой жидкости с использованием многосеточного метода на основе алгоритма SIMPLE в пакете программ ЛОГОС, журнал ВАНТ, сер. Математическое моделирование физических процессов, 2013, вып. 4, стр. 44–56.

[5] Козелков А.С., Шагалиев Р.М., Курулин В.В., Ялозо А.В., Лашкин С.В. Исследование потенциала суперкомпьютеров для масштабируемого численного моделирования задач гидродинамики в индустриальных приложениях // Вычислительная математика и математическая физика, 2016, том 56, № 8, с. 154–165.

[6] Kozelkov A.S., Kurkin A.A., Pelinovsky E.N., Tyatyushkina E.S., Kurulin V.V., Tarasova N.V., Landslide-type tsunami modelling based on the Navier-Stokes Equations // Science of tsunami Hazards, Journal of Tsunami Society International, 2016, vol. 35, № 3, p. 106–144.

[7] Pelinovsky E., Zahibo N., Dunkly P., Edmonds M., Herd R., Talipova T., Kozelkov A.S., Nikolkina I. Tsunami generated by the volcano eruption on July 12-13, 2003 at Montserrat, Lesser Antilles // Science of Tsunami Hazards, 2004, v. 22. № 1, p. 44–57.

[8] Козелков А.С., Куркин А.А., Пелиновский Е.Н., Курулин В.В., Тятюшкина Е.С. Моделирование возмущений в озере Чебаркуль при падении метеорита в 2013 году // Известия РАН Механика жидкости и газа, 2015, № 6, с. 134–143.

Козелков Андрей Сергеевич — д.ф.-м.н., заместитель начальника отдела, начальник научно-исследовательской лаборатории Института теоретической и математической физики ФГУП «РФЯЦ — ВНИИЭФ»; старший научный сотрудник кафедры «Прикладная Математика» Нижегородского Государственного Технического Университета им. Р.А. Алексеева;
e-mail: askozelkov@mail.ru;
Шагалиев Рашит Мирзагалиевич — д.ф.-м.н., заместитель директора ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», заместитель научного руководителя ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», первый заместитель директора Института теоретической и математической физики ФГУП «РФЯЦ — ВНИИЭФ» по вопросам математического моделирования и вычислительным системам;
email: RMShagaliev@vniief.ru.
Дмитриев Сергей Михайлович — д.т.н., профессор, ректор Нижегородского Государственного Технического Университета им. Р.А. Алексеева,
email: dmitriev@nntu.ru.
Куркин Андрей Александрович — д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой «Прикладная Математика», Нижегородского Государственного Технического Университета им. Р.А. Алексеева;
email: aakurkin@gmail.com.
Пелиновский Ефим Наумович — д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник кафедры «Прикладная Математика», Нижегородского Государственного Технического Университета им. Р.А. Алексеева;
email: pelinovsky@gmail.com.
Дата поступления — 26 мая 2017 г.

ГРАДИЕНТНЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ СОВМЕЩЕННОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ

О. И. Криворотько[1,2], С. И. Кабанихин[1,2]

[1] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.63

Предложен численный алгоритм решения задачи определения источника возмущений для системы нелинейных уравнений мелкой воды одновременно по двум типам измерений отклонения возмущения водной поверхности от состояния покоя в конечном числе точек пространственной области и в фиксированный момент времени на части области. Исследуемая совмещенная обратная задача сводится к задаче минимизации целевого функционала, характеризующего квадратичное отклонение моделируемых данных от измерений. Получен явный вид градиента целевого функционала, связанный с решениями двух сопряженных задач.

Ключевые слова: нелинейные уравнения мелкой воды, обратная задача, определение источника возмущений, цунами, совмещенные данные, градиентный подход, градиент функционала.

Введение

В настоящее время одним из важнейших направлений современной вычислительной математики является моделирование различных природных процессов, связанных с перемещением потоков жидкости в мировом океане. К числу таких процессов можно отнести возникновение приливных волн или волн цунами. Основной математической моделью, описывающей динамику приливных волн, является система уравнений динамики мелкой воды. Теория мелкой воды основывается на предположениях малости вертикального ускорения частицы на свободной поверхности по отношению к ускорению свободного падения и слабой зависимости горизонтальных скоростей от вертикальной координаты.

Разрушительность события цунами, порожденного подводным землетрясением, поставили вопрос о прогнозировании этого явления. Любой прогноз события цунами подразумевает наличие ошибки в расчетах (неточные сейсмические данные и данные с подводных датчиков, спутниковые данные, вычислительные и модельные ошибки), в результате чего увеличивается вероятность ложного прогноза. Поэтому необходимо добиться высокой точности прогноза цунами. Одним из важных вопросов является уточнение параметров источника цунами, а именно параметров землетрясения. В работе L. Manshina и D. Smylie [1] приведена связь параметров землетрясения с начальным возмущением водной поверхности. Поэтому вопрос определения параметров землетрясения сводится к вопросу определения формы начального возмущения свободной поверхности. Задача восстановления источника цунами, в свою очередь, не является однозначно разрешимой (В.М. Кайстренко, 1972, [2]). Первые исследования, связанные с методом обращения формы волны цунами, были опубликованы в работах K. Satake 1987 и 1989 гг. [3,4]. Основная идея метода заключается в применении функции Грина для определения параметров сейсмического разлома по измерениям проходящей волны в точках пространства с привлечением априорной информации об источнике цунами. В качестве альтернативы технике K. Satake в работе C. Pires и P. Miranda (2001, [5]) был предложен сопряженный метод обращения формы волны цунами. В отличие от своих предшественников этот метод ориентирован на нелинейные уравнения мелкой воды. Предложенный метод уточняет форму начального возмущения,

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации и Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 16-31-00189 и № 16-29-15120).

которая задается как линейной, так и нелинейной функцией от любого набора свободных параметров. Различные дискретные сопряженные методы успешно были применены в геофизике с целью прогнозирования распространения волн цунами (см. [6] и ссылки в ней).

Для приемлемого моделирования процесса распространения волн цунами необходимо задать точное начальное условие (т.е. начальное возмущение водной поверхности) и выбрать оптимальные параметры вычислительной сетки. Для линейной модели теории мелкой воды были предложены несколько подходов выбора оптимальных размеров сетки (например, [7, 8]. Форма начального возмущения может быть получена из параметров геологического разлома [1]. Однако информации о сейсмических волнах, как правило, бывает недостаточно, чтобы определить все параметры источника возмущения в режиме реального времени. В работе A. Piatanesi, S. Tinti, G. Pagnoni (2001, [9]) используется модель, в которой пространство данных состоит из конечного набора приемников, измеряющих высоту проходящей волны в точке, а пространство параметров модели представлено значениями начальной высоты столба жидкости в заданном числе точек. Предлагаемый в работе подход применим в том случае, когда прямая задача может быть записана в терминах функции Грина. В работах С.И. Кабанихина с соавторами (2012, [10]; 2014, [11]) исследованы градиентные методы (метод итерации Ландвебера и метод сопряженных градиентов) восстановления источника возмущений для уравнений мелкой воды в линейном приближении. В рамках линейной теории мелкой воды в работах Т.А. Ворониной [12–15]) была исследована задача восстановления источника цунами с помощью метода усеченного сингулярного разложения оператора обратной задачи. Впервые этот подход был применен в 1998 году Т.А. Ворониной и В.А. Чевердой для модельного случая постоянной глубины в работе [12] и позднее успешно применен к более сложным моделям для реальной батиметрии побережья Перу с зашумленными синтетическими данными.

В случае, когда волна приближается к точкам (или времени) измерений, справедливы нелинейные уравнения мелкой воды, более точно описывающие движение жидкости. В данной работе получен явный вид градиента целевого функционала, характеризующий отклонение модельных данных от измерений, и предложен градиентный подход численного решения совмещенной обратной задачи для нелинейных уравнений мелкой воды, которая заключается в определении источника возмущений по измерениям отклонения водной поверхности от состояния покоя в конечном числе точек пространства и в фиксированный момент времени на части области.

1 Совмещенная обратная задача для системы нелинейных уравнений мелкой воды

Рассмотрим совмещенную постановку задачи уточнения источника цунами в рамках нелинейных уравнений мелкой воды. Запишем в области $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ начально-краевую задачу определения поля скоростей и смещения водной поверхности для уравнений мелкой воды в размерном виде без учета воздействия внешних сил Кориолиса и донного трения

$$\begin{cases} \eta_t + [u(\eta+H)]_x + [v(\eta+H)]_y = 0, & (x,y) \in \Omega, \\ u_t + uu_x + vu_y + g\eta_x = 0, & t > 0, \\ v_t + uv_x + vv_y + g\eta_y = 0, & \\ \eta(x,y,0) = q(x,y), \quad u(x,y,0) = v(x,y,0) = 0; & \\ \eta|_{\partial\Omega} = u|_{\partial\Omega} = v|_{\partial\Omega} = 0. & \end{cases} \tag{1}$$

Здесь $\eta(x,y,t)$ описывает смещение водной поверхности относительно невозмущенного уровня, $H(x,y)$ — функция дна, u и v — компоненты скорости частиц жидкости вдоль осей x и y, соответственно, $g = 9.81$ м/с^2 — ускорение свободного падения, область $\Omega := (0, L_x) \times (0, L_y)$ предполагается прямоугольной (для простоты изложения). Функция $q(x,y)$ описывает источник возмущения. Для простоты изложения приведены однородные граничные условия. Схематичное изображение движения волны в мелкой воде и масштабы моделирования представлены на рисунке 1.

Пусть о колебаниях свободной поверхности задана дополнительная информация, а именно измерения отклонения водной поверхности от состояния покоя в конечном числе точек пространственной области

$$\eta(x_m, y_m, t) = f_m(t), \quad (x_m, y_m) \in \Omega, \quad m = 1, 2, \ldots, M, \quad M \in \mathbb{N}, \tag{2}$$

и в фиксированный момент времени T на части области $\omega \subset \Omega$

$$\eta(x, y, T) = f(x, y), \quad (x, y) \in \omega. \tag{3}$$

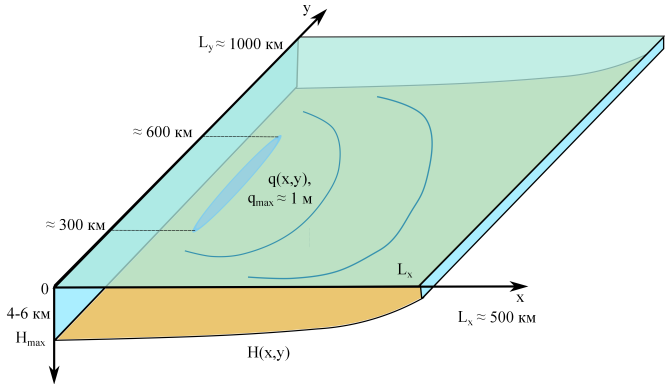


Рис. 1: Схематичная иллюстрация моделирования движения волны в мелкой воде.

Совмещенная обратная задача (1)-(3) состоит в уточнении параметров источника цунами $q(x,y)$ по дополнительным измерениям отклонения водной поверхности $f_m(t)$, $f(x,y)$.

Обратная задача (1)-(3) сводится сводится к задаче определения минимума целевого функционала [11]

$$J(q) = \sum_{m=1}^{M} \int_0^T \left(\eta(x_m, y_m, t; q) - f_m(t)\right)^2 dt + \iint\limits_{\omega} \left(\eta(x, y, T; q) - f(x,y)\right)^2 dxdy = J_1(q) + J_2(q), \tag{4}$$

характеризующего степень отклонения модельных данных от измерений (2) и (3).

Решение задачи минимизации целевого функционала (4) может быть получено с помощью градиентных методов (методов сопряженных градиентов, итерации Ландвебера, Ньютона-Канторовича), которые заключаются в поиске приближенного решения задачи в следующем виде:

$$q_{n+1} = q_n - \alpha_n J'(q_n), \quad \alpha_n > 0.$$

Здесь $J'(q_n)$ — градиент функционала $J(q)$ (4), α_n — параметр спуска.

2 Градиент целевого функционала

Обозначим отклонение $\delta W = \overline{W} - W$, где $\overline{W} = W(x,y,t;q+\delta q) = (\overline{\eta}, \overline{u}, \overline{v})$ как решение возмущенной начально-краевой задачи (1) с начальными данными $(q+\delta q, 0, 0)$, и $W = W(x,y,t;q) = (\eta, u, v)$ — решение начально-краевой задачи (1). Пренебрегая возмущениями функций второго порядка и выше (ввиду их малости), запишем начально-краевую задачу для вектора $\delta W = (\delta\eta, \delta u, \delta v)$

$$\begin{cases} \mathcal{L}_1\delta\eta := \delta\eta_t + \left[\delta\eta u + \delta u\,(\eta + H)\right]_x + \left[\delta\eta v + \delta v\,(\eta + H)\right]_y = 0, & \delta\eta|_{t=0} = \delta q, \\ \mathcal{L}_2\delta u := \delta u_t + (\delta u \cdot u)_x + \delta v \cdot u_y + v \cdot \delta u_y + g\delta\eta_x = 0, & \delta u|_{t=0} = 0. \\ \mathcal{L}_3\delta v := \delta v_t + (\delta v \cdot v)_y + \delta u \cdot v_x + u \cdot \delta v_x + g\delta\eta_y = 0, & \delta v|_{t=0} = 0, \\ \delta W|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \tag{5}$$

Обозначим скалярное произведение в пространстве $L_2(\Omega\times(0,T))$ следующим образом: $\langle\cdot,\cdot\rangle = \langle\cdot,\cdot\rangle_{L_2(\Omega\times(0,T))}$. Вариация целевого функционала (4) удовлетворяет соотношению (по определению производной Фреше):

$$\delta J = J(q+\delta q) - J(q) = \langle J'q, \delta q\rangle + o(\|\delta q\|^2).$$

С другой стороны, используя выражение (4), получим

$$\delta J = \delta J_1 + \delta J_2 = \int_0^T \iint_{\Omega} \delta\eta(x,y,t;\delta q) r_1(x,y,t)\,dxdydt + \int_0^T \iint_{\Omega} \delta\eta(x,y,t;\delta q) r_2(x,y,t)\,dxdydt + \langle\delta\eta, \delta\eta\rangle\,. \tag{6}$$

Здесь $r_1(x,y,t) = 2\sum\limits_{m=1}^{M}\left(\eta(x,y,t;q) - f_m(t)\right)\delta(x-x_m)\delta(y-y_m)$, $r_2(x,y,t) = 2\left(\eta(x,y,t;q) - f(x,y)\right)\chi(\omega)\delta(t-T)$, δ — дельта-функция Дирака, $\chi(\omega)$ — характеристическая функция области ω.

Введем две обобщенные сопряженные задачи в области $\Omega \times (0,T)$, соответствующие двум типам данных (2) и (3) совмещенной обратной задачи:

$$\begin{cases} \Phi_{1t} + u\Phi_{1x} + v\Phi_{1y} + g(\Phi_{2x} + \Phi_{3y}) = r_1, & \Phi_1|_{t=T} = 0, \\ \Phi_{2t} + u\Phi_{2x} + (v \cdot \Phi_2)_y - v_x\Phi_3 - (\eta + H)\Phi_{1x} = 0, & \Phi_2|_{t=T} = 0, \\ \Phi_{3t} + v\Phi_{3y} + (u \cdot \Phi_3)_x - u_y\Phi_2 - (\eta + H)\Phi_{1y} = 0, & \Phi_3|_{t=T} = 0, \\ \Phi_1|_{\partial\Omega} = \Phi_2|_{\partial\Omega} = \Phi_3|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \tag{7}$$

$$\begin{cases} \Psi_{1t} + u\Psi_{1x} + v\Psi_{1y} + g(\Psi_{2x} + \Psi_{3y}) = r_2, & \Psi_1|_{t=T} = 0, \\ \Psi_{2t} + u\Psi_{2x} + (v \cdot \Psi_2)_y - v_x\Psi_3 - (\eta + H)\Psi_{1x} = 0, & \Psi_2|_{t=T} = 0, \\ \Psi_{3t} + v\Psi_{3y} + (u \cdot \Psi_3)_x - u_y\Psi_2 - (\eta + H)\Psi_{1y} = 0, & \Psi_3|_{t=T} = 0, \\ \Psi_1|_{\partial\Omega} = \Psi_2|_{\partial\Omega} = \Psi_3|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \tag{8}$$

Ввиду того, что сопряженные задачи (7) и (8) отличаются между собой правыми частями r_1 и r_2, приведем вывод первой части градиента целевого функционала $J_1(q)$, связанной с решение сопряженной задачи $\Phi(x,y,t;q)$ (5). Вывод второй части градиента $J_2(q)$ будет аналогичным.

Используя возмущенную задачу для уравнений мелкой воды (5), сопряженную задачу (7) и метод интегрирования по частям, получим следующие соотношения:

$$\langle \mathcal{L}_1\delta\eta, \Phi_1\rangle = \langle \delta\eta, -\Phi_{1t} - u\Phi_{1x} - v\Phi_{1y}\rangle + \langle \delta u, (\eta+H)\Phi_{1x}\rangle + \langle \delta v, (\eta+H)\Phi_{1y}\rangle - \iint\limits_\Omega \delta q \cdot \Phi_1(x,y,0)\,dxdy = 0,$$
$$\langle \mathcal{L}_2\delta u, \Phi_2\rangle = \langle \delta u, -\Phi_{2t} - u\Phi_{2x} - (v\Phi_2)_y\rangle + \langle \delta\eta, -g\Phi_{2x}\rangle + \langle \delta v, u_y\Phi_2\rangle = 0,$$
$$\langle \mathcal{L}_3\delta v, \Phi_3\rangle = \langle \delta v, -\Phi_{3t} - v\Phi_{3x} - (u\Phi_3)_x\rangle + \langle \delta\eta, -g\Phi_{3y}\rangle + \langle \delta u, v_x\Phi_3\rangle = 0.$$

Запишем в векторном виде полученные соотношения для $\Phi = (\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3)^T$ и оператора $\mathcal{L} = (\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \mathcal{L}_3)^T$:

$$\langle \mathcal{L}W, \Phi\rangle = \langle \mathcal{L}_1\delta\eta, \Phi_1\rangle + \langle \mathcal{L}_2\delta u, \Phi_2\rangle + \langle \mathcal{L}_3\delta v, \Phi_3\rangle = 0.$$

Из последнего соотношения следует, что

$$\int\limits_0^T \iint\limits_\Omega \delta\eta(x,y,t;\delta q) r_1(x,y,t)\,dxdydt = \iint\limits_\Omega \delta q \cdot \Phi_1(x,y,0)\,dxdy.$$

Таким образом, градиент первой части функционала $J_1'q = \Phi_1(x,y,0)$. Аналогичные соотношения получаем для второй части градиента функционала $J_1'q = \Psi_1(x,y,0)$. Итоговый градиент целевого функционала (4) для совмещенной обратной задачи в случае нелинейных уравнений мелкой воды имеет вид:

$$J'q = \Phi_1(x,y,0) + \Psi_1(x,y,0).$$

2.1 Алгоритм численного решения совмещенной обратной задачи для нелинейных уравнений мелкой воды

Алгоритм численного решения совмещенной обратной задачи (1)-(3) для нелинейных уравнений мелкой воды, основанный на градиентном методе первого порядка, выглядит следующим образом:

1. Обрабатываем экспериментальные данные (2), (3) или создаем синтетические данные путем решения начально-краевой задачи (1) для известной функции $q(x,y)$. Считаем r_1 и r_2.
2. Задаем начальное приближение $q_0(x,y) = 0$, характеризующее состояние ровной поверхности.
3. Решаем начально-краевую задачу (1) и получаем функции $\eta(x,y,t)$, $u(x,y,t)$ и $v(x,y,t)$.
4. Решаем сопряженные задачи (7) и (8) и получаем $\Phi_1(x,y,t)$, $\Psi_1(x,y,t)$.
5. Вычисляем градиент целевого функционала $J'q = \Phi_1(x,y,0) + \Psi_1(x,y,0)$.
6. Вычисляем параметр спуска α_n согласно выбранному типу градиентного метода.
7. Вычисляем следующую итерацию согласно формуле $q_{n+1} = q_n - \alpha_n J'q_n$.

Заключение

Построен алгоритм решения задачи определения источника возмущения для системы нелинейных уравнений мелкой воды одновременно по двум типам измерений отклонения водной поверхности от состояния покоя в конечном числе точек пространственной области и в фиксированный момент времени на части области моделирования. Обратная задача сведена к задаче минимизации целевого функционала, характеризующего квадратичное отклонение модельных данных от измерений. Получено явное выражение для вычисления градиента функционала, связанное с решениями соответствующих сопряженных задач. Планируется апробировать алгоритм для нелинейной модели мелкой воды в случае экспериментальных данных.

Список литературы

[1] Mansinha L., Smylie D.E. The displacement fields of inclined faults // Bulletin of the Seismological Society of America. 1971. V. 61. P. 1433–1440.

[2] Кайстренко В.М. Обратная задача на определение источника цунами. В кн.: Волны цунами. Выпуск 29. Южно-Сахалинск: Труды СахКНИИ. 1972. P. 82–92.

[3] Satake K. Inversion of tsunami waveforms for the estimation of a fault heterogeneity: Method and numerical experiments // Journal of Physics of the Earth. 1987. V. 35. P. 241–254.

[4] Satake K. Inversion of tsunami waveforms for the estimation of heterogeneous fault motion of large submarine earthquakes: the 1968 Tokachi-oki and the 1983 Japan sea earthquake // Journal of Geophysical Research. 1989. V. 94. P. 5627–5636.

[5] Pires C., Miranda P.M.A. Tsunami waveform inversion by adjoint methods // Journal of Geophysical Research. 2001. V. 106. P. 19773–19796.

[6] Blaise S., St-Cyr A., Mavriplis D., Lockwood B. Discontinuous Galerkin unsteady discrete adjoint method for real-time efficient tsunami simulations // Journal of Computational Physics. 2013. V. 232, iss. 1. P. 416–430.

[7] Greenberg J.M., Leroux A.Y. A well-balanced scheme for the numerical processing of source terms in hyperbolic equations // SIAM Journal on Numerical Analysis. 1996. V. 33, iss. 1. P. 1–16.

[8] Tang H. Solution of the shallow-water equations using an adaptive moving mesh method // International Journal for Numerical Methods in Fluids. 2004. V. 44, iss. 7. P. 789–810.

[9] Piatanesi A., Tinti S., Pagnoni G. Tsunami waveform inversion by numerical finite-elements Green's functions // Natural Hazards and Earth System Sciences. 2001. V. 1, P. 187–194.

[10] Kabanikhin S.I., Bektemesov M.A., Nurseitov D.B., Krivorotko O.I., Alimova A.N. An optimization method in the Dirichlet problem for the wave equation // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2012. V. 20, iss. 2. P. 193–211.

[11] Kabanikhin S.I., Hasanov A., Marinin I.V., Krivorotko O.I., Khidasheli D. A variational approach to reconstruction of an initial tsunami source perturbation // Applied Numerical Mathematics. 2014. V. 83, P. 22–37.

[12] Voronina T.A., Tcheverda V.A. Reconstruction of tsunami initial form via level oscillation // Bulletin of the Novosibirsk Computer Center. Series Mathematical Modeling in Geophysics. 1998. V. 4, P. 127–136.

[13] Воронина Т.А. An optimization method in the Dirichlet problem for the wave equation // Сибирский журнал вычислительной математики. 2004. V. 7, iss. 3. P. 203–211.

[14] Voronina T.A. Reconstruction of initial tsunami waveforms by a truncated SVD method // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2011. V. 19, P. 615–629.

[15] Voronin V.V., Voronina T.A., Tcheverda V.A. Inversion method for initial tsunami waveform reconstruction // Natural Hazards and Earth System Sciences. Discussions. 2014. V. 2, P. 7735–7772.

Ольга Игоревна Криворотько — к.ф.-м.н., н.с. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, ст.преп. кафедры высшей математики физического факультета Новосибирского государственного университета;
e-mail: olga.krivorotko@sscc.ru;
Сергей Игоревич Кабанихин — чл.-корр. РАН, профессор, директор Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: kabanikhin@sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ГЕОИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА КАЗАХСТАНА. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ГЕОИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ КАЗАХСТАНА.

О. И. Криворотько[1,2], С. И. Кабанихин[1,2], А. Т. Турарбек[3], М. А. Бектемесов[3], И. В. Маринин[1], А. Б. Садыкова[4]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[3] *Казахский национальный университет им. аль-Фараби, 050040, Алматы*

[4] *Лаборатория региональной сейсмичности ТОО «Институт сейсмологии» МОН РК, 050040, Алматы*

УДК 519.688

В статье рассматриваются математические модели акустики, электродинамики и теории упругости, комплекс программ и их применение при создании динамической цифровой модели территории Казахстана.

Ключевые слова: геоинформационная система, землетрясение, база данных.

Введение

Геофизика является традиционно наиболее математизированной из наук о Земле. Это определяется физическими задачами, составляющими предмет ее изучения, которые, в большинстве своем, имеют математические постановки, и для их решения требуется использование аппарата широкого круга математических дисциплин. Исследование математических постановок геофизических задач, разработка вычислительных алгоритмов их решения, вместе с совершенствованием и обновлением математических методов обработки и интерпретации геофизических данных, формирует теоретическую область геофизики как науки. При этом для геофизики характерна тесная связь теории с практикой, поскольку очевидно, что ценность теоретических результатов определяется их прикладным значением, и направления развития теории формируются потребностями практики. Математические модели многих задач, возникающих в науках о Земле, хорошо описываются уравнениями математической физики. Более того, ряд важных геофизических задач представляет собой классические задачи математической физики, и им свойственно деление на прямые и обратные [1]. В этой связи ярким примером являются кинематические прямая и обратная задачи [2,3]. Обратная кинематическая задача — одна из важнейших сейсмических проблем, тесно связанная с вариационным исчислением. Она является задачей интегральной геометрии, составляет основу кинематической сейсмотомографии, и была, по-видимому, одной из первых рассмотренных обратных задач для дифференциальных уравнений. Эта задача возникала в различных постановках, и история исследования ее по первому результату (1905–1907 гг.) составляет уже 100 лет. Математические проблемы геофизики тесно связаны с приложениями теории некорректных задач в части создания вычислительных алгоритмов обработки и интерпретации геофизических измерений, основанных на законах взаимодействия традиционных геофизических полей. Это закон всемирного тяготения Ньютона, законы Фарадея, Ома, Гука, принцип Гюйгенса, уравнения электромагнитного поля Максвелла и динамической теории упругости, уравнения Ламе. В первой половине прошлого столетия были доказаны фундаментальные теоремы существования и единственности решений краевых задач для дифференциальных уравнений и систем уравнений, соответствующих основным постановкам прямых

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 16-31-00189, № 15-01-09230), Министерства образования и науки Российской Федерации и Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант № 1746/ГФ4 «Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач естествознания»).

задач геофизики. Решение краевых задач, соответствующих прямым задачам геофизики, можно рассматривать как математическое моделирование геофизических процессов. Численное решение этих задач играет существенную роль для правильного понимания и оценки эффективности результатов геофизических наблюдений, при проектировании геофизических приборов, планировании эксперимента. Численное решение прямых задач геофизики может представлять значительные трудности. До появления ЭВМ для расчетов были доступны лишь самые простые варианты моделей среды. Наиболее важной целью геофизических исследований является определение внутреннего строения Земли , т.е. распределения внутри Земли физических характеристик - плотности, намагниченности, магнитной восприимчивости, электропроводности, упругости, температуры. В связи с этим можно сказать, что обратные задачи являются основными математическими задачами в геофизике. Теория обратных задач как в геофизике, так и вообще в дифференциальных уравнениях развита значительно меньше, чем теория прямых задач. Очевидно, что каждой прямой задаче может быть сопоставлено много вариантов обратных задач.

Развитие геоинформационных систем было предопределено достижениями в области компьютерных технологий и компьютерной графики, а также автоматизацией картосоставительского процесса. Геоинформационная система — это система аппаратно-программных средств и алгоритмических процедур, созданная для цифровой поддержки, пополнения, управления, манипулирования, анализа, математико-картографического моделирования и образного отображения географических координированных данных [4]. ГИС эффективны во всех областях, это практически все направления деятельности органов управления и администраций: земельные ресурсы и объекты недвижимости, транспорт, инженерные коммуникации, развитие бизнеса, обеспечение правопорядка и безопасности, управление чрезвычайных ситуаций, демография, экология, здравоохранение и т.д.

В Казахстане географические информационные системы, как область информационных технологий, зародились 20 лет назад. Основная задача ГИС — связать объекты на карте с базой данных, и обеспечить многогранный анализ и классификацию информации по пространственным и по описательным характеристикам. Пространственный анализ с использованием технологий ГИС и ДЗЗ (дистанционного зондирования земли) — одна из немногих высокотехнологичных отраслей, где казахстанские компании работают на самом современном уровне. К списку таких компаний можно отнести: ООО «Казахстанский Центр геоинформационных систем», Казахстанское агентство географических информационных систем и дистанционного зондирования, АО «Казахстан ГИС центр», ТОО «Центр дистанционного зондирования и ГИС «Терра»», ТОО «Казахстанское агентство прикладной экологии», и другие игроки рынка. Все эти компании выполняют задачи поставленные Заказчиком, они разрабатывают и поддерживают работу ГИС, поставляют и обрабатывают данные с ДЗЗ с различных космических снимков, создают цифровую картографическую продукцию различной направленности и многое другое.

1 Существующие модели ГИС Казахстана

В настоящее время геоинформационные технологии в Республике Казахстан очень активно развиваются, так как во многих организациях развиваются сетевые технологии, позволяющие накапливать, анализировать и актуализировать геоданные без привязки к определенному местоположению.

ГИС Казахстана используются в разных отраслях экономики и государственного управления: земельный кадастр, геология, добыча углеводородов и других полезных ископаемых, транспортировка нефти и газа, общественная безопасность, градостроительство, лесное хозяйство, государственное управление, экология, навигация и т.д. Большое количество ГИС проектов реализовано и реализуется на основе программного обеспечения ESRI, а платформа ArcGIS стала стандартом ГИС в ряде государственных ведомств и крупных компаний. Приведем пример некоторых из них:

– **АИС Государственного земельного кадастра**. Первой масштабной попыткой внедрения ГИС в Республике Казахстан стало внедрения кадастровых ГИС на базе продуктов ESRI в Казахстане. Система предназначена для автоматизации работ государственных подразделений по управлению земельными ресурсами Республики Казахстан: кадастровых центров (районных, областных и республиканского уровня).

– **ГИС Даму**. Данный ресурс является интерактивной системой предоставления всей актуальной статистической и аналитической информации о деятельности фонда «Даму», а также о развитии малого и среднего предпринимательства, сектора микрокредитования, макро- и микроэкономических процессах республиканского и регионального уровня.

– **ГИС Комитета по правовой статистике и специальным учетам** создана в рамках реформы правоохранительной системы, направленной на максимальную открытость для граждан, стоит из карт уголовных правонарушений, аварийности, карты проверок предпринимателей и т.д.

– **Корпоративная геоинформационная системы АО «Торговый Дом «КазМунайГаз»»**. Ее целью является корпоративное развитие системы автозаправочных станций компании по территории Республики Казахстан, а также повышение конкурентоспособности на рынке подобных услуг.

– **ГИС «Интерактивная карта»**. Географическая информационная система контрактных территорий «Интерактивная карта» разработана для комитета геологии и недропользования МИР РК. Организована данная система в виде web-приложения на платформе Portal for ArcGIS.

– **Геоинформационная система г. Астаны (ГИС)**. ГИС представляет собой автоматизированную геоинформационную систему города Астаны, объединяющая все организации и картографическую информацию города в единую информационную среду, и предоставляющая информационно-аналитический инструментарий для изучения и регулирования общих тенденций развития города Астаны, а также для принятия управленческих решений.

– **ГИС технологии в Государственной системе предупреждения и ликвидации чрезвычайных ситуаций** создана в целях рационального планирования и принятия решений по оптимальному управлению территориями Казахстана в случае чрезвычайных ситуаций (ЧС). Она позволяет прогнозировать и моделировать развитие ЧС, планировать мероприятия по их ликвидации. Интегрирующим ядром является подсистема ГИС, разрабатываемая компанией ТОО «Казахстанский центр ГИС» на платформе ArcGIS. При создании ГИС используются принципы организации и построения инфраструктуры пространственных данных как элемента общегосударственных информационных ресурсов.

Кроме, вышеуказанных геоинформационных систем, на рынке ГИС Казахстана используется большое количество специализированных автоматизированных систем, включающих картографические данные. Так как, тема наших исследований связана с чрезвычайными ситуациями, обратим внимание на ГИС технологии, развивающиеся в этом направлении. К сожалению, в Казахстане ГИС предназначенной для моделирования, прогноза ущерба от ЧС нет, роль такой ГИС выполняет вышеуказанная «Корпоративная информационно-коммуникационная система Государственной системы предупреждения и ликвидации чрезвычайных ситуаций». Различные природные условия республики Казахстан предопределяют значительную ее подверженность природным катастрофам. Угрозе разрушительных землетрясений постоянно подвержены Алматинская, Восточно-Казахстанская, Жамбылская, Южно-Казахстанская области и г. Алматы. По данным Министерства по чрезвычайным ситуациям Республики Казахстан, землетрясения занимают первое место среди потенциально опасных стихийных бедствий для Казахстана. Этой опасности подвержено около 6 миллионов казахстанцев и около 450 тысяч квадратных километров площади республики. В сейсмически опасной зоне расположено 27 городов и более 400 населенных пунктов [5, 6].

Для определения отличительных свойств и качеств ГИС ITRIS (Integrated Tsunami Research and Information System), разработанной в Институте вычислительной математики и математической геофизики СО РАН совместно с ООО «ГеоСистема», рассмотрим геоинформационные системы, имеющие отношение к чрезвычайным ситуациям.

1. Программные средства ГИС «Экстремум» предназначена для оценки последствий разрушительных землетрясений, включает операционную среду, средства организации и проведения видеоконференций, программы для расчета последствий землетрясений. Кроме того, в состав ГИС входит комплект программ, что позволяет хранить, систематизировать и обрабатывать значительные объемы картографической и семантической информации, прогнозировать последствия землетрясений, а также обосновывать эффективные сценарии реагирования.

2. Платформа RQE EQECAT используется для анализа потенциальных последствий стихийных бедствий по всей планете. Первый инструмент для моделирования под названием RQE компания EQECAT представила в январе 2013 г. Он включает более 180 моделей природных катаклизмов для 96 стран и территорий на 6 континентах. Модель расчета финансовых потерь RQE использует статистику землетрясений, тропических циклонов и ураганов, тяжелых конвективных штормов, зимних штормов, наводнений и прочих стихийных бедствий за 300 000 лет.

3. ГИС Seismo Map реализована в клиент-серверной архитектуре с тонким клиентом. Она выполняет экспресс-анализ сейсмической активности в географическом контексте Google Maps API и предназначена как для специалистов, так и для широкого круга пользователей сети Интернет.

4. ГИС Digital faults выявляет векторные тенденции возбуждения очагов землетрясений в областях динамического влияния разломов и оценки параметров деформационных волн.

5. ГИС GIS-EEDB решает пространственные геодинамические задачи, связанные с изучением современного сейсмогеодинамического процесса на разных масштабных уровнях — от локального до глобального.

На мировом рынке геоинформационных систем для потребителей представлено большое количество специализированных систем. Можно отметить, что в Казахстане, в основном, ГИС представлены для различных отраслей экономики и государственного управления. В данной работе мы продемонстрируем возможности ГИС Итрис для моделирования опасных природных явлений и для обработки и анализа геоданных.

2 Геоинформационная система ITRIS

В настоящее время для проведения сейсмического мониторинга и анализа данных используются различные информационные технологии позволяющие автоматизировать процесс обработки сейсмологических данных и визуализации полученных результатов. Одним из таких современных инструментов является система ITRIS, разработанная в рамках лаборатории математических методов геофизики ИВМиМГ СО РАН. Система ITRIS, является продуктом совместных усилий как ученых, занимающихся фундаментальными разработками в области изучения природных катастроф, так и специалистов по информационным технологиям. Геоинформационная система ITRIS основана на принципах ГИС-технологий и объединяет в своем составе специализированные базы данных, программные компоненты для моделирования, инструменты для обработки и анализа геоданных, включающих спутниковые снимки, цифровые модели суши и морского дна, материалы дистанционного зондирования [7, 8]. Особенностью программы является пользовательский интерфейс, позволяющий легко выполнять обработку, поиск и трехмерную визуализацию пространственных данных. Графическая оболочка программы написана на языке C# и построена в качестве картографической системы ГИС-типа, она обеспечивает легкую и эффективную манипуляции картами, 3D-моделями и данными.

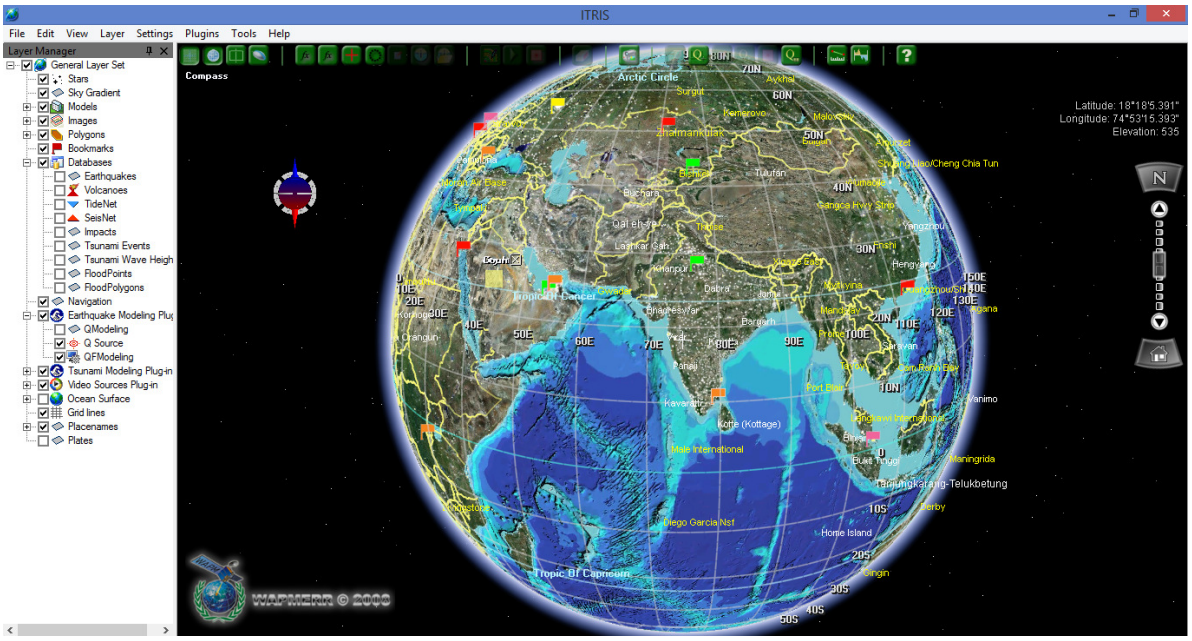


Рис. 1: Интерфейс геоинформационной системы ITRIS

В системе ITRIS успешно используются модули прогнозирования и оценки ущерба при землетрясениях, возможно моделирование и других природных катастроф, таких как цунами, наводнения, извержения вулканов, сели и пр. Для координации работы организаций по чрезвычайным ситуациям и для научных исследований в области моделирования природных катастроф необходима максимально полная и достоверная информация о том или ином событии. Система ITRIS включает в себя специализированные реляционные базы данных. В зависимости от пользовательской задачи база данных может быть дополнена другими видами данных. Интерфейс программы представлен на рисунке 1.

В системе ITRIS доступны такие базы данных природных явлений как землетрясения, вулканы, цунами, высоты цунами, удары метеоритов, наводнения, TideNet (сеть датчиков наблюдений за высотой волны, прилива), SeisNet (сеть датчиков наблюдений за сейсмической активностью).

Основные опции для работы с базой данных доступны в меню ***Tools*** и реализуются с помощью инструмента ***Data Viewer***, который позволяет, открыв необходимую базу данных, выполнить поиск, выборку, сортировку в соответствии с заданными параметрами. База данных землетрясений (Рисунок 2) состоит из таблиц, в которых содержатся данные о дате и времени, координатах эпицентра, глубине и магнитуде землетрясения.

Полезной функцией, реализованной в ITRIS, является возможность выполнения различных видов выборки, с помощью которых пользователь сможет указывать территорию:

– по территории, пункт *Select Area* расположен на панели инструментов, он позволяет задать область на карте для проведения выборки из списка данных. На рисунке 3 отмечена территория Казахстана и показаны эпицентры произошедших землетрясений, каждая окружность соответствует отдельному явлению, а ее размер и цвет соответствуют параметрам землетрясения (Рисунок 2).

– по фильтру, пункт *Filter* позволяет пользователю задать диапазоны значений для интересующих его полей данных. После применения фильтра пользователь визуально может увидеть эпицентры землетрясений. В диалоговом окне *Filter* пользователь с помощью выбора широты и долготы, определяет землетрясения, произошедшие на определенной территории Казахстана.

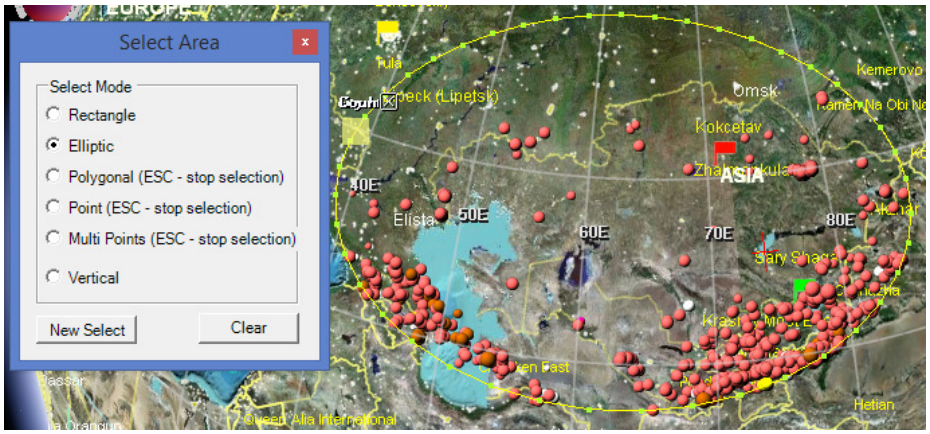


Рис. 2: Диалоговое окно *Select Area*.

Проведем моделирование землетрясения и оценку возможных ущерба на территории Казахстана с параметрами: $M = 7$, $Lon = 43.40$, $Lan = 77.09$, $Depth = 40$. Для этого воспользуемся инструментом *Earthquake Assessment Viewer*, который позволяет провести экспертную оценку в графическом или, при необходимости, в табличном виде.

В системе ITRIS выполняется моделирование параметров источника землетрясения, которое позволяет спрогнозировать ущерб от землетрясения, с обозначением населенных пунктов и степени возможного повреждения. В первую очередь, для определения источника землетрясения пользователю необходимо выбрать режим моделирования. Для определения места источника (диалоговое окно *Source Editor*) в программе предусмотрено два режима: 1) *Simple* — предназначен для простых пользователей; 2) *Advance* — предназначен для специалистов в сейсмологии и геофизике. После выбора режима необходимо ввести начальные параметры [7].

Затем необходимо провести моделирование, отметив область, интенсивность, эпицентр землетрясения. Если эксперимент сделан правильно, система выводит сообщение об успешном завершении. После этого появится окно *Loss Assessment Viewer* в котором отображаются две наиболее современные шкалы сейсмической интенсивности (Рисунок 3): это международный проект EMS-98 и общероссийский проект MMSK-92. В Казахстане используется MMSK-92.

Прежде, чем начать оценку повреждений, пользователю нужно выбрать необходимые параметры в следующих пунктах:

– *Assessment* — необходимо выбрать файл сформированный на основе выбора источника в *Source Editor*.

– *Epi. distance/Intensity* — указывается расстояние от эпицентра и интенсивность землетрясения.

– *Options* — в этом разделе пользователю необходимо выбрать шкалу EMS или MMSK. После чего нужно указать тип зданий, а также индекс уязвимости *Vulnerability indices*.

– *Area, Place name, Area and place name* — выбрав способ отображения площади землетрясения, пользователь может отобразить названия местности или площадь землетрясения [7].

Для моделирования системой формируются таблицы, которые содержат информацию относительно повреждения зданий и возможного количества жертв. Для просмотра рассчитанной степени повреждений зданий пользователю необходимо выбрать шкалу EMS или MMSK, а затем указать тип зданий, для которого нужно отобразить прогнозные оценки и исследуемый уровень повреждений.

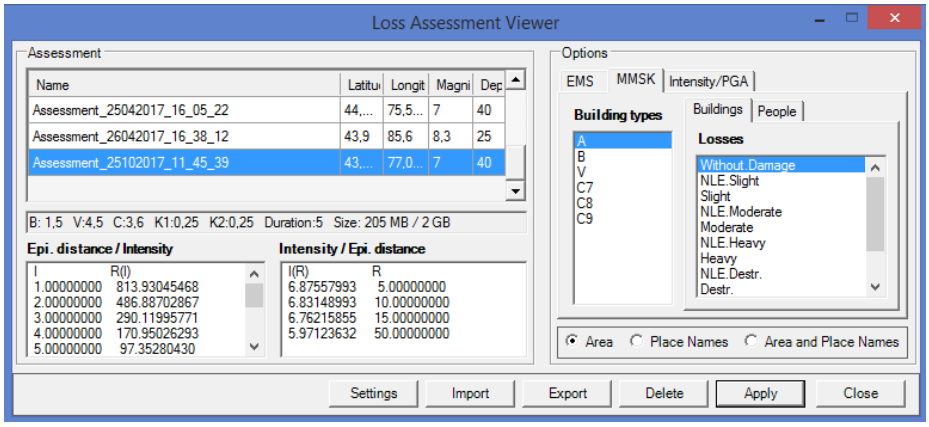


Рис. 3: Окно моделирования землетрясения *Loss Assessment Viewer*.

В результате моделирования система ITRIS дает результат в визуальном и численном виде. При отметке эпицентра красной звездой мы видим, что радиус ущерба повреждений зданий больше, чем возможный ущерб человеческих жертв. На рисунке 4 в визуальном виде окружностями указаны населенные пункты, размер которых соответствует численности населения. При моделировании возможного землетрясения пользователю предоставляется возможность увидеть количество пострадавшего населения в виде таблицы.

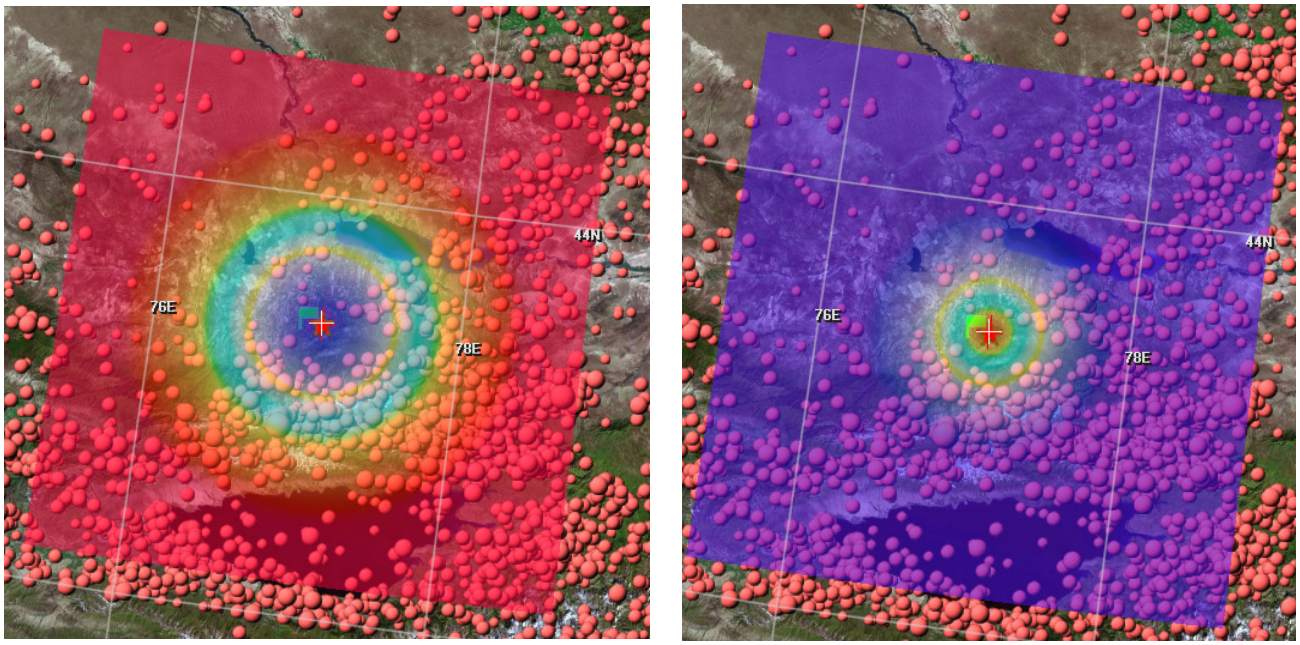
Заключение

Применение геоинформационной системы ITRIS для моделирования и прогнозирования землетрясений на территории Казахстана позволяет моделировать развитие событий по различным сценариям и получать наиболее полный и объективный прогноз. С помощью системы ITRIS, нам удалось выполнить несколько важных задач:

– дополнить базу данных землетрясений Казахстана;

– откорректировать базу данных о сейсмологических станциях Казахстана;

– в графическом виде отобразить сейсмический режим Казахстана на основе исторической базы данных;



а) ущерб повреждений зданий. б) ущерб возможных человеческих жертв.

Рис. 4: Графическое представление возможного ущерба от землетрясения.

– по параметрам эпицентра землетрясения смоделировать возможный ущерб;

– провести оценки повреждений зданий и возможных человеческих жертв, при землетрясении на территории Казахстана (на примере Алматинской области);

– по заданным параметрам в табличном виде спрогнозировать возможный ущерб.

Список литературы

[1] Гольдин, С.В. Преобразование и восстановление разрывов в задачах томографического типа. Новосибирск: Ин-т геологии и геофизики СО АН СССР, 1988. — 100 с.

[2] Романов, В.Г. Некоторые обратные задачи для уравнений гиперболического типа. Новосибирск: Наука, 1972.

[3] Романов, В.Г., Кабанихин, С.И. Обратные задачи геоэлектрики. Москва: Наука, 1991.

[4] Середович, В.А. Геоинформационные системы (назначение, функции, классификация). Новосибирск: СГГА, 2008. — 192 с.

[5] Садыкова А.Б. Сейсмическая опасность территории Казахстана. Алматы, 2012.

[6] Сыдыков А. Сейсмический режим территории Казахстана. Алматы: Наука, 2004.

[7] С.И. Кабанихин, О.И. Криворотько, И.В. Маринин. Трехмерная ГИС анализа и оценки природных и техногенных катастроф. Предварительный оперативный анализ и оценка последствий природных и техногенных чрезвычайных ситуаций. Новосибирск, 2013.

[8] A. Marchuk, I. Marinin, V. Komarov, A. Karas, D. Khidasheli. 3D GIS Integrated Natural and Man-made Hazards Research and Information System. Proceedings of The Joint International Conference on Human-Centered Computer Environments (HCCE) 2012, Aizu-Wakamatsu & Hamamatsu, Japan, Duesseldorf, Germany, March 8-13, 2012, Aizu-Wakamatsu, Japan, 2013. P. 225–229.

Криворотько Ольга Игоревна — к.ф.-м.н., науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, ст.преп. кафедры высшей математики ФФ НГУ;
e-mail: krivorotko.olya@mail.ru;
Кабанихин Сергей Игоревич — д.ф.-м.н., проф., чл.-корр. РАН, директор Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: kabanikhin@sscc.ru, ksi52@mail.ru
Турарбек Асем Турарбеккызы — докторант кафедры информационных систем механико-математического факультета Казахского национального университета им. аль-Фараби;
e-mail: assem.turarbek@kaznu.kz, turarbek_ asem@mail.ru
Бектемесов Мактагали Абдимажитович — д.ф.-м.н., проф. Казахского национального университета им. аль-Фараби;
e-mail: maktagali.bektessov@kaznu.kz
Маринин Игорь Валерьевич — ведущий программист Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: igor.marinin@inbox.ru
Садыкова Алла Байсымаковна — д.ф.-м.н., проф., заведующая лабораторией региональной сейсмичности ТОО «Институт сейсмологии» МОН РК;
e-mail: aluadin@mail.ru

КЛИЕНТ-СЕРВЕРНАЯ СИСТЕМА ВИЗУАЛИЗАЦИИ БОЛЬШИХ ОБЪЕМОВ ТРЕХМЕРНЫХ ДАННЫХ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Е. О. Кривошеин[1], Н. В. Снытников[2]

[1] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 517.968

Разработан программный комплекс для визуализации данных трехмерного моделирования, представляющих собой облака точек большого размера. Он имеет клиент-серверную программную архитектуру и может быть использован для различных приложений: от архитектурно-строительных САПР до обработки данных суперкомпьютерного моделирования в задачах астрофизики или физики плазмы. Работоспособность комплекса демонстрируется на решении задачи контроля соответствия строительного объекта его проектной документации.
Ключевые слова: Облака точек, октодерево, распределенные системы, системы автоматизированного проектирования

Введение

При суперкомпьютерном моделировании астрофизических процессов [1] или решении задач инженерного проектирования [2] (например, лазерного сканирования строительных объектов) возникает необходимость работы с большими объемами трехмерных данных — облаками точек (набором точек, каждая из которых определяется пространственной координатой и дополняется значением цвета или плотности). Общим для этих задач являются необходимость визуализации миллиардов точек, обеспечение возможности распределенного хранения, одновременного доступа и синхронизованной обработки несколькими пользователями в режиме общего редактирования. При этом требования к аппаратному обеспечению клиентских систем должны быть невысокими, чтобы иметь возможность доступа к визуализации данных с мобильного устройства (имеющего ARM процессор и 1 ГБ оперативной памяти) в сети с пропускной способностью 100 Мбит.

Подавляющая часть коммерческих и свободно распространяемых программных продуктов для работы с облаками точек являются однопользовательскими системами, требующими установку и работу с приложением на компьютере (ПК или мобильном устройстве), например, [4, 5, 6], для которых невозможно организовать одновременный доступ к модели несколькими пользователями. Однако в последние 2-3 года, в связи с бурным развитием клиент-серверных технологий, стали появляться клиент-серверные программные решения, предоставляющие доступ к модели, расположенной на сервере, непосредственно из браузера пользователя (с использованием технологии WebGL, поддерживаемой во всех современных браузерах: на ПК, смартфонах и планшетах). Среди них наиболее заметным некоммерческим проектом являются *potree.org* [7] и коммерческий сервис *PointCloudViz* [8]. В качестве основной структуры данных в них используется модифицируемое вложенное октодерево с уровнями детализации для эффективной пересылки данных и отрисовки, а также адаптирующимся под уровень размер точек для обеспечения гладкости изображения. Вместе с тем, программная архитектура подобных клиент-серверных решений предназначена для работы с предобработанными моделями (облаками точек) для визуализации данных на стороне пользователя, не позволяя модифицировать их в клиенте (браузере) во время работы, что ограничивает применимость для задач САПР.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, грант 16-07-00916.

В данной статье мы описываем программную архитектуру, основные алгоритмы и реализацию распределенной клиент-серверной системы: облака точек, структурированные в виде октодерева, хранятся непосредственно на сервере, по запросу пользователя происходит модификация данных (если требуется пользователю), передача необходимых данных на клиентскую машину и их дальнейшая визуализация в веб-браузере с выбором необходимой для пользователя степени детализации.

Работоспособность созданной программной системы демонстрируется на решении задачи контроля соответствия строительного объекта его проектной документации (Рис. 1). Такой контроль используется в реальной практике для выявления ошибок на ранних стадиях и отслеживании процесса строительства [3]. Его суть заключается в том, что для строящегося объекта (жилого дома или производственного помещения) выполняется регулярное трехмерное лазерное сканирование с помощью тахеометров или лидаров. В качестве выходных данных сканеры выдают облако точек (с числом точек в одном скане порядка сотни миллионов). Далее эти облака точек необходимо совместить с исходной проектной цифровой моделью строительного объекта и определить дефекты — разницу (расстояние) между данными сканирования и исходной моделью. Процедура совмещения включает в себя сдвиг и поворот, необходимые для минимизации разности расстояний между точками облака и проектной 3D модели. В существующих САПР точное совмещение выполняется в два этапа: предварительный (приближенный) и точный, основанный на алгоритме ICP (Iterative Closest Point, итеративная ближайшая точка) [9] для нахождения локального оптимального смещения.

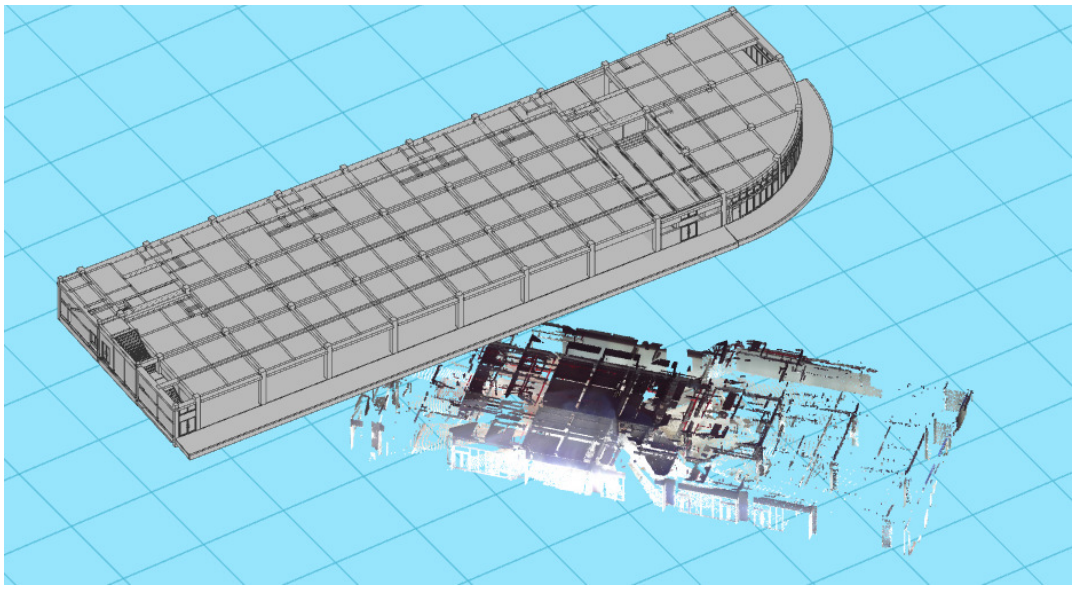


Рис. 1: 3D модель и соответствующее облако точек

1 Программная архитектура клиент-серверного приложения

Программная архитектура клиент-серверного приложения схематично представлена на Рис. 2.

Серверная часть представляет собой три основных модуля: веб-сервер, включающий в себя веб-интерфейс, обрабатывающий запросы пользователя, сервер-обработчик геометрических данных (облаков точек и цифровой модели), написанный на языке C++, и хранилище данных, включающее в себя СУБД с пользовательскими цифровыми моделями и загруженными облаками точек. При начале работы пользователь запускает веб-браузер (который является клиентским приложением) и подсоединяется к веб-серверу по HTTP протоколу. После выбора конкретной цифровой модели из базы данных выполняется ее запуск на сервере-обработчике и устанавливается прямое соединение между сервером-обработчиком и клиентским приложением с использованием протокола WebSocket, обеспечивающего возможность непрерывного и двустороннего сообщения между клиентом и сервером.

Сервер-обработчик должен предоставлять возможность реализации широкого спектра алгоритмов по работе с облаками точек. Так, для решения задачи сравнения актуального состояния строительного объекта с проектной цифровой моделью (Рис. 3) выполняются следующие шаги:

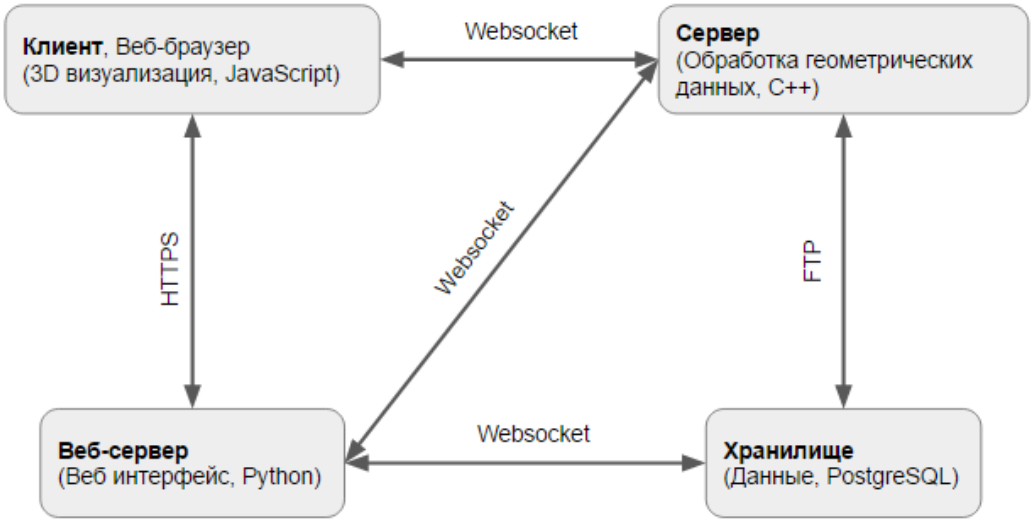


Рис. 2: Программная архитектура клиент-серверного приложения

- загрузка облака точек (результатов лазерного сканирования) на сервер в виде популярных форматов *.xyz* и *.ply*,
- декомпозиция облаков точек, позволяющая держать в памяти сервера только актуальное для пользователя подмножество точек (на основе структур данных octree, восьмеричного дерева), в результате чего точки в облаке распределяются между ограничивающими объемами (вокселями), и поиск ближайших соседей выполняется за логарифмическую сложность (а не квадратичную в случае полного пересчета всех расстояний между точками),
- клиент-серверная передача данных для визуализации, обеспечивающая визуализацию только актуальных для пользователя точек,
- фильтрация облака точек для удаления шумов,
- расчет нормалей и коэффициентов кривизны для каждой из точек, а также вычисление локальных признаков (предполагаемых поверхностей),
- приближенное выравнивание облака точек относительно исходной цифровой модели,
- точное выравнивание,
- расчет расстояний от точек облака до 3D модели.

2 Структура хранения облаков точек

Реализованная структура данных основана на октодереве, которое представляет собой рекурсивную сетку, где на каждом уровне 8 ячеек организованы в прямоугольный параллелепипед, — «ограничивающий объем» (bounding box, BB) облака точек. Размер BB равен двум ячейкам вдоль каждой оси: на каждом уровне пространство разбивается на две равные части. Во вложенном октодереве все узлы содержат точки — и внутренние, и листовые. Распределение точек по уровням октодерева позволяет подгружать их частями по необходимости, это в свою очередь дает возможность реализовать уровни детализации без дублирования точек. Точки хранятся в файлах на диске, для каждого узла вложенного октодерева — свой файл. Уровни детализации организованы через последовательную подгрузку узлов, начиная с корня октодерева. При отрисовке все узлы, попадающие в область видимости, подгружаются с диска в память. Пользователь может проходить через облако и «на лету» получать актуальные точки. Благодаря организации хранения облака точек через иерархию файлов, клиент может запрашивать узлы, как по HTTP через URL, так и по бинарным каналам (WebSocket).

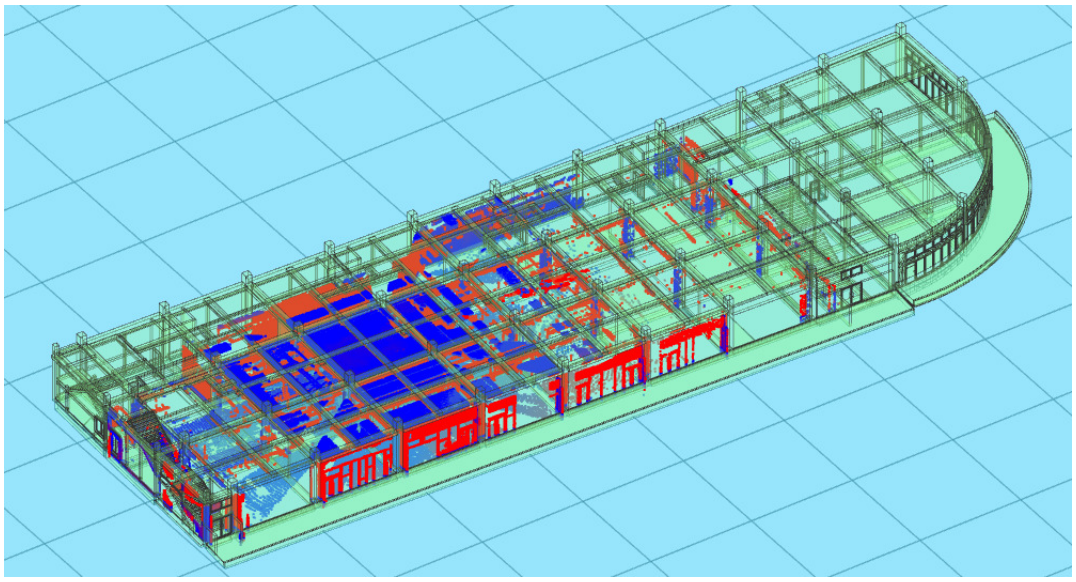


Рис. 3: Совмещенные 3D модель и облако точек. Точки окрашены в соответствии с их расстояниями до модели

Для построения октодерева на вход подается список трехмерных точек и BB всего облака точек; на выходе алгоритма построения получается вложенное октодерево. Иерархия строится таким образом, чтобы количество точек в узлах было приблизительно одинаковым. Построение выполняется в два этапа: заполнение листов октодерева и распределение точек между всеми уровнями в октодереве. На этапе заполнения (Рис. 2) точки складываются в листья октодерева: первые $nodeCapacity$ точек попадают в корень октодерева, если в корне оказывается больше $nodeCapacity$ точек — все точки корня распределяются между 8 детьми, теперь в октодереве 8 листьев и последующие точки добавляются в листья. В каждый момент времени на этапе заполнения точки находятся только в листьях октодерева. Таким образом, в конце этапа заполнения построено октодерево, в котором точки хранятся только в листовых узлах, а промежуточные узлы остаются пустыми. При таком построении нет необходимости держать точки в памяти, поэтому при количестве точек в дереве, большего заданного параметра $maxMemory$, точки перемещаются на диск, в памяти остается только пространственная иерархия октодерева. Благодаря этому алгоритм способен обрабатывать облака точек, не упираясь в ограничение по памяти и обеспечивает требование на работу с облаками размером 10^9 точек.

На втором этапе точки из узлов октодерева распределяются равномерно между всеми уровнями октодерева (Рис. 2).

Функция $Rand(min, max)$ моделирует случайную величину с плотностью вероятности:

$$f(x) = \frac{8^x}{\sum\limits_{n=0}^{depth} 8^n} \tag{1}$$

Где $depth$ — глубина октодерева. Такая функция выбрана для равномерного распределения точек между узлами вложенного октодерева.

3 Визуализация

При визуализации октодерево обходится в ширину, начиная с корня, для нахождения узлов, находящихся в области видимости камеры и имеющих достаточный видимый размер (Рис. 3).

Для этого ограничивающий объем узла проецируется на плоскость экрана, и если характерный размер проекции меньше некоторого заданного значения (например, 1 пиксель), узел игнорируется при отрисовке текущего кадра. На входе алгоритма задается бюджет в виде количества точек, которые необходимо визуализировать. Этот параметр позволяет пользователю контролировать уровень детализации облака и,

Алгоритм 1 Заполнение октодерева

```
1: function FillOctree(pointCloud, rootBoundingBox, nodeCapacity, maxMemory)
2:     octree ← octree ∪ rootBoundingBox
3:     for p in pointCloud do
4:         node ← GetLeafNodeContaining(octree, p)
5:         if size(node) + 1 < nodeCapacity then
6:             node ← node ∪ p
7:         else
8:             children ← GetChildren(node)
9:             octree ← octree ∪ children
10:            for point in node do
11:                idx ← GetSpatialIndex(node, point)
12:                children[idx] ← children[idx] ∪ point
13:            node ← ∅
14:        if size(octree) > maxMemory then
15:            SavePointsToDisk(octree)
16:    return octree
```

Алгоритм 2 Распределение точек по узлам октодерева

```
1: function DistributePoints(octree)
2:     for node in octree do
3:         LoadPointsFromDisk(node)
4:         parents ← GetParents(node)
5:         for point in node do
6:             r ← Rand(0, size(parents))
7:             parents[r] ← parents[r] ∪ point
8:     return octree
```

следовательно, производительность отрисовки. Если количество точек в узле, добавленное к общему количеству видимых точек, не превышает бюджета, то узел добавляется в бинарную кучу (binary heap). Бинарная куча позволяет эффективно извлекать элементы по приоритету. Приоритет узла обратно пропорционален весу $weight = Distance(node, camera)$, вычисляемому как расстояние от узла до камеры, спроецированное на прямую, перпендикулярную плоскости экрана и проходящую через его центр. Если расстояние меньше характерного размера узла, то назначается максимальный приоритет. Узлы, которые попали в бинарную кучу для визуализации, но не присутствуют в памяти клиента, должны быть запрошены с сервера. Сервер в ответ на запрос возвращает бинарный массив с точками, который будет без дополнительной обработки загружен в память видео-процессора клиента. Все подгруженные узлы попадают в кэш («Least Recently Used») и будут переиспользованы без подгрузки при очередном попадании в область видимости.

Заключение

Была разработана клиент-серверная система для визуализации облаков точек больших объемов. Представлена общая схема программной архитектуры и алгоритмы для построения структур данных для хранения облаков точек на сервере, а также для их визуализации на клиенте. Реализованные алгоритмы с механизмом уровней детализации обеспечивают возможность интерактивной навигации по облаку точек в реальном времени. Работоспособность системы протестирована на реальных индустриальных данных лазерного ска-

Алгоритм 3 Алгоритм визуализации

```
1: function RENDER(root, camera, budget)
2:     numVisiblePoints ← 0
3:     visibleNodes ← ∅
4:     loadingQue ← ∅
5:     binHeap ← binHeap ∪ root
6:     while size(binHeap) > 0 do
7:         node ← Pop(binHeap)
8:         if IsInsideFrustum(camera, node) = false then
9:             continue
10:        if numVisiblePoints + size(node) > budget then
11:            continue
12:        numVisiblePoints ← numVisiblePoints + size(node)
13:        if IsLoaded(node) then
14:            visibleNodes ← visibleNodes ∪ node
15:        else
16:            loadingQue ← loadingQue ∪ node
17:        for child in node do
18:            if ProjectedOnScreen(node) < 1 then
19:                continue
20:            weight ← Distance(node, camera)
21:            if weight < BoundingSphereRadius(node) then
22:                weight ← ∞
23:            binHeap[1/weight] ← node
24:    return visibleNodes
```

нирования строительных объектов (с десятками миллионов точек в одном скане) на примере решения задачи приближенного выравнивания, которое обеспечивает автоматическое выравнивание облака точек и строительного объекта.

Список литературы

[1] Снытников Н.В. Масштабируемый параллельный алгоритм для моделирования трехмерной динамики гравитирующих систем методом частиц // Вестник УГАТУ. 2016. Т. 20. С. 137–142.

[2] А.Г. Ершов, И.А. Рыков, Н.В. Снытников. Как создается инженерное наукоемкое ПО мирового класса // Наука из первых рук, номер 2 (50). 2013. С. 80–95.

[3] Burcu Akinci, Frank Boukamp, Chris Gordon, Daniel Huber, Catherine Lyons, and Kuhn Park. A formalism for utilization of sensor systems and integrated project models for active construction quality control //Automation in Construction, 2006, 15(2), pp. 124–138

[4] Point Cloud Library // http://www.pointclouds.org

[5] Geomagic 3D Scanning and Reverse Engineering Software // http://www.geomagic.com/en/products-landing-pages/scanning

[6] Trimble Realworks // https://geospatial.trimble.com/products-and-solutions/trimble-realworks

[7] Potree: Rendering Large Point Clouds in Web Browsers // http://www.potree.org

[8] PointCloudViz (Mirage Technologies: point cloud visualization and analysis) // http://www.pointcloudviz.com/

[9] Paul J. Besl and Neil D. McKay. A method for registration of 3-d shapes. // IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell, 1992, 14(2), pp. 239-256

Евгений Олегович Кривошеин — студент Новосибирского государственного университета;
e-mail: evgeny.krivoshein@gmail.com.
Николай Валерьевич Снытников — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: nik@ssd.sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕУСТАНОВИВШЕГОСЯ ДВИЖЕНИЯ ВОДЫ В ДЕЛЬТЕ Р. ЛЕНЫ

А.И. Крылова[1], Е.А. Антипова[2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 551.482.215.1

В рамках одномерной постановки задачи рассматривается моделирование неустановившегося движения воды в открытых руслах дельты реки Лена в гидравлическом приближении. Численное решение уравнений Сен-Венана для многорукавной устьевой области р. Лена основано на использовании одномерного математического описания процессов в каждом звене речной сети и формулировании условий сопряжения в точках разветвления. Для решения задачи используется специально разработанный метод прогонки по графу типа «дерево» для разветвленных и закольцованных участков речной сети [1]. Представлены результаты расчета распределения стока и уровня свободной поверхности по магистральным протокам дельты.

Ключевые слова: неустановившееся движение воды, гидравлическое приближение, уравнения Сен-Венана, многорукавное устье дельты реки, магистральные протоки, расход воды, уровень свободной поверхности.

Введение

Исследования водного режима устьев рек является одним из важных вопросов гидрологии речных дельт в условиях изменяющегося климата и увеличивающейся антропогенной нагрузки на природные речные объекты. С помощью математического моделирования неустановившегося движения жидкости в открытых руслах можно осуществить расчет основных характеристик речного стока. Изучение закономерностей изменений расхода воды и уровня свободной поверхности в дельте реки Лена является основной задачей данной работы.

В работе представлен гидродинамический метод описания сложной дельтовой системы, основанный на численном решении уравнений Сен-Венана с помощью устойчивой неявной разностной схемы. Методика решения базируется на использовании одномерного математического описания неустановившихся течений в каждом звене речной сети и формулировании условий сопряжения потоков в точках разветвления. При решении используется устойчивый метод прогонки по графу типа «дерево» для разветвленных и закольцованных участков системы русел.

Для применения численных методов решения уравнений Сен-Венана в условиях естественных водотоков приобретает важное значение подготовка гидравлических и морфометрических данных для обеспечения достаточной точности решения.

В данной работе рассматривается математическая модель сложноразветвленной дельты реки Лена, описывающая водный режим от с. Кюсюр в нижнем течении реки до впадения речных вод в море Лаптевых. Исследуется водный режим пяти магистральных проток дельты: Быковской, Трофимовской, Сардахской, Туматской и Оленёкской. Цифровая модель рельефа дельты, необходимая для учета в уравнениях движения, получена на основе географических карт и спутниковых фотографий земной поверхности из системы «Google Earth».

1 Постановка задачи

Система гиперболических дифференциальных уравнений, описывающая неустановившееся медленно изменяющееся движение воды в открытом русле без учета ветрового и барического воздействия, без учета пути-

вого притока и в предположении об одномерности потока имеет следующий вид:

$$B\frac{\partial Z}{\partial t}+\frac{\partial Q}{\partial x}=0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{Q^2}{\omega}\right)=-g\omega\left(\frac{\partial Z}{\partial x}+\frac{Q|Q|}{K^2}\right), \tag{2}$$

где x — координата, отсчитываемая вдоль оси русла; t — время; $Q(x,t)$ — расход воды; $Z(x,t)$ — отметка свободной поверхности воды; $B(x,h)$ — ширина свободной поверхности воды при глубине $h(x,t)$; $\omega(x,h)$ — площадь поперечного сечения потока; $K(x,h)=\omega\frac{1}{n}h^{2/3}$ — модуль расхода [2], где $n(x)$ — коэффициент шероховатости; g — ускорение силы тяжести.

Сложноразветвленный устьевой участок реки может быть представлен в виде системы, состоящей из двух типов элементов (участков открытых русел и узлов разветвления), которую можно представить в виде некоторого плоского графа (рис. 1). При этом участкам соответствуют ребра графа (отрезки оси x), а узлам — его вершины.

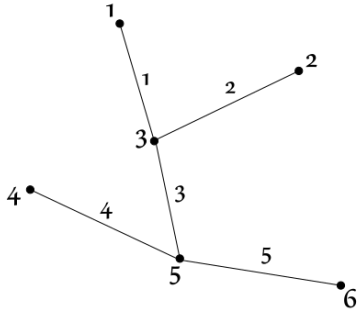


Рис. 1: Пример схематизации устьевого участка в виде плоского графа

На полученном графе рассматриваем систему уравнений (1) – (2). Расход воды и уровень свободной поверхности являются важнейшими величинами, полностью описывающими движение потока воды. Поэтому в качестве неизвестных функций на отрезках выбираются функции $Q(x,t)$ (расход воды) и $Z(x,t)$ (уровень свободной поверхности) как распределенные параметры, а в вершинах — $Q_*(t)$ и $Z_*(t)$ (сосредоточенный приток или отток и уровень в узле) как сосредоточенные параметры.

Начальные условия для распределенных параметров задаются на каждом отрезке

$$\begin{cases}Q(x,0)=Q^0(x),\\ Z(x,0)=Z^0(x).\end{cases} \tag{3}$$

Для сосредоточенных параметров задаются условия сопряжения в качестве баланса расходов в узле и связей между отметками уровня на концах участков и в узле. Граничные условия в начальных и концевых створах системы рассматриваются как частный случай условий сопряжения,например, в виде зависимости расхода $Q_*=f(t)$ или уровня $Z_*=Z(t)$ от времени.

2 Численный метод решения

Эффективными методами решения задач о гидрологическом режиме сложноразветвленных открытых русел являются численные методы, основанные на использовании неявных разностных схем. Неявные схемы, абсолютно устойчивые при любых соотношениях параметров разностной сетки, позволяют выбирать шаги сетки, исходя из соображений необходимой точности.

Сформулируем систему (1) - (2) в характеристической форме, переход к которой удобен для единообразного представления разностных уравнений для внутренних и граничных точек отрезков

$$R\frac{\partial U}{\partial t}+\Lambda R\frac{\partial U}{\partial x}=F, \tag{4}$$

где

$$U = \begin{pmatrix} Q \\ Z \end{pmatrix}, \qquad R = \begin{pmatrix} 1 & -B(v-c) \\ 1 & -B(v+c) \end{pmatrix},$$
$$F = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}, \qquad \Lambda = \begin{pmatrix} v+c & 0 \\ 0 & v-c \end{pmatrix}, \tag{5}$$
$$F_{1,2} = g\omega \left[Fr \cdot I - \frac{Q|Q|}{K^2} \right].$$

Здесь $Fr = \dfrac{v^2}{c^2}$ — число Фруда; $c = \sqrt{\dfrac{g\omega}{B}}$ — скорость распространения малых возмущений; $v = \dfrac{Q}{\omega}$ — средняя по течению скорость потока.

В используемой неявной разностной схеме производные по времени аппроксимируются с первым порядком точности, а по пространству — со вторым. В граничных точках $n = 0$ и $n = N$ используются разностные соотношения, соответствующие только характеристическим направлениям.

С учетом вышеизложенного получим на каждом участке систему разностных уравнений

$$A_n \left(U_{n+1}^{k+1} - U_{n-1}^{k+1} \right) + B_n U_n^{k+1} = C_n, \tag{6}$$
$$n = 1, 2, \ldots, N-1,$$

где

$$A_n = \frac{\tau}{2\triangle} \left(\Lambda R \right)_n^k,$$
$$B_n = R_n^k - \tau \left(\frac{\partial F}{\partial U} \right)_n^k, \tag{7}$$
$$C_n = B_n^k U_n^k + \tau F_n^k.$$

Для граничных точек ($n = 0, n = N$) разностные уравнения соответственно имеют вид:

$$2A_0^{(2)} U_1^{k+1} + \left(B_0^{(2)} - 2A_0^{(2)} \right) U_0^{k+1} = C_0^{(2)}, \tag{8}$$

$$\left(B_N^{(1)} + 2A_N^{(1)} \right) U_N^{k+1} - 2A_N^{(1)} U_{N-1}^{k+1} = C_N^{(1)}, \tag{9}$$

где индекс (1) или (2) означает, что берется только первая или вторая строка матриц.

Система уравнений (6), (8), (9) не замкнута, и для ее замыкания необходимо привлечь граничные условия или условия сопряжения. В работе [1] для решения таких систем предлагается вариант метода прогонки, который учитывает тип системы русел (каналов) и трехдиагональную структуру матрицы разностных уравнений. При решении получившейся системы линейных алгебраических уравнений для разветвлений с «кольцами» учитывается структура одномерного графа «дерево», а для простых разветвлений без «колец» используется метод параметрической прогонки.

3 Сравнение численного решения с аналитическим

При определенных дополнительных ограничениях на параметры русла система уравнений (1) – (2) может быть сведена к параболическому дифференциальному уравнению конвекции-диффузии в частных производных.

$$Q_t - \frac{K^2}{2B|Q|} Q_{xx} + \frac{K_h Q}{BK} Q_x = 0, \tag{10}$$

где $a = \frac{K^2}{2B|Q|}$ — коэффициент диффузии, $b = \frac{K_h Q}{BK}$ — скоростью конвекции. При постоянных a и b с помощью метода Фурье (метода разделения переменных) может быть построено аналитическое решение полученного уравнения, удовлетворяющее начальным и граничным условиям для расхода воды в русле реки

$$\begin{cases} Q(x,0) = Q_0(x), \\ Q(0,t) = Q_1(t), \\ Q(L,t) = Q_2(t). \end{cases} \tag{11}$$

Проведено сравнение аналитического решения уравнения конвекции-диффузии (10) – (11) с численным решением системы (1) – (2) . Для этого был повторен эксперимент с участком реки Кубань, приведенный в статье [3]. Средняя величина уклона дна на рассматриваемом участке принималась равной $1,8 \cdot 10^{-3}$, что позволяет использовать для описания движения паводковой волны уравнение (10).

В качестве исходных данных рассматривались следующие зависимости:

$$\begin{aligned} Q_0(x) &= \left(6.0606 \cdot 10^{-10}x^2 - 2.739 \cdot 10^{-4}x + 100\right) \cdot 4, \\ Q_1(t) &= \left(2.0552 \cdot 10^{-15}t^3 - 7.663 \cdot 10^{-10}t^2 + 1.4 \cdot 10^{-4}t + 100\right) \cdot 4, \\ Q_2(t) &= \left(1.956 \cdot 10^{-15}t^3 - 9.285 \cdot 10^{-10}t^2 + 2.294 \cdot 10^{-4}t + 80.2581\right) \cdot 4. \end{aligned} \tag{12}$$

Длина рассматриваемого участка по руслу реки $L = 90$ км, ширина прямоугольного русла $B = 70$ м, начальная глубина $h_0 = 2.5$ м, коэффициент шероховатости $n = 0.04$. За расчетный период был выбран промежуток времени равный 5 суткам. Расчетный шаг по длине Δx составлял 0.5 км, а шаг по времени $\Delta t = 0.5$ часа. Коэффициент диффузии a и скорость конвекции b принимались равными 11635 и 3.5759, соответственно. Данные значения являются усреднением по времени от значений этих параметров в численном решении.

Результаты сравнительного анализа представлены на рис. 2. Расходы воды в зависимости от времени приведены в начале, в середине и в конце участка. Также представлено численное решение в каждом узле участка, где синим показано изменение расхода по времени в граничных точках, а красным во внутренних узлах сетки.

Полученные результаты показывают сходимость численного решения для выбранного режима потока.

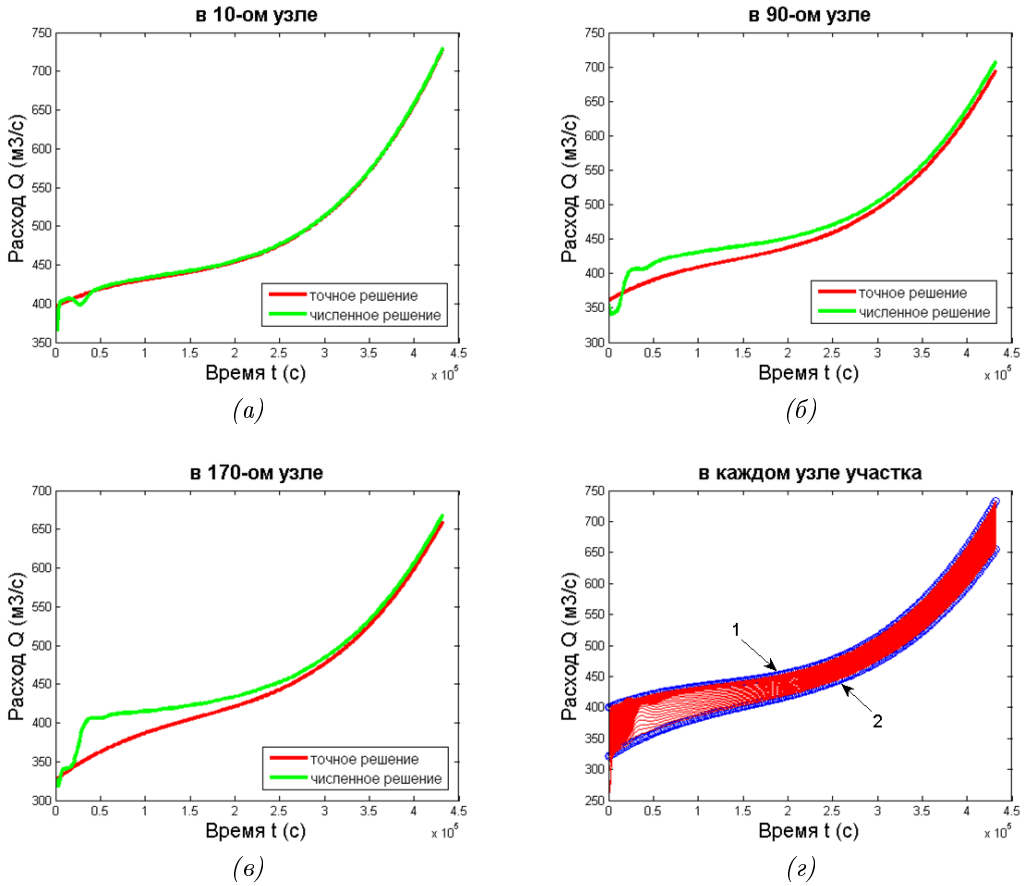


Рис. 2: Сравнение аналитического решения задачи (10), (12) с численным решением задачи (1)–(2), (12) *(а)* в начале, *(б)* в середине и *(в)* в конце участка реки Кубань; *(г)* численное решение в каждом узле расчетной сетки, где синим обозначено изменение расхода по времени в граничных точках (1 — в начальной, 2 — в конечной), красным — во внутренних узлах сетки.

4 Численное моделирование неустановившегося движения воды в дельте р. Лены

В качестве объекта исследования была выбрана сложноразветвленная дельта р. Лены, включающая пять основных магистральных проток: Быковскую, Трофимовскую, Сардахскую, Туматскую и Оленекскую (рис.3).

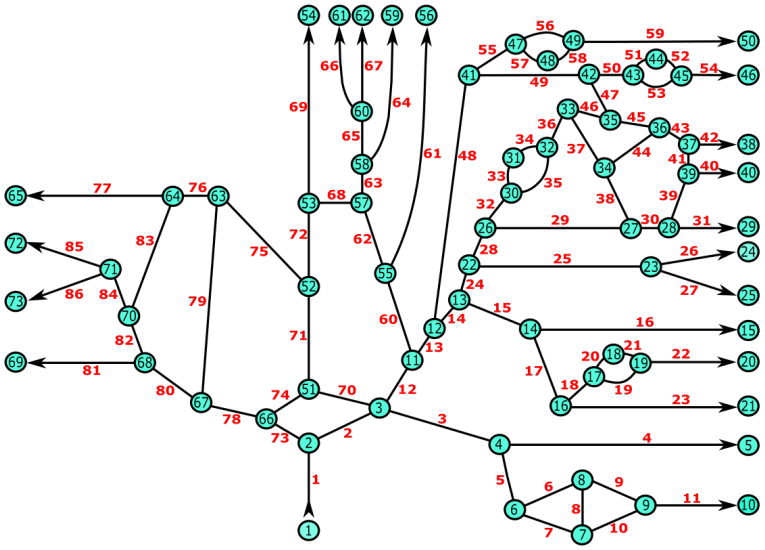


Рис. 3: Схематизация русловой сети дельты р.Лены в виде графа [5], где ⑤ — номер вершины, 12 — номер участка

Предполагается, что протоки дельты имеют параболическую форму русла, за исключением некоторого количества участков в Трофимовской протоке. Расчетный шаг по времени Δt составлял $0,5$ часа, а шаг по пространству Δx был различным на разных участках дельты, но в среднем составлял 500 м.

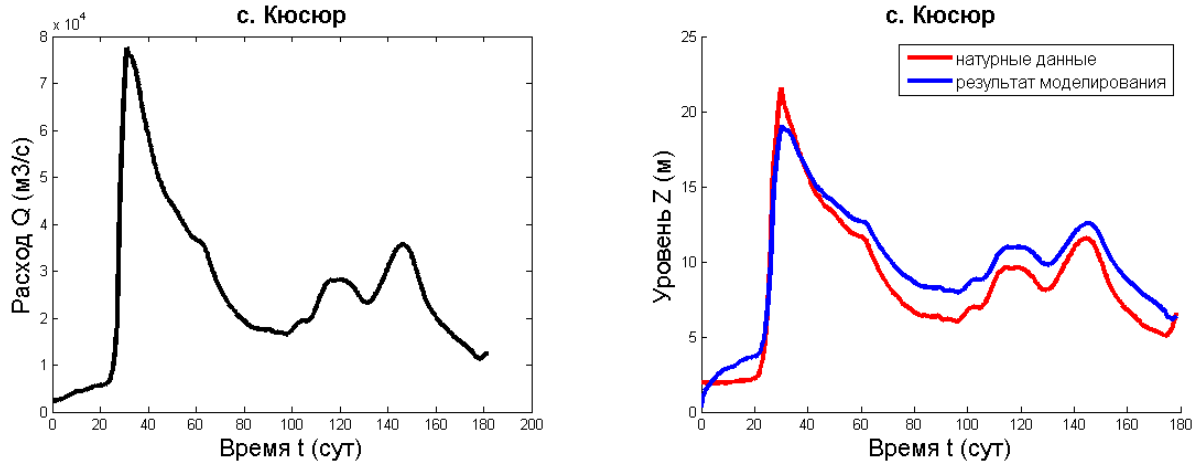
Ввиду того, что на начальный момент времени значения расходов воды в рукавах были неизвестны, расчет проводился в два этапа. Сначала был проведен процесс установления. В качестве начальной ширины были использованы натурные данные, полученные с помощью географических карт дельты р. Лены и программы *Google Earth*. Начальный уровень свободной поверхности и расход воды на всех участках предполагался равным нулю, кроме первой вершины, в которой было задано постоянное граничное условие на расход. Затем начальная глубина потока в каждом узле расчетной области приближенно рассчитывалась по следующей гидролого-морфометрической формуле, предложенной в работе [4].

$$h = 0.42B^{1/3}.$$

Полученные в результате решения стационарной задачи для всех участков значения расхода воды задавались в качестве начальных условий при расчете неустановившегося движения. В качестве граничных условий на левой границе расчетной области задавался ход расхода воды по времени $Q = f(t)$. В данной работе не учитываются сгонно-нагонные колебания уровня моря, поэтому на правых границах, в вершинах впадения реки в море, уровень воды принимался постоянным, равным нулю. Для задания функции $f(t)$ использовались данные расхода воды на гидростворе в селе Кюсюр за 2008 год (рис.4а) [5], который является Международным геофизическим годом. Моделирование гидравлического режима в дельте реки Лена проводилось в период открытой воды с мая по октябрь.

На рис. 4б, 5 представлены результаты численного эксперимента: 4б) сравнение измеренного и расчётного уровней свободной поверхности воды в с. Кюсюр [5]; 5) изменение расхода воды во всех пяти главных протоках дельты реки Лена за исследуемый период, включающий две фазы гидрологического режима: половодье и межень.

В таблице представлены многолетние гидрологические данные распределения водного стока по основным протокам р. Лены за 1953-1990 гг. [6] и результаты численного эксперимента.



(а) *(б)*

Рис. 4: *(а)* данные о расходе воды и *(б)* динамика уровня свободной поверхности: измеренная и смоделированная в с. Кюсюр за 2008 год [5].

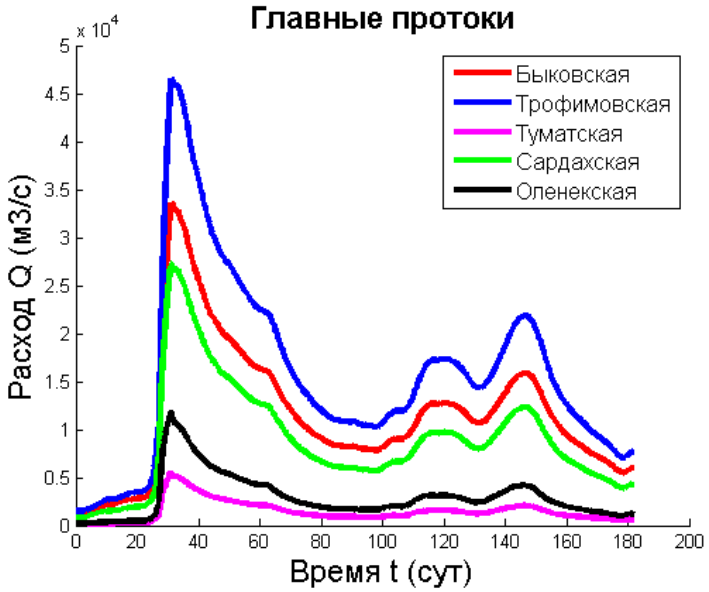


Рис. 5: Смоделированная динамика расхода воды в пяти главных протоках дельты реки Лена

Таблица 1: Процентное распределение расхода воды по протокам относительно суммарного количества поступающей в дельту воды: а — данные моделирования, б — данные, представленные в работе [6]

Период	Главные протоки							
	Быковская		Трофимовская и Сардахская		Туматская		Оленекская	
	а	б	а	б	а	б	а	б
Половодье (20 мая — 5 июня)	28.6	28	60	54	3.8	10	7.6	8
Межень (15 июля — 15 августа)	29.6	25	60.8	65	3.3	5	6.3	5
Период открытой воды	29.2	27	60.7	57	3.4	9	6.7	7

Заключение

Результаты расчета расходов и уровней воды в дельте р. Лены по представленной модели и их сравнение с данными измерений показали, что модель удовлетворительно описывает распределение расходов воды по основным протокам дельты. Ошибки расчёта для условий водного режима: межени и половодья, которые превышают предел точности гидрометрических измерений (5%), можно объяснить 1) принятой схематизацией русловой сети дельты; 2) грубыми оценками ширины и глубины русел основных проток и малых водотоков; 3) отсутствием полных данных о морфометрии как основных, так и боковых водотоков. Численное моделирование гидрологического режима, основанное на гидродинамическом методе расчета неустановившегося движения воды, позволяет получить характеристики одномерного потока, которые в натурных условиях измерить очень сложно.

Список литературы

[1] А.Ф.Воеводин, В.С.Никифоровская, А.С.Овчарова. Численные методы решения задачи о неустановившемся движении воды на устьевых участках рек // Гидрометеоиздат, Труды ААНИИ, т. 378. 1983. С. 23–34.

[2] В.В.Иванов, Е.П.Котрехов. Опыт численного моделирования неустановившегося движения воды в многорукавной дельте реки // Труды ААНИИ, т. 314. 1971. С. 16–35.

[3] Е.А.Семенчин, Н.В.Вандина. Анализ системы уравнений Сен-Венана аналитическими и численными методами // Научный журнал КубГАУ, № 64(10). 2010. С. 1–14.

[4] Р.С.Чалов, В.М.Панченко, С.Я.Зернов. Водные пути бассейна Лены. М.: МИКИС, 1995. 600 с.

[5] V.A.Shlychkov, G.A.Platov, A.I.Krylova. A coupled hydrodynamic system of the Lena River delta and the Laptev Sea shelf zone: the model tuning and preliminary results of numerical simulation // Bull. NCC. Ser.: Num. Model. in Atmosph. 2014. Vol. 14. P. 81–103.

[6] А.Ю.Гуков. Гидрология устьевой области реки Лена. М.: Научный мир, 2001, – 288 с.

Алла Ивановна Крылова — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: alla@climate.sscc.ru;
Екатерина Андреевна Антипова — студентка Новосибирского государственного университета;
e-mail: antipova_aea@mail.ru.
Дата поступления — 30 апреля 2017 г.

ОБ УЧЕТЕ КРИВИЗНЫ ГРАНИЦЫ ОБТЕКАЕМОГО ПРОФИЛЯ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ РАСЧЕТНОЙ СХЕМЫ ВИХРЕВОГО МЕТОДА ПОВЫШЕННОЙ ТОЧНОСТИ

К. С. Кузьмина, И. К. Марчевский

Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана, 105005, Москва

УДК 532.5

Рассмотрены вопросы построения численных схем повышенного порядка точности для решения граничного интегрального уравнения, возникающего при моделировании обтекания профилей вихревыми методами, относительно интенсивности вихревого слоя на границе профиля. Учтена криволинейность профиля: его форма аппроксимирована кубическими эрмитовыми сплайнами вместо прямолинейных панелей, которые обычно используются в вихревых методах. Решение на каждой криволинейной панели представлено в виде кусочно-линейной функции. Коэффициенты СЛАУ выражены определенными интегралами от известных функций. Для коэффициентов, численное интегрирование которых вызывает сложности, получены приближенные аналитические формулы. Разработанный метод обеспечивает 4-й порядок точности для средних величин интенсивностей вихревого слоя на панелях.

Ключевые слова: вихревой метод, интегральное уравнение, криволинейная граница, метод Галеркина

Введение

Бессеточные лагранжевы методы частиц, активно развиваемые как в нашей стране, так и за рубежом [1, 2, 3, 4], в ряде случаев позволяют эффективно решать многие актуальные практические задачи, среди которых отметим задачи аэрогидродинамики и аэрогидроупругости (метод дискретных вихрей — МДВ, метод вязких вихревых доменов — ВВД); моделирование вынужденной и свободной конвекции (метод вязких вихревых и тепловых доменов — ВВТД), а также сходные по математической постановке задачи электродинамики (расчет характеристик антенн), задачи рассеяния акустических и электромагнитных волн и др.

В основе указанных задач лежит решение граничного интегрального уравнения относительно искомой физической величины или ее потенциала. При этом граница обычно аппроксимируется ломаной или многоугольником (в двумерном случае) и «ломаной поверхностью» или многогранником (в пространственном случае), а интегральное уравнение аппроксимируется системой линейных алгебраических уравнений с заполненной матрицей.

Методические исследования показали, что такой подход в ряде случаев не обеспечивает высокого порядка аппроксимации, что сказывается на качестве численного решения задачи в целом. Это особенно проявляется при существенно неравномерной сетке на поверхности.

Целью работы является разработка схемы аппроксимации интегрального уравнения, обеспечивающей высокий порядок точности, на примере расчета обтекания профиля с помощью вихревых методов.

1 Постановка задачи

Рассмотрим задачу о моделировании двумерного течения несжимаемой среды вокруг неподвижного недеформируемого профиля. Математически задача сводится к отысканию интенсивности вихревого слоя, расположенного на границе профиля и оказывающего на среду такое же влияние, как и профиль [5]. Интенсив-

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента (проект МК-7431.2016.8) в рамках государственного задания вузам (проектная часть, проект 9.2422.2017/ПЧ).

ность вихревого слоя $\gamma(\vec{r})$ может быть найдена как решение интегрального уравнения, которое выражает собой условие прилипания (для вязкой среды) или непротекания (в случае идеальной среды) на профиле.

Среди двух известных подходов [6] к решению данной задачи наиболее перспективным представляется тот, в основу которого положено условие равенства нулю касательной компоненты предельного значения скорости среды на профиле. Он приводит к интегральному уравнению 2-го рода

$$\frac{1}{2\pi}\oint_K Q_\tau(\vec{r},\vec{\xi})\gamma(\vec{\xi})dl_\xi - \frac{\gamma(\vec{r})}{2} = f_\tau(\vec{r}), \quad \vec{r}\in K. \tag{1}$$

с равномерно ограниченным (для гладких профилей) ядром вида

$$Q_\tau(\vec{r},\vec{\xi}) = \frac{\vec{k}\times(\vec{r}-\vec{\xi})}{|\vec{r}-\vec{\xi}|^2}\cdot\vec{\tau}(\vec{r}),$$

где $\vec{\tau}(\vec{r})$ — орт касательной к профилю. Часто используемый альтернативный подход [6], имеющий в основе равенство нулю нормальной компоненты скорости среды, приводит к сингулярному уравнению 1-го рода с ядром Гильберта, интеграл в котором понимают в смысле главного значения по Коши [1].

Правая часть $f_\tau(\vec{r})$ уравнения (1) — известная функция, зависящая от формы профиля, скорости набегающего потока и распределения завихренности в области течения. Если рассматривается задача безвихревого обтекания, когда завихренность в потоке отсутствует, $f_\tau(\vec{r})$ имеет простой вид:

$$f_\tau(\vec{r}) = -\vec{V}_\infty\cdot\vec{\tau}(\vec{r}), \tag{2}$$

где $\vec{V}_\infty$ — скорость набегающего потока.

Уравнение (1) имеет бесконечное множество решений; для выделения единственного решения следует задать, например, величину суммарной завихренности на профиле [1], которая на практике обычно известна, исходя из физического смысла задачи:

$$\oint_K \gamma(\vec{\xi})dl_\xi = \Gamma. \tag{3}$$

Отметим, что требования о неподвижности и недеформируемости профиля несущественны; разрабатываемые схемы вихревых методов могут быть обобщены на случай произвольно движущегося профиля путем введения на его поверхности присоединенных слоев вихрей и источников [2, 7].

2 Расчетные схемы на профиле

2.1 Аппроксимация профиля прямолинейными панелями

Наиболее простым способом аппроксимации формы профиля является его замена многоугольником, состоящим из прямолинейных панелей. При этом на каждом прямолинейном участке границы (панели) распределение интенсивности вихревого слоя принимается, как правило, кусочно-постоянным или кусочно-линейным.

Наиболее точные из «кусочно-постоянных» схем обеспечивают второй порядок точности для величин средних интенсивностей вихревого слоя на панелях и первый порядок точности в норме L_1. «Кусочно-линейные» схемы оказываются незначительно более точными по отношению к средним интенсивностям вихревого слоя, но обеспечивают второй порядок точности в норме L_1. При этом точность резко снижается, если длины соседних панелей оказываются сильно различающимися.

Математически это объясняется тем, что вместо гладкого участка профиля в расчетах фактически приходится иметь дело с угловой точкой (рис. 1), в окрестности которой ядро уравнения (1) перестает быть ограниченным, а точное решение для такой геометрии профиля может иметь «нефизичную» особенность в угловой точке.

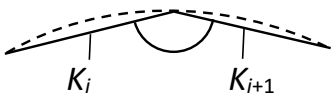


Рис. 1: Участок границы профиля и две прямолинейные панели, образующие угол

В случае равномерного или близкого к равномерному разбиению профиля на панели подобные особенности ядра на концах панелей компенсируют друг друга, тогда как при существенно различающихся длинах соседних панелей их влияние заметно сказывается на правильности вычисления коэффициентов соответствующей системы линейных алгебраических уравнений.

Следует также отметить, что при близком к равномерному разбиению профиля на панели наиболее продуктивным в смысле точности получаемого результата оказывается подход к решению уравнений (1), (3), имеющий в основе идеи разрывного метода Галеркина [10]. В соответствии с ним решение на каждой панели является комбинацией базисных функций — постоянной и линейной с нулевым средним. Коэффициенты разложения находятся из решения СЛАУ, которая выражает условие ортогональности невязки этим же базисным функциям, которые выступают, таким образом, и в качестве проекционных. При этом на границах панелей решение оказывается разрывным.

В качестве недостатка такого подхода следует отметить удвоение числа искомых величин и, соответственно, размерности соответствующей СЛАУ.

2.2 Аппроксимация профиля с учетом криволинейности панелей

В работе [9] предложена схема, учитывающая криволинейность границы профиля путем его аппроксимации гладкой кривой. Данная схема обеспечивает 4-й порядок точности для средних величин интенсивности вихревого слоя на криволинейных панелях, но является чрезвычайно трудоемкой для практического применения. В данной работе рассмотрим упрощенную схему, обеспечивающую тот же уровень точности решения граничного интегрального уравнения.

Пусть $\vec{C}_i$, $i = 1, \ldots, N$, — радиус-векторы вершин профиля; отрезки C_iC_{i+1} назовем хордами профиля. Как и в работе [9], профиль над i-й хордой аппроксимируется гладкой кривой, параметрическое уравнение которой имеет вид

$$\vec{r}_i(t) = \vec{C}_i + L_i^0 \left(t\,\vec{\tau}_i^0 + p_i(t)\,\vec{n}_i^0 \right), \quad t \in [0;\,1], \tag{4}$$

где значения $t = 0$ и $t = 1$ соответствуют началу и концу панели; L_i^0 — длина i-й хорды; $\vec{\tau}_i^0$ и $\vec{n}_i^0$ — орты касательной и нормали к i-й хорде профиля. В качестве $p_i(t)$ рассмотрим кубическую функцию

$$p_i(t) = \alpha_i\, t(t-1) + \beta_i\, t(t-1/2)(t-1), \tag{5}$$

где коэффициенты α_i и β_i находятся из условия совпадения касательных к исходной кривой и к криволинейной панели в ее концах (рис. 2) и вычисляются следующим образом:

$$\alpha_i = -\frac{1}{2}(\operatorname{tg}\varphi_i + \operatorname{tg}\psi_i), \quad \beta_i = (\operatorname{tg}\varphi_i - \operatorname{tg}\psi_i).$$

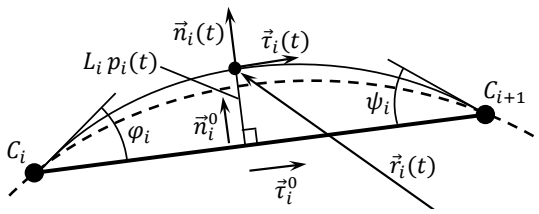


Рис. 2: Криволинейная панель и i-я хорда профиля

Отметим, что если участок исходного профиля над i-й хордой представляет собой гладкую кривую класса C^4, погрешность аппроксимации профиля будет величиной порядка $O(L_i^4)$.

2.3 Аппроксимация интегрального уравнения

Для построения расчетной схемы для поиска приближенного решения уравнений (1), (3) воспользуемся идеей разрывного метода Галеркина (DG) [10]. Для этого введем константные и линейные базисные функции $\varphi_0^i(t)$ и $\varphi_1^i(t)$, $i = 1, \ldots, N$, каждая из которых отлична от нуля только на i-й панели:

$$\varphi_0^i(t) \equiv 1, \qquad \varphi_1^i(t) = t - \frac{1}{2}, \quad t \in [0;\,1]. \tag{6}$$

Решение на каждой панели будем искать в виде кусочно-линейной по t функции:

$$\gamma\big(\vec{r}_i(t)\big) = \gamma_i\varphi_0^i(t) + \delta_i\varphi_1^i(t), \quad t \in [0;\,1], \quad i = 1, \ldots, N.$$

Коэффициенты разложения γ_i и δ_i можно найти из условия ортогональности невязки уравнения (1) базисным функциям $\varphi_0^k(t)$ и $\varphi_1^k(t)$.

Поскольку носителями базисных функций являются панели профиля, а условие ортогональности представляет собой равенство нулю интеграла от произведения невязки на эти базисные функции, можно рассмотреть невязку отдельно на i-й панели:

$$z_i(t) = \frac{1}{2\pi}\sum_{j=1}^{N}\left(\gamma_j\int_0^1 Q_\tau\big(\vec{r}_i(t),\,\vec{r}_j(\xi)\big)\,\varphi_0^j(\xi)\,J_j(\xi)d\xi + \delta_j\int_0^1 Q_\tau\big(\vec{r}_i(t),\,\vec{r}_j(\xi)\big)\varphi_1^j(\xi)\,J_j(\xi)\,d\xi\right) - \\ - \frac{\gamma_i\varphi_0^j(t) + \delta_i\varphi_1^j(t)}{2} - f_\tau\big(\vec{r}_i(t)\big), \quad i = 1, \ldots, N.$$

Здесь якобиан $J_j(\xi)$ вычисляется в соответствии с используемой аппроксимацией (4), (5) и имеет вид

$$J_j(\xi) = \left\|\frac{d\vec{r}_j(\xi)}{d\xi}\right\| = L_j^0\sqrt{1 + \left(\alpha_j\,(2\xi - 1) + \beta_j\left(3\xi^2 - 3\xi + \frac{1}{2}\right)\right)^2}.$$

Дискретный аналог уравнения (3) имеет вид

$$\sum_{j=1}^{N}\Bigg(\gamma_j\underbrace{\int_0^1\varphi_0^j(t)\,J_j(\xi)d\xi}_{L_j} + \delta_j\underbrace{\int_0^1\varphi_1^j(t)\,J_j(\xi)d\xi}_{L_j^*}\Bigg) = \Gamma.$$

В итоге приходим к системе линейных алгебраических уравнений, в которую введена дополнительная регуляризирующая переменная R по аналогии с методикой, разработанной в [1]:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} A^{00} + D^{00} & A^{01} + D^{01} & I_N \\ A^{10} + D^{10} & A^{11} + D^{11} & O_N \\ L & L^* & 0 \end{pmatrix}}_{M}\begin{pmatrix}\gamma\\ \delta\\ R\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b^0\\ b^1\\ \Gamma\end{pmatrix}.$$

Здесь блоки A^{pq} — квадратные матрицы размером $N \times N$; D^{pq} — диагональные матрицы, $p, q = 0, 1$; L и L^* — строки, составленные из длин панелей L_i и коэффициентов L_i^*; I_N — столбец из единиц; O_N — столбец из нулей; γ и δ — столбцы искомых коэффициентов; b^0 и b^1 — столбцы, образующие правую часть системы.

Коэффициенты матриц A^{pq}, D^{pq} имеют вид

$$A_{ij}^{pq} = \frac{1}{2\pi}\int_0^1\left(\int_0^1 Q_\tau\big(\vec{r}_i(t),\,\vec{r}_j(\xi)\big)\varphi_q^j(\xi)J_j(\xi)d\xi\right)\varphi_p^i(t)J_i(t)dt,$$

$$D^{pq} = \operatorname{diag}\left\{-\frac{1}{2\pi}\int_0^1 J_i(t)\left(\varphi_1^i(t)\right)^{p+q}dt\right\}, \quad p, q = 0, 1, \quad i, j = 1, \ldots, N.$$

Наиболее простой способ вычисления внедиагональных коэффициентов матриц A^{pq}, обеспечивающий требуемую точность, — численное интегрирование с использованием квадратурных формул Гаусса по 4 точкам.

Отметим, что вычислительная сложность процедуры вычисления интегралов может быть снижена: для расчета влияния панелей, расположенных далеко друг от друга, количество гауссовых точек может быть уменьшено. Более подробное исследование данного вопроса требует отдельного исследования и выходит за рамки данной работы.

В то же время точности предложенного алгоритма оказывается недостаточно, если рассматривается профиль с острой кромкой, когда соседние панели (ближайшие к кромке по обе стороны от нее) практически примыкают друг к другу. В этом случае требуется существенно большая точность интегрирования; этот вопрос также в данной работе не рассматривается.

Для диагональных элементов матриц A^{pq} имеются приближенные формулы:

$$A_{ii}^{00} \approx \Big(\frac{\alpha_i}{2\pi} - \frac{\alpha_i^3}{12\pi}\Big)L_i, \quad A_{ii}^{01} \approx \Big(\frac{\beta_i}{24\pi} - \frac{\alpha_i^2\beta_i}{144\pi}\Big)L_i, \quad A_{ii}^{10} \approx \Big(\frac{\beta_i}{12\pi} - \frac{23\alpha_i^2\beta_i}{720\pi}\Big)L_i, \quad A_{ii}^{11} \approx -\frac{\alpha_i^3}{144\pi}L_i.$$

Элементы матриц D^{pq} также можно вычислить приближенно по формулам

$$D_{ii}^{00} \approx -\Big(\frac{1}{2} - \frac{\beta_i^2}{80}\Big)L_i, \quad D_{ii}^{01} = D_{ii}^{10} \approx -\frac{\alpha_i\beta_i}{60}L_i, \quad D_{ii}^{11} \approx -\Big(\frac{1}{24} + \frac{\alpha_i^2}{180}\Big)L_i.$$

Длины панелей L_i и коэффициенты L_i^* с высокой точностью выражаются через длины хорд профиля L_i^0 по формулам

$$L_i \approx L_i^0\left(1 + \frac{\alpha_i^2}{6} + \frac{\beta_i^2}{40}\right), \quad L_i^* \approx L_i^0\alpha_i\beta_i\left(\frac{1}{30} - \frac{\alpha_i^2}{70}\right).$$

Коэффициенты правой части вычисляются по формулам

$$b_i^p = \int_0^1 f_\tau\big(r_i(t)\big)\,\varphi_p^i(t)J_i(t)\,dt, \quad p = 0, 1, \quad i = 1, \ldots, N.$$

2.4 Оценка точности решения задачи

В некоторых частных случаях, например, для задачи о расчете обтекания эллиптического профиля [9], используя методы теории конформных отображений, можно найти точное аналитическое решение для распределения $\gamma^*(s)$ интенсивности вихревого слоя вдоль профиля (здесь s — некоторый параметр, которым может быть параметризована граница профиля).

После решения системы линейных алгебраических уравнений и отыскания значений неизвестных γ_i и δ_i, $i = 1, \ldots, N$, распределение интенсивности вихревого слоя по панелям можно считать найденным. Приводя его к той же параметризации профиля, что и точное аналитическое решение, и сравнивая с ним в норме L_1:

$$\|\Delta\gamma\|_{L_1} = \oint_K |\gamma(s) - \gamma^*(s)|\,dl_s,$$

можно установить, что ошибка убывает пропорционально квадрату длины панелей, т. е. предложенная схема обеспечивает второй порядок точности.

Однако в вихревых методах помимо самого распределения интенсивности вихревого слоя по профилю представляют интерес величины суммарной завихренности на панелях, вычисляемые по найденному численному решению следующим образом:

$$\Gamma_i = \int_0^1 \big(\gamma_i\varphi_0^i(t) + \delta_i\varphi_1^i(t)\big)\,J_i(t)dt, \quad i = 1, \ldots, N.$$

Сравнивая их с интегралами Γ_i^* от точного аналитического решения, вычисляемыми вдоль панелей, получаем, что предложенная схема обеспечивает 5-й порядок точности, если под ошибкой понимать величину

$$\|\Delta\Gamma\|_{C^h} = \max_{i=1,\ldots,N} |\Gamma_i - \Gamma_i^*|,$$

и 4-й порядок для средних значений интенсивности вихревого слоя на панелях:

$$\|\Delta\gamma\|_{C^h} = \max_{i=1,\ldots,N} \left|\frac{\Gamma_i - \Gamma_i^*}{L_i}\right|,$$

3 Вычислительный эксперимент

На графике на рис. 3 приведены зависимости ошибки $\|\Delta\gamma\|_{C^h}$ от числа панелей при моделировании обтекания эллиптических профилей с различным соотношением осей при их разбиении на панели приблизительно равной длины. Видно, что разработанный численный метод обеспечивает 4-й порядок точности.

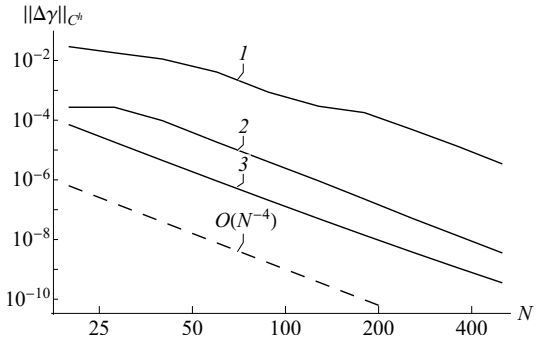


Рис. 3: Ошибка в определении средних величин интенсивности вихревого слоя по панелям в зависимости от их количества для эллиптических профилей с различным соотношением осей: *1* — 1:5; *2* — 1:2; *3* — 1:1; штриховая линия соответствует 4-му порядку точности (в логарифмическом масштабе)

Заключение

Разработана новая расчетная схема для решения граничного интегрального уравнения, возникающего при моделировании обтекания профилей вихревыми методами. Данная схема основана на учете кривизны профиля путем его аппроксимации с помощью эрмитовых сплайнов. Для численного решения интегрального уравнения использован подход, основанный на идеях разрывного метода Галеркина. Решение представляется в виде кусочно-линейной функции. Данный подход позволяет получить 2-й порядок точности в норме L_1 и 4-й порядок для средних интенсивностей вихревого слоя на панелях.

Список литературы

[1] Лифанов И. К. Метод сингулярных уравнений и численный эксперимент. М.: ТОО «Янус», 1995. 520 с.

[2] Дынникова Г. Я. Вихревые методы исследования нестационарных течений вязкой несжимаемой жидкости: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 05.13.18. Москва, 2011. 269 с.

[3] Cottet G.-H., Koumoutsakos P. D. Vortex methods. Theory and practice. Cambridge University Press, 2008. 314 p.

[4] Lewis R. I. Vortex Element Methods For Fluid Dynamic Analysis Of Engineering Systems. Cambridge University Press, 2005. 592 p.

[5] Жуковский Н. Е. О присоединенных вихрях // Труды Отделения физических наук Общества любителей естествознания. 1906. Т. XIII, вып. 2.

[6] Kempka S. N., Glass M. W., Peery J. S., Strickland J. H. Accuracy considerations for implementing velocity boundary conditions in vorticity formulations. SANDIA REPORT SAND96-0583 UC-700, 1996.

[7] Kuzmina K. S., Marchevsky I. K. The modified numerical scheme for 2D flow-structure interaction simulation using meshless vortex element method // Proc. of 4th Intern. Conf. on Particle-Based Methods — PARTICLES 2015 (Barcelona). 2015. P. 680–692.

[8] Кузьмина К. С., Марчевский И. К., Рятина Е. П. Расчетная схема вихревых методов второго порядка точности для моделирования обтекания профилей несжимаемым потоком // Известия вузов. Авиационная техника. 2017. В печати.

[9] Кузьмина К. С., Марчевский И. К. Численная схема высокого порядка точности для определения интенсивности вихревого слоя при решении двумерных задач аэрогидродинамики вихревыми методами // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2016. № 6. С. 93–109.

[10] Cockburn B., Shu C.-W. Runge-Kutta Discontinuous Galerkin methods for convection-dominated problems // J. of Scientific Computing. 2001. V. 16. No. 3. P. 173–261.

Ксения Сергеевна Кузьмина — аспирант, ассистент каф. «Прикладная математика» Московского государственного технического университета имени Н. Э. Баумана
e-mail: kuz-ksen-serg@yandex.ru;
Илья Константинович Марчевский — к.ф.-м.н., доцент каф. «Прикладная математика» Московского государственного технического университета имени Н. Э. Баумана
e-mail: iliamarchevsky@mail.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ ЭКМАНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЯВНОЙ АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТУРБУЛЕНТНОСТИ

Л. И. Курбацкая[1], А. Ф. Курбацкий[2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск*

УДК 532.517.4, 551.511.32

Аннотация Моделирование турбулентности является важным объектом наук об окружающей среде для описания существенно важного турбулентного транспорта тепла и импульса в пограничном слое атмосферы. Многие модели турбулентности, используемые в моделировании течений в окружающей среде, основываются на концепции вихревой вязкости, а эффекты плавучести часто включаются в выражения для турбулентных потоков через эмпирические функции, основанные на теории подобия Монина-Обухова, справедливой, строго говоря, только для приземного слоя. Более существенный прогресс достигнут в последние годы в развитии более общих, чем стандартные гипотезы турбулентной вязкости, моделей для вихревых коэффициентов диффузии импульса и тепла, как результат записи дифференциальных уравнений для напряжений Рейнольдса и вектора турбулентного потока тепла в слабо-равновесном приближении, которое пренебрегает адвекцией и диффузией некоторых безразмерных величин. Явная алгебраическая модель рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного потока тепла для планетарного пограничного слоя тестируется в нейтрально стратифицированном пограничном слое атмосферы (ПСА) над однородной шероховатой поверхностью. Рассматриваемый вариант алгебраической модели построен на физических принципах RANS (Reynolds Average Navier Stokes) приближения для стратифицированной турбулентности, использует три прогностических уравнения и показывает правильное воспроизведение основных характеристик нейтрального ПСА: компонент скорости среднего ветра, угол поворота ветра, турбулентную статистику. Тестовые расчеты показывают, что данная модель может быть использована для целенаправленных исследований атмосферного пограничного слоя при решении различных задач окружающей среды.

Ключевые слова: атмосферный пограничный слой, течение Экмана, турбулентность, RANS-приближение, численное моделирование

Введение

Моделирование турбулентности является важным объектом атмосферных наук для описания существенно важного турбулентного транспорта тепла и импульса в пограничном слое атмосферы [1]. Многие модели турбулентности, используемые в моделировании климата или прогноза погоды, основываются на концепции вихревой вязкости, а эффекты плавучести часто включаются в выражения для турбулентных потоков через эмпирические функции, основанные на теории подобия Монина-Обухова [2], справедливой, строго говоря, только для приземного слоя. Более общее приближение [3] для геофизических турбулентных течений основано на уравнениях переноса для рейнольдсовых напряжений $\overline{u_i u_j}$ и вектора турбулентного потока тепла $\overline{u_i \theta}$, а также уравнении для скорости диссипации турбулентной кинетической энергии. Однако, в силу практических ограничений в моделировании климата и прогноза погоды, только простейшие модели в этой иерархии применялись в операционных моделях с минимальным числом прогностических уравнений, по большей части использовалось лишь уравнение для турбулентной кинетической энергии (TKE). Существенный прогресс достигнут в последние годы в развитии более общих, чем стандартные гипотезы

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00137) и программы Президиума РАН 1.33П "Фундаментальные проблемы математического моделирования" .

турбулентной вязкости, моделей для вихревых коэффициентов диффузии импульса и тепла, как результат записи дифференциальных уравнений для напряжений Рейнольдса и вектора турбулентного потока тепла в слабо-равновесном приближении [4]–[6], которое пренебрегает адвекцией и диффузией некоторых безразмерных величин. Для турбулентных течений с плавучестью, т.е. температурой (плотностью), как активным скаляром, математический вывод модели усложняется, вследствие связи между напряжениями Рейнольдса и потоком тепла, которую создают члены плавучести. В слабо-равновесном приближении связанную систему алгебраических уравнений для турбулентных потоков импульса и скаляра для ПСА можно разрешить аналитически с применением математической операции символьной алгебры для получения явных (безытерационных) выражений для турбулентных потоков импульса ($\overline{u_i u_j}$) и тепла ($\overline{u_i \theta}$) в ПСА. Примеры моделей, развитых в этом приближении, даны, например, для однородного турбулентного течения в [7]-[10] и неоднородного турбулентного течения в [11], [12]. В настоящей статье, развитую явную модель турбулентных потоков импульса и тепла для стратифицированного ПСА [11], [12], мы тестируем в нейтральном пограничном слое атмосферы, рассматривая результаты тестирования в качестве "входного модуля"для последующего исследования динамики устойчивого ПСА над охлаждаемой поверхностью.

1 Явная алгебраическая модель напряжений Рейнольдса (EARS) в нейтральном ПСА

Нейтральный пограничный слой реализуется в условиях постоянной виртуальной потенциальной температуры при отсутствии потоков тепла и влаги на поверхности, горизонтальных градиентов температуры и облачности. В нейтральном ПСА отсутствуют эффекты плавучести, вызываемые нагреванием или охлаждением поверхности. EARS модель стратифицированной турбулентности [12] для напряжений Рейнольдса и вектора турбулентного потока тепла трансформируется в нейтральном ПСА к более простому виду

$$\frac{DU}{Dt} = -\frac{\partial \overline{uw}}{\partial z} - f\left(V_g - V\right), \quad \frac{DV}{Dt} = -\frac{\partial \overline{vw}}{\partial z} + f\left(U_g - U\right) \tag{1}$$

$$\left(\overline{uw}, \overline{vw}\right) = -K_{m1}\left(\frac{\partial U}{\partial z}, \frac{\partial V}{\partial z}\right), \quad K_{m1} = \frac{1}{D_1}\frac{2}{3}\Delta_2 \frac{E^2}{\varepsilon} = C_{m1}\left(E^2/\varepsilon\right); \tag{2}$$

$$D_1 = 1 + d_1 G_M = 1 + \frac{2}{3}\Delta_2^2\left[\frac{E}{\varepsilon}\right]^2\left[\left(\frac{\partial U}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial z}\right)^2\right] \tag{3}$$

$$C_{m1} = \frac{(2/3)\,\Delta_2}{1 + (2/3)\,\Delta_2^2\left(E/\varepsilon\right)^2\left[\left(\partial U/\partial z\right)^2 + \left(\partial V/\partial z\right)^2\right]}, \qquad (\Delta_2 = 0,25) \tag{4}$$

$$\frac{DE}{Dt} = -\overline{uw}\frac{\partial U}{\partial z} - \overline{vw}\frac{\partial V}{\partial z} - \varepsilon + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{K_{m1}}{\sigma_E}\frac{\partial E}{\partial z}\right); \quad \frac{D\varepsilon}{Dt} = -\frac{1}{2}\psi_0\frac{\varepsilon^2}{E} + \frac{1}{2}\psi_1\frac{\varepsilon}{E}P + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{K_{m1}}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial z}\right). \tag{5}$$

Турбулентное число Шмидта σ_ε для диффузионного члена в ε-уравнении (5) затруднительно аккуратно оценить традиционной процедурой [13] с привлечением из прогностического уравнения TKE (5) приближения “порождение≈диссипации” в приземном слое: $C_{m1} = \left(u_*^2/E\right)$. В [14] даны оценки отношения стандартных отклонений компонент скорости к скорости трения со средним значением $E = 5,5\,u_*^2$, которое может быть использовано, как граничное условие на нижней границе. В настоящей модели величина C_{m1} не константа. Поэтому, численное значение турбулентного числа Шмидта $\sigma_\varepsilon = 0,8$ найдено численной оптимизацией. Турбулентное число Шмидта σ_E в диффузионном члене прогностического уравнения (5) для TKE выбрано равным 1, как и в других моделях турбулентности [12], [15].

2 Результаты численного моделирования

В настоящем численном тестировании начальный профиль ветра выбран равномерным по высоте, равным геострофической скорости ветра: $U = G = 8$ м/с, $V = 0$ м/с. Согласно существующей теории нейтрального ПСА, его структура определяется только одним безразмерным параметром — поверхностным числом Россби $\mathrm{Ro} = \mathrm{G}/\left(f\, z_0\right)$, а закон подобия по числу Россби устанавливает [16], что геострофический коэффициент

сопротивления $C_g = u_*/G$ (u_* — скорость трения на поверхности) есть функция только числа Россби. Параметр Кориолиса $f = 10^{-4}c^{-1}$. Верхняя граница расчетной области определена, как $h = u_*/f$ по данным [17] (в расчетах $h = 3200$ м для шероховатости $z_0 = 0,1$ м и $h = 2600$ м для шероховатости $z_0 = 0,01$ м). В настоящем тесте численные результаты на рис. 1, 2; 3, 4; 5, 6, 7, 8 приведены для значения шероховатости поверхности $z_0 = 0,01$ м (число Россби $Ro = 8 \cdot 10^6$). Нормализация величин на рисунках выполнена с привлечением u_*, определенной по фиксированному числу Россби и заданной высоте расчетной области согласно данным [17]. При задании начальных профилей ТКЕ $E = 5,5\, u_*^2 z_1/z \;\; (z \geq z_1)$ и скорости ее диссипации $\varepsilon_1 = u_*^3/(kz)$ $(z \geq z_1)$ скорость трения u_* определялась значением геострофического коэффициента сопротивления $C_g = u_*/G$ по фиксированному числу Россби из данных [17]. Постоянная Кармана $k = 0,4$. Скорость трения вычислялась аналитически, из логарифмического закона для средней скорости ветра

$$|\vec{U}\,|/u_* = k^{-1}\ln(z/z_0)\,; \quad u_* = k\frac{\sqrt{U(z_2)^2 + V(z_2)^2}}{\ln(z_2/z_0)}.$$

На верхней границе расчетной области ($z = h$): $\frac{\partial U}{\partial z} = \frac{\partial V}{\partial z} = \frac{\partial E}{\partial z} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = 0$. На нижней границе, в первом узле разностной сетки ($z = z_1$): $E = 5,5\, u_*^2$, $\varepsilon_1 = u_*^3/k z_1$.

В предположении малого влияния сил Кориолиса в приземном слое из логарифмического профиля для средней скорости, в первых двух узлах разностной сетки выполняется условие

$$\frac{U(z_1)}{U(z_2)} = \frac{V(z_1)}{V(z_2)} = \frac{\ln(z_1/z_0)}{\ln(z_2/z_0)},$$

которое используется в качестве граничного условия для компонент скорости ветра.

Результаты вычисления некоторых основных характеристик нейтрального ПСА приведены на рис. 1–8 после 12 часов интегрирования. Система уравнений (1–5) при заданных начальных и граничных условиях решена методом конечных разностей по полунеяной схеме [18] на сетке со смещенными узлами. Шаг по вертикальной координате равен 10^{-3}h (h = u_*/f — заданная высота расчетной области).

2.1 Профили скорости, спираль Экмана

На рис. 1, 2 показаны профили компонент среднего ветра. На этом рисунке и далее, линии показывают расчет по настоящей алгебраической модели рейнольдсовых напряжений, символами нанесены опытные данные [19]. Рис. 3 показывает спираль Экмана для средней скорости ветра. В отличие от классической экмановской

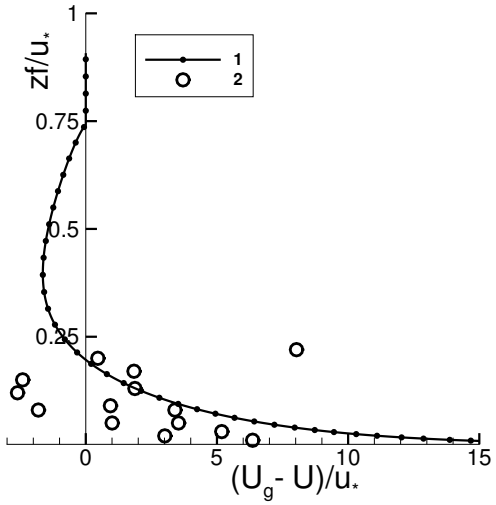


Рис. 1: Вертикальный профиль дефекта горизонтальной скорости ветра: 1 — EARS расчет при $Ro = 8 \cdot 10^6$, 2 — данные измерений [19].

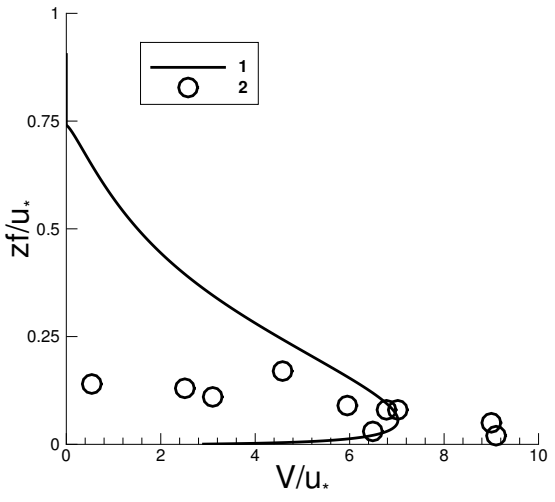


Рис. 2: Вертикальный агеострофический профиль скорости ветра: 1 — EARS расчет при $Ro = 8 \cdot 10^6$, 2 — данные измерений [19].

спирали с постоянным по высоте коэффициентом вязкости и углом поворота ветра 45°, в турбулентном экмановском пограничном слое с переменным по вертикали вихревым коэффициентом диффузии импульса спирали Экмана располагаются существенно ближе к направлению геострофического ветра.

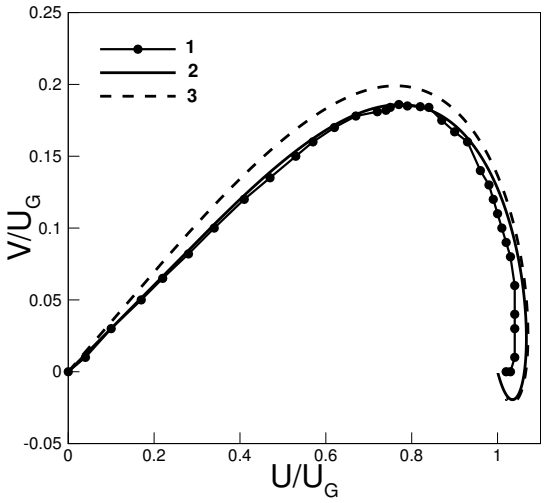


Рис. 3: Экмановская спираль средней скорости ветра: линия 1 — DNS расчет [21], линия 2 — EARS расчет при $Ro = 8 \cdot 10^6$, линия 3 — EARS расчет при $Ro = 8 \cdot 10^5$.

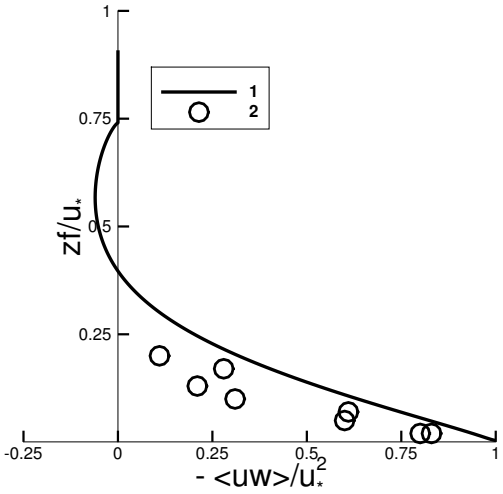


Рис. 4: Вертикальный профиль горизонтального турбулентного потока импульса.

Наиболее изменчивым параметром в определении числа Россби является высота шероховатости поверхности z_0. Для большего числа Россби (меньшего значения z_0) спираль Экмана фиксирует меньший угол поворота ветра. Для числа Россби $\mathrm{Ro} = 8 \cdot 10^6$ ($z_0 = 0,01$ м) полный угол поворота ветра $\alpha \simeq 16,7°$(сплошная линия на рис. 3), а для числа Россби $\mathrm{Ro} = 8 \cdot 10^5$ ($z_0 = 0,1$ м) угол поворота ветра $\alpha \simeq 18,8°$ (штриховая линия на рис. 3). Эти значения находятся в согласии с данными измерений [17]. Величина угла поворота ветра среднего ветра уменьшается с увеличением числа Россби, что согласуется с LES-расчетами [20]: спираль для $z_0 = 0,1$ м располагается выше, чем спираль для $z_0 = 0{,}01$ м. С увеличением числа Россби профиль спирали плотнее прижимается к поверхности. На рис. 3 показан также годограф скорости, полученный в нейтральном слое Экмана методом прямого численного моделирования ([21]). Следует отметить, что LES моделирование представляет эффективную вычислительную технику для исследования турбулентных течений и она применялась при исследовании устойчивого ПСА (см. ссылки в [21]). Однако, её способность к моделированию сильно устойчивых стратифицированных течений остается неясной. Предшествующие исследования наводят на мысль, что LES не может аккуратно предсказывать сильно устойчивые течения (см. ссылки там же [21]). В литературе широко показано, что статистика течений, полученная из LES, оказывается сильно зависящей от используемой подсеточной модели (subgrid-scale (SGS)), типа фильтра, пространственного разрешения и других численных деталей. Эти факторы сильно ограничивают точность воспроизведения статистики течения в поверхностном слое при больших числах Рейнольдса. Когда энергосодержащие масштабы движения достаточно малы и получаются того же порядка, как размер вычислительной сетки, как это имеет место в случае сильно устойчивого течения Экмана, LES может корректно и не воспроизводить подсеточные потоки турбулентности [22], [23]. В обходе ограничений данных наблюдений и LES техники жизнеспособная альтернатива в перспективе может быть связана с развитием прямого численного моделирования (DNS). Однако, пока это возможно лишь для очень низких чисел Рейнольдса [21], чем те, которые характерны для пограничного слоя атмосферы.

2.2 Профили турбулентных напряжений, турбулентная кинетическая энергия, коэффициент турбулентной вязкости, скорость трения

Турбулентная статистика в численном тесте представлена касательными напряжениями Рейнольдса на рис. 4, 5 и профилем TKE (рис. 6).

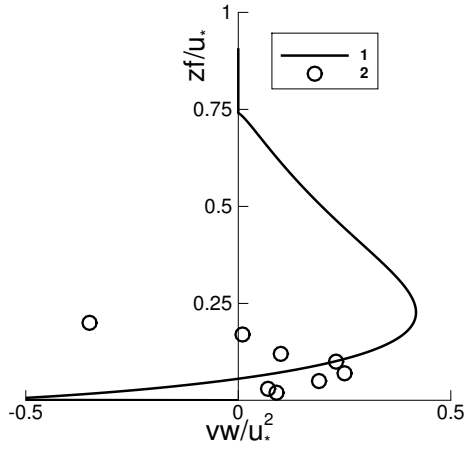


Рис. 5: Вертикальный профиль агеострофического турбулентного потока импульса.

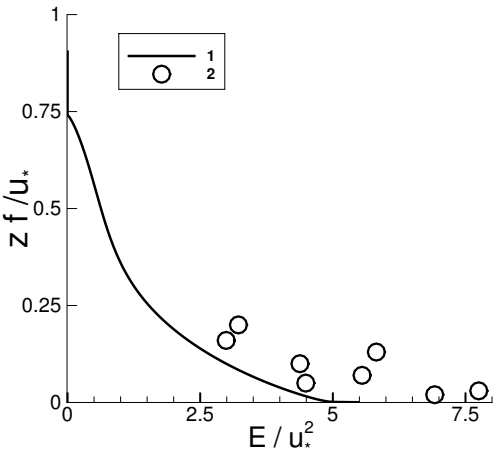


Рис. 6: Вертикальный профиль кинетической энергии турбулентности: 1 — EARS расчет при $Ro = 8 \cdot 10^6$, 2 — данные измерений [19].

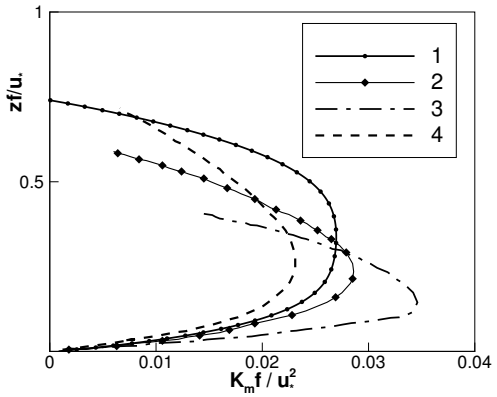


Рис. 7: Вертикальный вихревой коэффициент диффузии импульса: 1 — вычисление по явной алгебраической модели турбулентных напряжений; 2 — модифицированная модель [13]; 3 — Hinze [24]; 4 — Wyngaard et al. [25].

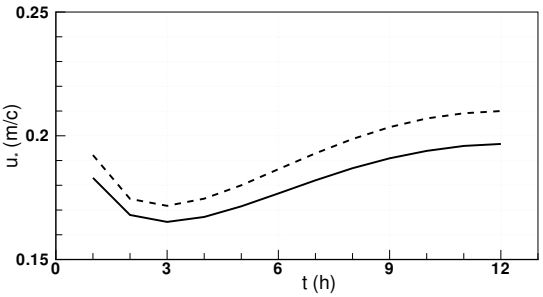


Рис. 8: Скорость трения на поверхности: штриховая линия — $Ro = 8 \cdot 10^5$, сплошная линия — $Ro = 8 \cdot 10^6$, по оси абсцисс — время в часах.

На рис. 7 приведены вертикальные профили вихревого коэффициента диффузии импульса. Там же для сравнения нанесены данные других авторов. На рис. 8 показана скорость трения на поверхности в зависимости от времени интегрирования. Как и в LES-расчете [20], скорость трения на поверхности уменьшается с увеличением числа Россби.

Заключение

В данной работе выполнено численное моделирование нейтрально стратифицированного атмосферного пограничного слоя. Эта задача является классической задачей геофизической гидромеханики. Новизна работы

заключена в использовании явной алгебраической модели для турбулентных потоков импульса, которая является предельным случаем полной явной модели для турбулентных потоков импульса и тепла для термически стратифицированного пограничного слоя атмосферы. Модель правильно воспроизводит вертикальные профили средней скорости ветра, касательных турбулентных напряжений, вертикального распределения кинетической энергии турбулентности, поведение экмановской спирали среднего ветра в зависимости от величины числа Россби. Полученные характеристики нейтрального течения Экмана предполагается использовать в качестве входного модуля при численном исследовании эволюции структуры устойчиво стратифицированного планетарного пограничного слоя с неустановившейся температурой поверхности.

Список литературы

[1] Holtslag A.A.M, Svensson G, Baas P, Basu S, Beare B, Beljaars A.C.M, Bosveld F.C, Cuxart J, Lindvall J, Steeneveld G.J, Tjernstrom M, Van deWiel B.J.H. Stable atmospheric boundary layers and diurnal cycles: challenges for weather and climate models // Bull Am Meteor Soc. 2013. V. 94, iss. 11. P. 1691–1706.

[2] Монин А. С., Обухов А. М. Основные закономерности турбулентного перемешивания в приземном слое атмосферы. Труды Геофизического института. М.: Изд-во АН СССР, 1954. 25(151). С. 163–187.

[3] Mellor G.L., Yamada T. Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems // Rev. Geophys Space Phys. 1982. V. 20. P. 851–875.

[4] Rodi W. A new algebraic relation for calculating the Reynolds stresses // Z. Angew. Math. Mech. 1976. V. 56. P. 219–221.

[5] Cheng Y., Canuto V. M., Howard A. M. An Improved Model for the Turbulent PBL // J. Atmos. Sci. 2002. V. 59. No. 5. P. 1550–1565.

[6] Kurbatskii A. F., Kurbatskaya L. I. turbulence closure model for an atmospheric boundary layer including the urban canopy // Meteorol. Atmos. Phys. 2009. V. 104. No. 1-2. P. 63–81.

[7] Sommer T. P., So R. M. C. On the modelling of homogeneous turbulence in a stably stratified flow // Phys. Fluids. 1995. V. 7 (11). P. 2766–2777.

[8] So R. M. C, Vimala P., Jin L. H., Zhao C. Y., Gatski T. B. Accounting for buoyancy effects in the explicit algebraic stress model: homogeneous turbulent shear flows // Theor. Comput. Fluid Dyn. 2002. V. 15. P. 283–302.

[9] So R. M. C., Jin L. H., Gatski T. B. An explicit algebraic Reynolds stress and heat flux model for incompressible turbulence: part II Buoyant flow // Theor. Comput. Fluid Dyn. 2004. V. 17. P. 377–406.

[10] Jin L. H., So R. M. C., Gatski T. B. Equilibrium states of turbulent homogeneous buoyant flows // J. Fluid Mech. 2003. V. 482. P. 207–233.

[11] Kurbatskii A. F. Computational Modeling of the Turbulent Penetrative Convection above the Urban Heat Island in Stably Stratified Environment // J. Appl. Meteor. 2001. V. 40 (10). P. 1748–1761.

[12] Курбацкий А. Ф., Курбацкая Л. И. Трехпараметрическая модель турбулентности для атмосферного пограничного слоя над урбанизированной поверхностью // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2006. Т. 42(4). С. 476–494.

[13] Duynkerke P. G. Application of the Turbulence Closure Model to the Neutral and Stable Atmospheric Boundary Layer // J. Atmos. Sci. 1988 V. 45. No. 5. P. 865–880.

[14] Panofsky H. A., Dutton J. A. Atmospheric Turbulence. Wiley and Sons. 1984. — 397 pp.

[15] Lazeroms W. M. J., Svensson G., Bazile E., Brethouwer G., Wallin S., Johansson A. V. Study of Transitions in the Atmospheric Boundary Layer Using Explicit Algebraic Turbulence Models // Boundary-Layer Meteor. 2016. V. 161. P. 19–47.

[16] Теннекес Х., Законы подобия, масштабные соотношения и спектральная динамика. В кн. “Атмосферная турбулентность и моделирование распространения примесей”. Л.: Гидрометеоиздат. 1985. С. 51–82.

[17] Зилитинкевич С. Динамика пограничного слоя атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат. 1970. — 292 с.

[18] Roache P. J. Computational fluid dynamics. Hermosa Publishers Albuquerque, 1976.

[19] Nicholls S. Aircraft Observations of the Ekman Layer during the Joint Air-Sea Interaction Experiment // Quart. J. Meteor. Soc. 1985. V. 111. P. 391–426.

[20] Шокуров М. В., Артамонов С. Ю., Эзау И. Н. Численное моделирование нейтрально стратифицированного атмосферного пограничного слоя // Морской гидрофизический журнал. 2013. № 2. С. 37–50.

[21] Gohari S. M., Sarkar S. Direct Numerical Simulation of Turbulence Collapse and Rebirth in Stably Stratified Ekman Flow // Boundary-Layer Meteor. 2017. V. 162. P. 401–426.

[22] Jimenez MA, Cuxart J. Large-eddy simulations of the stable boundary layer using the standard Kolmogorov theory: range of applicability // Boundary-Layer Meteor. 2005. V. 115. P. 241–261.

[23] de Wiel BJHV, Moene GJAF, Steeneveld P, Baas FC, A BA, Holtslag M (2012) The cessation of continuous turbulence as precursor of the very stable nocturnal boundary layer // J Atmos Sci V. 69. P. 3097–3115.

[24] Hinze J Q. Turbulence. McGraw-Hill. 1975. — 790 pp.

[25] Wyngaard J. C., Cote O. R., Rao K. S. Modeling the atmospheric boundary layer // Advances in Geophysics. 1974. V. 18A, Academic Press, P. 193–211.

Людмила Ивановна Курбацкая — ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: L.Kurbatskaya@ommgp.sscc.ru;
Альберт Феликсович Курбацкий — д.ф.-м.н., Г.Н.С. Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: kurbat@itam.nsc.ru.
Дата поступления — 22 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОНИКАЮЩЕЙ ТУРБУЛЕНТНОЙ КОНВЕКЦИИ ОТ ПОВЕРХНОСТНОГО ИСТОЧНИКА ТЕПЛА В УСТОЙЧИВОЙ АТМОСФЕРЕ

Л. И. Курбацкая[1], А. Ф. Курбацкий[2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск*

УДК 532.517.4, 551.511.32

Аннотация Моделирование турбулентности является важным объектом наук об окружающей среде для описания существенно важного турбулентного транспорта тепла и импульса в пограничном слое атмосферы. Вычислительно эффективная явная алгебраическая модель для вихревых коэффициентов диффузии импульса и тепла применена для моделирования структуры турбулентной циркуляции над поверхностным источником тепла (городским островом тепла) в устойчиво стратифицированной окружающей атмосфере. Турбулентные потоки импульса и тепла, зависящие от трех параметров – кинетической энергии турбулентности, скорости её спектрального расходования и дисперсии температурных флуктуаций – находятся из решения замкнутых дифференциальных уравнений баланса.

Ключевые слова: городской остров тепла, устойчивая стратификация, турбулентная проникающая конвекция, RANS-приближение, численное моделирование

Введение

Циркуляция воздуха над городским островом тепла генерируется за счет энергии антропогенных источников в пределах городской черты (рис. 1). Наиболее интенсивной такая циркуляция наблюдается в ночное время при ясном небе и слабом окружающем ветре. Фундаментальными характеристиками, отражающими структуру ночного городского острова тепла, являются распределения полей скорости и температуры, а также интенсивностей турбулентности. Вертикальный турбулентный тепловой факел от локализованного источника (острова тепла) и, связанная с ним циркуляция, развиваются вследствие различия температуры между островом тепла и его окружением, которое имеет более низкую температуру.

Типичный тепловой факел городского острова тепла имеет малое относительное удлинение, $z_i/D << 1$, т.е. малое отношение высоты перемешивания z_i к линейному размеру острова тепла D (черная утолщенная полоска на рис. 2). В лабораторном эксперименте [1] высота перемешивания z_i определяется как высота, на которой достигается максимальная отрицательная разность между температурой в центре факела и окружающей температурой (плотностью). Натурные измерения фиксируют в ночном пограничном слое в качестве типичных значений: $z_i \approx 200$ м, $D \approx 20$ km . Малость отношения z_i/D для прототипа представляет основное ограничение лабораторного эксперимента. Вследствие значительного уменьшения линейного масштаба в лабораторном моделировании трудно разрешить структуру течения во всем диапазоне высот, от поверхности до верхней границы факела. Характерное число Рейнольдса моделируемого течения на несколько порядков меньше, чем оно же для прототипа. Поэтому лабораторное моделирование [1] ограничивается воспроизведением крупномасштабной циркуляции над островом тепла внутри городского пограничного слоя; процессы в вязком подслое (в приземном слое шероховатости) не рассматриваются. Однако, при слабом ветре турбулентное движение в центре городского острова тепла доминирует за счет работы флуктуирующей силы плавучести. Механическое же воздействие городской шероховатости и сдвига ветра менее важны.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (код проекта 17-01-00137)и программы Президиума РАН 1.33П "Фундаментальные проблемы математического моделирования".

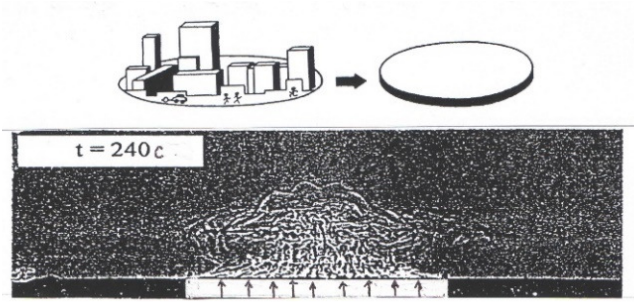


Рис. 1: Теневая фотография циркуляции над городским островом тепла в лабораторном эксперименте.

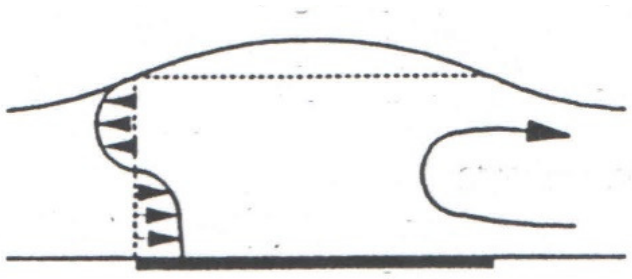


Рис. 2: Схема циркуляции в лабораторном эксперименте.

1 Определяющие уравнения

Проникающая турбулентная конвекция, инициируемая постоянным потоком тепла H_0 с поверхности пластины диаметра D (рис. 1, 2), моделирует в лабораторном эксперименте прототип городского острова тепла малого относительного удлинения ($z_i/D << 1$) при слабом окружающем ветре в устойчиво стратифицированной окружающей среде: $(\partial T_a/\partial z) = \gamma_z > 0$. Движение среды рассматривается как обладающее осевой симметрией. На основании обработки данных измерений [1] для горизонтальной (радиальной) скорости выбран масштаб $\mathrm{w}_D = (\beta g D H_0/\rho_0 c_p)$, где β — коэффициент термического расширения среды, g — ускорение силы тяжести, c_p — удельная теплоемкость. Величина w_D несколько отличается от конвективного масштаба скорости, введенного Дирдорфом [2], поскольку диаметр нагреваемой пластины D используется в качестве базового контролируемого параметра длины. В качестве характерного масштаба температуры принимается величина $w_D N/g\beta$, а времени — величина D/w_D, $N = [\beta g(\partial T/\partial z)_0]^{1/2}$ — частота Брента-Вяйсяля. Основные уравнения гидродинамики для описания циркуляции над островом тепла малого относительного удлинения могут быть взяты в гидростатическом приближении [3]. Без учета силы Кориолиса и радиации эти уравнения в безразмерной форме для осреднённых значений скорости и температуры в приближении Буссинеска имеют вид:

$$\frac{\partial U}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rU)U+Fr\frac{\partial}{\partial z}UW=Fr^{-1}\int_z^h\frac{\partial T}{\partial r}dz-\frac{\partial(\overline{\mathrm{u}^2})}{\partial r}-\frac{\partial(\overline{\mathrm{uw}})}{\partial z}+\frac{\overline{u^2}-\overline{\mathrm{v}^2}}{r}+Re^{-1}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial U}{\partial r}+\frac{\partial^2 U}{\partial z^2}\right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial r}rU+Fr\frac{\partial}{\partial z}rW=0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rUT)+Fr\frac{\partial}{\partial z}(WT)=(Re\cdot\mathrm{Pr})^{-1}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial T}{\partial r}+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right)+\left[-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\,\overline{u\theta}-\frac{\partial}{\partial z}\overline{\mathrm{w}\theta}\right]. \quad (3)$$

В уравнениях (1)–(3): U — осредненная горизонтальная скорость, W — осредненная вертикальная скорость, u — горизонтальная турбулентная скорость, w — вертикальная турбулентная скорость, v — азимутальная турбулентная скорость, T — осредненная температура, θ — турбулентная пульсация температуры, $Re = (\mathrm{w}_D D)/\nu$ — число Рейнольдса, λ — коэффициент температуропроводности, ν — кинематическая вязкость ($\mathrm{Pr} = \nu/\lambda$ — число Прандтля), $Fr = \mathrm{w}_D/(N\cdot D)$ — число Фруда, h — заданная высота стратифицированного слоя среды. В (1)–(3) и везде далее прописными буквами и чертой сверху обозначаются осредненные значения величин, а строчными буквами — турбулентные флуктуации величин.

2 Явная алгебраическая модель турбулентных потоков импульса и тепла

Уравнения (1)–(3) включают в качестве неизвестных величин компоненты турбулентных напряжений $\overline{u_i u_j}$ (нормальные и касательные) и вектор турбулентного потока тепла $\overline{u_i\theta}$. Физически корректное описание воздействия стратификации среды на турбулентную структуру циркуляции над островом тепла можно получить в приближении локально равновесной турбулентности [4, 5], в котором турбулентные потоки параметризуются соотношениями градиентной диффузии. Такой подход минимизирует сложность описания

турбулентности стратифицированных течений окружающей среды в условиях устойчивой стратификации и вычислительные затраты на реализацию модели.

Точное уравнение для вектора турбулентного потока тепла $\overline{u_i\theta}$ в случае больших турбулентных чисел Рейнольдса имеет следующий замкнутый вид [6]:

$$\frac{D\overline{u_i\theta}}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_k}\left\{c_{s\theta}\frac{E}{\varepsilon}\left(\overline{u_iu_\alpha}\frac{\partial\,\overline{u_k\theta}}{\partial x_\alpha} + \overline{u_ku_\alpha}\frac{\partial\,\overline{u_i\theta}}{\partial x_\alpha}\right)\right\} = -\overline{u_iu_j}\frac{\partial T}{\partial x_j} - \overline{u_j\theta}\frac{\partial U_i}{\partial x_j} -$$

$$-c_{1\theta}\frac{\overline{u_i\theta}}{\sqrt{\tau\tau_\theta}} + c_{2\theta}\overline{u_j\theta}\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + c_{3\theta}g_i\beta\overline{\theta^2} - g_i\beta\overline{\theta^2}, \tag{4}$$

где $E = (1/2)\,\overline{u_iu_i}$ — турбулентная кинетическая энергия (TKE), ε — скорость диссипации TKE, $\tau_\theta = \overline{\theta^2}/2\varepsilon_\theta$ — масштаб времени турбулентного температурного поля и $\tau = E/\varepsilon$ — масштаб времени турбулентного поля скорости. В уравнении (4) диссипация турбулентного потока тепла $\overline{u_i\theta}$ принята равной нулю по соображениям отсутствия изотропного тензора первого ранга. В рамках этого допущения обычно полагается, что $c_{3\theta} = c_{2\theta}$; численные значения коэффициентов $c_{1\theta}$, $c_{2\theta}$, $c_{3\theta}$ приведены ниже.

Полностью явная градиентная модель для вектора турбулентного потока тепла (и импульса) может быть выведена в приближении слабо равновесной турбулентности [4, 10]. В настоящем исследовании используется упрощенный вариант модели для вектора турбулентного потока тепла, получаемый из (4) в приближении равновесной турбулентности, следуя [7] и принимая простые модели градиентной диффузии Буссинеска для потоков импульса ($-\overline{u_iu_j}$) и тепла ($-\overline{u_i\theta}$), входящих в правую часть (4):

$$-\overline{u_iu_j} = 2K_mS_{ij} - \frac{2}{3}E\delta_{ij}, \quad -\overline{u_j\theta} = K_h\frac{\partial T}{\partial x_j}, \tag{5}$$

где $S_{ij} = 1/2(\partial U_i/\partial x_j + \partial U_j/\partial x_i)$ — осредненный тензор скоростей деформации, вихревой коэффициент диффузии импульса $K_m = c_\mu E^2/\varepsilon$, $K_h = c_\lambda\sqrt{2R}\cdot E^2/\varepsilon$ — вихревой коэффициент диффузии тепла, $R = \tau_\theta/\tau$ — параметр отношения временных масштабов температурного (τ_θ) и динамического (τ) турбулентных полей температуры и скорости, соответственно. Численные значения коэффициентов в (4) откалиброваны при решении "предельных" задач стратифицированных течений [7, 8, 9]: $c_\mu = 0,09$; $c_\lambda = 0,095$; $c_{1\theta} = 3,28$; $c_{2\theta} = c_{3\theta} = 0,40$; $R = 0,6$.

Подстановка (5) в (4) и записи (4) в приближении равновесной турбулентности дает полностью явное выражение для вектора турбулентного потока тепла:

$$-\overline{u_i\theta} = c_\lambda\frac{E^2}{\varepsilon}\sqrt{2R}\frac{\partial T}{\partial x_i} - \frac{\sqrt{2R}}{c_{1\theta}}\frac{E}{\varepsilon}[\{2K_m + (1-c_{2\theta})K_h\}S_{ij} + (1-c_{2\theta})K_h\Omega_{ij}]\frac{\partial T}{\partial x_j} + \frac{1-c_{2\theta}}{c_{1\theta}}\sqrt{2R}\frac{E}{\varepsilon}g_i\beta\overline{\theta^2}, \tag{6}$$

где $\Omega_{ij} = (\partial U_i/\partial x_j - \partial U_j/\partial x_i)/2$ — средний тензор вращения. Градиентная модель (6) в явной форме выражает вектор потока $-\overline{u_i\theta}$ через средние градиенты, коэффициенты вихревой диффузии импульса и тепла, а также дисперсию флуктуаций температуры $\overline{\theta^2}$. Из (6) следуют выражения для нормализованных потоков тепла, вертикального $-\overline{w\theta}$ и горизонтального $-\overline{u_i\theta}$:

$$-\overline{w\theta} = c_\lambda\frac{E^2}{\varepsilon}\sqrt{2R}\frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\sqrt{2R}}{c_{1\theta}}\frac{E}{\varepsilon}\left[K_m\left(Fr\frac{\partial W}{\partial r} + \frac{\partial U}{\partial z}\right) + (1-c_{2\theta})K_hFr\frac{\partial W}{\partial r}\right]\frac{\partial T}{\partial r} - \frac{1-c_{2\theta}}{c_{1\theta}}\sqrt{2R}\frac{E}{\varepsilon}\overline{\theta^2}\cdot Fr^{-1}, \tag{7}$$

$$-\overline{u\theta} = c_\lambda\frac{E^2}{\varepsilon}\sqrt{2R}\frac{\partial T}{\partial r} - \frac{\sqrt{2R}}{c_{1\theta}}\frac{E}{\varepsilon}\left[K_m\left(\frac{\partial U}{\partial z} + Fr\frac{\partial W}{\partial r}\right) + (1-c_{2\theta})K_h\frac{\partial U}{\partial z}\right]\frac{\partial T}{\partial z}. \tag{8}$$

Подстановка (7) и (8) в (3) приводит к замкнутой форме уравнения для осредненной температуры.

Для нормальных турбулентных напряжений, входящих в правую часть уравнения (1), используется простая модель градиентной диффузии Буссинеска, сохраняющая некоторую анизотропию нормальных напряжений:

$$\overline{u^2} = \frac{2}{3}E - 2K_m\frac{\partial U}{\partial r}, \qquad \overline{w^2} = \frac{2}{3}E - 2K_mFr\frac{\partial W}{\partial z}, \qquad \overline{v^2} = \frac{2}{3}E - 2K_m\frac{U}{r}. \tag{9}$$

Подстановка (9) в (1) позволяет записать уравнение (1) в замкнутой форме. Выражения (9) с учетом уравнения неразрывности (2) дают в сумме кинетическую энергию турбулентности. Для касательного турбулентного напряжения модель градиентной диффузии (5) имеет вид:

$$-\overline{uw} = K_m \left(\frac{\partial U}{\partial z} + Fr \frac{\partial W}{\partial r} \right). \tag{10}$$

Вертикальная осредненная скорость W в численной модели находится квадратурой из уравнения неразрывности (2).

Область интегрирования представляет цилиндр заданной высоты h. Нагреваемая пластина диаметром D расположена в центре нижней поверхности цилиндра (рис. 1, 2). Внешняя граница располагается на расстоянии 1,5 D от оси цилиндра. В начальный момент времени среда находится в состоянии покоя и устойчиво стратифицирована. Замкнутый вид для уравнений баланса E, ε и $\overline{\theta^2}$, подробности о начальных и граничных условиях можно найти в [5, 10]. Для численной реализации модели использован конечно-разностный метод с полунеявной схемой переменных направлений ("вторая схема с разностями против потока" [11]) на сетке со смещенными узлами.

3 Результаты численного моделирования

В эксперименте [1] после нескольких минут после начала поступления тепла от нагревателя в окружающую устойчиво стратифицированную среду формировалось квазиустановившееся состояние термической циркуляции, при котором интенсивность острова тепла $\triangle T_m = T_m - T_0$ и поверхностный поток тепла оставались неизменными с течением времени (T_m, T_0 — температуры поверхности в центре острова тепла и вне его соответственно). Эксперимент ограничивался первыми несколькими минутами квазиустановившегося состояния, чтобы индуцируемая островом тепла циркуляция среды не достигала боковых стенок установки, и не сказывалось влияние последних. Представленные ниже численные результаты соответствуют такому квазиустановившемуся состоянию циркуляции над островом тепла.

3.1 Поле скорости

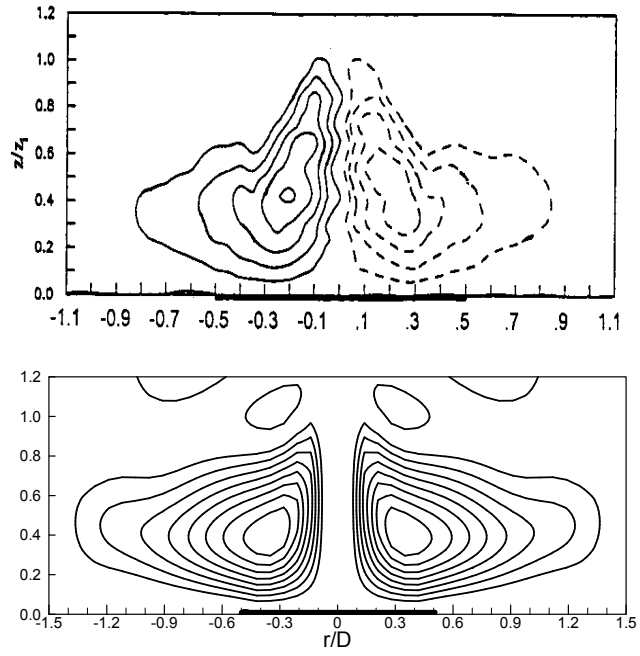


Рис. 3: Картины линий тока над островом тепла: вверху — эксперимент [1] ($H = 0,65$ вт/см^2; $Fr = 0,077$; $Re = 8280$; $\partial T/\partial z = 0,5^\circ$C/см); внизу — вычисление при тех же параметрах (численное решение).

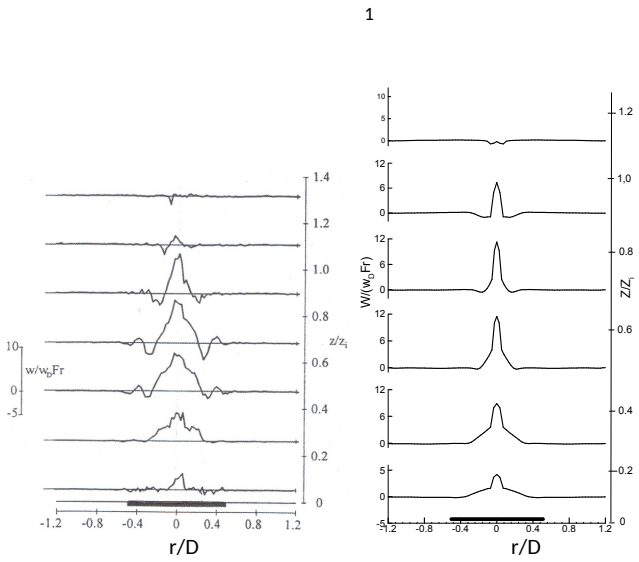


Рис. 4: Нормализованная вертикальная скорость над источником тепла: слева — лабораторный эксперимент [1], справа — (численное решение). *Стационарная волна фиксируется на равновесной высоте ($z/z_i \approx 0,7$) вследствие превышения центральной части факела.*

На рис. 3 показаны два крупномасштабных вихря (см. также рис. 5) с вращением левого вихря против часовой стрелки, правого — по часовой стрелке, которые формируют основное восходящее движение в центре, простирающееся до слоя вовлечения ($z/z_i \approx 1$) и нисходящее движение на периферии. При этом высота теплового факела подавляется устойчивой стратификацией среды, увеличиваются боковое движение и турбулентность факела. На рис. 4 (справа) показано наблюдаемое в эксперименте и вычисленное распределение вертикальной скорости поперек факела на различных высотах от источника тепла. Ширина области восходящего потока, приближенно, постоянна в интервале высот $z/z_i = 0,2 - 0,6$. *На равновесной высоте ($z/z_i \approx 0,7$) наблюдается стационарная волна. Это есть следствие превышения термического факела выше его равновесной высоты в устойчиво стратифицированной окружающей среде, что можно видеть на рис. 4 (слева), где показаны вычисленные векторное поле скорости и изотермы. Верхняя часть факела приобретает форму "шляпы" (как в квазиустановившемся состоянии на теневой фотографии рис. 1).* Эффект возвышения центральной части факела (swelling) объясняется ниже.

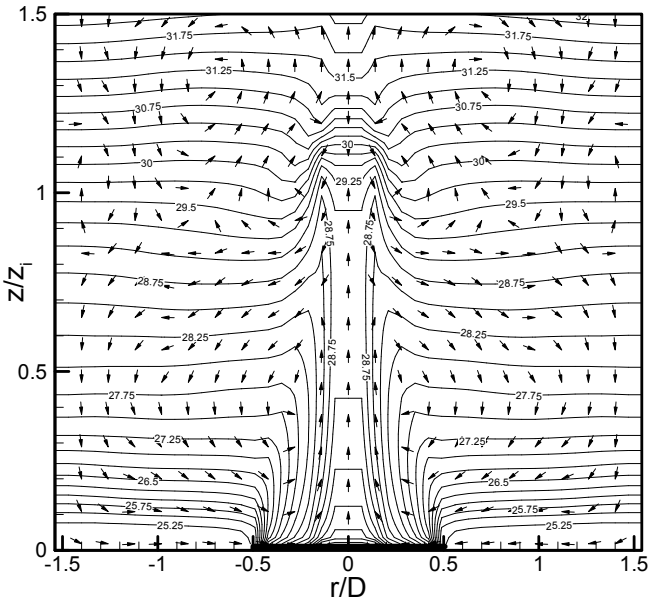


Рис. 5: Вычисленная картина векторного поля скорости и поля изотерм над источником тепла в квазиустановившемся состоянии. В термически устойчиво стратифицированной окружающей среде верхняя часть теплового факела приобретает форму "шляпы".

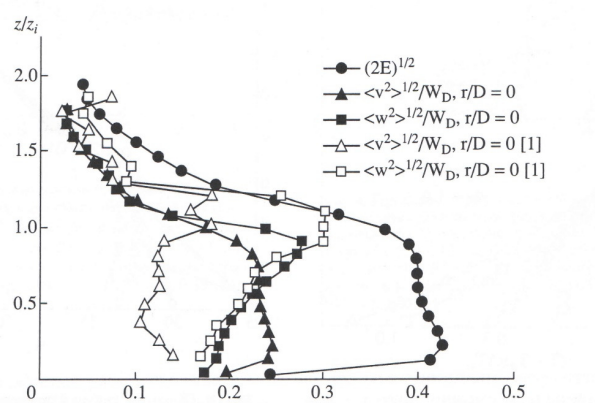


Рис. 6: Распределения горизонтальной и вертикальной дисперсий турбулентной скорости на оси факела ($r/D = 0$) над островом тепла. Светлые треугольники и квадраты — эксперимент [1]. Зачерненные треугольники и квадраты — вычисление (трехпараметрическое RANS приближение), зачерненные окружности — вычисленное распределение интенсивностей турбулентности, $\sqrt{\overline{u_i u_i}}$.

Структура турбулентности теплового факела представлена на рис. 6 распределениями среднеквадратичных флуктуаций горизонтальной, $\sigma_u = \left(\overline{u^2}\right)^{1/2}/w_D$, и вертикальной, $\sigma_w = \left(\overline{w^2}\right)^{1/2}/w_D$, турбулентных скоростей в центре факела. Как данные лабораторных измерений, так результаты численного моделирования показывают, что большие значения σ_u/w_D и σ_w/w_D внутри перемешанного слоя быстро убывают с высотой выше слоя вовлечения ($z > z_i$). Как измеренный, так и вычисленный профили σ_w/w_D имеют максимум вблизи верхней границы перемешанного слоя ($z/z_i \approx 1$) σ_U/w_D. Область вычисленного максимального значения σ_u/w_D простирается дальше по горизонтали, чем значение σ_w/w_D вследствие горизонтального дивергентного течения, вызываемого устойчивой стратификаций в верхней части факела. Следует отметить, что конечные размеры экспериментальной установки все же оказывали влияние на циркуляцию, вероятно подавляя горизонтальное движение и, таким образом, понижая уровень значений σ_U/w_D. Представленные результаты вычисления турбулентной структуры теплового факела показывают, что в рассматриваемой задаче простые параметризации турбулентных потоков импульса и тепла не только правильно описывают характерные особенности распределений σ_u/w_D и σ_w/w_D, но и удовлетворительно отражают их анизотропный характер.

3.2 Поле температуры

На рис. 7 показаны измеренные в лабораторном эксперименте, а на рис. 8 — вычисленные вертикальные распределения температуры над островом тепла. Измерения на рис. 7 соответствуют "сильной" стратификации [1] на момент времени равный 8 минутам. Вычисленное распределение на рис. 8 соответствуют тем же условиям. Вычисленное распределение температуры при $r/D = 0$ и $r/D = 0,20$ подобно измеренному и указывают на хорошее перемешивание в нижней и центральной части факела. Такой характер поведения распределения температуры с высотой относится к тем реальным ночным планетарным пограничным слоям, в которых преобладают неустойчивые (конвективные) условия, вследствие восходящего потока тепла от (урбанизированной) поверхности и небольшие скорости движения окружающего воздуха. В отсутствие сильного потока тепла, направленного вверх, или значительных скоростей движения окружающего воздуха, приближенно нейтральные или слегка устойчивые условия могут превалировать внутри городского пограничного слоя. На рис. 7, 8 видно, что *профили температуры внутри факела имеют характерное "вздутие" (swelling): температура внутри факела оказывается ниже температуры вне его на той же высоте, фиксируя тем самым область отрицательной плавучести, вследствие возвышения факела в центре.* Это возвышение связано с эффектом *перекрещивания*, обнаруженном в вертикальных профилях температуры город–сельская местность. Эта высота возвышения максимальна на оси факела и уменьшается с расстоянием от его центра. Такой характер вертикального распределения температуры соответствует шлирен-фотографии теплового факела в лабораторном эксперименте на рис. 1: факел имеет куполообразную верхнюю часть в форме "шляпы".

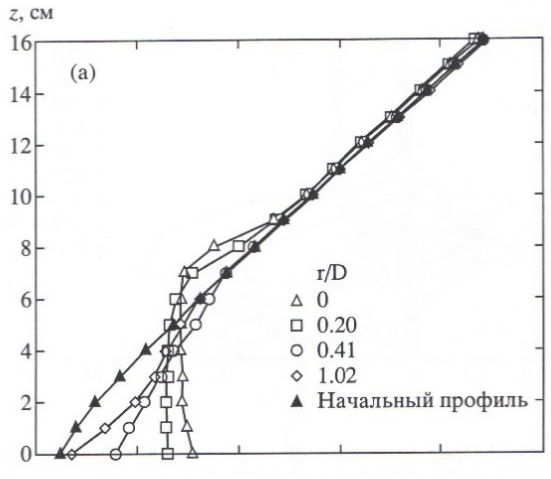


Рис. 7: Профили температуры в различных сечениях над островом тепла: эксперимент [1] ($H_0 = 1,81$ вт/см^2; $Fr = 0,088$; $Re = 4500$; $\partial T/\partial z_a = 1,4°$C/см); $r/D = 0(\Delta)$; $0,2\,(\square)$; $0,4\,(\bigcirc)$; $1,0\,(\diamond)$; $(\blacktriangle)$ — начальный профиль.

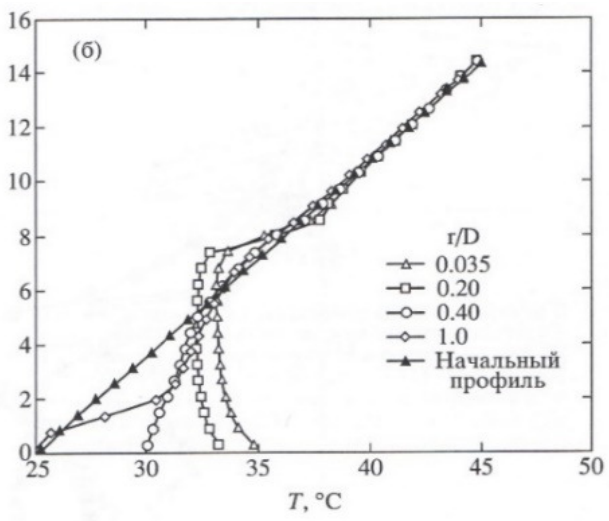


Рис. 8: Вычисленные профили при тех же параметрах, как и на рис. 7.

Заключение

Сформулирована математическая модель городского острова тепла. Описание турбулентности теплового факела в RANS приближении с включением в качестве искомых моментов термогидродинамических полей второго порядка позволяет воспроизвести структурные особенности проникающей турбулентной конвекции над островом тепла, включая такие тонкие эффекты, как *перекрещивание вертикальных профилей температуры теплового факела с образованием области отрицательной плавучести*, свидетельствующей о развитии куполообразной формы у верхней части факела в виде "шляпы" (рис. 1).

Вертикальная дисперсия турбулентной скорости удовлетворительно согласуется с опытными данными, в то время как вычисленная радиальная дисперсия турбулентной скорости превосходит экспериментальный аналог в пределах слоя перемешивания ($0 < z/z_i \leq 1$), что может быть связано с влиянием вертикаль-

ных стенок лабораторной установки [1], воздействие которых в квазиустановившемся состоянии вероятно подавляло горизонтальное движение, понижая уровень горизонтальной дисперсии турбулентной скорости.

В рассматриваемой задаче простая модель градиентной диффузии для турбулентных потоков не только правильно описывает характерные особенности распределений вертикальной и горизонтальной дисперсий турбулентной скорости, но и удовлетворительно отражает их анизотропный характер.

Список литературы

[1] Lu J., Arya P. et al. A Laboratory Study of the Urban Heat Island in a Calm and Stably Stratified Environment. Part I and II // J. Appl. Meteor. 1997. Vol.36, No.10, 1377–1402.

[2] Willis G. E. and J. W. Deardorff. A laboratory model of the unstable planetary boundary layer // J. Atmos. Sci. Vol. 1974. 31, 1297–1307.

[3] Pielke R. A. Mesoscale meteorological modeling (second edition). Academic Press, 2002.

[4] Cheng Y., Canuto V. M., Howard A. M. An Improved Model for the Turbulent PBL // J. Atmos. Sci. 2002. Vol. 59, No.9, 1550–1565.

[5] А. Ф. Курбацкий, Л. И. Курбацкая. Трехпараметрическая модель турбулентности для атмосферного пограничного слоя над урбанизированной поверхностью // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2006. 42(4), 476–494.

[6] А. Ф. Курбацкий, Моделирование нелокального турбулентного переноса импульса и тепла. Изд-во "НАУКА" Сибирское отделение, Новосибирск: 1988 г., 240 с.

[7] Sommer T. P., So R. M. C. On the modeling of homogeneous turbulence in a stably stratified flow // Phys. Fluids. 1995. Vol. 7, No.11, 2766–2777.

[8] Jin L. H., So R. M. C., Gatski T. B. Equilibrium states of turbulent homogeneous buoyant flows // J. Fluid Mech. 2003. Vol. 482, 207–233.

[9] Beguier C., Dekeyser I., Launder B. E. Ratio of scalar and velocity dissipation time scales in shear flow temperature // Phys. Fluids. 1978. Vol. 21, No. 3, 307–310.

[10] Курбацкий А. Ф., Курбацкая Л. И. Турбулентная циркуляция над поверхностным источником в устойчиво стратифицированной окружающей среде // Теплофизика и аэромеханика. 2016. Т. 23. №5, С. 703–719.

[11] Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М. "Мир", 1980 г., 616 с.

Людмила Ивановна Курбацкая — ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: L.Kurbatskaya@ommgp.sscc.ru;
Альберт Феликсович Курбацкий — д.ф.-м.н., Г.Н.С. Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: kurbat@itam.nsc.ru.

Дата поступления — 22 мая 2017 г.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДВУХ АЛГОРИТМОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИКИ ЗАРЯЖЕННЫХ ПУЧКОВ

К. В. Лаговская[1], М. А. Боронина[2]

[1] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 517.968

В представленной работе рассматривается задача о движении пучка заряженных частиц. Предполагается, что движение частиц происходит под действием самосогласованного поля в вакууме на релятивистских скоростях. Динамику системы описывают уравнения Власова — Максвелла, решение обеспечивается методом частиц-в-ячейках. Целью работы явилась реализация и исследование возможности применения алгоритма с использованием неявной схемы для расчета уравнений Максвелла для численного моделирования динамики тонких длинных пучков. В работе приведен сравнительный анализ численных результатов явной и неявной схем.

Ключевые слова: метод частиц-в-ячейках, ультрарелятивизм, математическое моделирование, пучки заряженных частиц, уравнения Максвелла, уравнение Власова, моделирование эффектов встречи, электромагнитное поле, неявная схема.

Введение

Развитие современной физики во многом сосредоточено на исследованиях, связанных с ускорительными установками. В установке формируются пучки заряженных частиц с необходимыми характеристиками (энергией, интенсивностью, пространственными размерами и т.д.), которые затем ускоряются и взаимодействуют между собой. Целью является достижение наибольшей светимости ускорителя путем получения пучка частиц с наибольшей плотностью и энергией. Численные и реальные эксперименты взаимодополняют друг друга при поиске решения поставленной задачи. Проблемой математического моделирования динамики плоских пучков является трехмерность задачи и большие градиенты, связанные с размерами пучков и ультрарелятивистскими скоростями частиц. Пучки являются достаточно плоскими и длинными, соотношение их размеров может достигать $\approx 10^3 : 1 : 10^5$. Например, размеры пучков для проекта Международного Линейного Коллайдера (ILC) [1]: $\sigma_x = 904$ нм, $\sigma_y = 7.8$ нм, $\sigma_z = 300$ мкм. При использовании пространственных сеток известный метод решения задачи требует достаточно малый временной шаг, что очевидно замедляет процесс симуляции движения пучка таких размеров. На основе существующей схемы Лэнгдона — Лазински [2] была предложена неявная схема [3], [4], которая должна помочь в решении данной проблемы. Т.к. ее условие устойчивости не зависит от пространственного шага по одному из направлений, то использование более крупного временного шага приведет к меньшему количеству вызовов трудозатратной процедуры вычисления граничных условий на каждом шаге по времени. Выявлены преимущества и недостатки новой схемы относительно первоначальной на реальных задачах математического моделирования.

1 Постановка задачи и методы решения

В прямоугольной области $[0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ с релятивисткой скоростью движется плоский пучок. Движение происходит в вакууме под действием самосогласованного электромагнитного поля. Пучок характеризуется формой, линейными размерами, положением в пространстве и времени, количеством заряженных

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 16-31-00301, 16-01-00209)

частиц и неоднородным распределением плотности заряда внутри пучка. Предполагается, что в начальный момент времени пучок сформирован. Поле, создаваемое им, определяется по принципу суперпозиции суммированием вкладов полей частиц пучка. Излучение не учитывается. Имеем кинетическое уравнение Власова [5]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}\frac{\partial f}{\partial r} + \vec{F}\frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = 0,$$

Система уравнений Максвелла выражает свзяь между плотностью зарядов n ($q = \pm e$), током $\vec{j}$ и напряженностью электрического и магнитного полей $\vec{E}$ и $\vec{H}$:

$$rot\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{H}}{\partial t},$$
$$rot\vec{H} = \frac{4\pi}{c}\vec{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t},$$
$$div\vec{E} = 4\pi nq,$$
$$div\vec{H} = 0.$$

Плотности заряда и тока определяются через моменты функции распределения частиц:

$$n = \int f dV,$$
$$\vec{j} = \int f\vec{v}qdV.$$

Далее, все уравнения записываются в безразмерных переменных так, что характерная длина пучка равна 1 см, а характерная скорость частиц равна скорости света. Раннее была разработана методика решения данной задачи с учетом ультрарелятивистских скоростей частиц [6], [7]. Методика основана на методе частиц-в-ячейках [8] с PIC-ядром и с использованием разнесенных сеток с специальным алгоритмом вычисления токов [9].

Компоненты всех величин вычисляются на сдвинутых друг относительно друга на полшага сетках по времени и пространству. Запись производных через центральные разности обеспечивает второй порядок схемы по времени и по пространству. Для решений уравнений Максвелла используется схема Лэнгдона — Лазински [2].

$$\frac{Hx^{m+1/2} - Hx^{m-1/2}}{\tau} = \triangle_z Ey^m - \triangle_y Ez^m,$$
$$\frac{Hy^{m+1/2} - Hy^{m-1/2}}{\tau} = \triangle_x Ez^m - \triangle_z Ex^m,$$
$$\frac{Hz^{m+1/2} - Hz^{m-1/2}}{\tau} = \triangle_y Ex^m - \triangle_x Ey^m,$$
$$\frac{Ex^{m+1} - Ex^m}{\tau} = \triangle_y Hz^{m+1/2} - \triangle_z Hy^{m+1/2} + j_x^{m+1/2},$$
$$\frac{Ey^{m+1} - Ey^m}{\tau} = \triangle_z Hx^{m+1/2} - \triangle_x Hz^{m+1/2} + j_y^{m+1/2},$$
$$\frac{Ez^{m+1} - Ez^m}{\tau} = \triangle_x Hy^{m+1/2} - \triangle_y Hx^{m+1/2} + j_z^{m+1/2}.$$

Неравенство $\tau^2/h_x^2 + \tau^2/h_y^2 + \tau^2/h_z^2 \leq 1$ описывает её условие устойчивости [10]. Если размеры пучка по оси x минимальны, то шаг τ определяется значением пространственного шага h_x. В работе [3] предложена новая схема с целью ослабить условие на временной шаг. В алгоритме Лэнгдона — Лазински модифицируется расчет двух уравнений для компонент электрического поля:

$$\frac{Ey^{m+1}-2Ey^m+Ey^{m-1}}{\tau^2}=\frac{1}{4}\triangle_{xx}Ey^{m+1}+\frac{1}{2}\triangle_{xx}Ey^m+\frac{1}{4}\triangle_{xx}Ey^{m-1}+$$
$$+\triangle_{yy}Ey^m+\triangle_{zz}Ey^m-\triangle_y\rho^m-\frac{j_y^{m+1/2}-j_y^{m-1/2}}{\tau},$$
$$\frac{Ez^{m+1}-2Ez^m+Ez^{m-1}}{\tau^2}=\frac{1}{4}\triangle_{xx}Ez^{m+1}+\frac{1}{2}\triangle_{xx}Ez^m+\frac{1}{4}\triangle_{xx}Ez^{m-1}+$$
$$+\triangle_{yy}Ez^m+\triangle_{zz}Ez^m-\triangle_z\rho^m-\frac{j_z^{m+1/2}-j_z^{m-1/2}}{\tau},$$

Временной и пространственные шаги связаны условием устойчивости. За счет неявности модифицированной схемы её условие устойчивости $\tau^2/h_y^2+\tau^2/h_z^2\le 1$ не зависит от шага по оси x, что дает возможность рассматривать движение плоских пучков, не требуя уменьшения временного шага. Важным вопросом является корректное описание скорости волны схемой. Обе схемы описывают скорость волны со вторым порядком точности [11]:

$$\frac{\omega}{k}=1-k^2\left(\frac{h_x^2cos^4\alpha+h_y^2cos^4\beta+h_z^2cos^4\gamma-\tau^2}{24}\right)+O(\tau^3,h^3,...)$$

для схемы Лэнгдона — Лазински и

$$\frac{\omega}{k}=1-k^2\left(\frac{h_x^2cos^4\alpha+h_y^2cos^4\beta+h_z^2cos^4\gamma-\tau^2+3\tau^2cos^2\alpha}{24}\right)+O(\tau^3,h^3,...)$$

для модифицированной схемы, где ω — скорость волны, k — волновое число, α, β, γ — углы между волновым вектором и соответствующими осями.

В отличие от обычной схемы, для реализации неявной схемы необходимо знать значение электрического поля на двух начальных слоях, как и значение производной тока. В случае простых решений токи в начальный момент вычисляются аналитически по плотности частиц и их скорости. Для данной задачи делается сильное упрощение: предполагается, что электрическое поля при $m=1$ совпадает с его значением при $m=0$. Следует отметить, магнитное поле вычисляется на дробных шагах по времени. Но для задания начальных значений для него необходимо несколько раз рассчитать электрическое поле. Поэтому магнитное поле вычисляется через векторное произведение скорости заряда и электрического поля E^0, что понижает порядок точности до первого, но позволяет ускорить вычисления. Переход на следующий шаг по новой схеме делается с помощью прогонки. Задание граничных условий требует суммирования по узлам плотности (i,l,k) для всех точек границы с (i_1,l_1,k) и очень трудоемко [12]. Более крупный временной шаг требует более редкого вызова процедуры задания граничных условий и существенно сокращает время работы программы.

2 Результаты сравнения численных методов

Алгоритм на основе новой схемы был реализован в однопроцессорной программе на языке Fortran95. Для исходного алгоритма использовалась параллельная программа [6].

Исследование методов проведено на примере плоского пучка электронов цилиндрической формы с гауссовым поперечным распределением плотности. Движение пучка направлено строго по оси z. Предполагается, что заряд пучка достаточно мал, поэтому его поле должно жестко переноситься со временем по оси z.

В общем случае аналитических решений для данной задачи не существует. Равномерное продольное распределение частиц в длинном цилиндре обеспечивает постоянство электрического поля вдоль цилиндра. Если пучок в поперечном сечении круглый, то по теореме Гаусса можно рассчитать аналитически значения электрического поля в поперечном сечении вблизи середины цилиндра. Для гауссова распределения с $\sigma_x=\sigma_y=\sigma$

$$E(r)=\frac{2Q}{rL}\left(1-\exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right)\right).$$

Для проведения тестов длина цилиндра взята $L = 0.6$. Для круглого пучка с $\sigma = 0.0002$ (соотношение размеров $1 : 1 : 1000$) размеры расчетной области взяты $L_x = 0.002, L_y = 0.004, L_z = 2$. Заряд пучка брался $Q = 10^6$ электронов, релятивистские факторы частиц — $\gamma = 6.85 \cdot 10^3$.

На рисунке 1 изображена поперечная компонента электрического поля по оси z в плоскости ($x = 6.33 \cdot 10^{-4}, y = 1.23 \cdot 10^{-3}$), а на рисунке 2 — продольная в плоскости ($y = 1.23 \cdot 10^{-3}, z = 0.462$) в начальный момент времени.

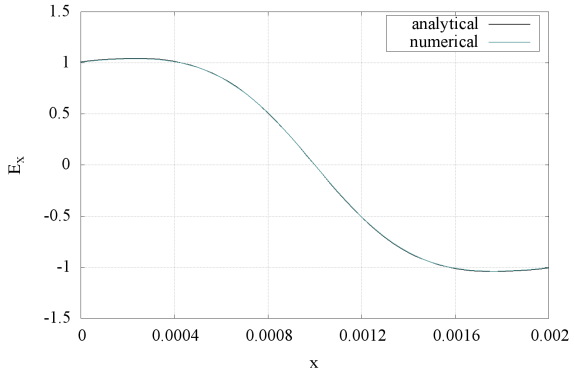


Рис. 1: Поле пучка $E_x(x)$ при $t = 0$

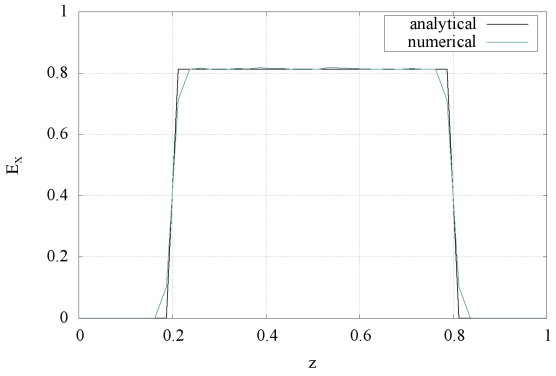


Рис. 2: Поле пучка $E_x(z)$ при $t = 0$

Черным цветом обозначено аналитическое решение, голубым — численное решение. В начальный момент времени для исходной схемы и для новой алгоритм задания поля совпадает, как и результаты. Рисунок демонстрирует корректное задание начальных компонент поля. Градиент на границе пучка на практике определяется величиной пространственного шага, т.к. аналитическое значение недостижимо за счет ультрарелятивистских значений γ. Пространственная сетка состоит из $60 \times 60 \times 80$ узлов. Для некруглых пучков вычислить электрическое поле по теореме Гаусса затруднительно, поэтому сравнение будет проводиться с результатами имеющейся параллельной программы.

Целью численных экспериментов явилась проверка возможности моделирования при крупном временном шаге τ. Для численных экспериментов стандартными параметрами выбраны размеры области $L_x = 0.002, L_y = 0.0016, L_z = 2$ (соотношение $1 : 8 : 1000$). Сетка состоит из $60 \times 60 \times 80$ узлов, временной шаг $\tau_0 = 8 \cdot 10^{-5}$.

На практике максимально возможный временной шаг для устойчивости исходной схемы определяется соотношением $\tau/h_{min} < 0.6$. Таким образом максимальным временным шагом для данных пространственных шагов является $\tau_{max1} = \tau_0/4 = 2 \cdot 10^{-5}$, при этом $c_x = \tau_{max1}/h_x = 0.6, c_y = \tau_{max1}/h_y = 0.075, c_z = \tau_{max1}/h_z = 0.0008$. Для новой схемы также необходимо, чтобы для значений h_y и h_z временной шаг также не превышал значения 0.6. Поэтому максимальный временной шаг для новой схемы $\tau_{max2} = 2\tau_0$, где $\tau_0 = 8 \cdot 10^{-5}$, а $c_x = \tau_{max2}/h_x = 4.8, c_y = \tau_{max2}/h_y = 0.6, c_z = \tau_{max2}/h_z = 0.0064$.

Ну рисунке 3 представлены графики зависимости компоненты E_x от поперечной координаты x в плоскости $y = 0.00787, z = 0.625$, а на рисунке 4 — результаты для E_x в зависимости от z времени $t = 0.18$ в плоскости $x = 0.00047, y = 0.00787$. Для $\tau = \tau_0$ (фиолетовый цвет), $\tau = 2\tau_0$ (зеленый), $\tau = \tau_0/2$(розовый) вычисления проводились по новой схеме, для исходной схемы $\tau = \tau_{max1}$.

Результаты показывают, что зависимости от временного шага практически нет. Наибольшие значения погрешностей достигаются возле границ пучка в начальный момент времени($z = 0.2, z = 0.8$). Эксперименты показали, что уровень погрешностей не зависит от сдвига начальных координат частиц, только от положения границ пучка в начальный момент времени.

На рисунках 5 и 6 изображены графики поля $E_x(z)$ в плоскости $x = 0.00046, y = 0.008$ для сетки с числом узлов $N_z = 80$ (слева) и $N_z = 120$ (справа). Фиолетовым цветом отмечен результат работы новой схемы с максимальным возможным временным шагом для исходной схемы τ_{max1}, голубой цвет соответствует τ_0, зеленый — τ_{max2}. Стандартным количеством модельных частиц в расчетах было $4 \cdot 10^6$. Розовым цветом обозначены графики поля при количестве частиц $8 \cdot 10^6$ и максимальном временном шаге для новой схемы. Черным цветом обозначен результат работы параллельной программы со стандартным количеством частиц и максимальным шагом для нее τ_{max1}. Красным цветом обозначен график поля, полученного с помощью параллельной программы и количества модельных частиц $5 \cdot 10^8$, которое не вмещается в память однопроцессорной машины.

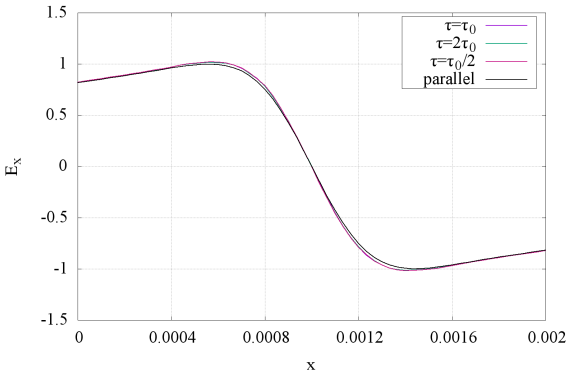


Рис. 3: Поле пучка $E_x(z)$ при $t = 0.18$

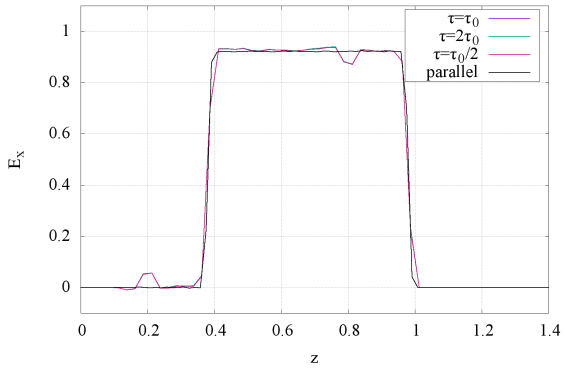


Рис. 4: Поле пучка $E_x(z)$ при $t = 0.18$

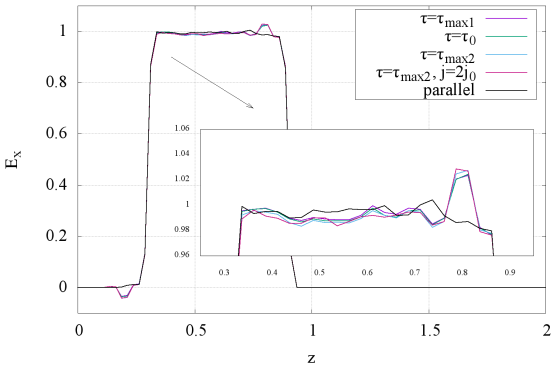


Рис. 5: Поле пучка $E_x(z)$ при $t = 0.1, h_z = 0.025$

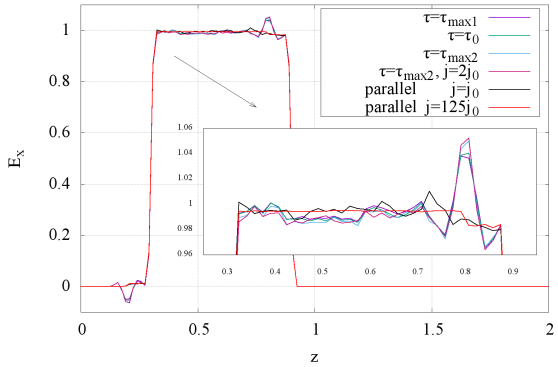


Рис. 6: Поле пучка $E_x(z)$ при $t = 0.1, h_z = 0.0167$

Сложно сказать, какая из схем лучше справилась с задачей. Для данных параметров увеличение сетки в поперечном направлении существенно на результаты не влияет при достаточном количестве частиц в ячейке. При недостаточном количестве частиц возникают колебания, которые уменьшаются с увеличением числа частиц в пучке. Зависимость от продольного шага выражена сильнее — с уменьшением сетки колебания увеличиваются, с увеличением количества частиц j в пучке не изменяются. Существенное увеличение количества частиц для исходного алгоритма дает возможность понизить шумы в методе частиц и увидеть на рис. 6, что исходная схема также дает погрешности на фронте пучка и за пучком, но их уровень существенно ниже. Существенное повышение размеров сетки в каком-либо направлении влечет за собой необходимость увеличения числа частиц, а оно ограничено памятью однопроцессорной ЭВМ. На данном этапе можно сделать вывод, что новая схема хорошо описывает участки области с небольшими градиентами поля. Сеточные эффекты на фронте пучка и за пучком, по-видимому, связаны с несогласованностью начальных условий. В частности, сначала было предложено взять нулевые токи, которые, как видно из схемы, делают прямой вклад в электрическое поле. Т.к. заряд пучка мал, поперечные токи равны нулю. Задание компоненты j_z по плотности цилиндра и постоянной скорости частиц понизило уровень поперечных токов на два порядка, но и этого недостаточно. Требуется более детальное согласование начальных полей, токов и граничных условий.

Тем не менее, новая схема позволяет проводить вычисления при большем временном шаге. Так, временной промежуток $T = 0.02$ с шагом τ_{max1} рассчитывается за 22 минуты программой с использованием неявной схемы и за 10 минут параллельной программой. Новая схема позволяет увеличить временной шаг до τ_{max2} и сократить время вычисления T до 3 минут, то есть примерно в $L_y/L_x = 8$ раз. Увеличение сетки в продольном направлении линейно увеличивает время счета, с 3 минут для 80 узлов до 5 минут для 120 узлов. Таким образом, однопроцессорная версия программы с внедрением новой схемы показала время счета, меньшее в три раза, чем время счета с использованием имеющейся параллельной программы с максимальным временным шагом.

Представленные численные эксперименты проводились для новой схемы на персональном компьютере,

расчеты по параллельной версии программы проводились на суперкомпьютере “Ломоносов” (МГУ).

Авторы благодарят Вшивкова Виталия Андреевича за обсуждение результатов и ценные замечания.

Заключение

В работе приведен сравнительный анализ численных результатов явной и неявной схем для задачи динамики пучка заряженных ультрарелятивистских частиц в самосогласованных электромагнитных полях. Неявная схема позволила проводить расчеты для тонких длинных пучков с существенно более крупным временным шагом, и, следовательно, проводить численные эксперименты намного быстрее. Такие временные шаги для плоских пучков не могут быть реализованы в алгоритме с обычной схемой. Однако корректное задание начальных условий откроет возможность более точного описания решения на границах пучка.

Список литературы

[1] Adolphsen C. et al. The International Linear Collider Technical Design Report — Volume 3.II: Accelerator Baseline Design. 2013.

[2] Langdon A., Lasinski B. Electromagnetic and relativistic plasma simulation models // Methods in Computational Physics. 1976. Vol. 16.

[3] Боронина М. А., Вшивков В. А., Дудникова Г. И. Неявная схема для решения уравнений Максвелла в областях с различными масштабами // Доклады Академии наук высшей школы России. 2014. № 4(25). С. 39–46.

[4] Boronina M., Vshivkov V. Development and analysis of computational algorithm of the Maxwell’s equations in flat domains // Journal of Physics: Conference Series. 2016. V. 722. 012006.

[5] Власов А.А. Теория многих частиц. М.-Л.: ГИТТЛ, 1950. 348 с.

[6] Boronina M., Vshivkov V. Parallel 3-D particle-in-cell modelling of charged ultrarelativistic beam dynamics // Journal of Plasma Physics. 2015. V.81. Iss. 6.

[7] Boronina M. A., Korneev V.D. The parallel three-dimensional PIC code for the numerical modeling of ultrarelativistivc beams // Bull. Nov. Comp. Center. 2013. №16. P. 15–22.

[8] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М. : Мир, 1962.

[9] Villansenor J., Buneman O. Rigorous Charge Conservation for Local Electromagnetic Field Solvers // Computer Physics Communications. 1992. V.69. P. 306–316.

[10] Самарский А.А. Гулин А.В. Численные методы: Учеб.пособие для вузов. М.:Наука, Гл.ред.физ-мат.лит., 1989. 432 с.

[11] Boronina M.A. Numerical experiments for solving Maxwell’s equations in thin domains with a new implicit scheme // Bull. Nov. Comp. Center, Num. Anal. 2016. № 18. P. 1–8.

[12] Вшивков В. А., Боронина М. А., Трехмерное моделирование динамики ультрарелятивистских пучков заряженных частиц: особенности вычисления начальных и граничных условий // Матем. моделирование. 2012. Т. 24. № 2. С. 67–83.

Боронина Марина Андреевна — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: boronina@ssd.sscc.ru;
Лаговская Кира Вячеславовна — магистрант Новосибирского национального исследовательского государственного Университета;
e-mail: klagovskaya@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

РАСЧЁТ ТЕПЛООТВОДА РЯДОМ С ТРЕЩИНАМИ, ОБРАЗОВАВШИМИСЯ ПРИ ИМПУЛЬСНОЙ ТЕПЛОВОЙ НАГРУЗКЕ

Г. Г. Лазарева[1,3,4], А. С. Аракчеев[2,4], А. А. Васильев[2], Л. Н. Вячеславов[2], А. А. Касатов[2], И. В. Кандауров[2], В. В. Куркучеков[2], В. А. Попов[3], Ю. А. Трунев[2], А. А. Шошин[2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, 630090, Новосибирск*

[3] *Новосибирский государственный университет, 630073, Новосибирск*

[4] *Новосибирский государственный технический университет, 630090, Новосибирск*

УДК 51-72

Проводилось экспериментальное и теоретическое моделирование условий, вызывающих интенсивную эрозию и образующихся при энерговкладах и длительностях воздействия на поверхность вольфрама, характерных для импульсных процессов в установке ИТЭР. При помощи мощного электронного пучка моделируется соответствующая импульсная тепловая нагрузка в режимах с механическим разрушением, плавлением и разбрызгиванием материала. Лабораторные эксперименты сопровождаются вычислительными. Вычислительный эксперимент позволил количественно описать перегрев рядом с трещинами на поверхности, вызванный параллельными поверхности трещинами.

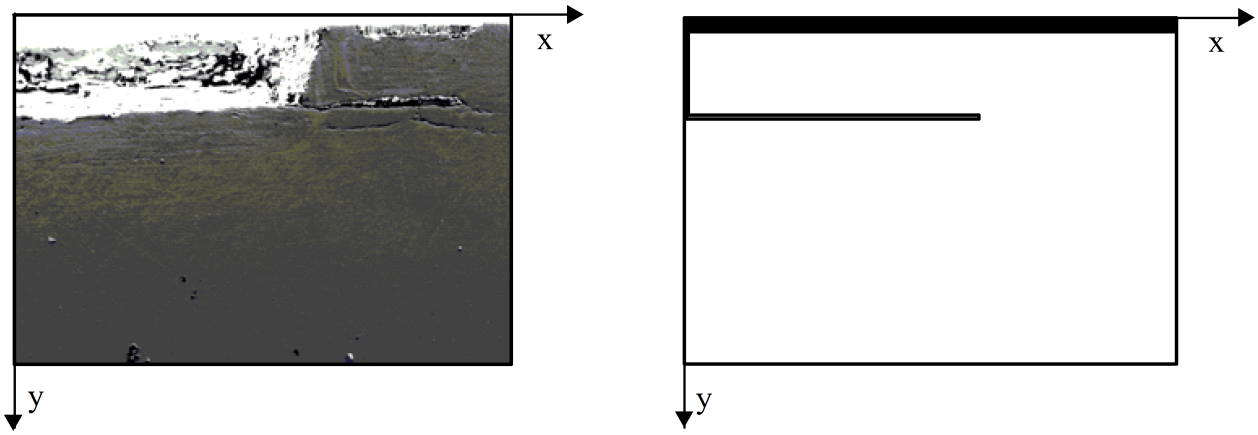
Ключевые слова: математическое моделирование, теплоперенос, трещины, импульсные тепловые нагрузки

Введение

Компоненты первой стенки и дивертора прототипа токамака-реактора ITER будут подвергаться серьезной тепловой нагрузке во время разряда [1]. Этот поток тепла будет состоять из стационарной компоненты в результате истечения плазмы вдоль сепаратрисы магнитного поля (до 20 МВт/м^2), а также из быстрой импульсной нагрузки в виде ЭЛМов 1 типа, срывов и др., которые могут иметь энерговыделение до 80 МДж/м^2 за ~ 1 мс. Действующие плазменные ловушки с магнитным удержанием не могут воспроизвести подобные условия, поэтому для их моделирования используются специализированные стенды: квазистационарные плазменные ускорители [2, 3], электронные пучки [4, 5] и лазеры [6]. Полученные экспериментальные данные по эрозии материалов ложатся в основу расчетных моделей рабочих режимов токамака.

Для адекватной работы пластин дивертора они должны отводить тепло с поверхности вглубь материала к охлаждающим трубкам. Основной опасностью, которая может помешать этому процессу, является потеря теплопроводности в результате распространения трещин параллельно облучаемой поверхности (см. рис. 1 а). Подобное явление было обнаружено post-mortem анализом в ряде экспериментальных работ [7, 8], хотя численное моделирование возможного перегрева поверхности из-за этих трещин не было проведено. На созданном в ИЯФ СО РАН экспериментальном стенде BETA были получены in-situ результаты нагрева вольфрамовой мишени мощным субмиллисекундным пучком электронов. Эти данные свидетельствуют о корреляции перегрева поверхности образца и наличия подповерхностных трещин в материале [9].

Работа поддержана Программой РАН № 0315-2015-0010, стипендией Президента России (проект СП-4010.2016.1). Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-79-20203).



а) б)

Рис. 1: Снимок поперечного среза вольфрамового образца, сделанный при помощи электронного микроскопа [9] (а), схема расчетной области (б).

1 Постановка задачи

Из-за теплового расширения при импульсном нагреве в поверхностном слое вольфрама образуются трещины. Экспериментально обнаружено, что образуются не только перпендикулярные поверхности трещины, но и параллельные поверхности. Последние могут существенно ухудшать теплоотвод от поверхности облучённого материала. Задачей данной работы является расчёт теплоотвода при импульсных тепловых нагрузках вблизи параллельной поверхности материала трещины. В том числе, попытка воспроизвести измеренные распределения температуры по поверхности и предсказание характерных зависимостей ослабления теплоотвода в зависимости от геометрии трещин.

В качестве области моделирования рассматривается прямоугольная область среза образца с подповерхностной трещиной (см. рис. 1 а). На фотографии видно образование трещины параллельной поверхности на глубине ~ 250 мкм. Левая часть поверхности образца имела слабый механический контакт с объемом и была потеряна в ходе предварительной резки. На границе $y = 0$ задается поток тепла, трещина расположена перпендикулярно нагреваемой поверхности на части границы $x = 0$ расчетной области и переходит в подповерхностную трещину (см. рис. 1 б). В заданной области решается уравнение для температуры (1) методом [10].

$$c(T)\rho(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}\lambda(T)\operatorname{grad}T + Q, \tag{1}$$

где T — температура, $c(T)$ — удельная теплоёмкость, $\rho(T)$ — плотность, $\lambda(T)$ — теплопроводность, Q — источник тепла.

Начальные условия и условия на границе γ имеют вид:

$$T(0,x,y) = T_0, \quad (n,\nabla T)|_\gamma = 0, \quad \left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_{y=0} = \frac{W(t)}{\lambda(T)},$$

где $W(t)$ — мощность потока тепла (экспериментальные данные приведены на рис. 2 а), длительностью 100–200 мкс. На подповерхностной трещине задано условие $(n,\nabla T)|_{crack} = 0$. Для обезразмеривания использованы характерные величины:

$$\lambda = 10^{-2}\frac{watt}{mm\cdot K}, \quad \rho = 10^{-5}\frac{kg}{mm^3}, \quad c = 10^{7}\frac{watt\cdot\mu s}{kg\cdot K},$$
$$t = 1\mu s, \quad x = 10^{-2}mm, \quad T = 10^{3}K, \quad W = 10^{3}\frac{watt}{mm^2}.$$

Характерное время счета 1000 мкс.

Измерение теплофизических характеристик тугоплавких металлов — достаточно сложная задача. Поэтому во многих справочниках и статьях приведена ориентировочная или теоретически предсказанная зависимость с оценкой точности в 10% и менее. Теплопроводность и теплоёмкость твёрдого вольфрама взяты

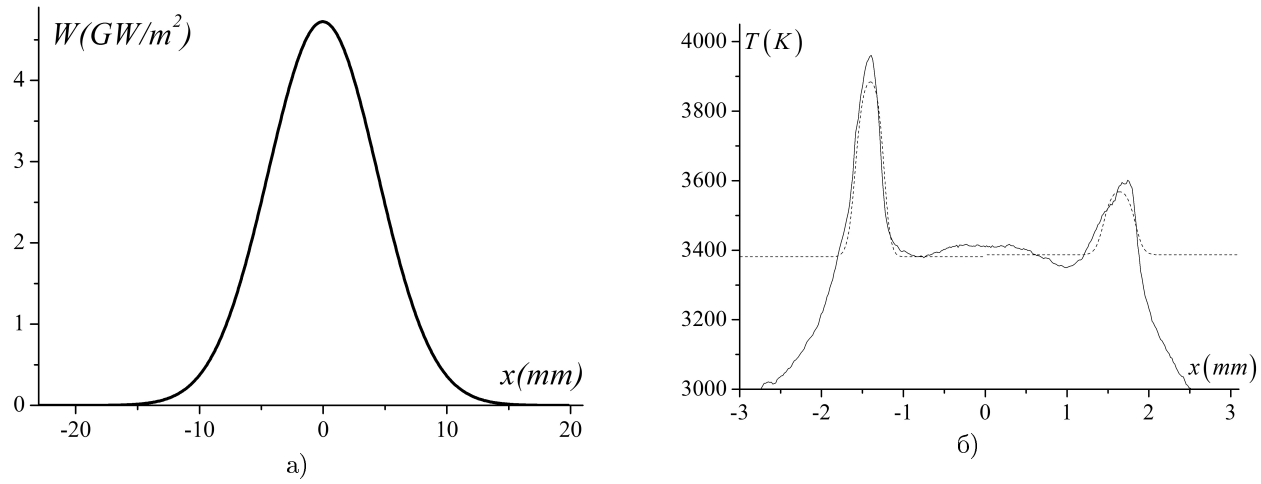


Рис. 2: Распределение по поверхности мощности потока тепла (а) и температуры (б): экспериментальные данные (сплошная линия) и результаты расчетов (пунктир).

из работы [11]. Теплопроводность жидкого вольфрама оценена из работ [12–14]. В диапазоне температур $300°K \le T^* \le 6000°K$ плотность, удельная теплоёмкость и теплопроводность задаются в виде зависимостей (2)–(4) от температуры вещества.

Плотность (см. рис. 3 а):

$$\rho(T) = \begin{cases} \begin{bmatrix} 19.25 - 2.66207 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 273.15) \\ -3.0595 \cdot 10^{-9} \cdot (T - 273.15)^2 \\ -9.5185 \cdot 10^{-12} \cdot (T - 273.15)^3 \end{bmatrix} \cdot 10^{-6} kg/mm^3, & 300°K \le T \le 3695°K, \\ \begin{bmatrix} 16.267 - 7.679 \cdot 10^{-4} \cdot (T - 3695) \\ -8.091 \cdot 10^{-8} \cdot (T - 3965)^2 \end{bmatrix} \cdot 10^{-6} kg/mm^3, & 3695°K \le T \le 6000°K. \end{cases} \tag{2}$$

Теплопроводность (см. рис. 3 б):

$$\rho(T) = \begin{cases} \begin{bmatrix} 149.441 - 45.466 \cdot 10^{-3} T + 13.193 \cdot 10^{-6} T^2 \\ -1.484 \cdot 10^{-9} T^3 + 3.866 \cdot 10^{6} T^{-2} \end{bmatrix} \cdot 10^{-3} watt/(mm \cdot K), & 300°K \le T \le 3695°K, \\ \begin{bmatrix} 66.6212 + 0.02086(T - 3695) \\ -3.7585 \cdot 10^{-6} (T - 3695)^2 \end{bmatrix} \cdot 10^{-3} watt/(mm \cdot K), & 3695°K \le T \le 6000°K. \end{cases} \tag{3}$$

Удельная теплоёмкость (см. рис. 3 в):

$$c(T) = \begin{cases} \begin{bmatrix} 21.868372 + 8.068661 \cdot 10^{-3} \cdot T \\ -3.756196 \cdot 10^{-6} \cdot T^2 \\ +1.075862 \cdot 10^{-9} \cdot T^3 \\ +1.406637 \cdot 10^{4} \cdot T^{-2} \end{bmatrix} \cdot 10^{-6} / 0.186 watt \cdot \mu s/(kg \cdot K), & 300°K \le T \le 3080°K, \\ \left[2.022 + 1.315 \cdot 10^{-2} \cdot T\right] \cdot 10^{-6} / 0.186 watt \cdot \mu s/(kg \cdot K), & 3080°K \le T \le 3695°K. \\ [51.3] \cdot 10^{-6} / 0.186 watt \cdot \mu s/(kg \cdot K), & 3695°K \le T \le 6000°K. \end{cases} \tag{4}$$

2 Результаты моделирования

Результатам вычислительных экспериментов сопоставлены данные измерений (см. рис. 2 б). Параметры расчета: длительность воздействия пучка 186 мкс, момент измерения 200 мкс от начала пучка, длительность

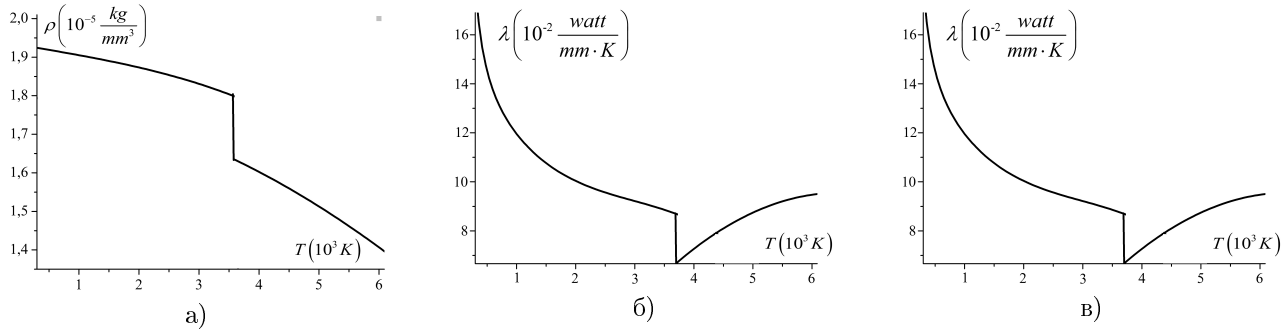


Рис. 3: Графики зависимости от температуры плотности (а), теплопроводности (б) и удельной теплоёмкости (в).

экспозиции — 10 мкс, глубина левой трещины около 0.12 мм, длина трещины около 0.2 мм, глубина правой трещины 0.15 мм, длина трещины около 0.145 мм. Мощность нагрева считалась равномерной и равной $W = 3 * 10^3 \frac{watt}{mm^2}$. Расчеты подтвердили гипотезу, что неоднородности температуры поверхности вольфрама связаны с наличием подповерхностных трещин.

Расширение модели предполагает включения термодинамически согласованных уравнений сохранения для твердой, жидкой и газовой фаз вещества [15–20] в осесимметричной постановке с целью изучения процессов, возникающих в ходе плавления и испарения вещества.

Выводы

Проводилось экспериментальное и теоретическое моделирование условий, вызывающих интенсивную эрозию и образующихся при энерговкладах и длительностях воздействия на поверхность вольфрама, характерных для импульсных процессов в установке ИТЭР. При помощи мощного электронного пучка моделируется соответствующая импульсная тепловая нагрузка в режимах с механическим разрушением, плавлением и разбрызгиванием материала. Лабораторные эксперименты сопровождаются вычислительными. Вычислительный эксперимент позволил количественно описать перегрев рядом с трещинами на поверхности, вызванный параллельными поверхности трещинами.

Список литературы

[1] Pitts R A et al, 2013 A full tungsten divertor for ITER: Physics issues and design status, J. Nucl. Mater. 438 S48

[2] Klimov N et al 2009 Experimental study of PFCs erosion under ITER-like transient loads at plasma gun facility QSPA J. Nucl. Mater. 390–391 721

[3] Tereshin V I et al 2007 Application of powerful quasi-steady-state plasma accelerators for simulation of ITER transient heat loads on divertor surfaces Plasma Phys. Control. Fusion 49 A231

[4] M. Wirtz, et al., Thermal shock response of deformed and recrystallised tungsten, Fus. Eng. Design V88 (2013) 1768–1772

[5] Trunev Yu A et al 2016 Heating of Tungsten Target by Intense Pulse Electron Beam AIP Conf. Proc. 1771 060016

[6] A. Huber, et al., Investigation of the impact of transient heat loads applied by laser irradiation on ITER-grade tungsten, Phys. Scripta T159 (2014) 014005

[7] Pintsuk G., Loewenhoff Th., Impact of microstructure on the plasma performance of industrial and high-end tungsten grades, Journal of Nuclear Materials (2013), Volume 438, P. S945–S948

[8] Wirtz M., Cempura G., Linke J., Pintsuk G., Uytdenhouwen I., Thermal shock response of deformed and recrystallised tungsten, Fusion Engineering and Design (2013), Volume 88, Issue 9, P. 1768–1772.

[9] Vasilyev A.A. et al In-situ imaging of tungsten surface modification under ITER-like transient heat loads, Nucl. Matter Energy (in press, available online 5 December 2016) https://doi.org/10.1016/j.nme.2016.11.017.

[10] Konovalov A. N. , Popov Yu. P. , Explicitly solvable optimal discrete models with controlled disbalance of the total mechanical energy for dynamical problems of linear elasticity, Siberian Math. J., 56:5 (2015), P. 872–878.

[11] J.W. Davis, P.D. Smith, ITER material properties handbook, Journal of Nuclear Materials, V. 233, 1996, P. 1593–1596, ISSN 0022-3115, http://dx.doi.org/10.1016/S0022-3115(96)00202-4.

[12] Ho C.Y. et al. Thermal conductivity of elements, 1972.

[13] G. Pottlacher, Thermal conductivity of pulse-heated liquid metals at melting and in the liquid phase, Journal of Non-Crystalline Solids, V. 250, 1999, P. 177-181, ISSN 0022-3093, http://dx.doi.org/10.1016/S0022-3093(99)00116-7.

[14] Талуц С. Г. Экспериментальное исследование теплофизических свойств переходных металлов и сплавов на основе железа при высоких температурах, Екатеринбург, 2001.

[15] Годунов С.К. Механические эффекты на электроде при кумуляции плазмы на оси / С.К. Годунов, Н.В. Филиппов, Т.И. Филиппова // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1967. — Т.52, вып.5. — С. 1138–1145.

[16] Алалыкин Г.Б., Годунов С.К., Киреева И.Л., Плинер Л.А. Решение одномерных задач газовой динамики в подвижных сетках. — М.: Наука, 1970. — 112 с.

[17] Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. Москва, Наука, 1966.

[18] Годунов С. К., Куликов И. М. Расчет разрывных решений уравнений гидродинамики с гарантией неубывания энтропии // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 54:6 (2014), 1008–1021.

[19] Годунов С. К., Киселев С. П., Куликов И. М., Мали В. И. Численное и экспериментальное моделирование образования волн при сварке взрывом // Тр. МИАН, 281 (2013), 16–31.

[20] Годунов С. К., Киселев С. П., Куликов И. М., Мали В. И. Моделирование ударно-волновых процессов в упругопластических материалах на различных (атомный, мезо и термодинамический) структурных уровнях. — Ижевск : Ижевский институт компьютерных исследований, 2014. — 289 с.

Галина Геннадьевна Лазарева — чл.-корр. д.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: lazareva@ssd.sscc.ru;
Алексей Сергеевич Аракчеев — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН;
e-mail: asarakcheev@gmail.com;
Александр Александрович Васильев — ст. лаб., аспирант Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН;
e-mail: alex.alex.vasilyev@gmail.com;
Леонид Николаевич Вячеславов — д.ф.-м.н., гл. науч.сотр. Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН;
e-mail: vyachesl@inp.nsk.su;
Александр Александрович Касатов — мл. науч.сотр. Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН;
e-mail: a.a.kasatov@gmail.com;
Владимир Андреевич Попов — студент Новосибирского Государственного Университета
e-mail: v.a.popov94@gmail.com;
Кандауров Игорь Васильевич — науч.сотр. Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН;
e-mail: i.v.kandaurov@inp.nsk.su;
Виктор Викторович Куркучеков — мл. науч.сотр. Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН;
e-mail: kurkuchekov.victor@gmail.com;
Юрий Александрович Трунев — науч.сотр. Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН;
e-mail: y.a.trunev@gmail.com;
Андрей Алексеевич Шошин — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН;
e-mail: a.a.shoshin@inp.nsk.su.

Дата поступления — 31 мая 2017 г.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КИНЕТИЧЕСКИ-СОГЛАСОВАННЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ С РЯДОМ СЕТОЧНЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

Г. Г. Лазарева[1, 2], А. Г. Максимова[2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.63

В данной работе рассмотрены и протестированы различные модификации дискретных кинетических моделей, описывающих одночастичную функцию распределения. Проведено сравнение тестовых решений с решениями, полученными явными методами решения уравнений газовой динамики. Приведен контрпример, показывающий необходимость учёта последовательности вывода уравнений используемого метода.

Ключевые слова: вычислительная математика, методы решения уравнений газовой динамики, разностные схемы, дискретные кинетические модели.

Введение

В данной работе мы рассмотрим нетривиальный подход к созданию вычислительных алгоритмов решения уравнений газовой динамики. Для создания кинетически-согласованных разностных схем (КСРС) сначала строится разностная аппроксимация уравнения Больцмана. Затем эта аппроксимация осредняется по скоростям молекул и выводятся разностные уравнения для газодинамических параметров. В традиционных методах решения уравнений газовой динамики последовательность действий иная. Сначала производится осреднение по скоростям молекул уравнения Больцмана с использованием предположения о функции распределения с получением уравнений Навье — Стокса или Эйлера. И только затем строится разностная аппроксимация.

1 Кинетически-согласованные разностные схемы

Примем следующую модель изменения одночастичной функции распределения [2]. В момент времени t^n для каждого отрезка $[x_j, x_{j+1}]$ существует своя постоянная на отрезке одночастичная функция распределения, совпадающая с максвелловской. Газодинамические параметры ρ_j, u_j, p_j постоянны на отрезке. За время $\tau = t^{n+1} - t^n$ газ совершает бесстолкновительный разлёт. В каждый момент t^n происходит мгновенная максвеллизация функции распределения. Отметим, что для газодинамических процессов максвелловское распределение одночастичной функции является адекватным. Именно эта функция соответствует столкновениям молекул в газе. После осреднения по скоростям молекул получается громоздкая схема с интегралом ошибок:

Работа выполнена при финансовой поддержке программы РАН № 0315-2015-0010.

$$\begin{gathered}\frac{\rho_i^{n+1}-\rho_i^n}{\tau}+(\rho u)_{\dot{x}}=\frac{h}{2}\left[\rho u\,\mathrm{erf}(s)+\frac{1}{\beta\sqrt{\pi}}\exp(-s^2)\right]_{\bar{x}x},\\ \frac{(\rho u)_i^{n+1}-(\rho u)_i^n}{\tau}+(\rho u^2+p)_{\dot{x}}=\frac{h}{2}\left[(\rho u 2+p)\,\mathrm{erf}(s)+\frac{\rho u\exp(-s^2)}{\beta\sqrt{\pi}}\right]_{\bar{x}x},\\ \frac{E_i^{n+1}-E_i^n}{\tau}+(u(E+p))_{\dot{x}}=\frac{h}{2}\left[u(E+p)\,\mathrm{erf}(s)+\frac{1}{\beta\sqrt{\pi}}\left(E+\frac{p}{2}\right)\exp(-s^2)\right]_{\bar{x}x},\end{gathered}\tag{1}$$

где ρ плотность газа, h — шаг сетки по пространству, T — температура, $p=\rho RT$ — давление, u — скорость газа, γ — показатель адиабаты, $\varepsilon=\frac{RT}{\gamma-1}$ — внутренняя энергия, $E=\frac{\rho u^2}{2}+\rho\varepsilon$ — полная энергия. Интеграл ошибок $\mathrm{erf}(x)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x\exp(-z^2)dz$, где $s=\beta u$, $\beta=\frac{1}{\sqrt{2RT}}$. Центральная разность для аппроксимации первой производной $a_{\dot{x}}=\frac{a_{i+1}-a_{i-1}}{2h}$. Разностная аппроксимация второй производной $a_{\bar{x}x}=\frac{a_{i+1}-2a_i+a_{i-1}}{2h^2}$.

2 Квазигазоинамическая система уравнений

Квазигазодинамическая система уравнений (КГУ) является одной из форм дифференциальной записи КСРС [3]. КГУ часто используется при вычислениях из-за её относительной простоты:

$$\begin{gathered}\frac{\rho_i^{n+1}-\rho_i^n}{\tau}+(\rho u)_{\dot{x}}=\tau_c(\rho u^2+p)_{\bar{x}x},\\ \frac{(\rho u)_i^{n+1}-(\rho u)_i^n}{\tau}+(\rho u^2+p)_{\dot{x}}=\tau_c(\rho u^3+3pu)_{\bar{x}x},\\ \frac{E_i^{n+1}-E_i^n}{\tau}+(u(E+p))_{\dot{x}}=\tau_c(u^2(E+2p))_{\bar{x}x}+\tau_c\left(\frac{p}{\rho}(E+p)\right)_{\bar{x}x},\end{gathered}\tag{2}$$

где $\tau_c\approx\frac{h}{2c}$ — кинетическое время, за которое молекулы пересекают границу ячейки.

Отметим, что система газодинамических уравнений имеет гиперболический тип, а КГУ — параболический [4].

3 Схема с направленными разностями

Рассмотрим схему с направленными разностями первого порядка [5] с тремя вариантами правой части $F=(f_1,f_2,f_3)^T$:

$$\begin{gathered}\frac{\rho_i^{n+1}-\rho_i^n}{\tau}+u_i^{n+}\frac{\rho_i^n-\rho_{i-1}^n}{h}+u_i^{n-}\frac{\rho_{i+1}^n-\rho_i^n}{h}+\rho_i^n\frac{u_{i+1}^n-u_{i-1}^n}{2h}=f_1,\\ \frac{(\rho u)_i^{n+1}-(\rho u)_i^n}{\tau}+u_i^{n+}\frac{(\rho u)_i^n-(\rho u)_{i-1}^n}{h}+u_i^{n-}\frac{(\rho u)_{i+1}^n-(\rho u)_i^n}{h}+(\rho u)_i^n\frac{u_{i+1}^n-u_{i-1}^n}{2h}+\frac{p_{i+1}^n-p_{i-1}^n}{2h}=f_2,\\ \frac{E_i^{n+1}-E_i^n}{\tau}+u_i^{n+}\frac{E_i^n-E_{i-1}^n}{h}+u_i^{n-}\frac{E_{i+1}^n-E_i^n}{h}+E_i^n\frac{u_{i+1}^n-u_{i-1}^n}{2h}+\frac{u_{i+1}^n p_{i+1}^n-u_{i-1}^n p_{i-1}^n}{2h}=f_3,\end{gathered}\tag{3}$$

где $u_i^{n\pm}=\frac{u_i^n\pm|u_i^n|}{2}$, h,τ шаги по пространству и времени. $F=(0,0,0)^T$ соответствует первоначальной схеме с направленными разностями.

Схема с направленными разностями с правой частью КСРС (1):

$$F=\begin{pmatrix}\frac{h}{2}\left[\rho u\,\mathrm{erf}(s)+\frac{1}{\beta\sqrt{\pi}}\exp(-s^2)\right]_{\bar{x}x}\\ \frac{h}{2}\left[(\rho u^2+p)\,\mathrm{erf}(s)+\frac{\rho u\exp(-s^2)}{\beta\sqrt{\pi}}\right]_{\bar{x}x}\\ \frac{h}{2}\left[u(E+p)\,\mathrm{erf}(s)+\frac{1}{\beta\sqrt{\pi}}\left(E+\frac{p}{2}\right)\exp(-s^2)\right]_{\bar{x}x}\end{pmatrix}\tag{4}$$

Схема с направленными разностями с правой частью КГУ (2):

$$F=\begin{pmatrix}\tau_c(\rho u^2+p)_{\bar{x}x}\\ \tau_c(\rho u^3+3pu)_{\bar{x}x}\\ \tau_c(u^2(E+2p))_{\bar{x}x}+\tau_c\left(\frac{p}{\rho}(E+p)\right)_{\bar{x}x}\end{pmatrix}\tag{5}$$

4 Схема Стегера — Варминга

Аналогично рассмотрим схему Стегера — Варминга [6] с тремя вариантами правой части:

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\tau} + \frac{F_{j+1/2}^n - F_{j-1/2}^n}{h} = 0, \tag{6}$$

где

$$U = (\rho, \rho u, E)^T, F_{j+1/2} = A_j^+ U_j + A_{j+1}^- U_{j+1},$$

$$A^\pm = RD^\pm L, D^\pm = \mathrm{diag}(d_1^\pm, d_2^\pm, d_3^\pm),$$

$$d_k^\pm = \frac{1}{2}(a_k \pm |a_k|),$$

$$a_1 = u - c, a_2 = u, a_3 = u + c,$$

$$E = \frac{\rho u^2}{2} + \frac{p}{\gamma - 1}, c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}}, H = \frac{E + p}{\rho},$$

$$L = \begin{pmatrix} uc + (\gamma - 1)\frac{u^2}{2} & -c - (\gamma - 1)u & \gamma - 1 \\ 1 - (\gamma - 1)\frac{u^2}{2c^2} & (\gamma - 1)\frac{u}{c^2} & -(\gamma - 1)\frac{1}{c^2} \\ -uc + (\gamma - 1)\frac{u^2}{2} & c - (\gamma - 1)u & \gamma - 1 \end{pmatrix},$$

$$R = L^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2c^2} & 1 & \frac{1}{2c^2} \\ \frac{1}{2c^2}(u - c) & u & \frac{1}{2c^2}(u + c) \\ \frac{1}{2c^2}(H - uc) & \frac{u^2}{2} & \frac{1}{2c^2}(H + uc) \end{pmatrix}.$$

$F = (0, 0, 0)^T$ определяет схему Стегера — Варминга, $F = (f_1, f_2, f_3)^T$ из (4) и (5) соответствует схеме Стегера — Варминга с КСРС (1) и КГУ (2).

5 Результаты тестов

Рассмотрим поведение невязкого газа в одномерном случае на примере задачи Римана с известным точным решением [7]. При $x = x_0$ стоит перегородка, разделяющая газ в трубе. С левой стороны перегородки газ имеет параметры ρ_1, u_1, p_1, а с правой ρ_2, u_2, p_2. Для определённости будем считать, что $p_1 > p_2$. В таком случае начальные данные задачи примут следующий вид:

Начальные данные: $\rho_1 = 1, u_1 = 0, p_1 = 1, \rho_2 = 0.125, u_2 = 0, p_2 = 0.1$. В момент времени $t = 0$ перегородку убирают.

Рассмотрим результаты тестов, отображающие погрешность решения в среднеквадратичной норме, при различных шагах по времени и пространству в момент времени $t = 1$.

Графики (рис. 1 a, b) показывают, что КСРС точнее, чем первоначальная схема с направленными разностями (3). КГУ имеет преимущество при малых шагах по пространству и требует улучшения порядка сходимости по времени. Отметим, что КГУ второго порядка сходимости по времени с добавленной второй временной производной имеет параболический тип решаемой системы уравнений [4].

Графики (рис. 2 a, b) демонстрируют, что добавление правой части $F = (f_1, f_2, f_3)^T$ (4,5) понижает точность первоначальной схемы Стегера — Варминга (6). Это связано с тем, что схема Стегера — Варминга получена методом, основанном на характеристиках. Этод метод не согласуется с способом построения КСРС и КГУ. Этот контрпример показывает необходимость учёта метода получения схемы.

Рассмотрим скорости сходимости при измельчении шага дискретизации. Порядок точности $\mathcal{P}(h)$ определяется для некоторой величины f, рассматриваемой с последовательным уменьшением шага h, при помощи правила Рунге [8]:

$$\mathcal{P}(h) = \lim_{h \to 0} \left(\log_2 \frac{f(2h) - f(h)}{f(h) - f(h/2)} \right).$$

График (рис. 3 a, b) показывает, что порядок сходимости не достигает первого порядка на примере закона сохранения масс:

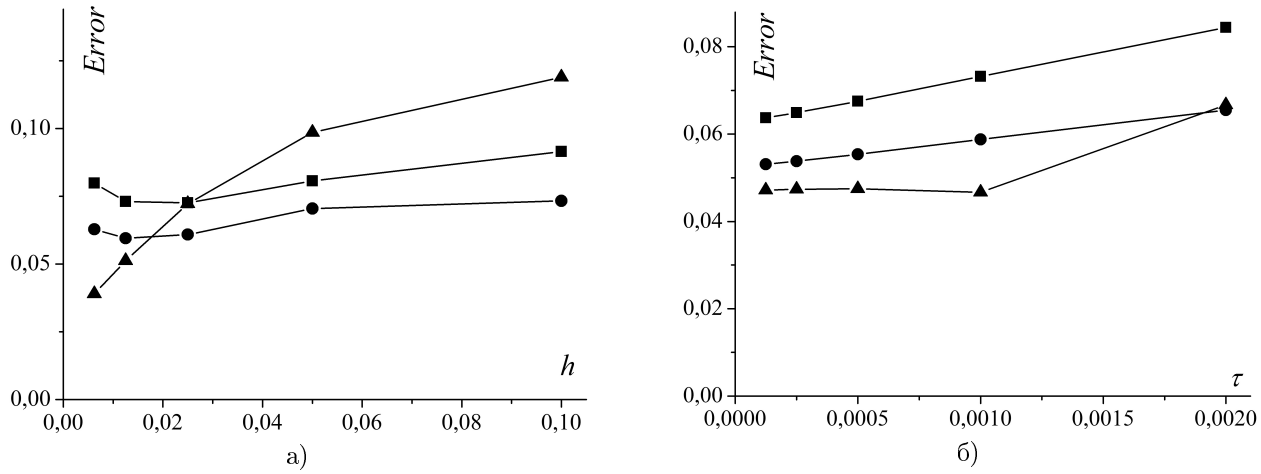


Рис. 1: Погрешность в среднеквадратичной норме схемы с направленными разностями (квадратный символ), схемы с направленными разностями с КСРС (круглый символ), с КГУ (треугольный символ). (a) — различные шаги по пространству при $\tau = 0.001$. (b) — различные шаги по времени при $h = 0.01$.

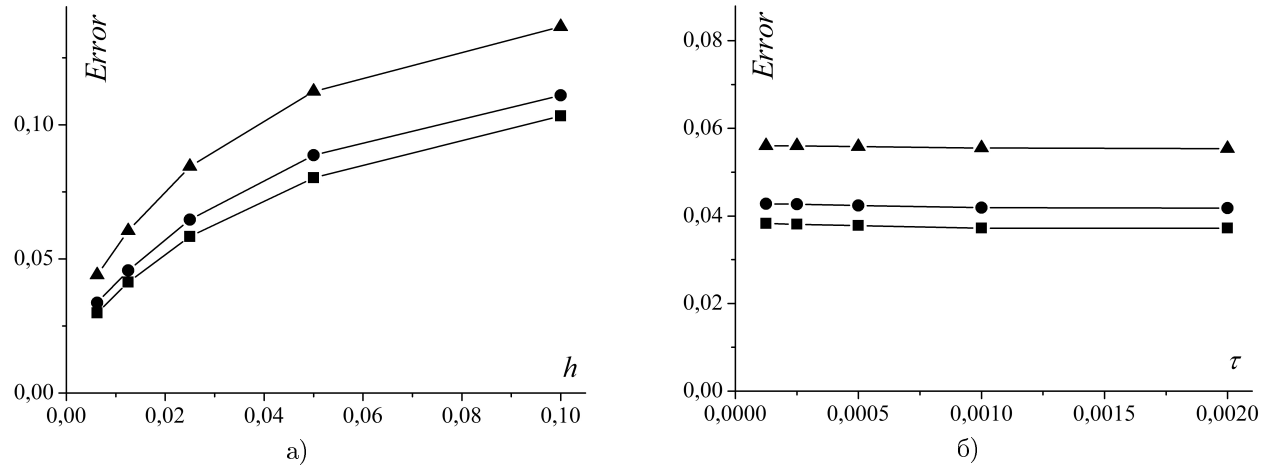


Рис. 2: Погрешность в среднеквадратичной норме схемы Стегера — Варминга (квадратный символ), схемы Стегера — Варминга с КСРС (круглый символ), с КГУ (треугольный символ). (a) — различные шаги по пространству при $\tau = 0.001$. (b) — различные шаги по времени при $h = 0.01$.

$$f_\rho = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t_2)\, dx - \int_{x_1}^{x_2} \rho(x, t_1)\, dx + \int_{t_1}^{t_2} (\rho u)(x_2, t)\, dt - \int_{t_1}^{t_2} (\rho u)(x_1, t)\, dt.$$

На разрывных решениях порядок аппроксимации не достигает первой степени [8]. Определение точности порядка для разрывных решений связано с областью определения этих решений и зависит от области в которой производится расчёт.

Заключение

В работе были рассмотрен вывод уравнений КСРС и КГУ. Этот подход использован для схемы с направленными разностями и схемы Стегера — Варминга. Проведена серия тестов для задачи Римана на сгущающихся сетках. Схема с направленными разностями для КСРС и КГУ показала высокую точность. Так же были показаны плюсы и минусы КСРС и КГУ. Построенный контрпример с применением схемы Стегера — Варминга показал необходимость учёта последовательности вывода уравнений КСРС и КГУ.

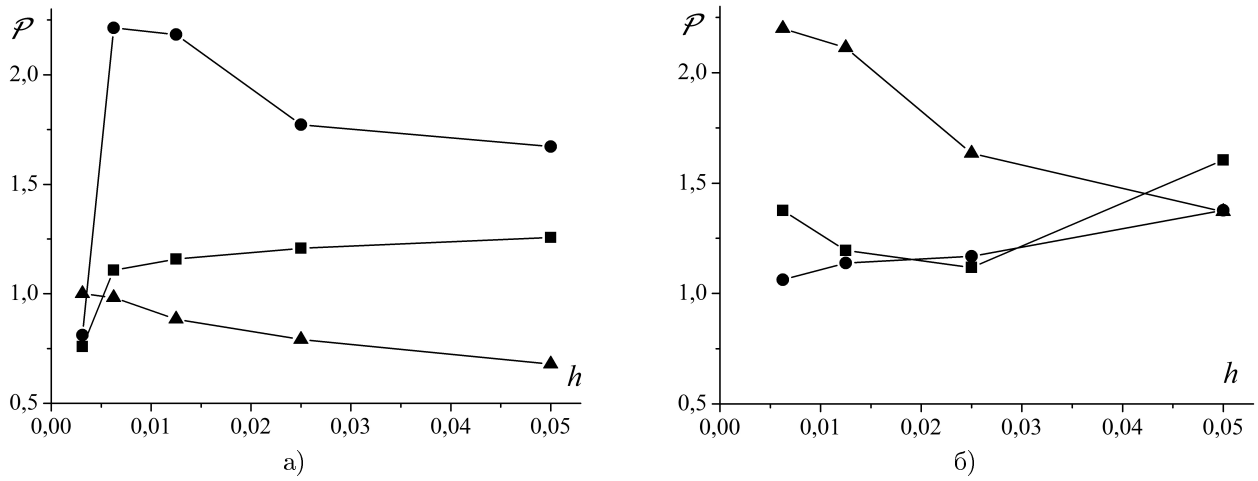


Рис. 3: Порядок сходимости плотности ρ при различных шагах по пространству, $\tau = 0.0005$, $t_1 = 0.3$, $t_2 = 0.4$, $x_1 = -0.6$, $x_2 = -0.2$. (a) — вычислено для схемы с направленными разностями (квадратный символ), схемы с направленными разностями с КСРС (круглый символ), с КГУ (треугольный символ), (b) — вычислено для схемы Стегера — Варминга (квадратный символ), для схемы Стегера — Варминга с КСРС (круглый символ), с КГУ (треугольный символ).

Список литературы

[1] Четверушкин Б. Н. Кинетически-согласованные схемы в газовой динамике // М.: МГУ, 1999. — 232 с.

[2] Четверушкин Б. Н., Елизарова Т. Г. Кинетические алгоритмы для расчёта газодинамических течений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 25:10, 1985. 1526–1533 с.

[3] Chetverushkin B.N., Romanyukha N. Yu. Kinetic and Lattice Boltzmann Schemes // Parallel Computational Fluid Dynamics, Multidisciplinary Applications (Elsevier, Amsterdam, 2005), pp. 257–262.

[4] Д'Асцензо Н., Савельев В. И., Четверушкин Б. Н. Об одном алгоритме решения параболических и эллиптических уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 55:8, 2015. 1320–1328 с.

[5] Patankar S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow // Taylor and Francis, 1980.

[6] Steger J.L., Warming R.F. Flux-vector splitting of the inviscid gas-dynamic equations with applications to finite difference schemes // J. Comput. Phys. 40, 1981, pp. 263–293.

[7] Toro E.F. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics // Springer-Verlag. Second Edition, 1999.

[8] Годунов С. К., Манузина Ю. Д., Назарьева М. А. Экспериментальный анализ сходимости численного решения к обобщенному решению в газовой динамике // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 51:1, 2011. 88–95 с.

[9] Годунов С. К., Куликов И. М. Расчёт разрывных решений уравнений гидродинамики с гарантией неубывания энтропии // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 54:6, 2014. 1008–1021 с.

Галина Геннадьевна Лазарева — чл.-корр. к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: lazareva@ssd.sscc.ru;
Анастасия Глебовна Максимова — студент Новосибирского государственного университета;
e-mail: a.g.maksimova@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА КОМПЛЕКСНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ПЛАСТ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ ТГХВ БС

Г. Г. Лазарева[1,2,3], М. А. Шишленин[1,2,5], Р. А. Идиятуллин[4], Е. А. Федоров[1], В. Б. Заволжский[4], И.В. Хлестов[4]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630073, Новосибирск*

[3] *Новосибирский государственный технический университет, 630090, Новосибирск*

[4] *ООО "Центр Нефтяных Технологий", 119526, Москва*

[5] *Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.633

Представлены прямая и обратная задача моделирования комплексного воздействия с применением технологии термогазохимического воздействия бинарными состава на скважинах. Для возможности обоснования параметров ведущихся промышленных испытаний разработан быстродействующий расчетный модуль для выполнения расчетов технологическими службами сервисного предприятия. Обратная задача поставлена для получения оптимальных значений объемов закачки реагентов. Приведен пример применения пакета программ на пермокарбоновой залежи Усинского месторождения ООО ЛУКОЙЛ-Коми, который показывает рабочую точность прогноза работ по компклексному воздействию на призабойную зону продуктивного пласта закачиваемыми бинарными химическими системами (монотопливом) на основе неорганических солей.

Ключевые слова: математическое моделирование, тепломассоперенос, добыча нефти

Введение

Одной из основных задач современной разработки и эксплуатации нефтяных и газовых месторождений является повышение нефтеотдачи пластов. Значительный прирост добычи нефти от применения различных современных методов воздействия по сравнению с традиционными методами разработки достигается, в основном, в пластах с повышенной вязкостью нефти, обводненных пластах и низкопроницаемых коллекторах. Доля трудноизвлекаемых запасов нефти в мире непрерывно растет и новые методы по их добыче становятся все более востребованными. При разработке, основным средством воздействия на месторождения с высоковязкими нефтями является тепло, закачиваемое в продуктивный пласт. Масштабный прогрев продуктивного пласта, содержащего как тяжелую, так и обычную нефть, экономически и технологически должен быть выгоден, т.к. нагрев нефти, например, от 30°C до 130°C приводит к многократному снижению вязкости и повышению подвижности нефти. Соответственно, производительность добываемой продукции может возрасти в несколько раз.

Необходимым элементом решения задачи наиболее полного извлечения запасов при максимальной экономической рентабельности является математическое моделирование. Начиная с 60-х годов создаются математические геолого-технологические модели месторождений, анализируется эффективность применения способов добычи, разрабатываются программные комплексы для нахождения способов повышения нефтеотдачи пластов на основе математического моделирования. Без вычислительных технологий прогресс в этой области невозможен, так как аналитические методы решения ограничены рассмотрением упрощенных случаев с высокой степенью симметрии или дают приближенные оценки для нелинейных задач. В настоящее время разработано большое количество методов решения широкого класса задач подземной гидромеханики,

Работа поддержана Программой РАН № 0315-2015-0010, РФФИ (проекты 17-51-540004, 16-29-15120, 16-01-00755).

изучены их свойства и правомерность их использования. На основе существующих и хорошо апробированных методов решения разработано большое количество пакетов программ для моделирования различных аспектов процесса разработки месторождений с целью предсказания их характеристик и рабочих параметров современных инженерных устройств. Наряду с отечественными комплексами программ ГЕОПАК (СибНИИНП, Тюмень), SUTRA и LAURA (ВНИИнефть, Москва), Weatherford (Weatherford, Москва), TimeZYX (группа компаний Траст), HydroGeo (ТПУ), T-Navigator (RF Dinamics, г.Москва) в России известны и широко используются зарубежные пакеты программ Property, ECLIPS, PETREL и SIS (Schlumberger), IRAR RMS, Irap и TEMPEST-MORE (ROXAR), VIP (Halliburton), Stratamodel, Total Drilling Performance (Landmark), SKUA/GOCAD Engineering Modeling (Paradigm Geophysical), Tigress (Geotrace Tigress Software).

Несмотря на развитую теорию, большой опыт успешного применения методов решения и существование созданных на их основе готовых пакетов программ, решение задач в случае создания новой технологии, основанной на принципиально новых принципах, требует особого подхода. В работе представлены математическая модель комплексного воздействия с применением технологии термогазохимического воздействия бинарными состава (ТГХВ БС) на скважинах. Для возможности обоснования параметров ведущихся промышленных испытаний разработаны математическая модель и быстродействующий расчетный модуль для выполнения расчетов технологическими службами сервисного предприятия. На основе анализа моделируемой технологии выделены наиболее существенные физические процессы: последовательная закачка реагентов, возникновение зоны реакции, разогрев и образование зоны высокого давления в ходе реакции, распространение температурного поля и поля давления по пласту. Построен алгоритм расчета ведущихся натурных испытаний, приведены реальные параметры пласта и закачиваемых реагентов к единой метрической системе. Учтены возможности ввода изменяющихся параметров пласта и закачиваемых веществ, создан удобный интуитивно-понятный интерфейс с возможностью вывода результатов расчета в графическом виде. Поставлена обратная задача для получения оптимальных значений объемов закачки реагентов.

1 Технология ТГХВ БС

Технология ТХВС БС предусматривает воздействие на призабойную и удаленную зону продуктивного пласта нагнетанием в скважину раствора неорганических солей бинарного состава, с последующим инициированием реакции разложения бинарного состава внутри порово-трещиноватых коллекторов закачкой в пласт растворов неорганических, органических кислот и формальдегидов. В результате разложения компонентов бинарного состава генерируется высокая температура (до $300 - 320°C$) и давление, что в комплексе способствует прогреву горной породы и высоковязких углеводородов, и созданию вторичной сетки трещин в продуктивном пласте В большинстве случаев при обработке призабойной зоны пласта, работы по закачке проводятся через трубное пространство, привлекая специалистов и дополнительную технику КРС. Работы по проведению ТГХВ БС предусматривает возможность закачки БС в скважину и по затрубному пространству (без извлечения насосного оборудования) растворов энерговыделяющего состава и инициатора разложения. Контроль за процессом протекания реакции на забое скважины, в режиме реального времени, производится с помощью высокотемпературной системы измерения, а скорость разложения и температура реакции могут регулироваться концентрацией солей. Результатом термогазохимического воздействия на призабойную зону пласта является восстановление проницаемости ПЗП, снижение вязкости нефти и образование дополнительных каналов фильтрации. Технология разработана специалистами ООО "ЦНТ защищена российскими и зарубежными патентами, прошла экспертизу на промышленную безопасность в лицензированном предприятии ЗАО "Взрывиспытания".

2 Постановка задачи

Выбранная одномерная многофазная модель фильтрационных процессов описывает радиально симметричное распространение веществ в пористой среде из точечного источника [5]. Алгоритм расчета параметров ведущихся натурных испытаний состоит из определения координат зоны реакции и расчета распространения температурного поля и поля давления в пласте. Процесс вытеснения описывается как радиальное распространение реагентов поршневым способом. Решается уравнение теплопроводности с учетом переменных коэффициентов в цилиндрической системе координат:

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

$$\left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=0} = \left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=R} = 0, \tag{2}$$

$$T(r,0) = T_0(r). \tag{3}$$

где T — температура, $k_T = k_T^l + m_r k_T^r$ — коэффициент температуропроводности, который состоит из значений для нефти/воды k_T^l и породы k_T^r с учетом пористости m_r. Коэффициент температуропроводности

$$k_T^{l,r} = \frac{\lambda^{l,r}}{c^{l,r}\rho^{l,r}},$$

где $\lambda^{l,r}$ — теплопроводность, $c^{l,r}$ — теплоемкость, $\rho^{l,r}$ — плотность, определяется из фактических поверхностных условий.

Зная точные радиальные распределения пористости и других параметров пласта можно построить полную гидродинамическую модель [6, 7] распространения реагентов в пласте с подробным расчетом давления, плотности, скорости, насыщенности, удельной массы и т.д. Для получения оценки результирующего давления в пласте достаточно расчета уравнения пьезопроводности:

$$P_t = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\chi(r) \frac{\partial P}{\partial r}\right), \tag{4}$$

$$\left.\frac{\partial P}{\partial r}\right|_{r=0} = \left.\frac{\partial P}{\partial r}\right|_{r=R} = 0, \tag{5}$$

$$P(r,0) = P_0(r). \tag{6}$$

Здесь P — давление,

$$\chi = \frac{k_r}{\mu(m_r\beta_l + \beta_r)}$$

— коэффициент пьезопроводности, k_r — проницаемость, μ — коэффициент вязкости, β_l, β_r — коэффициенты сжимаемости вещества и пласта. Коэффициент сжимаемости вещества принимается равным коэффициенту сжимаемости воды для области вокруг скважины, реагента в зоне реакции, комбинации коэффициентов сжимаемости воды и нефти в не задействованном пласте. Коэффициент сжимаемости пласта взят для песчаника $\beta_r = 10^{-9}$ ms^2/kg.

В качестве начальных данных выбраны температура и давление в пласте (известные в результате натурных измерений) и в области реакции (непосредственно вычисляемые из данных о закачиваемых реагентах). На границах заданы условия Дирихле. Размер расчетной области задается пользователем, шаг по времени определяется через задаваемые параметры. Вводятся пользователем и в программе приводятся к безразмерному виду параметры пласта и веществ: пористость, проницаемость, пластовое давление, мощность пласта, плотность, объем закачки, коэфициенты сжимаемости, вязкости и температуропроводности.

Для вычисления температуры и давления используется дискретная модель [8] наследующая свойства непрерывной задачи. Разностная схема [9–11] является полностью консервативной и равномерно устойчивой по начальным данным в энергетической сеточной норме. Алгоритм реализации состоит из двух явно разрешимых этапов.

Обратная задача состоит в нахождении вектор-функции начальных данных $q(r) = (T_0(r), P_0(r))$. Решение обратной задачи будем искать минимизируя следующий целевой функционал

$$J(q) = \int_0^L \Big(P^2(0,t) - T^2(R,t)\Big)dt \to \min. \tag{7}$$

градиентным методом [16, 17]

$$q^{(n+1)} = q^{(n)} - \alpha_n J'(q^{(n)}).$$

Здесь $q^{(0)}$ — начальное приближение, α_n — параметр спуска, $J'(q^{(n)})$ — градиент целевого функционала. Предполагается, что начальные данные связаны друг с другом и возможен их пересчет.

Сходимость метода Ландвебера для нелинейной коэффициентной обратной задачи была доказана в работе [14]. Для уменьшения числа итераций можно использовать априорную информацию о принадлежности искомого решения некоторому классу функций [13, 15].

3 Термохимическая реакция

Рассматривается реакция

$$NH_4NO_3 + NaNO_2 \longleftrightarrow NH_4NO_2 + NaNO_3,$$

где NH_4NO_3 — нитрат аммония, $NaNO_2$ — нитрит натрия, NH_4NO_2 — нитрит аммония, $NaNO_3$ — нитрат натрия. Количество теплоты, выделяемое при сгорании бинарных смесей вычисляется с использованием соотношения: $Q_T V = (T_{\max} - T_0) M k_T$, где Q_T количество тепла)ккал/м^3) для разогрева объема V в кубометрах, $T_{\max}$ — температура в зоне реакции, T_0 — температура в пласте, M — масса раствора, k_T — теплоемкость раствора.

Алгоритм позволяет по объему закачки и процентному соотношению солей в БС определить температуру БС $T_{\max}$ в момент завершения реакции, выделяемую теплоту Q_T, выделяемый объем газов. Используемый алгоритм позволяет определять данные для любого разумного процентного соотношения солей. Зная температуру БС $T_{\max}$ в момент завершения реакции, пористость и проницаемость можно вычислить потери тепла на прогрев пласта. Таким образом удается достаточно точно определить начальное распределение температуры.

4 Прогноз работ по технологии ТГХВ-БС на скважине Усинского месторождения

Усинское нефтяное месторождение расположено в Республике Коми. Входит в Тимано-Печорскую нефтегазоносную провинцию. Пермокарбоновая (P+C) залежь нефти открыта в 1968 году, в промышленную эксплуатацию введена в 1977 году. Залежь приурочена к органогенным карбонатным коллекторам трещинно-кавернозно-порового типа сакмарского и артинского ярусов нижней перми, верхнего карбона и московского и башкирского ярусов среднего карбона. Пермокарбоновая залежь Усинского месторождения отличается сложным геологическим строением, к основным особенностям геолого-физической характеристики относятся аномально высокая вязкость нефти, большая толщина и крайняя неоднородность коллектора.

К сожалению, на текущий момент построить априорных оценок для процесса распределения температуры и давления по пласту в зависимости от количества и скорости прокачки невозможно. Поэтому необходимые данные можно получить только проведением серии численных экспериментов, решая ряд прямых задач. В настоящее время рассматриваемая модель является рабочим инструментом для моделирования работ по ТГХВ БС. Используя представленную математическую модель, специалисты ООО “ЦНТ” провели предварительные расчеты и провели натурные испытания на пермо-карбоновой залежи Усинского месторождения ООО “ЛУКОЙЛ-Коми” [12].

Расчеты позволили найти наиболее оптимальный график закачки (см. таблицу) на скважине № 3603 Усинского месторождения при которой максимальная температура на расстоянии 15 м от забоя (рис. 1) превышает 200°C (рис. 2). По истечению 24 часов в призабойной зоне пласта температура зафиксирована на отметке 63°C.

Работы по технологии ТГХВ-БС на скважине №3603 23 ГС Усинского месторождения были проведены 11–13 августа 2016г. Концентрация солей БС 60% , соляной кислоты 12%. Произведен фоновый замер температуры и давления. Анализ результатов термометрии показал, что после 4 часов температура в призабойной зоне пласта (0–10м) составила 74°C. Более того, после 24 часов температура составила 58°C в призабойной зоне пласта. Полученные данные соответствуют расчетным температурам.

Выводы

Представлены прямая и обратная задача моделирования технологии термогазохимического воздействия бинарными состава на скважину. Существующий опыт применения пакета программ на пермо-карбоновой

Таблица 1: Проектный график закачки

Stage	Закачиваемое вещество	Объем жидкости, м^3
1	Активатор	2
2	Буферная закачка технической воды	2
3	Закачка БС	2
4	Буферная закачка технической воды	5
5	Закачка соляной кислоты	12
6	Продавочная техническая вода	20
7	Остановка закачки	

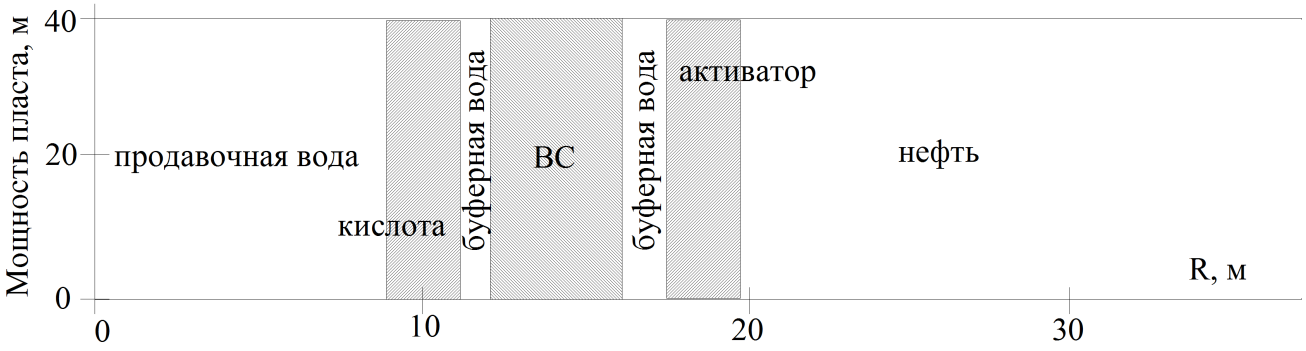


Рис. 1: Визуализация профиля проникновения БС

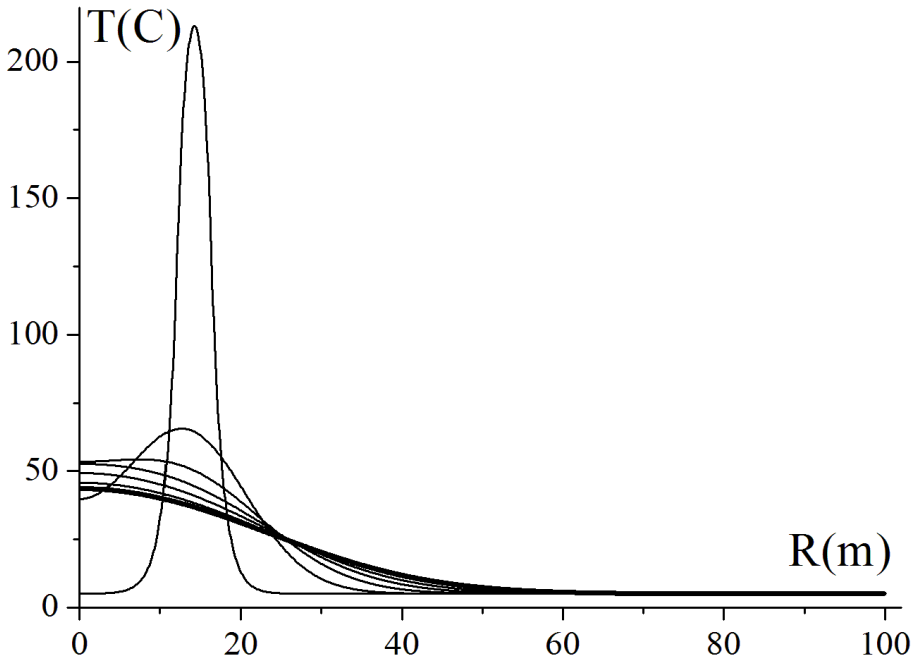


Рис. 2: График теплового фронта вытеснения нефти через: 17 мин, 4, 9, 13, 17, 21, 24 час

залежи Усинского месторождения ООО "ЛУКОЙЛ-Коми", показывает рабочую точность прогноза работ по комплексному воздействию на призабойную зону продуктивного пласта закачиваемыми бинарными химическими системами (монотопливом) на основе неорганических солей.

Список литературы

[1] Economides M.J., Kenneth G. Nolte Reservoir Stimulation. Third Edition. – McDowell, Schlumberger: John Wiley and Sons, 2000.

[2] Регламент на проведение работ "Термогазохимического воздействие на призабойную зону пласта с применением бинарной системы (ТГХВ БС)", РД — Москва 2014 — 16 с.

[3] Хисамов Р.С. Особенности геологического строения и разработки многопластовых нефтяных месторождений // Материалы международной научно-практической конференции. — Казань: Изд-во "ФЭН" АН РТ, 2013. — 57–65 с.

[4] Муслимов Р.Х., Назипов Р.С., Хисамов Р.С., Романов Г.В., Ибатуллин Р.Р., Смелков В.М., Плотникова И.Н. Новейшие методы увеличения нефтеотдачи пластов — теория и практика их применения — М. :ОАО "ВНИИОЭНГ", 2005 — 121 с.

[5] Басииев К. С, Кочина И. Н., Максимов В. М. Подземная гидромеханика — М.: Недра, 1993. — 416 с.

[6] Romenski E., Drikakis D., Toro E.F. Conservative models and numerical methods for compressible two-phase flow // J. Sci. Comput. – 2010. – Vol. 42, No 1. – P. 68–95.

[7] Herard J.M. A three-phase flow model // Mathematical and Computer Modelling. – 2007. – Vol. 45, No 5–6. – P. 732–755.

[8] Коновалов А. Н. Сопряженно-факторизованные модели в задачах математической физики // Сиб. журн. вычисл. матем., 1:1 (1998), 25–58.

[9] Коновалов А.Н. Сопряженно-согласованные аппроксимации и экономичные дискретные реализации для динамической задачи линейной теории упругости // Дифференц. уравнения. 2010. т. 46. № 7. с. 1004–1010.

[10] Коновалов А. Н. Итерационные методы для операторных уравнений с сопряженно-факторизованной структурой // Сиб. матем. журн., 41:2 (2000), 370–384

[11] А.Н. Коновалов, Ю.П. Попов Оптимальные явно разрешимые дискретные модели с контролируемым дисбалансом полной механической энергии для динамических задач линейной теории упругости // Сибирский математический журнал, 2015. Том 56, №5, стр. 1092–1099.

[12] Технологическая схема опытно-промышленной разработки актуальных участков пермо - карбоновой залежи Усинского месторождения // ООО "ЛУКОЙЛ-Коми отчет ООО "ЛУКОЙЛ — Инжиниринг "ПечорНИПИнефть— Ухта 2011 — 120 с.

[13] Кабанихин С.И., Шишленин М.А. Об использовании априорной информации в коэффициентных обратных задачах для гиперболических уравнений // Тр. ИММ УрО РАН. 2012. Т. 18, № 1. С. 147–164.

[14] Kabanikhin S.I., Scherzer O., Shishlenin M.A. Iteration methods for solving a two dimensional inverse problem for a hyperbolic equation // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2003. V. 11, iss. 1. P. 87–109.

[15] Kabanikhin S.I., Shishlenin M.A. Quasi-solution in inverse coefficient problems // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2008. V. 16, iss. 7. P. 705–713.

[16] Kabanikhin S.I. Definitions and examples of inverse and ill-posed problems // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2008. V. 16, iss. 4. P. 317–357.

[17] Belonosov A., Shishlenin M. Regularization methods of the continuation problem for the parabolic equation // Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). 2017. 10187 LNCS. P. 220–226.

Галина Геннадьевна Лазарева — чл.-корр. д.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: lazareva@ssd.sscc.ru;
Максим Александрович Шишленин — д.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: mshishlenin@ngs.ru;
Рафаэль Альбертович Идиятуллин — начальник ПТО ООО "Центр Нефтяных Технологий";
e-mail: 01.idiyatullin@gmail.com;
Егор Александрович Федоров — мл. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: forallepsilon@yandex.ru;
Виктор Борисович Заволжский — Генеральный директор ООО "Центр Нефтяных Технологий";
e-mail: victor@cnt-komitat.com;
Иван Валерьевич Хлестов — Директор ООО "Центр Нефтяных Технологий";
e-mail: ivan.khl@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ВЕСОВЫЕ ОЦЕНКИ МЕТОДА МОНТЕ — КАРЛО ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРЯМЫХ И ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ОПТИКИ МУТНЫХ СРЕД

А. В. Лаппа, А. Е. Анчугова

Челябинский государственный университет, 454001, Челябинск

УДК 519.245

В рамках кинетической модели в работе записаны прямое и сопряженное интегральные представления для линейных характеристик поля оптического излучения в гетерогенной мутной среде, корректно учитывающие особенности распространения света в веществе, в частности его отражение и преломление на поверхностях разрыва показателя преломления. Эти представления имеют существенные отличия от их аналогов в задачах переноса ионизирующих излучений, что не позволяет напрямую применять разработанные для этих задач методы. На основе записанных представлений в работе получен ряд новых Монте — Карловских оценок весового типа для вычисления указанных линейных характеристик, и сформулированы условия несмещенности оценок. Разработаны алгоритмы для решения обратных задач оптики мутных сред, и эти алгоритмы применены к одной из центральных задач биомедицинской оптики: неразрушающему определению оптических параметров биологических тканей, исходя из измерений характеристик отраженного излучения. Алгоритмы, в частности, позволяют с высокой точностью, одновременно для большого набора сред с различными оптическими параметрами рассчитывать радиационные характеристики и их производные по этим параметрам.

Ключевые слова: метод Монте — Карло, весовые оценки, перенос излучения, мутная среда, оптическое излучение, свет, оптические параметры, обратная задача, кинетическая модель.

Введение

Настоящая работа стимулирована задачами биомедицинской оптики [1], и именно их мы, прежде всего, имели в виду при разработке алгоритмов. Но область приложений результатов работы — шире. Кратко, объект приложений можно определить как свет в мутных средах в кинетической модели. Свет здесь и далее трактуется расширительно, как оптическое излучение, включающее излучения ультрафиолетового, видимого и инфракрасного диапазонов. Мутная среда может быть конденсированной (биологические ткани, эмульсии, суспензии, порошки, непрозрачные диэлектрики) и газообразной (турбулентная атмосфера, дым, пыль, туман, аэрозоль), но, в первую очередь, работа ориентирована на более сложный случай: конденсированные и гетерогенные мутные среды. Кинетическую модель мы трактуем в духе физической кинетики: как описание систем частиц и излучений в веществе посредством одночастичных функций распределения в фазовом пространстве и кинетических уравнений переноса излучений для этих функций. Модель, как известно, с большим успехом применяется для нейтронов и других ионизирующих излучений. Достаточно широко и успешно она применяется и для света в мутной среде, хотя ее адекватность здесь, вообще говоря, меньше.

Благодаря известной вероятностной интерпретации модели, в оптических приложениях, как и в «ионизирующих», получил распространение метод Монте — Карло. В основном, используются аналоговые алгоритмы, т.е. простая статистическая реализация исходной (физической) вероятностной модели. Предложены и неаналоговые алгоритмы (неплохой их обзор представлен в [2]), но все они (по крайней мере для конденсированных сред) получены (физиками) эвристически, посредством физических рассуждений «на пальцах» (точнее, на частицах) без существенного использования формул и уравнений. Как следствие, алгоритмы слабо обоснованы, условия их применимости не ясны, и они составляют лишь малую (не самую лучшую) часть из возможных неаналоговых алгоритмов.

Главная причина этому — недостаточная развитость математического описания кинетической модели для света в конденсированных средах. В этой работе мы, на основе сопряженного интегрального уравнения

переноса излучений, формулируем замкнутую математическую модель для разнообразных линейных характеристик световых полей в гетерогенных мутных средах, облучаемых произвольными источниками. Предлагаем ряд новых Монте — Карловских оценок весового типа для вычисления этих характеристик. Применяем оценки для решения обратных задач оптики мутных сред, в частности для неразрушающего определения оптических параметров биологических тканей, исходя из измерений характеристик отраженного излучения.

1 Модель

Мы ограничиваемся приложениями, в которых свет в среде можно считать некогерентным и неполяризованным. Первое допущение необходимо для применения кинетической модели, второе — позволяет обойтись скалярной функцией распределения для описания поля излучения. В качестве таковой в оптике используется лучевая (дифференциальная) интенсивность $I = I(x,t)$ с фазовыми координатами $x = (\mathbf{r}, \nu, \mathbf{\Omega})$, описывающими положение точки в пространстве $\mathbb{R}^3$, направление лучей на единичной сфере $O \subset \mathbb{R}^3$ и частоту света (или его длину волны в вакууме) в рассматриваемом спектральном диапазоне $\Lambda \subset (0, \infty)$.

Область приложений данной работы составляют задачи о вычислении различных линейных характеристик стационарного светового поля в заданной мутной среде (далее просто среде). Условимся о следующем. Область $\bar{G} \subset \mathbb{R}^3$, занимаемая средой, — ограничена, замкнута, односвязна и невогнута. Среда погружена в другую мутную среду (окружение), занимающую все остальное пространство. Среда может быть гетерогенной, т.е. область $\bar{G}$ состоит из одной или нескольких попарно непересекающихся открытых зон $G_1, G_2, \ldots, G_m$ и кусочно-гладкой границы Γ, состоящей из внутренней границы γ (между зонами) и внешней границы Γ_0 между средой и окружением. Внутри окружения границ нет. В каждой из зон оптические характеристики (введены ниже) непрерывны по $\mathbf{r}$ и могут иметь конечные скачки на границах. Показатель преломления внутри зоны — постоянен (чтобы свободные пробеги были прямолинейными, и уравнение переноса имело обычный вид).

Скачки показателя преломления вызывают отражение и преломление света, что приводит к разрывам поля на границе, т.е. неравенству правого и левого пределов интенсивности на Γ:

$$I_\pm(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{\Omega}) = I(\mathbf{r} \pm \mathbf{\Omega} \cdot 0, \nu, \mathbf{\Omega}) \equiv \lim_{\varepsilon \downarrow 0} I(\mathbf{r} \pm \mathbf{\Omega}\varepsilon, \nu, \mathbf{\Omega}).$$

Естественно назвать I_- входной, а I_+ — выходной интенсивностями, поскольку первая описывает падающий на границу свет, а вторая — покидающий ее. $I_\pm$ определены для всех $\mathbf{r} \in \Gamma, \nu \in \Lambda$ и для $\mathbf{\Omega} \in O^\pm_{\mathbf{r}} \equiv \{\mathbf{\Omega} : \mathbf{r} \pm \mathbf{\Omega} \cdot 0 \notin \Gamma\}$, т.е. для $\mathbf{\Omega}$ таких, что лучи, выходящие из $\mathbf{r}$ в направлении $\pm\mathbf{\Omega}$ сразу же покидают Γ. Более строго: $O^\pm_{\mathbf{r}} = \{\mathbf{\Omega} : \exists \varepsilon_{\mathbf{\Omega}} > 0 \, \forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_{\mathbf{\Omega}}) \, (\mathbf{r} \pm \mathbf{\Omega}\varepsilon \notin \Gamma)\}$. Если граница в точке $\mathbf{r}$ криволинейна по всем направлениям, то $O^\pm_{\mathbf{r}} = O$.

Далее используются обозначения: $x = (\mathbf{r}, \nu, \mathbf{\Omega}) = (y, \mathbf{\Omega}), y = (\mathbf{r}, \nu)$, $dx = d\mathbf{r}\, d\nu\, d\mathbf{\Omega} = dy\, d\mathbf{\Omega}$, $G = G_1 + \cdots + G_m$, $Y = (G + G_0) \times \Lambda$, $X = Y \times O$, $X_G = G \times \Lambda \times O$, $X_0 = G_0 \times \Lambda \times O$, $X_\pm = \{x : \mathbf{r} \in \Gamma, \nu \in \Lambda, \mathbf{\Omega} \in O^\pm_{\mathbf{r}}, \}$, $\mathbf{n_r}$ — (кусочно-непрерывная) нормаль, определенная в каждой точке $\mathbf{r} \in \Gamma$, направленная в сторону зоны с меньшим номером (т.е. на Γ_0 нормаль — внешняя),

$$(a, b) \equiv \int\limits_{X_G} a(x) b(x) dx, \quad [a, b]_\pm \equiv \int\limits_\Gamma d\Gamma \int\limits_{O^\pm_{\mathbf{r}}} d\mathbf{\Omega}\, |\mathbf{\Omega}\mathbf{n_r}| \int\limits_\Lambda d\nu a(x) b(x).$$

Практически все интересные для приложений линейные характеристики поля в среде могут быть представлены в виде следующего линейного функционала от интенсивности:

$$Q = (I, q) + [I_-, g_-]_- + [I_+, g_+]_+, \tag{1}$$

где q, g_-, g_+ — заданные функции на X_G, X_-, X_+, соответственно, определяющие вид характеристики. В этом виде могут быть представлены показания многих (линейных) детекторов излучения, и поэтому, следуя терминологии теории переноса излучений, будем интерпретировать функционал (1) как показание некоторого, не обязательно реального, детектора с заданными функциями отклика. Этот детектор состоит из трех компонентов: объемного и двух граничных, входного и выходного. Показание первого формируются светом внутри среды, второго и третьего — светом, падающим на границу и покидающим ее. Если часть границы Γ, где действуют граничные детекторы, свободна от поверхностных источников (детектирующая граница не излучает), то трехкомпонентный детектор сводится к двухкомпонентному с показанием:

$$Q = (I, q) + [I_-, g]_-, \tag{2}$$

которое мы будем рассматривать далее как исходное. «Эффективная» граничная функция отклика g выражается через заданные посредством (определенного ниже в (8)) сопряженного оператора «отражения-преломления»: $g = g_- + \mathbf{P}_+ g_+$.

Будем считать, что поле излучения в системе может создаваться объемными источниками внутри среды, с заданной фазовой плотностью мощности $s = s(x)$, $x \in X_G$, и поверхностными источниками, с заданными входной и выходной интенсивностями: $i_- = i_-(x)$, $x \in X_-$, $i_+ = i_+(x)$, $x \in X_+$. Последние, как и отражение и преломление, вызывает скачок поля на границе. Согласно геометрической оптике, связь между интенсивностями на границе линейна, и ее можно задать с помощью линейных операторов отражения и преломления. Мы объединяем их в одном операторе «отражения — преломления»:

$$I_+ = \mathbf{P}_- I_- + i, \tag{3}$$

где $i = i_+ + \mathbf{P}_- i_-$. Область определения этого оператора — функции в X_-, область значений — в X_+. Его явное выражение записывать не будем, поскольку в дальнейшем оно не понадобится.

Сопряженное представление искомого функционала (2) имеет вид:

$$Q = (s, J) + [i, J_+]_+, \tag{4}$$

где $J = J(x)$ — функция ценности (далее — просто ценность), равная показанию детектора, создаваемого лучом света единичной мощности, испускаемым из фазовой точки x; $J_\pm(\mathbf{r}, \nu, \mathbf{\Omega}) = J(\mathbf{r} \pm \mathbf{\Omega} \cdot 0, \nu, \mathbf{\Omega})$, $\mathbf{r}, \nu, \mathbf{\Omega} \in X_\pm$ — выходная и входная ценности на границе. Они связанны граничным условием:

$$J_- = \mathbf{P}_+ J_+ + g, \tag{5}$$

Сопряженный оператор отражения — преломления $\mathbf{P}_+$(определенный в (8)) переводит функции в X_+ в функции в X_- посредством дифференциального коэффициента «отражения-преломления» $p(x; d\mathbf{\Omega}')$. Произведение $p(x; d\mathbf{\Omega}')\,|\mathbf{\Omega}'\mathbf{n}_\mathbf{r}|$ есть распределение по направлениям мощности выходящего с границы света, отраженного или преломленного, от луча единичной мощности падающего на границу в фазовой точке x. Взаимодействие с границей — локально и упруго: не изменяет координату и частоту луча света.

Вне границ (т.е. на X) интенсивность и ценность удовлетворяют, соответственно, прямому и сопряженному интегро-дифференциальным уравнениям переноса излучений, из которых, используя граничные условия (3) и (5), нетрудно вывести двойственное представление (эквивалентность (2) и (4)) и получить интегральные уравнения. Они оказываются справедливыми и на границах: для интенсивности — на X_-, для ценности — на X_+. Естественно, поэтому, принять на границах $I = I_-$ и $J = J_+$, распространив тем самым область определения этих функций до $\bar{X}_-$ и $\bar{X}_+$, соответственно ($\bar{X}_\pm \equiv X_0 + X_\pm$).

Ценность определяют функции отклика детектора q, g и (оптические) характеристики среды и окружения: коэффициенты (макроскопические сечения) взаимодействия и рассеяния $\mu(y), \mu_s(y)$, индикатриса (фазовая функция) рассеяния $w(x; d\nu' d\mathbf{\Omega}')$ (распределение по направлениям и частотам мощности света после рассеяния луча единичной мощности в фазовой точке x) и введенный коэффициент отражения-преломления $p(x; d\mathbf{\Omega}')$. Чтобы формализовать требования к этим (и другим) величинам, введем 2 банаховых пространства: $B(Z)$, состоящее из ограниченных борелевских числовых функций $f(z)$ на множестве Z с нормой $\|f\| = \sup\limits_{z \in Z} |f(z)|$, и $V(Z)$, состоящее из конечных мер (со знаком) $\phi(A)$, определенных на борелевских множествах в Z с нормой, равной полной вариации меры на Z: $\|\phi\| = |\phi|\,(Z)$. Эти пространства сопряжены (точнее V изоморфна части B^* [3]), и потому каждый элемент $V(Z)$ задает линейный функционал на $B(Z)$: $\langle \phi, f \rangle = \int\limits_Z \phi(dz) f(z)$.

Следующие ограничения на характеристики системы вытекают из их физического смысла:

$$g \in B(X_-);\ q \in B(X);\ q(x) = 0, x \in X_0. \tag{6}$$

$$\begin{array}{l} \mu_s, \mu \in B(Y),\ 0 < \mu_s \le \mu; \\ w(x; \cdot) \in V(\Lambda \times O), x \in X;\ w \ge 0;\ w(x; \Lambda \times O) = 1; \\ \mathbf{W}f(x) \equiv \int\limits_{\Lambda \times O} w(x; d\nu' d\mathbf{\Omega}') f(\mathbf{r}, \nu', \mathbf{\Omega}',) \in B(X),\ f \in B(X)\,. \end{array} \tag{7}$$

$$p(x;\cdot)\in V(O_{\mathbf{r}}^{+}),x\in X_{-};p\geq 0;\mathbf{P}_{+}\chi_{X_{+}}(x)=1;$$
$$\mathbf{P}_{+}f(x)\equiv\int\limits_{O_{\mathbf{r}}^{+}}p(x;d\mathbf{\Omega}')\,|\mathbf{\Omega}'\mathbf{n}_{\mathbf{r}}|\,f(y,\mathbf{\Omega}')\in B(X_{-}),f\in B(X_{+}). \tag{8}$$

Будем считать их выполненными. Тогда можно ввести 4 оператора:

рассеяния: $\mathbf{S}f=\mu_s\mathbf{W}f\,|_X\quad\big(B(\bar{X}_+)\to B(X)\big)$,

пробега: $\mathbf{L}f(x)=\int\limits_0^{|\mathbf{r}_{\mathbf{\Omega}}-\mathbf{r}|}\exp\{-\tau(\mathbf{r},\mathbf{r}+\mathbf{\Omega}l,\nu)\}f(\mathbf{r}+\mathbf{\Omega}l,\nu,\mathbf{\Omega})dl\quad\big(B(X)\to B(\bar{X}_+)\big)$,

достижения границы: $\mathbf{\Theta}f(x)=\begin{cases}\exp\{-\tau(\mathbf{r},\mathbf{r}_{\mathbf{\Omega}},\nu)\}f(\mathbf{r}_{\mathbf{\Omega}},\nu,\mathbf{\Omega}), & \mathbf{r}_{\mathbf{\Omega}}\in\Gamma\\ 0, & \mathbf{r}_{\mathbf{\Omega}}\notin\Gamma\end{cases}\quad\big(B(X_-)\to B(\bar{X}_+)\big)$,

отражения-преломления, «расширенный»: $\mathbf{P}f=\mathbf{P}_{+}f\,|_{X_+}\quad\big(B(\bar{X}_+)\to B(X_-)\big)$.

Здесь $\tau(\mathbf{r},\mathbf{r}',\nu)=\int\limits_0^{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|}\mu(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{r}'-\mathbf{r}}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|}l,\nu)dl$ — оптическое расстояние между точками $\mathbf{r},\mathbf{r}'$ для света с частотой ν; $\mathbf{r}_{\mathbf{\Omega}}$ — точка первого достижения границы лучом, выходящим из точки $\mathbf{r}$ в направлении $\mathbf{\Omega}$. Если достижений нет, то $\mathbf{r}_{\mathbf{\Omega}}=\infty$ и $|\mathbf{r}_{\mathbf{\Omega}}-\mathbf{r}|=\infty$.

Из этих операторов построим еще один: $\mathbf{K}=\mathbf{LS}+\mathbf{\Theta P}$, и запишем интегральное уравнение для ценности на всем фазовом пространстве $\bar{X}_+$:

$$J=\mathbf{K}J+\mathbf{L}q+\mathbf{\Theta}g. \tag{9}$$

Поскольку оператор $\mathbf{K}$ действует в пространстве $B(\bar{X}_+)$, решение уравнения следует искать в этом же пространстве, что вполне соответствует физическому смыслу ценности.

Любой источник излучения может быть охарактеризован фазовым распределением мощности источников: мерой $\sigma(A)$ на $\bar{X}_+$, имеющей смысл мощности света, излучаемого источниками внутри фазовой области $A\subset\bar{X}_+$. Поэтому, всякое распределение $\sigma\in V(\bar{X}_+)$ задает линейный функционал от ценности $J\in B(\bar{X}_+)$:

$$\mathbb{Q}=\langle\sigma,J\rangle=\int\limits_{\bar{X}_+}\sigma(dx)J(x) \tag{10}$$

В частном, до сих пор рассматриваемом случае, когда источники сосредоточены только в среде и имеют плотности s, i, имеет место: $\sigma(A)=(s,\chi_A)+[i,\chi_A]_+,\ A\subset\bar{X}_+$, где $\chi_A(x)$ — индикатор множества A (равный 1 при $x\in A$ и 0 при $x\notin A$). Тогда (10) переходит в (4) и, следовательно, $\mathbb{Q}$ совпадает с исходным функционалом (2). Иными словами, представление (10) есть обобщение сопряженной формы (4), позволяющее включить в рассмотрение произвольные источники, в том числе точечные, мононаправленные, монохромные. Разумеется, по-прежнему, они должны быть конечными и сосредоточенными в среде:

$$\sigma\in V(\bar{X}_+),\ \sigma\geq 0,\ \sigma(X_0)=0. \tag{11}$$

Условия (6)–(8), (11) задают естественные ограничения на все исходные характеристики системы (детектора, среды и источника). Всякий набор, характеристик, удовлетворяющих этим ограничениям, условимся называть *физическим*.

Заметим, что обобщенное прямое представление, отвечающее (10), можно записать в прежней форме (2), но в обобщенных функциях для интенсивности. Более последовательный подход требует введения мер для описания поля излучения вместо интенсивности. Желание избежать этих усложнений, явилось важной причиной выбора сопряженного подхода.

Формула (10), уравнение (9) и условия физичности (6)–(8), (11) задают замкнутую математическую модель для разнообразных линейных характеристик световых полей в гетерогенных мутных средах, облучаемых произвольными источниками. Следующий раздел статьи посвящен вычислению этих характеристик в рамках данной модели.

2 Оценки

Свет в вероятностной интерпретации кинетической модели представляет собой поток невзаимодействующих друг с другом частиц, движущихся в среде по случайным траекториям, составленным из чередующихся прямолинейных свободных пробегов (изменяющих положение частицы) и точечных мгновенных событий

(изменяющих направление и частоту). Событие может быть либо столкновением с двумя несовместными исходами: рассеянием или поглощением, либо достижением границы с несовместными отражением или преломлением.

Обозначим как $x_0, \ldots, x_n$ последовательность (фазовых координат) событий на траектории одной частицы в $\bar{X}_+$. Нулевое событие отвечает испусканию частицы источником, n-е — последнему событию — поглощению. Значения $\mathbf{\Omega}_i, \nu_i$ — выходные, т.е. относятся к моменту после события. Для поглощения (для определенности) полагаем: $\mathbf{\Omega}_n = \mathbf{\Omega}_{n-1}, \nu_n = \nu_{n-1}$.

Введенная последовательность есть однородная обрывающаяся марковская цепь в $\bar{X}_+$ с переходной вероятностью, целиком определяющейся введенными выше оптическими характеристиками. Будем называть такую цепь *физической* (или *физического типа*), *обусловленной* указанным набором характеристик. Понятие включает выполнение физических ограничений (7), (8) на этот набор. Ядро оператора уравнения (9) $k(x, A) = \mathbf{K}\chi_A(x)$, $x \in \bar{X}_+$, $A \subset \bar{X}_+$, совпадает с физической цепью, обусловленной набором μ, μ_s, w, k (точнее с цепью, $x_0, \ldots, x_{n-1}$, не включающей поглощение).

Если существует итерационное решение уравнения (9) в $B(\bar{X}_+)$ (например, при $\|\mathbf{K}\| = \sup\limits_{x \in \bar{X}_+} k(x, \bar{X}_+) < 1$), то оно совпадает с математическим ожиданием аддитивного функционала от этой цепи, выходящей из фиксированной точки $x_0 = x$:

$$J(x) = \mathbf{M}_x \phi, \ \phi = \phi_G + \phi_\Gamma = \sum_{i=1}^{n} (h_i + \gamma_i).$$

Функционал состоит из объемной и граничной частей, вклады от событий в которые (h_i, γ_i), определются уравнением неоднозначно. Для граничной части наиболее «физично» выглядит вклад $\gamma_i = \chi_i g(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1}, \mathbf{\Omega}_{i-1},)$, для объемной — два следующих:

$$h_i^{tr} = \int\limits_0^{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}|} q(\mathbf{r}_{i-1} + \mathbf{\Omega}_{i-1} l, \nu_{i-1}, \mathbf{\Omega}_{i-1},) dl, h_i^c = \bar{\chi}_i q(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1}, \mathbf{\Omega}_{i-1},) / \mu(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1}).$$

Здесь $\chi_i = \chi_\Gamma(\mathbf{r}_i)$ — признак достижения границы, равный 1, если i-е событие — достижение и 0, если столкновение; $\bar{\chi}_i = 1 - \chi_i$ — признак столкновения.

Искомая величина — интеграл (10), очевидно, пропорциональна математическому ожиданию этого же функционала: $\mathbb{Q} = \bar{\sigma} \mathbf{M} \phi$ $(\bar{\sigma} = \sigma(\bar{X}_+))$, но от цепи со случайным входом x_0, распределенным по нормированной мере $\sigma / \bar{\sigma}$. Отсюда следуют аналоговые (имитационные) алгоритмы метода Монте — Карло, широко используемые в приложениях. Функционал ϕ — Монте — Карловская оценка величины $\mathbb{Q} / \bar{\sigma}$. Выбор $h_i = h_i^{tr}$ дает оценку «по — пробегам», $h_i = h_i^c$ — «по — столкновениям».

Интегральное представление (9),(10) для линейного функционала $\mathbb{Q}$ позволяет разрабатывать для него эффективные неаналоговые (неимитационные) алгоритмы, используя классический «весовой» подход (схему Неймана — Улама) [4]. В соответствии с ним, неаналоговые оценки будем строить на траекториях цепи, отличной от аналоговой, т.е. обусловленной заданными характеристиками среды μ, μ_s, w, k. Но произвол выбора этой неаналоговой цепи ограничим классом физических цепей.

Потребуем, чтобы характеристики $\tilde{\mu}, \tilde{\mu}_s, \tilde{w}, \tilde{p}$, обуславливающие выбранную неаналоговую цепь и ее начальное распределение $\tilde{\sigma}$, удовлетворяли условиям регулярности:

$$\begin{aligned}
&(\tilde{\mu}_s(y) = 0) \Rightarrow (\mu_s(y) = 0), \ y \in Y; \\
&\exists w'(x; \mathbf{\Omega}', \nu') : \ w(x; A \times B) = \int\limits_{A \times B} \tilde{w}(x; d\mathbf{\Omega}' d\nu') w'(x; \mathbf{\Omega}', \nu'), \ x \in X, A \subset O, B \subset \Lambda; \\
&\exists p'(x; \mathbf{\Omega}') : p(x; A) = \int\limits_A \tilde{p}(x; d\mathbf{\Omega}') p'(x; \mathbf{\Omega}'), \ x \in X_-, A \subset O_{\mathbf{r}}^+; \\
&\exists \sigma'(x) : \sigma(A) = \int\limits_A \tilde{\sigma}(dx) \sigma'(x), \ x \in \overline{X}_{+-}, A \subset \bar{X}_+.
\end{aligned} \tag{12}$$

На ней определим функционал:

$$\psi_1 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \left(\chi_i g(y_i, \mathbf{\Omega}_{i-1},) + \bar{\chi}_i \frac{q(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1}, \mathbf{\Omega}_{i-1},)}{\mu(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1})} \right), \tag{13}$$

где вес $\alpha_i = \sigma'(x_0)\exp\{\tilde{\tau}_i - \tau_i\}\prod_{m=1}^{i}\beta_m$, $\beta_m = \chi_m p'(y_m, \mathbf{\Omega}_{m-1}; \mathbf{\Omega}_m) + \bar{\chi}_m \frac{\mu_s(\mathbf{r}_m, \nu_{m-1})}{\tilde{\mu}_s(\mathbf{r}_m, \nu_{m-1})} w'(\mathbf{r}_m, \nu_{m-1}, \mathbf{\Omega}_{m-1}; \nu_m, \mathbf{\Omega}_m)$, $\tau_i = \sum_{j=1}^{i}\tau(\mathbf{r}_{j-1}, \mathbf{r}_j; \nu_{j-1})$; $\tilde{\tau}_i = \sum_{j=1}^{i}\tilde{\tau}(\mathbf{r}_{j-1}, \mathbf{r}_j; \nu_{j-1})$ — оптические пути до i-го события для коэффициентов взаимодействия μ и $\tilde{\mu}$.

Теорема 1. *Пусть функции отклика q, g, оптические характеристики μ, μ_s, w, k и распределение источников σ — физичны (удовлетворяют условиям (6)–(8), (11)), и $\sup_{y\in Y}\mu_s(y)/\mu(y) < 1$.*

Пусть $x_0, \ldots, x_n$ — неаналоговая марковская цепь физического типа в $\bar{X}_+$, обусловленная характеристиками $\tilde{\mu}, \tilde{\mu}_s, \tilde{w}, \tilde{p}$, с начальным распределением $\tilde{\sigma}$, удовлетворяющими условиям регулярности (12).

Тогда функционал (13) от этой цепи является несмещенной оценкой линейного функционала (10) от решения уравнения (9): $\mathbb{Q} = \tilde{\mathbf{M}}\psi_1$.

Отметим, что утверждение теоремы включает существование и единственность решения уравнения и существование математического ожидания.

Большинство реальных линейных детекторов — граничные; для них $q = 0$, и оценка (13) суммирует вклады только от достижений границ, которых, обычно, мало (особенно, когда среда однозонна). При этом фазовый объем детектора (область в X_-, где $g \neq 0$) часто очень мал, и вероятность попадания в него (аналоговой траекторией) может быть совершенно ничтожной. Увеличить эту вероятность и, тем самым, уменьшить дисперсию оценки можно за счет надлежащего выбора неаналоговой цепи. Но этот путь неэффективен в типичной ситуации, когда необходимо одновременно рассчитывать показания нескольких детекторов («улучшили одно — ухудшили другое»). В таких случаях лучше использовать другую оценку.

Перепишем уравнение (9) при $q = 0$ в виде $J = J_1 + \mathbf{\Theta}g$, $J_1 = \mathbf{K}J_1 + \mathbf{LS\Theta}g + \mathbf{\Theta P\Theta}g$. Отсюда следует: $\mathbb{Q} = \langle\sigma, J_1\rangle + \langle\sigma, \mathbf{\Theta}g\rangle$. Применяя к первому слагаемому оценку (13) и рандомизируя вторую, приходим к новой оценке:

$$\psi_2 = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i\left(\chi_i\left(\delta_{i,1} + \mathbf{P\Theta}\right)g(y_i, \mathbf{\Omega}_{i-1}) + \bar{\chi}_i\frac{\mathbf{S\Theta}g(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1}, \mathbf{\Omega}_{i-1})}{\mu(\mathbf{r}_i, \nu_{i-1})}\right), \tag{14}$$

где вес α_i — тот же, что и в (13), $\delta_{i,1}$ — символ Кронекера.

Теорема 2. *В условиях теоремы 1 при $q = 0$ функционал (14) от неаналоговой марковской цепи является несмещенной оценкой линейного функционала (10) от решения уравнения (9): $Q = \tilde{\mathbf{M}}\psi_2$.*

В отличие от ψ_1 оценка ψ_2 содержит вклады от столкновений, которых, как правило, значительно больше, чем достижений. К тому же, и вероятность иметь таким вкладам ненулевые значения существенно выше, чем вкладам в ψ_1. Поэтому, дисперсия оценки ψ_2 значительно меньше, чем ψ_1. Но ψ_2 значительно сложнее, и ее вычисление, связанное с вычислением интегралов, требует большего времени. Поэтому по трудоемкости, простая оценка ψ_1 может оказаться предпочтительней «навороченной» ψ_2, особенно, когда фазовый объем детектора не мал.

Сложность вычисления вкладов в ψ_2 можно существенно уменьшить за счет их рандомизации: вычисления интегралов методом Монте — Карло. Тут возможны различные варианты, но рассматривать их здесь мы не имеем возможности. Также опустим рассмотрение частных случаев, приводящих к полезным модификациям оценок.

3 Обратная задача

Главной обратной задачей оптики мутных сред, в частности биомедицинской оптики, является задача определения оптических параметров среды, исходя из измерений определенных характеристик излучения от заданного источника. Для ее решения необходима предварительная априорная оценка измеряемых характеристик для множества наборов оптических параметров, покрывающего с достаточно мелким шагом область возможных значений искомого набора. При этом, оценка должна иметь высокую дифференциальную точность, т.е. малую погрешность расчета, как самих характеристик, так и их разностей при близких значениях параметров.

Аналоговый метод Монте — Карло плохо приспособлен к решению этой задачи. Во-первых, он требует проведения отдельных самостоятельных расчетов для каждого набора параметров, что многократно увеличивает общее время счета. Во-вторых, и это главное (хотя не отмечаемое авторами), аналоговый метод

имеет низкую дифференциальную точность вследствие низкой коррелированности результатов разных аналоговых расчетов (даже при использовании одной исходной последовательности случайных чисел во всех расчетах).

Построенные неаналоговые оценки (13), (14) решают проблему. Схема проста. Пусть требуется рассчитать показания нескольких детекторов в заданном множестве сред с различными характеристиками. Геометрия среды и источники — одинаковы. Выбираем цепь для моделирования так, чтобы ее характеристики удовлетворяли условиям регулярности по отношению к характеристикам каждой из заданных сред. Выбираем тип оценки: ψ_1 или ψ_2. Применяем ее к каждой среде и детектору. На одном ансамбле траекторий рассчитываем показания всех детекторов для всех сред.

Для извлечения оптических свойств среды из интегральных измерений приходится упрощать геометрию среды и модель переноса. В неразрушающих методах рассматривают полубесконечную однородную среду. Оптимальной моделью, на наш взгляд, является модель с фиксированной индикатрисой (например, Хеньи — Гринштейна с заданным фактором анизотропии). В большинстве случаев можно пренебречь неупругим рассеянием и использовать односкоростное приближение (частоту можно исключить из фазовых переменных). В перечисленных условиях среда характеризуется тремя оптическими параметрами: коэффициентами μ, μ_s и показателем преломления (входящим в коэффициент отражения-преломления). Удобно в качестве моделируемой цепи выбрать цепь в этой простой модели с параметрами, отвечающим одной из заданных сред. Тогда гарантировано выполнение условий регулярности, и оценки выглядят намного проще.

Вариант оценки (13) был успешно применен нами в «двухшаговом» методе неинвазивного определения оптических параметров биологических тканей по измерениям отраженного света [5], [6]. На основе оценки (14) разработан более мощный, «одношаговый» метод, в котором наряду с показаниями детекторов рассчитываются их производные по оптическим параметрам. Его практическая реализация близка к завершению.

Заключение

Предложенная формализация разнородных вычислительных задач оптики мутных сред в виде одной общей задачи позволяет применить строгие подходы к разработке методов их решения. Полученные на этом пути две общие весовые оценки метода Монте — Карло намного расширяют область применимости метода. Особо следует выделить обратные задачи оптики мутных сред, где эти оценки позволяют с высокой дифференциальной точностью одновременно для большого набора сред с различными оптическими параметрами рассчитывать радиационные характеристики и даже их производные по этим параметрам.

Список литературы

[1] Тучин В.В. Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике. Монография. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013.

[2] Zhu C. Review of Monte Carlo modeling of light transport in tissues/ C.Zhu, Q.Liu // J. Biomed. Opt. — 2013. — Vol. 18(5) — 050902.

[3] Данфорд Н., Шварц Дж. Линейные операторы. Том 1. Общая теория. М.: ИЛ, 1962.

[4] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование (2-е изд.). М.: ФИЗМАТЛИТ, 1982.

[5] A non-destructive diffuse reflectance calibration-free method for determine optical parameters of biological tissues/ A.V.Lappa , Ar.N.Kulikovskiy, An.N.Kulikovskiy, T.A.Makarova // Proc. SPIE.- 2013. — Vol. 8579, 857912.

[6] Lappa A.V. A non-invasive diffuse reflectance calibration-free method for absolute determination of exogenous biochemicals concentration in biological tissues/ A.V.Lappa, Ar.N.Kulikovskiy, O.G.Busarov //Proc. SPIE.– 2014. — Vol. 8952, 895216.

Лаппа Александр Владимирович — проф., д.ф.-м.н., проф. кафедры теоретической физики Челябинского государственного университета
e-mail: lappa@csu.ru;
Анчугова Анастасия Евгеньевна — аспирант кафедры теоретической физики ЧелГУ
e-mail: anchugova.ae@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ КОИНФЕКЦИИ ТУБЕРКУЛЕЗА И ВИЧ В ЭНДЕМИЧНЫХ РАЙОНАХ

В. А. Латышенко[1,2], В. Н. Каштанова[1], О. И. Криворотько[1,2], С. И. Кабанихин[2]

[1] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.622.2

Теоретически исследована математическая модель распространения коинфекции туберкулеза (ТБ) и ВИЧ. Анализ чувствительности осуществлен с помощью метода собственных значений гессиана матрицы чувствительности. Численные результаты показали, что шесть параметров (из 15 доступных) однозначно идентифицируются по данным измерений количества инфекционных туберкулезом (без ВИЧ), инфицированных ТБ и ВИЧ и больных СПИДом в течение как минимум 3 лет. Анализ чувствительности важно проводить прежде, чем применять численный метод решения возникающей обратной задачи.

Ключевые слова: туберкулез, ВИЧ, анализ чувствительности, идентифицируемость, обратная задача.

Введение

В некоторых регионах России наблюдается «высокая» заболеваемость вирусом иммунодефицита человека (ВИЧ) и туберкулезом (ТБ). Существует высокая вероятность распространения эпидемий этих заболеваний и их коинфекции [1, 2], так как эти болезни влияют друг на друга и имеют сильную связь в период заболевания [3, 4]. Известно, что эпидемия ВИЧ в 1980-х годах вызвала высокий уровень распространения и смертности от ТБ особенно в странах Центральной и Южной Африки. В Российской Федерации за последние десять лет число случаев ВИЧ удвоилось. ВИЧ в России обычно выявляется слишком поздно, в результате чего он перерастает в СПИД. В среднем на 100 000 населения в России насчитывается 335 ВИЧ-инфицированных. Наибольшее количество случаев зарегистрировано в Свердловской области в 2014 году: инфицировано 1000 человек на каждые 100 000 человек [5] и около 70% смертельных исходов от ТБ. Хотя ВИЧ и ТБ могут контролироваться лечением, каждое из этих заболеваний может быть смертельным. Переход от латентного к острому туберкулезу может проходить быстрее при приобретении ВИЧ. С другой стороны, ВИЧ-положительный индивидуум более восприимчив к туберкулезу из-за плохой иммунной системы. ТБ считается наиболее распространенной причиной смерти от ВИЧ. Следовательно, обе болезни влияют на распространение друг друга, что делает изучение их коинфекции очень важным.

Математическое моделирование является одним из мощных инструментов для прогнозирования эпидемии коинфекции ВИЧ и ТБ. Но лишь несколько статистических или математических моделей использовались для изучения последствий их совместной динамики на уровне популяции [6]. Большая часть математических моделей описывает одно заболевание и основаны на динамических системах обыкновенных дифференциальных уравнений. Значительное число сосредоточено на ТБ [7–10] или на динамике передачи ВИЧ/СПИДа [11, 12]. В статьях [13–15] имеется несколько моделей коинфекции ТБ/ВИЧ. Naresh и др. [13] разработали нелинейную математическую модель, основанную на четырех нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнениях. Их модель была сосредоточена на динамике передачи ВИЧ и ТБ в популяциях разного размера. Porco и др. [14] прогнозируют потенциальное воздействие ВИЧ на вероятность и ожидаемую тяжесть вспышек туберкулеза с использованием моделирования дискретных событий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, гранта Президента РФ (номер МК-1214.2017.1) и Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант № 1746/ГФ4 «Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач естествознания»).

Но большинство из этих моделей были сосредоточены только на структуре моделей, а параметры модели, описывающие характеристики болезни и населения, были усредненными. Поэтому прогнозы распространения эпидемий на основе этих моделей неверны и не учитывают региональные особенности. Следовательно, необходимо качественно оценить параметры модели (или их комбинации) для построения более точной математической модели для конкретной популяции или региона. Эффективным инструментом является подход обратных задач, который заключается в определении или оценке параметров математической модели (коэффициенты динамических систем) с использованием дополнительных измерений о некоторой группе людей (например, ВИЧ-инфицированных, больных СПИДом и т.д.) в фиксированные моменты времени (в годах) [16, 17].

Модель коинфекций ТБ и ВИЧ включает в себя множество известных биологических взаимодействий (параметров) в одну крупную модель. Для больших моделей возникает вопрос о том, могут ли неизвестные параметры однозначно определяться по измеренными данными (анализ чувствительности). Системные подходы к ответу на этот вопрос необходимы, поскольку уникальность значений параметров модели имеет важное значение для интеллектуального моделирования и решения проблемы оценки параметров. В литературе существует несколько типичных методов: метод корреляции, ортогональный метод, метод собственных значений и т.д. Обзор методов приведен в статье [18].

Прежде чем решать проблему оценки параметров, нужно знать, какие параметры можно идентифицировать, а какие нельзя. Идентификация параметров означает, что теоретически возможно однозначно определять значения параметров по доступным данным.

1 Математическая модель

Рассмотрим задачу Коши для математической модели распространения коинфекции ТБ и ВИЧ, разработанную группой американских исследователей [6]:

$$
\begin{cases}
\frac{dS}{dt} = \Lambda - \beta c S \frac{I+J_3}{N} - \lambda\sigma S \frac{J^\star}{R} - \mu S, \\
\frac{dL}{dt} = \beta c (S+T) \frac{I+J_3}{N} - \lambda\sigma L \frac{J^\star}{R} - (\mu + k + r_1) L, \\
\frac{dI}{dt} = kL - (\mu + d + r_2) I, \\
\frac{dT}{dt} = r_1 L + r_2 I - \beta c T \frac{I+J_3}{N} - \lambda\sigma T \frac{J^\star}{R} - \mu T, \\
\frac{dJ_1}{dt} = \lambda\sigma (S+T) \frac{J^\star}{R} - \beta c J_1 \frac{I+J_3}{N} - (\alpha_1 + \mu) J_1 + r^\star J_2, \\
\frac{dJ_2}{dt} = \lambda\sigma L \frac{J^\star}{R} + \beta c J_1 \frac{I+J_3}{N} - (\alpha_2 + \mu + k^\star + r^\star) J_2, \\
\frac{dJ_3}{dt} = k^\star J_2 - (\alpha_3 + \mu + d^\star) J_3, \\
\frac{dA}{dt} = \alpha_1 J_1 + \alpha_2 J_2 + \alpha_3 J_3 - (\mu + f) A, \\
S(0) = S_0,\ L(0) = L_0,\ I(0) = I_0,\ T(0) = T_0, \\
J_1(0) = J_{1_0},\ J_2(0) = J_{2_0},\ J_3(0) = J_{3_0},\ A(0) = A_0.
\end{cases}
\tag{1}
$$

$$
\begin{aligned}
N &= S + L + I + T + J_1 + J_2 + J_3 + A, \\
R &= S + L + T + J_1 + J_2,\ J^\star = J_1 + J_2 + J_3.
\end{aligned}
$$

Описание функций и параметров задачи (1) приведены в таблице 1.
Математическая модель основана на следующих предположениях [6]:

- смешение между людьми однородно;
- ВИЧ-инфицированные лица, зараженные туберкулезом (J_3), и вирусом СПИД (A) не могут получить эффективное лечение ТБ;
- люди заражаются ТБ только через контакты с инфицированными ТБ индивидами (I и J_3);
- люди могут заразиться ВИЧ только через контакты с ВИЧ-инфицированными людьми (группа $J^\star$).

Таблица 1: Определения параметров и функций, используемых в модели(1)

Параметр	Описание	Единицы	Значение
Λ	Приток молодежи в модельную популяцию	чел/год	зависит от популяции
$\beta * c$	параметр контагиозности ТБ	—	зависит от популяции
$\lambda * \sigma$	параметр контагиозности ВИЧ	—	зависит от популяции
μ	смертность от причин не связанных с ТБ и ВИЧ	1/год	зависит от популяции
k	скорость развития активной формы ТБ (без ВИЧ)	год	0.05
$k^\star$	скорость развития активной формы ТБ (с ВИЧ)	год	0.25
d	смертность от ТБ	1/год	0.1
$d^\star$	смертность от ТБ+ВИЧ	1/год	0.2
f	смертность от СПИД	1/год	0.5
r_1	скорость лечения от латентного ТБ (без ВИЧ)	чел/год	3
r_2	скорость лечения от ТБ (без ВИЧ)	чел/год	1
$r^\star$	скорость лечения от латентного ТБ (с ВИЧ)	чел/год	3
α_1	скорость перехода ВИЧ к СПИД для группы J_1	год	0.1
α_2	скорость перехода ВИЧ к СПИД для группы J_2	год	0.2
α_3	скорость перехода ВИЧ к СПИД для группы J_3	год	0.5
N	общее количество населения	чел	зависит от популяции
$S(t)$	количество не зараженных индивидов		
$L(t)$	количество индивидов латентно зараженных ТБ (без ВИЧ)		
$I(t)$	количество индивидов с активной формой ТБ (без ВИЧ)		
$T(t)$	количество индивидов вылеченных от ТБ (без ВИЧ)		
$J_1(t)$	количество индивидов зараженных ВИЧ (без ТБ)		
$J_2(t)$	количество индивидов зараженных ВИЧ и латентно зараженных ТБ		
$J_3(t)$	количество индивидов зараженных ВИЧ с активной формой ТБ		
$A(t)$	количество индивидов со СПИД		

Для идентификации параметров модели известна дополнительная информация в фиксированных точках t_k только о трех группах индивидуумов:

$$I(t_k) = I_k,\ J_3(t_k) = J_{3_k},\ A(t_k) = A_k, \quad k = 1, \ldots, K. \tag{2}$$

2 Анализ чувствительности

Анализ чувствительности параметров модели распространения коинфекции ТБ и ВИЧ (1) проведен с помощью метода собственных значений [19], который позволяет глобально оценивать и сравнивать влияние значений параметров на данные измерений.

2.1 Метод собственных значений

Метод собственных значений находит неидентифицируемые параметры, основываясь на свойства собственных значений λ и собственных векторов u матрицы $H = S^T S$, где S это матрица чувствительности, которая определяется следующим образом:

$$S = \begin{pmatrix} s_{11}(t_1) & \dots & s_{1n_\theta}(t_1) \\ \dots & \ddots & \dots \\ s_{n_y1}(t_1) & \dots & s_{n_yn_\theta}(t_1) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ s_{11}(t_K) & \dots & s_{1n_\theta}(t_K) \\ \dots & \ddots & \dots \\ s_{n_y1}(t_K) & \dots & s_{n_yn_\theta}(t_K) \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Здесь $s(t_i)$ определяется по вектору параметров θ^*, заданным начальным данным $S(0), L(0), I(0), T(0), J_1(0), J_2(0), J_3(0), A(0)$ и измерениям y_i в фиксированные моменты времени t_k, $k = 1, \dots, K$, как

$$s_{ij}(t_k) = \frac{\partial y_i(t_k, \theta^*)}{\partial \theta_j} \tag{4}$$

Алгоритм метода собственных значений:

1) Задаем критерий остановки δ, массив идентифицируемых параметров $I = 1, ..., L$ и массив неидентифицируемых параметров $U = \emptyset$. Строим матрицу чувствительности S (3).

2) Если I пусто, то стоп. Для данной модели все параметры неидентифицируемы.

3) Считаем матрицу $H = S^T S$. Для нее находим собственные значения λ^l ($\lambda^1 \le \lambda^l \le ... \le \lambda^L$)и собственные вектора u^l.

4) Если $\lambda^1 \ge \delta$, то стоп. Параметры, находящиеся в I идентифицируемы.

5) Выбираем l: $|u_l^1| = \max(|u_1^1|, |u_2^1|, ..., |u_L^1|)$ (максимальный элемент в собственном векторе, который соответствует минимальному собственному значению). Добавляем l в множество неидентифицируемых параметров U, удаляем из I, удаляем соответствующий столбец из матрицы S и на шаг 2.

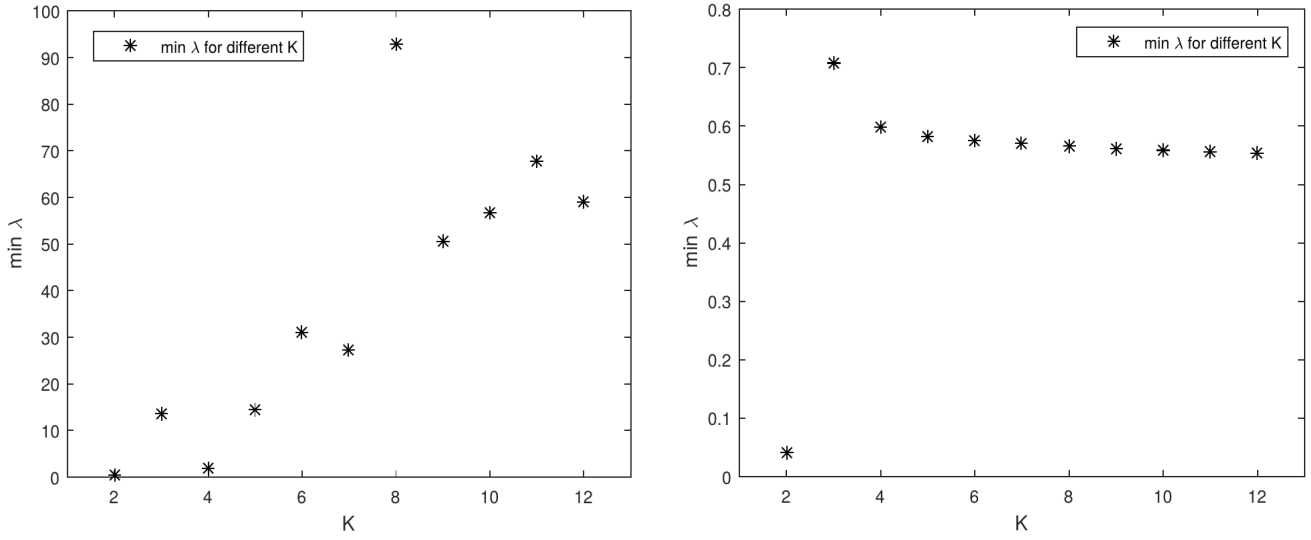
Порядок, в котором параметры удаляются из I, определяет ранжирование параметров от наименее идентифицируемых до наиболее идентифицируемых.

2.2 Результаты

Модель коинфекции ТБ и ВИЧ состоит из уравнений, но мы можем получить информацию $g(t_k)$ только о трех из них (2) один раз в год в течении, например, 5 лет. Это значит, что мы имеем $g_i(t_k)$, где $i = 1, 2, 3$, $k = 1, \dots, 5$. Данная модель содержит множество параметров, некоторые из них можно получить из статической информации. Следовательно, мы проверим модель по 6 параметрам $\theta^* = (k, k^*, r_2, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, которые индивидуальны для каждого конкретного региона. В этом случае матрица чувствительности (3) имеем следующий вид:

$$S = \begin{pmatrix} L(t_1) & 0 & -I(t_1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J_2(t_1) & 0 & 0 & 0 & -J_3(t_1) \\ 0 & 0 & 0 & J_1(t_1) & J_2(t_1) & J_3(t_1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ L(t_K) & 0 & -I(t_K) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J_2(t_K) & 0 & 0 & 0 & -J_3(t_K) \\ 0 & 0 & 0 & J_1(t_K) & J_2(t_K) & J_3(t_K) \end{pmatrix}$$

Для метода собственных значений 2.1 предполагаем, что $\varepsilon = 10^{-4}$ [19], значения вектора параметров θ^* взяты из таблицы 1 и $n_\theta = 6$. После применения алгоритма, получаем $\min \lambda(H) = 14.03$, это больше, чем ε.



а) для данных с 10% Гауссовским шумом б) для модельных данных.

Рис. 1: Зависимость между минимальным собственным значением и измерениями

Таблица 2: Минимальное собственное значение для разных K.

K	$\min\lambda$ для данных с ошибкой	$\min\lambda$ для модельных данных
2	0.3094	0.0399
3	13.5082	0.7074
4	1.8698	0.599
5	14.2985	0.5827
6	31.1228	0.576
7	27.3849	0.5707
8	92.9655	0.5659
9	50.4785	0.5616
10	56.5681	0.5583
11	67.6813	0.5558
12	59.047	0.5539

Мы использовали модельные и реальные данные (2) по Свердловской области Российской Федерации с 2010 по 2014 года. Рисунок 1а) показывает зависимость между минимальным собственным значением матрицы H $\min\lambda(H)$ и количеством измерений K (одно измерение в год) для данных с 10% Гауссовским шумом и для модельных данных б). Полученные значения приведены в таблице 2. Минимальное собственное значение $\min\lambda > \varepsilon$ для всех количеств измерений, то есть модель является идентифицируемой по параметрам θ^*. Но для $K = 2$ минимальное собственное значение близко к 10^{-2} для точных данных, эта ситуация может обеспечить практическую идентификацию для другого ε. В результате, 6 параметров θ^* идентифицируемы для модели (1) с использованием дополнительной статистической информации (2) в точках t_k, $k = 3, \ldots, K$ для K не меньше 3.

2.3 Исследование обратной задачи

Так как вектор параметров $\theta^* = (k, k^*, r_2, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ определяется однозначно, исследуем линеаризованную обратную задачи для модели (1).

Обратная задача (1)–(2) состоит в определении 6 параметров θ^* по дополнительным измерениям в фиксированные моменты времени (2). Рассмотри задачу Коши в векторной форме (1):

$$\dot{x} = y(x(t), \theta)$$

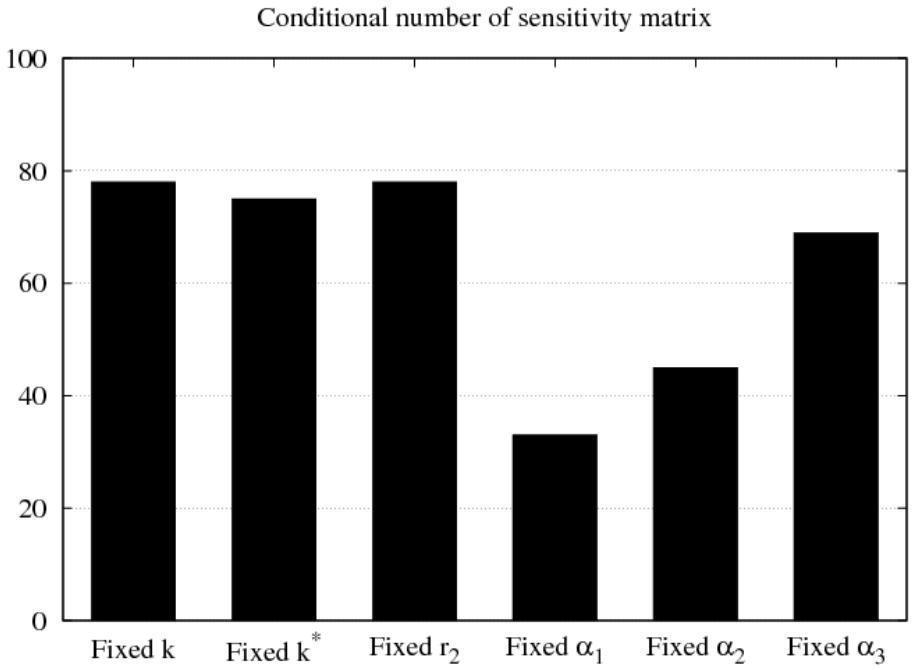


Рис. 2: Число обусловленности матрицы S для каждого фиксированного параметра из вектора θ^*.

и разложим линейную часть в ряд Тейлора в окрестности точки θ^* (предполагаем, что $\theta = \theta^* + q$, где θ^* известный вектор параметров и q достаточно малое неизвестное отклонение [16]):

$$\dot{x} = y(x(t), \theta^*) + \frac{\partial y(x(t), \theta^*)}{\partial \theta} q + o(|q|^2). \tag{5}$$

Это означает, что в линейном приближении исследование матрицы чувствительности позволяет контролировать некорректность обратной задачи. Действительно, в фиксированных моментах времени уравнение (5) может быть переписано, как:

$$Sq = G. \tag{6}$$

Следовательно, $G = (\dot{x} - y(x(t), \theta^*))|_{t=t_k}$ описывает известные измерения аналогично (2).

Линеаризованная обратная задача состоит в определении отклонения q в системе (6). Известно [16], что число обусловленности матрицы S определяет условность (некорректность) линейной системы (6). Чем больше число обусловленности, тем выше некорректность обратной задачи (для обращения матрицы S требуется применение методов регуляризации). Число обусловленности матрицы чувствительности удовлетворяет выражению:

$$\mathrm{cond}(S) = \frac{\sigma_{\max}(S)}{\sigma_{\min}(S)}.$$

Здесь $\sigma_{\max}(S)$ и $\sigma_{\min}(S)$ максимальное и минимальное сингулярные числа матрицы S, соответственно.

В данном примере $\mathrm{cond}(S) = 78$ для задачи идентифицируемости 6 параметров. Это значит, что решение q рассматриваемой обратной задачи устойчиво к небольшим изменениям данных (уровень шума, вычислительные ошибки и т.д.). Если фиксировать каждый из 6 параметров отдельно θ^*, получаем матрицу чувствительности на ранг меньше. Рисунок 2 демонстрирует значения $\mathrm{cond}(S)$ для каждого фиксированного параметра из $\theta^* = (k, k^*, r_2, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$. Видно, что число обусловленности в каждом случае невелико, что для исходной ситуации (определение шести параметров) объясняет понятия устойчивости: чем меньше определяемых параметров, тем выше устойчивость. Когда мы фиксируем α_1, число обусловленности матрицы S меньше, чем в других случаях. Это значит, что для линейного случая α_1 самый чувствительный параметр в обратной задаче и его нужно контролировать.

Заключение

Теоретически исследована математическая модель распространения коинфекции ТБ и ВИЧ. Анализ чувствительности осуществляется на основе метода собственных значений для гессиана матрицы чувствительности. Показано, что шесть параметров (из 15 доступных) однозначно идентифицируются по данным измерений количества инфекционных туберкулезом (без ВИЧ), инфицированных ТБ и ВИЧ и больных СПИДом в течение как минимум 3 лет. На практике, если матрица чувствительности имеет полный ранг, но собственные значения разного порядка, параметры, соответствующие наименьшим собственным значениям, теоретически идентифицируемы, но могут быть практически неидентифицируемы. При таких обстоятельствах подходы, основанные на чувствительности, по-прежнему полезны в смысле определения практически неидентифицируемых параметров и управления некорректностью линеаризованной обратной задачи.

Список литературы

[1] Эпидемиологические данные о ВИЧ-инфицированных в Российской Федерации. http://www.hivrussia.ru.

[2] Туберкулез в Российской Федерации 2011 г. Аналитический обзор статистических показателей, используемых в Российской Федерации и в мире. — М., 2013. — 280 с.

[3] S.D. Lawn, A.D. Kerkhoff, M. Vogt and R. Wood. HIV-associated tuberculosis: Relationship between disease severity and the sensitivity of new sputum-based and urine-based diagnostic // BMC Medicine. 2013. V. 11. pp. 231–241.

[4] P.Nunn, A.Reid and K.M.D. Cock. Tuberculosis and HIV infection: The global setting // Journal of Infections Diseases. 2007. V. 196. pp. 5–14.

[5] W.H.O. Global tuberculosis report. 2013

[6] L.W. Roeger, Z. Feng and C. Castillo-Chavez. Modeling tb and HIV co-infections // Mathematical biosciences and engineering. 2009. V. 6, no. 4. pp. 815–837.

[7] J.P. Aparicio, A.F. Capurro and C. Castillo-Chavez. Markers of disease evolution: the case of tuberculosis // J.Theor. Biol. 2002. V. 215. pp. 227–237.

[8] S. Blower, P. Small and P. Hopewell. Control strategies for tuberculosis epidemics: New models for old problems // Scitnce. 1996. V. 273. pp. 497–500.

[9] Z. Feng, C. Castillo-Chavez. Mathematical models for the disease dynamics of tuberculosis, advances in mathematical population dynamics-molecules, cells and man // Vanderbilt University Press. 1998. pp. 117–128.

[10] T. Porco and S. Blower. Quantifying the intrinsic transmission dynamics of tuberculosis // Theor. Pop. Biol. 1998. V. 54. pp. 117–132.

[11] H.W. Hethcote. Modeling HIV transmission and AIDS in the United States. Lecture notes in biomathematics ed. Springer-Verlag, New York, 1991.

[12] H.R. Thieme and C. Castillo-Chavez. How may infection-age infectivity affect the dynamics of HIV/AIDS // SIAM J.Appl.Math. 1993. V. 53. pp. 1447–1479.

[13] R. Naresh and A. Tripathi. Modeling and analysis HIV-TB co-infection in a variable sizen population // Mathematical Modelling and Analysis. 2005. V. 10. pp. 275–286.

[14] T. Porco, P. Small and S. Blower. Amplification dynamics: Predicting the effect of hiv on tuberculosis outbreaks // Journal of Acquired Immune Deficiency Syndromes. 2001. V. 28. pp. 437–444.

[15] R.B. Schinazi. Can hiv invade a population which is already sick? // Bull. Braz. Math. Soc.(N.S.). 2003. V. 34. pp. 479–488.

[16] С.И. Кабанихин. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сибирское научное издательство, 2009.

[17] А.И. Ильин, С.И. Кабанихин, О.И. Криворотько. Об определении параметров моделей, описываемых системами нелинейных дифференциальных уравнений // СЭМИ. 2014. Т. 11. С. 1–14.

[18] H. Miao, X. Xia, A. S. Perelson and H. Wu. On identifiability of nonlinear ode models and applications in viral dynamics // SIAM Rev Soc Ind Appl Math. 2011. V. 53(1). pp. 3–39.

[19] T. Quaiser and M. Monnigmann. Systematic identifiability testing for unambiguous mechanistic modeling application to jak-stat, map kinase, and nf-kb signaling pathway models // BMC Systems Biology. 2009. V. 3. no. 50.

Варвара Александровна Латышенко — магистрант Новосибирского государственного университета, инженер Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: latushenko_varia@mail.ru;
Виктория Николаевна Каштанова — магистрант Новосибирского государственного университета,
e-mail: vikakashtanova@ya.ru;
Ольга Игоревна Криворотько — к.ф.-м.н., н.с. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: krivorotko.olya@mail.ru;
Сергей Игоревич Кабанихин — член-корр. РАН, директор Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: kabanikhin@sscc.ru.

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК СРЕДСТВО ОБЕСПЕЧЕНИЯ КОРРЕКТНОСТИ ВЫВОДОВ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ КРИТЕРИЕВ ОДНОРОДНОСТИ ДИСПЕРСИЙ В НЕСТАНДАРТНЫХ УСЛОВИЯХ

Б. Ю. Лемешко, И. В. Веретельникова

Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск

УДК 519.24

Даже в условиях классического предположения о принадлежности анализируемых выборок нормальному закону распределения статистик ряда параметрических критериев проверки однородности дисперсий представлены лишь ограниченными таблицами критических значений. Вследствие этого исключается возможность по результатам проверки гипотезы оценить достигнутый уровень значимости p_{value}, снижается обоснованность вывода о результатах проверки. При нарушении стандартного предположения о нормальности возможность использования классических результатов полностью исключается. В то же время параметрические критерии однородности имеют явное преимущество в мощности перед непараметрическими аналогами, в том числе в условиях нарушений стандартного предположения о нормальности. Опираясь на статистическое моделирование распределений статистик критериев, в работе решаются проблемы корректного использования критериев однородности дисперсий в нестандартных условиях с оценкой p_{value}.

Ключевые слова: статистическое моделирование, проверка однородности дисперсий, распределение статистики, мощность, уровень значимости.

Введение

Одной из наиболее часто решаемых в приложениях задач является проверка гипотез об однородности дисперсий k выборок, имеющая вид $H_0 : \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \cdots = \sigma_n^2$.

Для проверки такой гипотезы предложено множество параметрических (Бартлетта, Кокрена, Фишера, Хартли, Левене, Неймана — Пирсона, О'Брайена, Ньюмана, Z–критерий Оверолла — Вудворда и его модификация, Блисса — Кокрена — Тьюки, Кадуэлла — Лесли — Брауна, Линка) и непараметрических (Ансари — Бредли, Муда, Сижела — Тьюки, Кейпена, Клотца, Флайне — Киллина) критериев [1].

При выборе критерия ориентируются на его мощность и на возможность обоснованного принятия решения, в том числе, при возможном нарушении стандартных предположений. При этом следует учитывать следующие известные факты [1].

1. Параметрические критерии (по крайней мере, лучшие их представители) имеют явное преимущество в мощности по сравнению с непараметрическими.

2. Стандартным предположением, обуславливающим возможность применения параметрических критериев однородности дисперсий, является принадлежность анализируемых выборок нормальному закону распределения. В случае его нарушении распределения статистик критериев, соответствующие справедливости H_0, существенно изменяются.

3. Даже в случае выполнения стандартного предположения возможность корректного применения ряда параметрических критериев ограничена тем, что не известны распределения статистик, и имеются лишь таблицы критических значений статистик для некоторого ряда объёмов выборок. Поэтому нельзя оценить достигнутый уровень значимости p_{value}.

Исследования выполнены при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках государственной работы «Обеспечение проведения научных исследований» и проектной части государственного задания (проект № 1.1009.2017/ПЧ).

4. При ограниченных объёмах выборок распределения статистик параметрических критериев зачастую существенно отличаются от известных асимптотических распределений этих статистик.

5. На непараметрические критерии однородности характеристик рассеяния, в которых по существу проверяется гипотеза о равенстве параметров масштаба, не накладывается предположения о нормальности. Однако требуется выполнение не менее сильного предположения об однородности законов анализируемых выборок.

6. Распределения нормализованных статистик непараметрических критериев являются дискретными и при малых объёмах выборок существенно отличаются от асимптотического стандартного нормального закона.

7. Параметрические критерии имеют очевидное преимущество в мощности перед непараметрическими и в условиях нарушения стандартного предположения (в случае законов, отличающихся от нормального). Это заставляет задуматься о возможности их корректного применения при использовании в условиях нарушения стандартного предположения.

Таким образом, для построения корректного статистического вывода по результатам проверки гипотезы необходимо выбрать наиболее мощный критерий и в соответствии с этим критерием оценить достигнутый уровень значимости p_{value}. Принятие решения на основе оценки p_{value} всегда более информативно, чем в результате сравнения вычисленной статистики с некоторым критическим значением.

В случае применения критериев, распределения статистик которых (при выполнении стандартного предположения) неизвестны или отличаются от известных асимптотических вследствие ограниченности объёмов анализируемых выборок, оценивание p_{value} представляет собой некоторую проблему. Однако эта проблема вполне решаема при наличии соответствующего программного обеспечения, позволяющего найти оценку p_{value} по результатам статистического моделирования. Реализация такой же возможности в случае использования критериев в условиях нарушения стандартного предположения о нормальности случайных величин существенно расширяет сферу применения параметрических (и непараметрических) критериев однородности дисперсий.

1 Вычисление достигнутого уровня значимости

Принятие решения о результатах проверки гипотезы H_0 на основании значения p_{value} всегда более обосновано, чем в результате сравнения полученного значения статистики S^* с заданными критическими значениями, извлекаемыми из соответствующей таблицы процентных точек.

В случае правостороннего критерия достигнутый уровень значимости определяется соотношением

$$p_{value} = P\{S > S^* \mid H_0\} = 1 - G(S^* \mid H_0), \tag{1}$$

где $G(S \mid H_0)$ — функция распределения вероятностей статистики применяемого критерия при справедливости H_0.

В случае двустороннего критерия критическая область состоит из двух частей. А p_{value} определяется соотношением

$$p_{value} = 2\min\{G(S^* \mid H_0), 1 - G(S^* \mid H_0)\}. \tag{2}$$

Вычисление p_{value} в соответствии с соотношениями (1) для правостороннего критерия или (2) для двустороннего не вызывает труда при известном распределении статистики критерия. Если информация о распределении статистики соответствующего критерия отсутствует и представлена лишь таблицей процентных точек, либо объёмы выборок относительно невелики и таковы, что распределение статистики существенно отличается от предельного (асимптотического), то корректное вычисление p_{value} представляет собой некоторую проблему.

К сожалению, распределения большинства параметрических критериев однородности дисперсий (даже в классическом случае принадлежности выборок нормальному закону) существенно зависят от объемов выборок. Поэтому при формировании решения о результатах проверки гипотезы H_0 приходится опираться на таблицы процентных точек, которые сформированы для ограниченных наборов n_i и, часто, подразумевают равенство объёмов сравниваемых выборок.

Каким же образом можно повысить качество статистических выводов? В настоящее время благодаря резкому увеличению возможностей вычислительной техники в программных системах статистического анализа существенно возрастает роль использования компьютерных методов исследования закономерностей.

Например, когда распределение статистики критерия, используемого для проверки некоторой гипотезы, к моменту начала проверки (в силу разных причин) оказывается неизвестным (при данном объёме выборки n), появляется возможность исследования распределения статистики в реальном времени проверки гипотезы (в интерактивном режиме) [1]. Например, в интерактивном режиме можно исследовать неизвестное распределение статистики любого критерия однородности дисперсий, зависящее от объема выборки, при тех значениях n_i, которые соответствуют анализируемым выборкам, и оценить по найденному в результате моделирования эмпирическому распределению статистики p_{value}.

При таком подходе необходимое для проверки гипотезы эмпирическое распределение $G_N(S_n \mid H_0)$ статистики соответствующего критерия строится в результате статистического моделирования с точностью, зависящей от числа экспериментов N в методе Монте — Карло [2]. Затем по эмпирическому распределению $G_N(S_n \mid H_0)$ и вычисленному по анализируемой выборке значению статистики S^* критерия в соответствии с соотношениями (1) или (2) определяется оценка p_{value}.

Таким образом, результаты статистического моделирования, осуществляемого в интерактивном режиме (непосредственно в процессе проводимого анализа) используются при формировании вывода по итогам проверки гипотезы. Реализация такого интерактивного режима требует наличия развитого программного обеспечения, позволяющего (как в [3]) в целях ускорения распараллеливать процессы моделирования и привлекать доступные вычислительные ресурсы.

2 Применение критериев в "нестандартных" условиях

Использование интерактивного режима для исследования распределений статистик открывает возможность применения критериев в условиях нарушения стандартного предположения о принадлежности результатов измерений нормальному закону. Отклонение от нормальности приводит к существенным изменениям распределений $G(S \mid H_0)$ статистик критериев. В меньшей степени это касается критерия О'Брайена, модифицированного Z–критерия Оверолла — Вудворда и модификаций критерия Левене. Однако за эту устойчивость данные критерии платят некоторым снижением мощности (при выполнении стандартных предположений). В то же время распределения $G(S \mid H_0)$ статистик этих трёх критериев всё-таки настолько отклоняются от имеющих место при стандартных предположениях (в случае принадлежности выборок законам с тяжелыми хвостами), что пренебрегать этим нельзя. Поэтому корректность выводов зависит от того, насколько точно знания о распределении $G(S \mid H_0)$ соответствуют реальным условиям, характеризующим анализируемые результаты измерений.

Для рассмотренных критериев однородности дисперсий проиллюстрируем использование интерактивного режима исследования $G(S \mid H_0)$ и точности оценивания p_{value} в зависимости от числа экспериментов моделируемых эмпирических распределений статистик, в том числе при нарушении стандартного предположения.

Напомним, что для того чтобы погрешность оценивания p_{value} с доверительной вероятностью 0.99 не превышала величины 0.01, количество экспериментов имитационного моделирования N должно быть порядка 16 600, для того, чтобы погрешность не превышала 0.001 — количество экспериментов должно быть порядка 1 660 000 [2].

Пример 1. Пусть проверяется гипотеза о равенстве дисперсий 2-х следующих выборок объемом $n_i = 40, i = \overline{1,2}$, в предположении о принадлежности их нормальному закону:

0.205	0.232	-0.219	0.829	0.127	0.939	0.995	0.706	-0.450	-0.361
-0.364	-0.107	1.054	-0.095	-2.188	0.453	-1.052	0.640	-0.417	-2.144
-3.473	-0.857	-0.678	0.070	-1.139	0.574	0.409	0.206	0.184	1.273
-0.326	-1.245	0.227	0.185	0.383	0.126	0.255	1.110	-0.310	-0.178

0.269	-0.187	-0.013	-1.248	-0.247	-0.541	1.209	-2.814	0.575	-0.452
-0.427	0.337	1.138	-1.090	-0.858	-0.006	-1.212	-0.180	1.751	-0.485
-0.779	-0.752	0.342	-0.175	0.509	0.209	0.596	1.869	1.764	1.084
0.995	0.633	0.003	-0.642	-1.225	-0.115	-1.543	0.137	-1.290	2.189

В таблице 1 приведены значения статистик, вычисленные при проверке однородности дисперсий, соответствующих этим 2-м выборкам. В таблице представлены оценки p_{value}, полученные по смоделированным распределениям статистик рассматриваемых критериев при количестве экспериментов $N = 10^4$ и $N = 10^6$ в

предположении о принадлежности случайных величин нормальному закону. Для критериев, относительно которых известны асимптотические распределения статистик, в таблице приведены также теоретические оценки p_{value}, вычисленные в соответствии с этими распределениями.

Таблица 1: Оценки p_{value}, полученные при проверке однородности первых 2-х выборок (при справедливости H_0)

Критерий	Значение статистики	p_{value}			
		При нормальном законе			При законе Лапласа
		Теоретическая	$N = 10^4$	$N = 10^6$	$N = 10^6$
Бартлетта	0.268028	0.604658	0.605	0.6045	0.734
Кокрена	0.541643	–	0.605	0.6045	0.734
Фишера	0.846236	0.604671	0.596	0.6045	0.734
Хартли	1.1817	–	0.605	0.6045	0.734
Неймана — Пирсона	1.00349	0.607	0.605	0.6045	0.734
Z–критерий Оверолла — Вудворда	0.279266	0.597183	0.605	0.6045	0.734
Модифицированный Z–критерий	0.115111	0.734398	0.741	0.7348	0.732
О'Брайена	0.162623	0.687856	0.702	0.6971	0.722
Левене (со средним)	0.604953	–	0.454	0.4451	0.459
Ньюмана	4.56411	–	0.780	0.7777	0.730
Линка	0.948631	–	0.806	0.8079	0.877
Блисса — Кокрена — Тьюки	0.513181	–	0.814	0.8084	0.878
Кадуэлла — Лесли — Брауна	1.05415	–	0.814	0.8084	0.878

В действительности обе анализируемые выборки моделировались в соответствии с распределением Лапласа со значением $\sigma = 1$. Поэтому в последней колонке таблицы представлены оценки p_{value}, полученные по смоделированным распределениям статистик рассматриваемых критериев при количестве экспериментов $N = 10^6$ в предположении о принадлежности случайных величин закону Лапласа.

С одной стороны, можно заметить существенное различие в оценках p_{value} при законах Лапласа и нормальном. С другой стороны, можно отметить, что в случае устойчивых критериев Левене, О'Брайена и модифицированного Z–критерия различие в таких оценках минимально.

Необходимо подчеркнуть следующее. Если реальный закон распределения обладает более "тяжелыми" хвостами по сравнению с нормальным законом, а мы, применяя параметрический критерий однородности дисперсий, опираемся на классические результаты, связанные с выполнением предположения о нормальности, то это приводит к увеличению (по сравнению с заданной) вероятности ошибки 1-го рода и к уменьшению вероятности ошибки 2-го рода. Если же реальный закон обладает более "лёгкими" хвостами, то в аналогичной ситуации это приводит к уменьшению вероятности ошибки 1-го рода и к увеличению вероятности ошибки 2-го рода.

Пример 2. Проверим гипотезу о равенстве дисперсий 3-х выборок, 2 из которых взяты из предыдущего примера, а третья приведена ниже:

0.254	-0.254	-0.017	0.002	1.937	-2.476	-0.092	-0.543	2.588	1.970
1.869	0.453	-0.616	-2.806	2.382	0.476	0.641	-2.581	-0.659	-0.027
1.775	2.154	-1.801	-0.774	-0.522	1.413	-0.042	-0.175	-0.929	0.664
-0.298	0.409	0.040	0.418	0.478	-0.052	-4.354	1.521	-2.126	1.177

Эта выборка также смоделирована в соответствии с распределением Лапласа, но при $\sigma = 1.5$.

В таблице 2 приведены значения статистик, вычисленные при проверке гипотезы об однородности дисперсий, соответствующих 3-м рассматриваемым выборкам. В предположении о принадлежности выборок нормальному закону в таблице представлены теоретические оценки p_{value} и оценки, полученные по результатам статистического моделирования при количестве экспериментов 10^6. В предположении о принадлежности выборок закону Лапласа приведены полученные оценки p_{value} при $N = 10^6$.

В данном случае видно, что если мы проигнорируем факт нарушения стандартного предположения о нормальности, то по всем критериям (за исключением модифицированного Z-критерия и критерия О'Брайена) получим значения p_{value} меньшие по сравнению с истинными, имеющими место при законе Лапласа. Если бы реальный закон обладал более лёгкими хвостами по сравнению с нормальным, то значения p_{value}, получаемые в предположении о нормальности, превышали бы истинные значения.

Таблица 2: Оценки p_{value}, полученные при проверке однородности 3-х выборок (отношение стандартных отклонений 1:1:1.5)

Критерий	Значение статистики	p_{value}		
		При нормальном законе		При законе Лапласа
		Теоретическая	$N = 10^6$	$N = 10^6$
Бартлетта	9.72943	0.0077	0.0079	0.1198
Кокрена	0.534165	–	0.0032	0.0667
Хартли	2.50172	–	0.0140	0.1508
Неймана — Пирсона	1.08774	–	0.0079	0.1198
Z–критерий Оверолла — Вудворда	5.0054	0.0067	0.0065	0.1098
Модифицированный Z–критерий	2.31571	0.0987	0.0953	0.0897
О'Брайена	3.2241	0.0434	0.0396	0.0336
Левене (со средним)	2.82473	–	0.0661	0.0713
Блисса — Кокрена — Тьюки	0.415913	–	0.0861	0.3301
Кадуэлла — Лесли — Брауна	1.46271	–	0.1899	0.5106

Таким образом, параметрические критерии однородности дисперсий, обладающие наибольшей мощностью, можно корректно применять как при выполнении стандартного предположения о нормальности, так и в условиях его нарушения. И в том и другом случае возможность вычисления оценок p_{value} повышает информативность статистических выводов.

Реализация такой процедуры применения критериев возможно только с опорой на программное обеспечение. Обязательным предварительным условием перехода к ней является идентификация вида закона распределения, наилучшим образом описывающего анализируемые выборки [4].

Решение о наиболее предпочтительной модели закона может лежать за рамками задачи проверки гипотезы об однородности, а при отсутствии такой возможности, приниматься в процессе анализа совокупности исследуемых выборок (или объединённой выборки). Если при этом в качестве наилучшей модели оказывается некоторое семейство распределений (например, обобщённый нормальный закон, семейства гамма- и бета-распределений и т.п.), в случае которого конкретный вид закона определяется значением параметра (или параметров) формы, то модель должна быть идентифицирована с точностью до значения этого параметра (его оценка должна быть найдена и зафиксирована).

3 Замечания о мощности критериев

В случае анализа двух выборок и выполнении стандартного предположения о нормальности наибольшей и одинаковой мощностью относительно тех же конкурирующих гипотез обладают критерии Фишера, Барт-

летта, Кокрена, Хартли, Неймана — Пирсона и Z–критерий Оверолла — Вудворда.

Далее в порядке убывания мощности следует группа устойчивых критериев О'Брайена, модифицированный Z-критерий, Левене.

Наименее перспективна для применения группа параметрических критериев Ньюмана, Блисса — Кокрена — Тьюки, Кадуэлла — Лесли — Брауна, Линка, которая уступает в мощности даже непараметрическим критериям, имея перед последними некоторое преимущество в мощности лишь при очень малых объёмах выборок.

Среди рассмотренных непараметрических критериев наибольшей мощностью обладает критерий Клотца, затем идёт критерий Флайне — Киллина, потом критерий Муда, который уже заметно уступает критериям Фишера, Бартлетта, Кокрена, Хартли, Неймана — Пирсона, Z–критерию Оверолла — Вудворда, О'Брайена, модифицированному Z-критерию и Левене.

В случае нарушения стандартного предположения и принадлежности двух выборок законам с более легкими хвостами, чем у нормального закона, вышеуказанный порядок предпочтительности сохраняется.

При симметричных законах с более тяжелыми хвостами по сравнению с нормальным законом критерии упорядочиваются следующим образом:

Флайне — Киллина $\succ$ Клотца $\succ$ Муда $\succ$ Левене $\succ$ Сижела — Тьюки $\sim$ Ансари — Бредли $\succ$
О'Брайена $\succ$ Модифицированный Z–критерий $\succ$ **группа критериев** (Бартлетта,
Кокрена, Хартли, Фишера, Неймана — Пирсона, Z–критерий Оверолла — Вудворда) $\succ$
Ньюмана $\succ$ **группа критериев** (Блисса — Кокрена — Тьюки, Кадуэлла — Лесли — Брауна, Линка).

Если анализируется большее число выборок, то при выполнении стандартного предположения или в случае принадлежности выборок законам с более лёгкими хвостами по сравнению с нормальным законом критерии по убыванию мощности располагаются в следующем порядке:

Кокрена $\succ$ О'Брайена $\succ$ Z–критерий Оверолла — Вудворда $\succ$ Модифицированный
Z–критерий $\succ$ **группа критериев** (Бартлетта, Неймана — Пирсона) $\succ$ Хартли $\succ$
Левене $\succ$ Флайне — Киллина $\succ$ Блисса — Кокрена — Тьюки $\succ$ Кадуэлла — Лесли — Брауна.

Надо отметить, что при симметричных законах с более лёгкими хвостами критерий Левене уступает в мощности критерию Флайне — Киллина.

При симметричных законах с более тяжелыми хвостами ситуация меняется:

Флайне — Киллина $\succ$ Левене $\succ$ О'Брайена $\succ$ Модифицированный Z–критерий $\succ$
группа критериев (Бартлетта, Неймана — Пирсона) $\succ$ Z–критерий Оверолла — Вудворда $\succ$
Хартли $\succ$ Кокрена $\succ$ Кадуэлла — Лесли — Брауна $\succ$ Блисса — Кокрена — Тьюки.

Заключение

Основной недостаток параметрических критериев связан с тем, что классические результаты обеспечивают корректность применения данных критериев лишь при выполнении предположения о принадлежности анализируемых выборок нормальным законам, так как только для этой ситуации известны распределения статистик рассмотренных параметрических критериев или таблицы процентных точек.

Этот недостаток можно преодолеть, используя компьютерные технологии для исследования распределений статистик и оценки p_{value} и распространив действие параметрических критериев на ситуации, когда выборки описываются законами, отличающимися от нормального.

При таком подходе необходимо учитывать, что распределение статистики критерия будет зависеть от вида закона, объема выборок и во многих случаях — от конкретных значений некоторых параметров. При использовании соответствующего программного обеспечения решение таких задач не вызывает принципиальных трудностей, а наличие программного обеспечения позволяет решать эти задачи по мере возникновения потребности [3].

Заметим, что специфика задач по исследованию методами компьютерного моделирования вероятностных закономерностей позволяет эффективно распараллеливать вычислительные процессы, используя ресурсы многоядерных и многопроцессорных компьютеров и компьютерных сетей и получать искомое решение практически в реальном масштабе времени.

Список литературы

[1] Лемешко Б.Ю. Критерии проверки гипотез об однородности. Руководство по применению. — М. : ИНФРА—М, 2017. — 208 с. DOI: 10.12737/22368

[2] Лемешко Б.Ю., Постовалов С.Н. Компьютерные технологии анализа данных и исследования статистических закономерностей: Учебное пособие. — Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004. — 119 с.

[3] Программная система статистического анализа одномерных случайных величин — ISW. URL: http://ami.nstu.ru/ headrd/ISW.htm (дата обращения 12.03.2017)

[4] Статистический анализ данных, моделирование и исследование вероятностных закономерностей. Компьютерный подход: Монография / Б.Ю. Лемешко, С.Б. Лемешко, С.Н. Постовалов, Е.В. Чимитова. — Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2011. — 888 с.

Борис Юрьевич Лемешко — д.т.н., профессор, главный научный сотрудник
Новосибирский государственный технический университет;
e-mail: lemeshko@ami.nstu.ru;
Ирина Викторовна Веретельникова — аспирант, младший научный сотрудник
Новосибирский государственный технический университет;
e-mail: ira-veterok@mail.ru.
Дата поступления — 28 апреля 2017 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИРОДНЫХ ПОЖАРОВ

Н. Э. Лепп

Сибирский государственный университет науки и технологий им. ак. М.Ф. Решетнева, 660049, Красноярск

УДК 519.63

Работа посвящена численной реализации неотрицательных случайных полей и их последующему использованию для прогнозирования и анализа динамики природного пожара. Представлена модификация авторегрессеонной схемы моделирования однородных гауссовых случайных полей, состоящая во включении в схему формирования отчетов поля случайных величин, имеющих гамма-распределение. Методом Монте–Карло проведено численное исследование динамики пожара на случайных полях скоростей, построены вероятностные контуры, получены оценки осредненной модели развития пожара.

Ключевые слова: моделирование случайных полей, лесной пожар, скорость распространения, оценка площади.

Введение

Стохастический подход к моделированию природных пожаров является актуальным и перспективным направлением исследований [1]–[3]. Задача такого подхода состоит в получении дополнительной информации о процессе распространения, оценке его интегральных характеристик с учетом погрешности во входных данных, характеризующих среду пожара.

Случайные поля используют при вероятностном описании флуктуационных явлений в системах с распределенными параметрами, в частности при описании флуктуации плотности, температуры, диэлектрической проницаемости и других параметров различных сред. Необходимость в моделировании случайных полей возникает при поиске и разработке эффективных алгоритмов анализа динамики процессов различной природы, распространяющихся в случайно-неоднородных средах. Как отмечено в [4], задачи имитационного моделирования случайных полей, да и сами модели полей, как правило, сопрягаются с моделями динамики управляемых объектов, процессов. Поэтому к трудоемким самим по себе задачам имитации полей добавляются системные требования, с позиций которых модели полей являются лишь частью более общей модели функционирования стохастической системы в целом.

1 Построение моделей неотрицательных случайных полей

Построение пространственных двумерных полей как математических моделей пространственных данных (моделей внешней среды) относится к активно развивающемуся направлению статистического моделирования. Сбор и анализ таких данных представляет интерес для многих научных и инженерных областей, в том числе науки о земле, проектирование материалов, астрономия и др. Так как в большинстве реальных информационных систем данные формируются в виде дискретных массивов, поэтому в работе рассматриваются методы описания дискретных полей, заданных на прямоугольных многомерных сетках.

Случайные возмущения, действующие на процесс распространения природного пожара, могут быть разделены на внутренние, такие как изменение параметров теплопередачи при горении неоднородно распределенного по поверхности растительного горючего материала (РГМ), и внешние, такие как изменение скорости

и направления ветра, топографии местности. В общем, внутренние и внешние возмущения, не являются независимыми, они коррелируют до некоторой степени: например, небольшое увеличение скорости ветра увеличит приток кислорода в зону горения, в результате будет сожжено больше РГМ, что приводит к увеличению площади пожара. Таким образом, для учета влияния стохастических возмущений на развитие пожара, детерминированная модель может быть модифицирована путем включения случайной составляющей, которая отражает влияние как внутренних, так и внешних возмущений с произвольной степенью корреляции.

Случайное поле скорости распространения призвано отразить совместное влияние внутренних (неравномерное пространственное расположение комплексов РГМ на поверхности) и внешних (вариации скорости и направления ветра в зоне пожара) возмущений на динамику природного пожара.

В данной работе представлена модификация авторегрессионной схемы моделирования однородных гауссовых случайных полей [5], состоящая во включении в схему формирования отсчетов поля случайных величин, имеющих гамма-распределение с параметром формы $k\,(0 < k < 1)$. Построение модели поля проводилось согласно специфике решаемых задач, скорость распространения не может быть отрицательной.

Трехточечная авторегрессионная схема формирования поля имеет вид (1),

$$x_{i,j} = \rho_1 x_{i-1,j} + \rho_2 x_{i,j-1} - \rho_1\rho_2 x_{i-1,j-1} + \sigma\sqrt{(1-\rho_1^2)(1-\rho_2^2)}\,\xi_{i,j}, \quad i,j \geqslant 1, \tag{1}$$

где i, j — дискретные пространственные координаты, $\xi_{i,j}$ — независимые случайные величины, имеющие гамма-распределение с параметром формы $k\,(0 < k < 1)$, σ^2 — дисперсия поля, ρ_1 и ρ_2 — коэффициенты корреляции соседних элементов поля по столбцу и строке соответственно, ρ_1, ρ_2 выбираются из диапазона от 0 до 1.

Плотность гамма-распределения с параметрами $k, \mu > 0$ задается формулой

$$P_{k,\mu} = \frac{\mu^k x^{k-1} e^{-\mu x}}{\Gamma(k)}, \quad x > 0. \tag{2}$$

Число k называют параметром формы, а число μ — параметром масштаба. Задача моделирования случайных величин $\Gamma(k, 1)$ с параметром $k < 1$ решается с использованием свойств гамма-распределения согласно [6]. Для изучения предложенной модифицированной модели были проведены компьютерные эксперименты, основной задачей которых было определение таких значений параметров, при которых вероятностные характеристики полей соответствовали бы значениям скорости распространения пожара в определенных лесорастительных условиях. По результатам экспериментов было решено при формировании поля на каждом шаге рекуррентных вычислений, в качестве аргумента, использовать случайную величину с параметром формы $k = 2/3$. Варьируя значения среднеквадратического отклонения и коэффициентов корреляции были получены модели полей скорости распространения, отражающие различные варианты пространственной неоднородности РГМ.

В таблице 1 приведены вероятностные характеристики сгенерированных полей при значении $\sigma = 1,6$ в модели (1). Вычислительные эксперименты показали, что увеличение корреляционной зависимости приводит к увеличению среднего значения по полю.

Таблица 1: Вероятностные характеристики сгенерированных полей.

Коэффициент корреляции	Среднее значение по полю	Дисперсия	Коэффициент вариации (%)
0,6	4,22	1,77	31,5
0,7	5,93	1,93	23,25
0,8	9,29	2,75	17,75

На рис. 1, 2, 3 представлены фрагменты (100×100) сгенерированных полей на решетке (200×200) при различной степени корреляционной зависимости соседних отсчетов поля.

2 Имитационное моделирование процесса распростанения пожара

На ландшафт, в котором моделируется развитие пожара, накладывается регулярная сетка $(m \times n)$. Моделирование процесса распространения проводилось волновым алгоритмом Ли, окрестность горящего узла

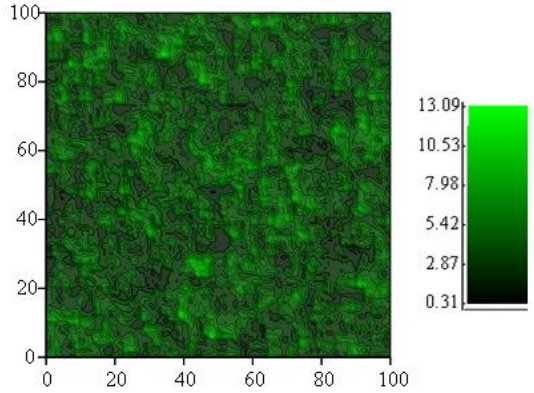


Рис. 1: Фрагменты реализации имитационной модели случайного поля скорости распространения $\rho_1 = \rho_2 = 0,6$

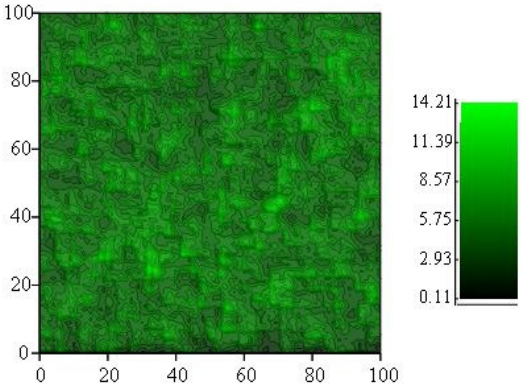


Рис. 2: Фрагменты реализации имитационной модели случайного поля скорости распространения $\rho_1 = \rho_2 = 0,7$

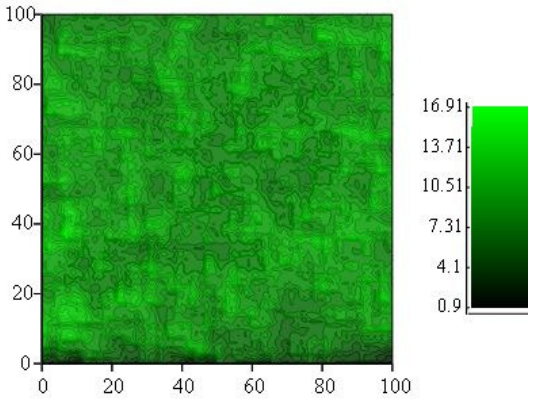


Рис. 3: Фрагменты реализации имитационной модели случайного поля скорости распространения $\rho_1 = \rho_2 = 0,8$

содержит 32 точки. В качестве исходной информации о процессе распространения алгоритм использует либо времена перехода из некоторой точки, занятой процессом, в соседние точки, либо величины скоростей движения фронта. Скорость распространения для этого алгоритма должна задаваться в узлах регулярной сетки, аппроксимирующей лесную территорию. Для изучения влияния флуктуаций скорости распространения на параметры природного пожара были проведены вычислительные эксперименты по моделированию процесса распространения на случайных полях скоростей.

На рис. 4 представлены результаты вычислительных экспериментов, соответствующих моделированию распространения лесного пожара на случайных полях скоростей, вероятностные характеристики которых приведены в таблице 1. Линии уровня соответствуют временам достижимости процесса распространения и показывают площадь, пройденную огнем в последовательные моменты времени. В первом, втором и третьем ряду на рисунке представлены две независимые реализации процесса распространения на случайных полях скоростей с коэффициентами корреляции $\rho = 0,6$, $\rho = 0,7$ и $\rho = 0,8$ соответственно. Увеличение корреляционной зависимости элементов поля скоростей приводит к модели развитого процесса распространения: быстрому росту площади, сглаживанию контура пожара.

Были проведены подобные вычислительные эксперименты по моделированию процесса распространения на случайных полях скоростей при значениях параметра $\sigma = 0,8$ и $\sigma = 1,2$ в модели (1) в трех вариантах корреляционной зависимости элементов поля.

На рис. 5, 6, 7 представлены результаты оценки площади, пройденной огнем для осредненной модели процесса распространения, шаг дискретизации по пространственным переменным $\Delta x = \Delta y$=2м, расчетная область 200×200, что соответствует 16 га лесной территории.

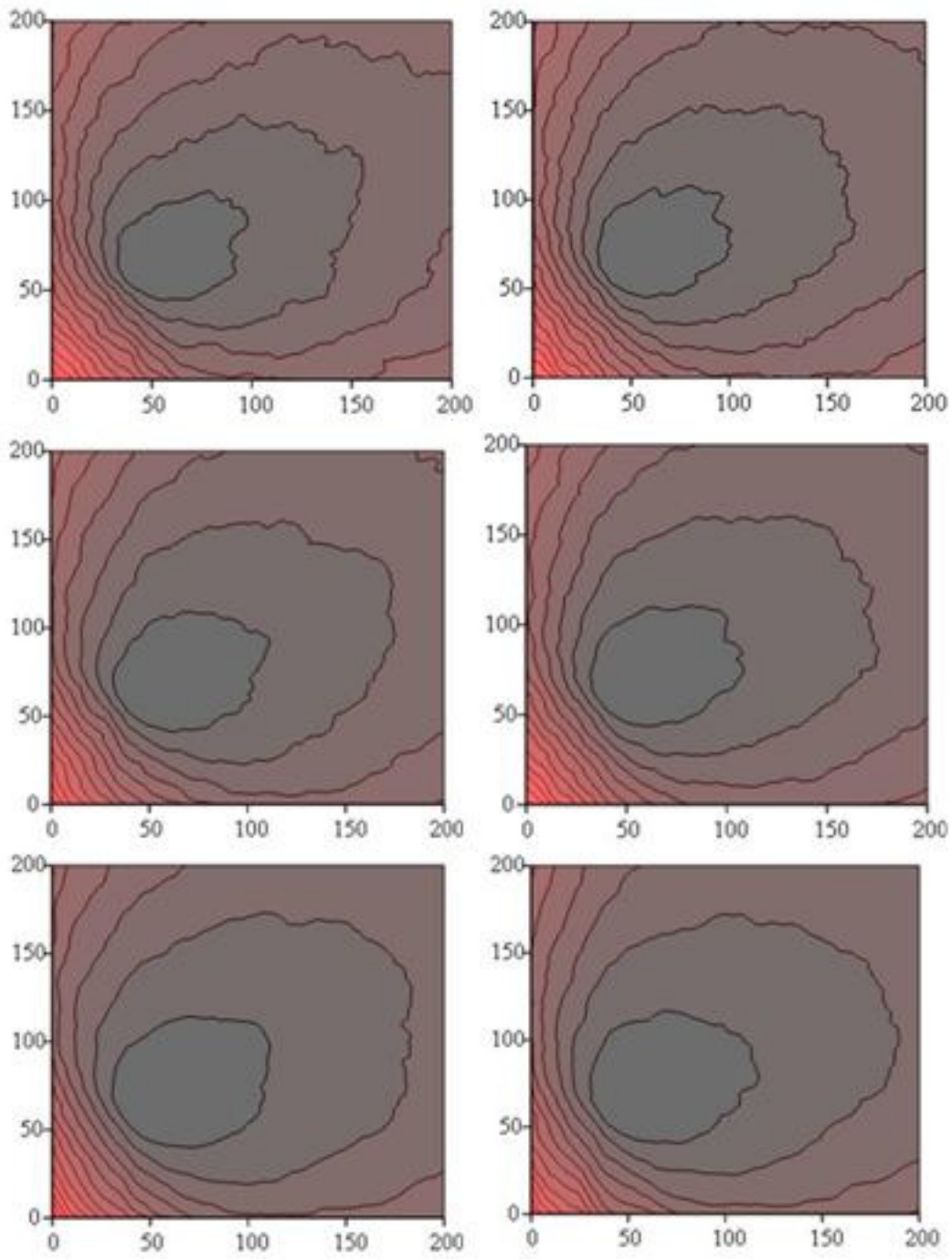


Рис. 4: Реализации процесса распространения пожара на случайных полях скоростей, шаг дискретизации по пространственным переменным ($\Delta x = \Delta y$ =2м); первый, второй и третий ряд - две независимые реализации процесса распространения на случайных полях скоростей с коэффициентом корреляции $\rho = 0,6$, $\rho = 0,7$ и $\rho = 0,8$ соответственно.

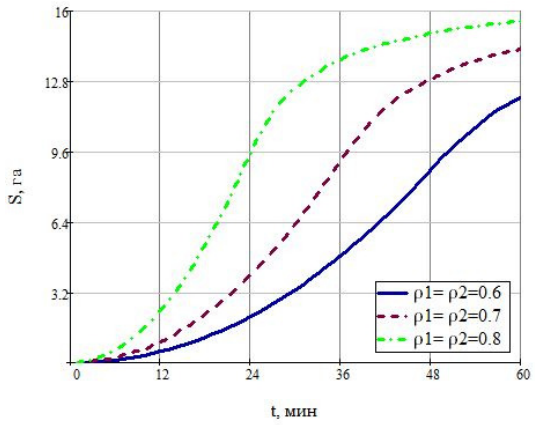


Рис. 5: Площадь пожара в последовательные моменты времени при $\sigma = 0,8$.

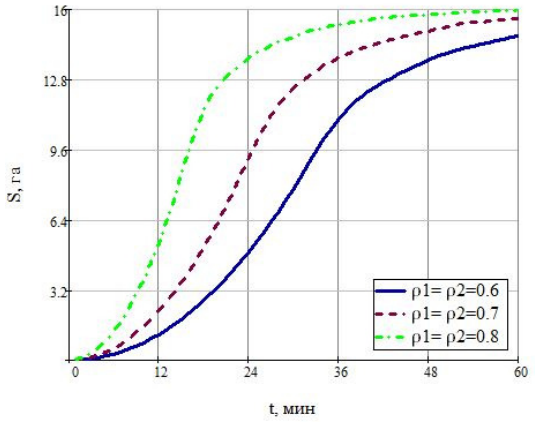


Рис. 6: Площадь пожара в последовательные моменты времени при $\sigma = 1,2$.

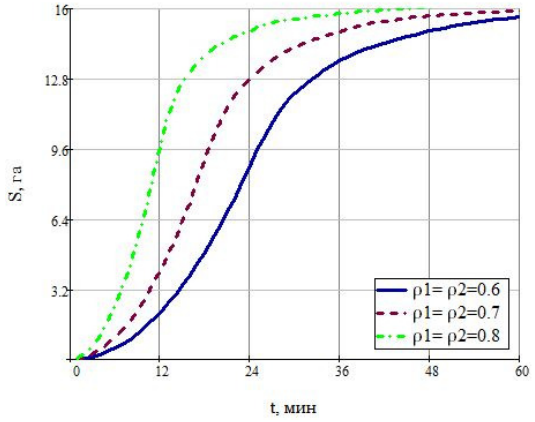


Рис. 7: Площадь пожара в последовательные моменты времени при $\sigma = 1,6$.

Результаты компьютерного моделирования процесса распространения пожара на случайных полях скоростей показали увеличение скорости продвижения горящей кромки, значительное увеличение площади, пройденной огнём при увеличении корреляционной зависимости отсчетов поля по пространственным координатам.

Заключение

Предсталена модифицированная авторегрессионная схема формирования двумерного неотрицательного случайного поля, на основе которой построены модели случайных полей скорости распространения природного пожара. Полученные модели были использованы для расчета процесса распространения и оценки площади пожара в неоднородных условиях внешней среды.

Список литературы

[1] Finney M.A. A Method for Ensemble Wildland Fire Simulation// Environ Model Asses. 2011, № 16. P. 153–167.

[2] Хвостиков С.А., Барталев С.А., Лупян Е.А. Вероятностное прогнозирование развития природных пожаров методом Монте–Карло на основе интеграции в имитационную модель данных спутникового детектировани очагов горения//Современные проблемы дистационного зондирования Земли из космоса. 2016, Т. 13. № 5. С. 145–156.

[3] Лери М.М. Пожар на конфигурационном графе со случайными переходами огня по ребрам// Информатика и ее применение. 2015, Т. 9. № 3. С. 65–71.

[4] Шалыгин А.С. Имитационные модели случайных полей./ А.С. Шалыгин, Ю.И. Палагин. БГТУ.— СПб., 1998. — 120с.

[5] Хабиби А. Двумерная байесовская оценка изображений// ТИИЭР. 1972. № 7. С. 153–159.

[6] Михайлов Г.А. Замечания о практически эффективных алгоритмах численного статистического моделирования//Сиб. журн. вычисл. математики. РАН. Сиб. отделение. — Новосибирск, 2014. Т.17. № 2. С. 177–190.

Наталья Эвальдовна Лепп — ст. преподаватель Сибирского государственного университета науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева;
e-mail: leppnatalia@mail.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИВЫХ БЛЕСКА ЗАТМЕННОЙ ДВОЙНОЙ СИСТЕМЫ С АККРЕЦИОННЫМ ДИСКОМ

В. В. Лукин[1,2], М. П. Галанин[1,2], В. М. Чечеткин[1,3], К. Л. Маланчев[4]

[1] *Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 125047, Москва*

[2] *Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 105005, Москва*

[3] *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123098, Москва*

[4] *Государственный астрономический институт им. П.К. Штернберга МГУ, 119234, Москва*

УДК 004.942

Рассмотрена математическая модель формирования аккреционного диска в затменной двойной звездной системе. Модель включает в себя систему уравнений трёхмерной газовой динамики для частично ионизованного невязкого газа с учетом гравитационного потенциала Роша и радиационного охлаждения вещества, записанную во вращающейся системе отсчета. Для численного исследования модели разработан параллельный программный комплекс, основанный на методе типа Годунова для тетраэдральных неструктурированных сеток и позволяющий строить синтетические кривые блеска по результатам газодинамического расчета. Исследован процесс формирования и эволюции аккреционного диска для параметров системы V1239 Her. Расчетные кривые блеска показывают хорошее соответствие с данными наблюдений.

Ключевые слова: аккреционный диск, методы типа Годунова, частично ионизованный газ, параллельные вычисления.

Введение

Кривые блеска затменных двойных систем, наблюдаемых под большими углами между лучом зрения и осью вращения системы, демонстрируют ряд характерных особенностей, нуждающихся в теоретической интерпретации с учетом структуры течения плазмы в аккреционном диске. К таким особенностям, например, относится описанная в [1] переменность кривой блеска звезды V1239 Her до и после затмения аккретора донором. Наблюдения показывают (см. рис. 1), что кривая блеска помимо главного минимума (на орбитальной фазе $\phi_{\rm orb} = 0$) в 1.5 средней внезатменной магнитуды и вторичного ($\phi_{\rm orb} = 0.5$) — в 0.2 магнитуды, как правило, содержит предзатменный подъем блеска ($\phi_{\rm orb} \simeq -0.2$) на 0.2 магнитуды. Подобное поведение демонстрируют и многие другие затменные двойные системы, например [2].

Математическое моделирование кривых блеска для подобных систем при больших углах наклона оси вращения системы требует аккуратного расчета особенностей течения во внешних частях аккреционного диска, а также численного исследования параметров потока в месте контакта струи, истекающей со звезды донора, и аккреционного диска. Такое исследование может быть произведено в рамках модели трехмерной газовой динамики с учетом гравитационного поля и охлаждения газа за счет излучения, см., например, [3]. В частности, было показано, что взаимодействие струи и диска носит безударный характер и приводит к формированию протяженной структуры на границе диска (так называемая горячая линия).

В данной работе мы применим такой подход для интерпретации наблюдательных кривых блеска системы V1239 Her. Газодинамическая модель включает в себя холодную струю, истекающую из внутренней точки Лагранжа L_1 системы и в течение нескольких оборотов формирующую дисковую структуру вокруг аккретора. Для расчета кривой блеска использована функция охлаждения ионизированного водорода. В отличие от [3] и других аналогичных работ, мы используем не модель совершенного газа, а уравнения состояния частично ионизованного газа для более точного учета баланса внутренней и излученной энергии газа.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 15-01-03073, 16-02-00656, 16-31-00302), Российского научного фонда (код проекта 14-12-00146).

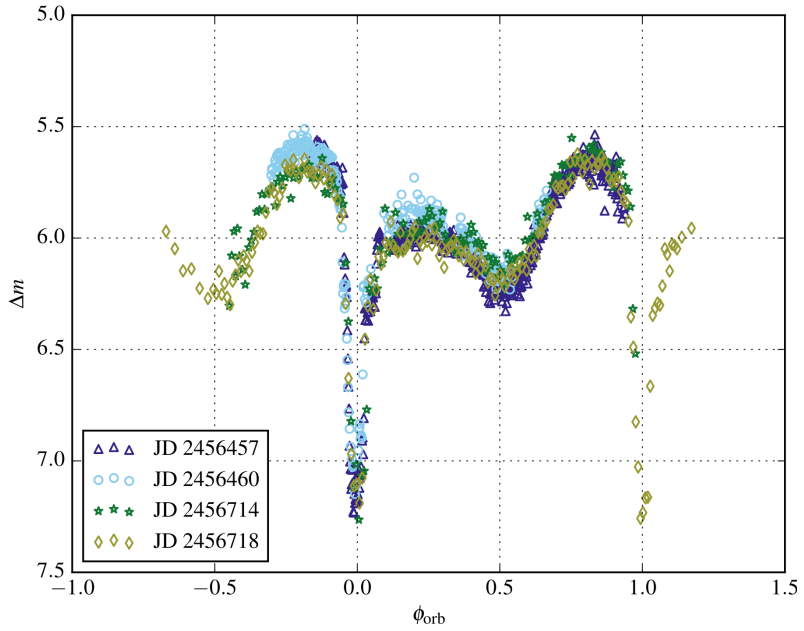


Рис. 1: Наблюдательные кривые системы V1239 Her в белом свете. Данные из [1].

1 Математическая модель

При формулировании математической модели истечения струи из внутренней точки Лагранжа и формирования аккреционного диска будем пользоваться следующими положениями.

- Поток частично ионизованной водородной плазмы описывается системой уравнений сжимаемой газовой динамики.
- Самогравитация газа, а также влияние магнитных полей в расчетах не учитывается.
- Плазма представляет собой идеальный невязкий газ, нагреваемый только в силу перехода гравитационной энергии аккрецирующей плазмы во внутреннюю энергию газа.
- Потери энергии происходят за счёт радиационного охлаждения оптически тонкой столкновительной плазмы. Излученная энергия служит мерой блеска системы, получаемого в наблюдениях.

Кривая блеска рассчитывается с использованием пространственного распределения функции радиационного охлаждения, проинтегрированного по лучу зрения до оптической толщи $\tau = 2/3$. Расчет оптической толщи при этом осуществляется также на основе трёхмерной структуры течения, что делает модель самосогласованной.

С учетом сделанных предположений система уравнений модели в неинерциальной системе координат, связанной с вращающейся звездной системой, имеет вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\rho\vec{v} = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \rho\vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\left(\rho\vec{v}\vec{v} + p\hat{I}\right) = -\rho\vec{\nabla}\Phi + 2\rho\vec{v}\times\vec{\Omega}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot(\vec{v}\,(e+p)) = -\rho\vec{\nabla}\Phi\cdot\vec{v} - \Lambda(\rho, i, T), \tag{3}$$

где ρ — плотность газа, $\vec{v}$ — скорость, p — давление, e — полная энергия единицы объема, $\vec{\Omega}$ — угловая скорость вращения двойной системы, $\Lambda(\rho, i, T)$ — радиационная функция охлаждения, гравитационный потенциал Роша

$$\Phi = -\frac{GM_1}{\|\vec{r}-\vec{r}_1\|} - \frac{GM_2}{\|\vec{r}-\vec{r}_2\|} - \frac{1}{2}\|\vec{\Omega}\times(\vec{r}-\vec{r}_c)\,\|^2, \tag{4}$$

$\vec{r}$ — радиус-вектор элементарного объема, M_1, M_2 — массы компонент, $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$ — их радиус-векторы, $\vec{r}_c$ — радиус-вектор центра масс системы, G — гравитационная постоянная. Система уравнений газовой динамики замыкается уравнениями состояния частично ионизованного газа [4]:

$$e = \frac{3}{2}p + \rho\frac{\mathrm{Ry}}{m_p}i + \frac{\rho\|\vec{v}\|^2}{2},\ p = \rho kT\frac{1+i}{m_p}, \tag{5}$$

$$i = \left[1 + p\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e}\right)^{3/2}(kT)^{-5/2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{Ry}/kT}\right]^{-1/2}, \tag{6}$$

где i — степень ионизации, T — температура, ε — удельная внутренняя энергия газа, k — постоянная Больцмана, Ry — постоянная Ридберга, m_p и m_e — массы протона и электрона соответственно.

В качестве функции охлаждения использована аппроксимация из [5].

Для проведения расчетов система уравнений (1)–(3) была обезразмерена на характерные масштабы: длина — расстояние между компонентами $L = 0.945R_\odot$, где $R_\odot$ — радиус Солнца; масса — сумма масс донора и аккретора $M_0 = M_d + M_a$, $M_d = 0.223M_\odot$, $M_a = 0.91M_\odot$, температура $T_0 = 3500$ K; плотность газа $\rho_0 = 1.6 \cdot 10^{-8}$ г см$^{-3}$. Остальные масштабы могут быть получены стандартным образом, в частности, масштаб времени — орбитальный период системы $t_0 = 2\pi\sqrt{\frac{L^3}{GM_0}}$.

Начало неинерциальной системы отсчета находится в центре звезды-донора. Расчетная область представляет собой шаровый слой с центром в аккреторе, внешним радиусом $r_o = 0.64485$ и внутренним (моделирующим поверхность аккретора) $r_i = 0.01$. Граничные условия на внутренней границе моделируют свободное падение вещества на аккретор, на внешней — вброс вещества плотностью $\rho_s = 1$ и температурой $T = 1$ с локальной звуковой скоростью в круговой окрестности точки L_1 радиусом $r_s = 0.01$ и исторические условия на остальной части границы. В начальный момент времени плазма в расчетной области вращается (покоится в инерциальной системе отсчета), имеет фоновую плотность $\rho = 10^{-5}$ и температуру $T = 10^{-4}$.

2 Численный метод

Для моделирования течения плазмы разработана модификация явного конечно-разностного метода типа Годунова для тетраэдральных неструктурированных сеток. Схема является аддитивной и реализует расщепление по физическим процессам: на первом этапе интегрируется гиперболическая газовая часть системы (1)–(3), затем в импульс и энергию в каждой разностной ячейке вносится поправка, соответствующая действию гравитационных сил и сил инерции, и наконец для уравнения (3) проводится дополнительное интегрирование с дроблением шага для учета радиационного охлаждения вещества. Дробление шага в последнем случае необходимо, поскольку в рамках принятого приближения вещество считается оптически прозрачным для исходящего излучения. В этом случае скорость потери энергии на излучение оказывается существенно выше скорости протекания газодинамических процессов, причем за время газодинамического временного шага часть ячеек может успеть прийти к равновесному тепловому состоянию. Характерное соотношение газодинамического шага, определяемого условием Куранта с коэффициентом запаса $CFL = 0.4$, и размера подшага интегрирования функции охлаждения составляет один порядок.

Для интегрирования газодинамических слагаемых системы уравнений применяется конечнообъемный подход с постоянным распределением решения внутри расчетных ячеек (тетраэдров). На гранях тетраэдров потоки $\vec{F} = (\rho v_\perp, \rho v_\perp^2 + p, \rho v_\perp v_{\parallel,1}, \rho v_\perp v_{\parallel,2}, v_\perp(e+p))^T$ консервативных переменных $\vec{u} = (\rho, \rho\vec{v}, e)^T$ вычислялись при помощи модифицированного метода HLLC (Harten — Lax — van Leer — Contact) [6]:

$$\vec{F}^* = \begin{cases} \vec{F}^R,\ S_R < 0, \\ \vec{F}^R + S_R(\vec{u}^{R*} - \vec{u}^R),\ (S_* \leqslant 0) \wedge (S_R \geqslant 0), \\ \vec{F}^L + S_L(\vec{u}^{L*} - \vec{u}^L),\ (S_L \leqslant 0) \wedge (S_* \geqslant 0), \\ \vec{F}^L,\ S_L > 0. \end{cases}, \tag{7}$$

где $\vec{F}^R$ и $\vec{F}^L$ — потоки, вычисленные по значениям решения с разных сторон от грани, скорости распро-

странения возмущений оцениваются по формулам

$$S_L = \min\{v_\perp^L - v_s^L, v_\perp^R - v_s^R\}, \tag{8}$$

$$S_R = \max\{v_\perp^L + v_s^L, v_\perp^R + v_s^R\}, \tag{9}$$

$$S_* = \frac{\rho^L v_\perp^L (S_L - v_\perp^L) - \rho^R v_\perp^R (S_R - v_\perp^R) + \bar{p}^R - \bar{p}^L}{\rho^L (S_L - v_1^L) - \rho^R (S_R - v_\perp^R)}, \tag{10}$$

а скорость звука в частично-ионизованном газе вычисляется по формуле

$$v_s^2 = \frac{5 + i(1-i)\left(\frac{5}{2} + \mathrm{Ry}\right)^2}{3 + i(1-i)\left[\left(\frac{3}{2} + \mathrm{Ry}\right)^2 + \frac{3}{2}\right]} \frac{p}{\rho}. \tag{11}$$

Отметим схожесть данного подход с моделью совершенного газа. В последнем случае скорость звука вычисляется по формуле

$$v_s^2 = \gamma \frac{p}{\rho}, \tag{12}$$

где γ — показатель адиабаты. Для газа со степенью ионизации $i = 0$ или 1 формула (11) дает то же значение, что и (12) для одноатомного газа с $\gamma = 5/3$. Для промежуточных значений степени ионизации i коэффициент при p/ρ в уравнении (11) становится меньше 5/3, что можно интерпретировать как большую сжимаемость частично ионизованной плазмы по сравнению с совершенным газом.

Дополнительная сложность расчетов связана с вычислением термодинамических параметров состояния в газа в каждой расчетной ячейке на каждом шаге интегрирования как гиперболической части системы уравнений, так и функции радиационного охлаждения. Для этого необходимо решить систему нелинейных уравнений (5)–(6) относительно переменных p, T и i при заданных e, ρ и $\vec{v}$. Подстановка уравнений (5) в (6) позволяет прийти к одному нелинейному уравнению вида $f(i) = 0$, где функция f в зависимости от величины внутренней энергии газа либо имеет корень на границе отрезка $[0, 1]$ (для малых и больших значений внутренней энергии соответственно), либо имеет корень внутри отрезка, который, в силу смены направления выпуклости функции в окрестности корня, не может быть эффективно найден методом Ньютона. Для решения системы в этом случае приходится применять более простые, но и более безотказные методы типа бисекции, требующие минимум 10 итераций для получения удовлетворительного приближения.

2.1 Параллельный алгоритм

Построенный численный метод в силу особенностей задачи является весьма требовательным к вычислительным ресурсам. Необходимость разрешить с хорошей точностью тонкий (максимальная толщина порядка 0.1) аккреционный диск даже с учетом локальных сгущений требует использования больших сеток. При этом расчет необходимо выполнять на большие внутренние времена задачи — от 20 орбитальных оборотов. Подобные времена диктуются временем установления течения в диске, выхода его на квазистационарный режим. В расчетах использовалась расчетная сетка из 560,000 ячеек с примерным шагом на поверхности аккретора 0.0025, в области взаимодействия струи и диска 0.02 и на максимальном удалении от диска 0.05. Количество временных слоев в газодинамическом расчете достигало 3–4 млн., не считая подшагов интегрирования функции охлаждения, которые еще на порядок увеличивают указанное число и, хотя и не требуют вычисления потоков (7), но являются затратными в силу сложности функции охлаждения и необходимости решать на каждом подшаге уравнения (5)–(6).

Для решения указанных проблем был разработан параллельный программный комплекс для расчета течений частично ионизованной плазмы на параллельных ЭВМ кластерного типа. Распараллеливание базируется на разбиении исходной области на подобласти с помощью программы Metis и использовании возможностей технологии MPI по прединициализации и группировке операций передачи данных между подобластями. Предварительная сортировка нумерации ячеек в подобластях позволила передавать данные наиболее эффективным образом, что сделало программный комплекс хорошо масштабируемым. Тестирование эффективности распараллеливания комплекса на кластере К-100 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН показало, что ускорение расчетов на 192 ядрах относительно 12 ядер составляет 13.2 раз, то есть эффективность распараллеливания — 82.5%. График ускорения расчетов с ростом числа ядер представлен на рис. 2.

2.2 Построение кривой блеска

Полный поток энергии F, наблюдаемый от системы вычисляется путем интегрирования видимой поверхностной структуры энерговыделения в аккреционном диске вдоль луча зрения наблюдателя:

$$F = \int_S I(x,y)\,\frac{dS}{d^2}\,, \tag{13}$$

где $I(x,y)$ — интенсивность излучения в точке (x,y) картинной плоскости, перпендикулярной лучу зрения, d — расстояние до источника излучения. Интенсивность $I(x,y)$ вычислялась как усредненное по гидродинамическому шагу значение функции охлаждения $\bar{\Lambda}$ на глубине оптической толщи $2/3$ от наблюдателя:

$$\begin{aligned} I(x,y) &= \frac{\bar{\Lambda}(x,y,z^*)}{4\pi}, \\ z^* : \tau(x,y,z^*) &= \int_0^{z^*} \alpha_{\mathrm{Pl}}(x,y,z')\,dz' = \frac{2}{3}, \end{aligned} \tag{14}$$

где z — расстояние вдоль луча зрения, τ — оптическая толща между наблюдателем и расчетной ячейкой, α_{Pl} — средний по Планку коэффициент поглощения. На поверхности звезды-донора задавалась фиксированная интенсивность излучения, соответствующая наблюдениям.

Важным упрощением является тот факт, что при расчитанной излученной энергии в каждой расчетной ячейке усредненный по Планку коэффициент поглощения может быть получен из результатов газодинамического расчета по формуле

$$\alpha_{Pl}(\rho,T) = \frac{\Lambda(\rho,T)}{4\sigma_{\mathrm{SB}}T^4}, \tag{15}$$

где σ_{SB} — постоянная Стефана – Больцмана. Подробности см. в [5].

Размер картинной плоскости выбирался подходящим под размеры наблюдаемой системы, плоскость разбивалась на 750×300 $(225,000)$ пикселей, и вычисление интеграла (13) производилось для 100 моментов времени (отличающихся по фазе вращения системы и по внутреннему времени задачи) на один орбитальный период. Луч зрения был наклонен на 85° относительно оси вращения системы. Интеграл (14) также вычислялся численно путем разбиения луча зрения на $3,000$ интервалов. Для ускорения расчетов, поскольку блеск для каждой фазы может быть вычислен независимо, также было произведено распараллеливание построенного модуля программного комплекса.

3 Результаты расчетов

Установление квазистационарного режима течения в расчетной области происходит за 10 оборотов системы. Струя плазмы, истекающая из точки L_1, формирует вокруг аккретора структуру в виде тонкого аккреционного диска. На рис. 3 приведены распределения плотности и усредненной функции охлаждения газа в экваториальной плоскости диска спустя 17 оборотов после начала расчета. На графиках видны отошедшая

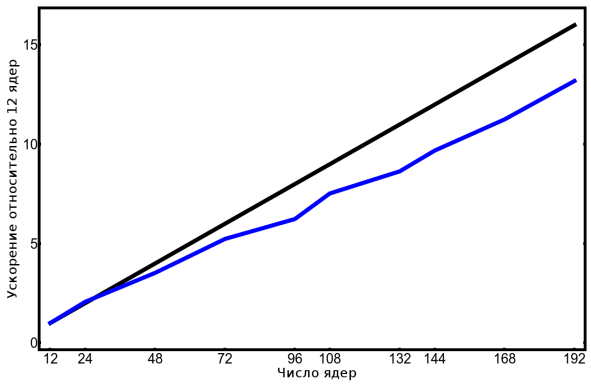


Рис. 2: Ускорение расчетов на кластере К-100.

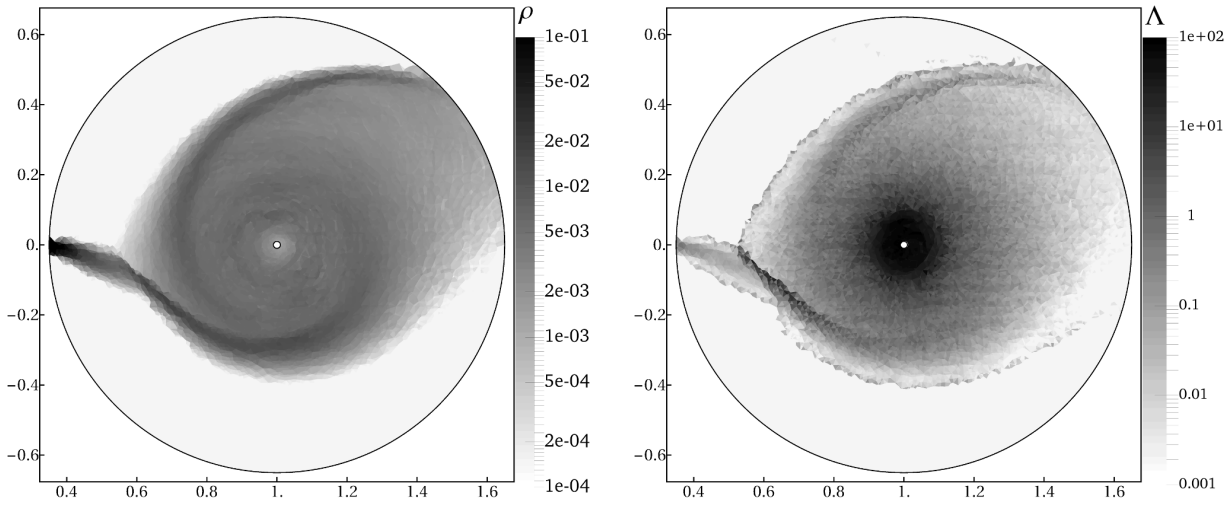


Рис. 3: Распределения плотности и усредненной функции охлаждения в момент времни $t = 17$.

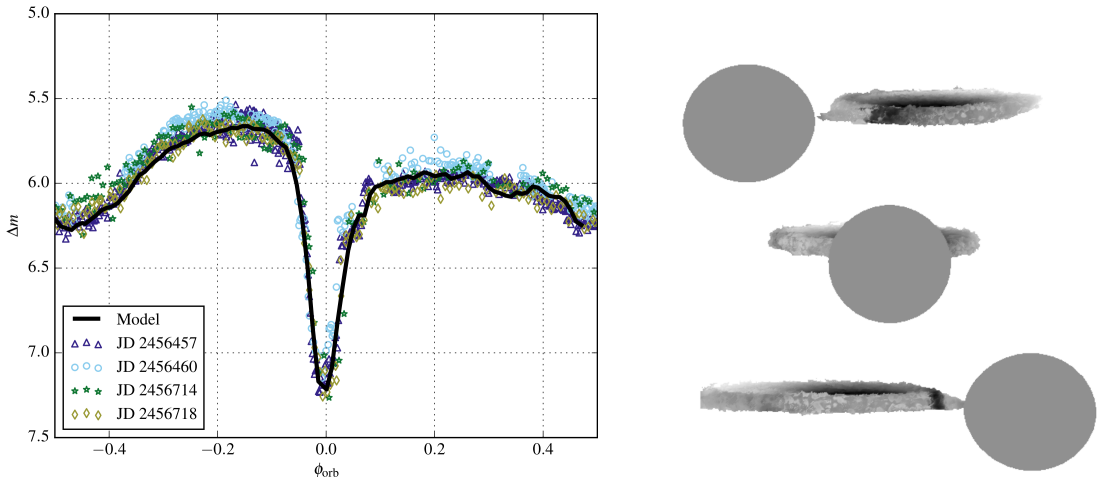


Рис. 4: Слева: синтетическая (черная линия) и наблюдательная (точки) кривые блеска для системы V1239 Her. Справа: изображение на синтетической картинной плоскости до, во время и после затмения, шкала аналогична рис. 3, справа.

ударная волна (в верхней части диска), переходящая в спиральную волну, аналогичную [7], и протяженная структура типа ударной волны в месте слияния струи и диска. Уплотнение и область высокого энерговыделения в этом месте возникают из-за ударного характера проникновения вещества диска, совершившего оборот вокруг аккретора, в струю. Около 50% вещества, поступающего вместе со струей от донора, уходит за пределы расчетной области и выходит из системы через внешнюю точку Лагранжа. В отличие холодной неионизованной струи и горячего полностью ионизованного фона, диск является частично ионизованным, степень ионизации составляет примерно 20%.

По полученному газодинамическому решению была построена синтетическая кривая блеска для стационарного состояния звездной системы. На рис. 4, слева эта кривая приведена вместе с наблюдательными данными. Отметим высокую точность полученного результата, а также разрешение всех характерных особенностей кривой блеска — положения и магнитуд затмений, предзатменного подъема блеска, а также характерной полочки в конце основного затмения. Последние две особенности объясняются тем, что на общий блеск системы оказывает существенное влияние видимость яркой горячей линии в месте контакта струи и аккреционного диска, см. рис. 4, справа. Использование модели частично ионизованного газа делает толщину этой области несколько меньше аналогичных расчетов в модели совершенного газа, а следовательно, позволяет учесть влияние излученной в ней энергии на полный блеск системы.

Заключение

В работе построена и исследована математическая модель течения газа в аккреционном диске затменной двойной системы V1239 Her. Модель включает в себя систему трехмерных уравнений динамики частично ионизованного газа с учетом гравитации и радиационного охлаждения вещества. Для численного решения построен алгоритм и соответствующий параллельный программный комплекс для расчетов на тетраэдральных неструктурированных сетках, включающий в себя модифицированную схему HLLC расчета газодинамических потоков, учет гравитационных сил и сил инерции, интегрирование функции радиационного охлаждения с уменьшенным шагом, а также решение системы нелинейных уравнений состояния. Полученные результаты хорошо согласуются с наблюдательными данными. Более подробное исследование физических аспектов модели можно найти в [5].

Список литературы

[1] Карликовая новая V1239 Геркулеса в спокойном состоянии блеска / Т. С. Хрузина, П. Ю. Голышева, Н. А. Катышева и др. // Астрономический журнал. 2015. Т. 92, № 4. С. 323–349.

[2] High-Speed Photometry of the Dwarf Novae Z Cha in Quiescence / J. Wood, K. Horne, G. Berriman et al. // Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 1986. Vol. 219. Pp. 629–655.

[3] Свидетельства отсутствия ударного взаимодействия струи и диска (горячего пятна) в полуразделенных двойных системах. Сравнение результатов математического моделирования и наблюдательных данных / Д. В. Бисикало, А. А. Боярчук, О. А. Кузнецов и др. // Астрономический журнал. 1998. Т. 75, № 1. С. 40–53.

[4] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Статистическая физика. Часть I. М.: Наука, Физматлит. 1976. 584 с.

[5] 3d modelling of accretion disc in eclipsing binary system v1239 her / V. V. Lukin, K. L. Malanchev, N. I. Shakura et al. // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. 2017. Vol. 467, № 3. P. 2934–2942.

[6] Toro E.F. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics. Berlin: Springer. 1999. 645 p.

[7] Ju W., Stone J. M., Zhu Z. Global MHD Simulations of Accretion Disks in Cataclysmic Variables. I. The Importance of Spiral Shocks // ApJ. 2016. Vol. 823. Article id. 81. 21 pp.

Владимир Владимирович Лукин — к.ф.-м.н.,
ст. науч.сотр. Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН;
Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана;
e-mail: vvlukin@gmail.com;
Михаил Павлович Галанин — д.ф.-м.н., проф.,
зав. отделом Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН;
Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана;
e-mail: galan@keldysh.ru;
Валерий Михайлович Чечеткин — д.ф.-м.н., проф.,
гл. науч.сотр. Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН;
Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт";
e-mail: chech@gin.keldysh.ru;
Константин Леонидович Маланчев — аспирант
Государственного астрономического института им. П.К. Штернберга МГУ;
e-mail: hombit@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

РЕШЕНИЕ ЭВОЛЮЦИОННОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УТОЧНЕНИЯ ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ В ОБЛАСТЯХ СОЛЯНОЙ ТЕКТОНИКИ

Б. В. Лунёв, В. В. Лапковский, М. С. Канаков, А. С. Застрожнов

Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 550.311, 553.98, 517.958

Для определения структуры объектов соляной тектоники в зонах, исследование которых сейсморазведкой затруднено, или невозможно, используется восстановление сформировавшей эти объекты эволюции. Задача решается путем расчета различных вариантов эволюции, возможных в рамках имеющихся данных о геологическом строении исследуемого участка, и подбора такого варианта, который дает актуальное положение геологических границ, совпадающее с данными бурения и сейсморазведки там, где они надежны. Такое совпадение позволяет считать, что структура определена адекватно во всей области, в том числе и там, где она не установлена обычными методами — на крыльях диапиров и в подсолевом комплексе.

Ключевые слова: соляная тектоника, обратная задача, эффективный метод.

Введение

Одной из сложнейших и практически важных обратных задач геофизики остается задача определения геологической структуры в областях развития соляной тектоники. Изначально эта задача решалась, как классическая обратная задача гравиразведки, средствами которой устанавливалось само наличие соляных куполов. В последнее время, она рассматривается скорее, как обратная задача сейсмики, являющейся основным методом исследования структуры платформенного чехла в связи с поисками и разведкой месторождений УВ. Сложность решения этой задачи обусловлена прихотливостью форм солянокупольных структур и, если иметь в виду сейсмику — высокой контрастностью, как самих структур, так и физических свойств образующей их каменной соли. Обычная сейсморазведка позволяет надежно определять границы слоев в надсолевом комплексе там, где они расположены субгоризонтально — над вершинами соляных диапиров и днищами разделяющих их синклиналей. Положение же границ слоев на крутопадающих (а иногда и опрокинутых) крыльях диапиров и повсюду в подсолевом комплексе определяется неоднозначно. А именно эти зоны являются наиболее интересными, в плане поиска скоплений УВ, выяснение их структуры является практически важной задачей для нефтегазовой геологии.

Известный путь избавления от неоднозначности — ограничение класса возможных решений. В случае структур соляной тектоники, есть прекрасная возможность использовать для этого модель механизма их формирования, благодаря тому, что за полтора века исследований он основательно изучен. По-видимому, можно утверждать, что развитие соляной тектоники, главным образом, определяется тем, что соль, в отличие от терригенных и биогенных осадков, практически не уплотняется под весом вышележащих пород. Поэтому, после захоронения каменной соли, имеющей плотность 2100–2200 кг/м^3, на глубину более 1000–1500 м, возникает инверсия плотности, так что соленосный слой начинает всплывать, формируя характерные структуры развития неустойчивости Рэлея–Тейлора. Динамика процесса и форма образующихся структур определяются соотношением плотностей, толщин и (в меньшей степени) реологических свойств всплывающего и перекрывающего слоев, темпами накопления последнего и временем. Возмущающими факторами, искажающими симметрию образующихся структур, являются наложенные, внешние, по отношению к системе, движения, краевые эффекты, обусловленные формой контура соляного пласта, и систематический

Работа выполнена в рамках программы IX.131.2.2. фундаментальных научных исследований СО РАН.

характер изменения веса перекрывающих отложений (увеличение их мощности или/и плотности в определенном направлении и во времени).

Такой процесс, в принципе, можно моделировать численно, применительно к каждому интересующему конкретному случаю. Воспроизведение региональных движений и накопления осадков, включая их уплотнение и эрозию во время подъемов территории, успешно реализуется существующими методами бассейнового моделирования. Развитие неустойчивости Рэлея–Тейлора, возникающей в процессе осадконакопления и формирующей собственно структуры соляной тектоники, моделируется решением соответствующей системы уравнений сплошной среды. Так что, если известны какие-либо параметры данной солянокупольной структуры, можно рассмотреть обратную задачу восстановления эволюции, приведшей к ее формированию.

Задача восстановления истории формирования солянокупольных структур, как развития неустойчивости Рэлея–Тейлора в высоковязкой ньютоновской жидкости, ставится в работах [1, 2, 3]. Там же показывается существование и единственность ее решения, дается методика решения и демонстрируются модельные и натурные примеры успешного восстановления эволюции системы, вплоть до начального состояния. Способ состоит в использовании отрицательного временного шага в эволюционном уравнении, связывающем между собой квазистационарные состояния системы, описываемые уравнением Стокса, так что от заданного состояния системы (актуального положения внутренних границ, определяющих распределение в исследуемом объеме параметров, прежде всего — плотности) рассчитываются предыдущие. Предполагается и показывается, что в отсутствие диссипации энергии, задача является устойчивой и корректной, независимо от направления времени.

Такой способ восстановления эволюции предполагает, что актуальное состояние системы полностью известно. Если иметь в виду реальные природные объекты, то, как уже говорилось, надежно обычно известно только положение границ надсолевого разреза, да и то лишь там, где они субгоризонтальны, структура же подсолевых слоев, вообще, гадательна. Понятно, что в этом случае решение обратной эволюционной задачи указанным путем невозможно. Важно, тем не менее, что доказана корректность и непосредственно показана принципиальная возможность решения такой задачи.

Опираясь на эти результаты, реконструировать формирование реальных объектов, при неполноте и неточности данных, можно путем расчета различных вариантов эволюции, как прямой задачи, с начальными условиями и параметрами, варьируемыми в рамках имеющихся данных о геологическом строении исследуемого участка, и подбора такого варианта, который дает актуальное положение геологических границ, совпадающее с данными бурения и с данными сейсморазведки там, где они надежны. Это классический метод подбора, успешно используемый для решения обратных задач геофизики. Возможность его практического применения определяется наличием достаточно эффективных вычислительных средств, позволяющих оперативно решать большое количество прямых задач на компьютерах доступных классов.

К сожалению, существующие алгоритмы, основанные на применении разностных методов решения дифференциальных уравнений движения, требуют слишком большого времени расчета эволюции моделей с большим количеством слоев с разной плотностью и сложными границами, воспроизводящих реальные структуры. Это обстоятельство, фактически, исключало использование подбора для решения обратной эволюционной задачи.

Нам удалось, на основе аналитического решения соответствующей краевой задачи, разработать высокоэффективные программы расчета эволюции неустойчивости Рэлея–Тейлора, позволяющие решать подбором обратную задачу восстановления истории формирования конкретных реальных объектов соляной тектоники. Поскольку при этом на каждый момент времени, в том числе – актуальный, вычисляется положение границ всюду в исследуемом объеме, то таким образом одновременно решается важная практическая задача определения структуры исследуемых объектов соляной тектоники там, где она не устанавливается обычными методами — на крыльях диапиров и в подсолевом комплексе.

1 Методика

Моделирование соляного тектогенеза в настоящей работе сводится к расчету происходящего под действием силы тяжести ползущего течения неоднородной по плотности ньютоновской жидкости с постоянной вязкостью, ограниченной сверху свободной поверхностью.

В прямоугольных декартовых координатах X_1, $X_{2,}$, X_3 рассматривается ограниченное свободной поверхностью $F(\vec{x},t) = x_3 - h(x_1,x_{2,}t) = 0$ полупространство $x_3 \le h(x_1,x_2,t)$; t — время, $\vec{n}$ — вектор единичной нормали к этой поверхности. Полупространство занято совокупностью несмешивающихся жидкостей в виде

слоев (или замкнутых тел) D_k разделенных границами $S_k(\vec{x},t)$, конфигурация которых изменяется рассчитываемым течением. Движущей силой течения является нормальная сила тяжести $\vec{g}$, приложенная к возмущению плотности, связанному с конфигурацией границ $S_k(\vec{x},t)$. Начальные условия определяются какой-либо заданной конфигурацией границ $S_k(\vec{x},t_0)$. Плотность, напряжения и давление представляются в виде: $\rho(\vec{x},t)=\rho^0(x_3,t)+\sigma(\vec{x},t)$; $T_{ij}(\vec{x},t)=T^0(x_3,t)+\tau(\vec{x},t)$; $P(\vec{x},t)=P^0(x_3,t)+p(\vec{x},t)$. Где ρ^0, T^0, P^0 — характеристики гидростатического состояния $T^0_{ij}=-\delta_{ij}P^0=-\delta_{ij}\rho^0 g x_3$, δ_{ij} — дельта Кронекера, а σ, τ, p — их малые возмущения. Течение $\vec{v}$, очевидно, связано с возмущениями.

Задача расчета ползущего течения, как обычно, разделяется на квазистационарную и эволюционную.

В квазистационарной задаче по $S_k(\vec{x},t_n)$,данному в некоторый момент времени t_n, и соответствующему возмущению плотности $\sigma(\vec{x},t_n)$ требуется найти поле течения $\vec{v}(\vec{x},t_n)$, $p(\vec{x},t_n)$ и форму свободной границы $F(\vec{x},t_n)$. Малость возмущения свободной границы h (относительно горизонтальных размеров) и производных $\dfrac{\partial h}{\partial x_1}$, $\dfrac{\partial h}{\partial x_2}$, позволяет линеаризовать граничные условия квазистационарной задачи и записать ее относительно возмущений в виде

$$\begin{aligned}
&\sigma(\vec{x},t_n)=\rho(\vec{x},t_n)-\rho^0(x_3,t_n),\quad \rho(\vec{x},t_n)=\rho_k \quad \text{для} \quad \vec{x}\in W_k,\\
&\mu\nabla^2\vec{v}-\nabla p=-\sigma\vec{g},\quad \mu\text{— коэффициент вязкости},\\
&\nabla\cdot\vec{v}=0;\\
&(v_3=\tau_{31}=\tau_{32}=0)_{x_3=0},
\end{aligned}\tag{1}$$

с дополнительным условием определения возмущения свободной поверхности — $(\tau_{33})_{x_3=0}=-\rho^0|\vec{g}|h$ ($\vec{v}$ и p непрерывны всюду в полупространстве).

Эволюционная задача состоит в отыскании движения границ $S_k(\vec{x},t)$ из уравнений

$$\frac{\partial S_k}{\partial t}+\vec{v}\cdot\nabla S_k=0,\tag{2}$$

с некоторыми начальными условиями $S_k(\vec{x},t_0)$, $\vec{v}(\vec{x},t_0)=0$.

Для расчета эволюции течения при заданном из (2) $S_k(x)$ и соответствующему возмущению плотности $\sigma(\vec{x})$ решается задача (1), после чего, при полученном $\vec{v}(\vec{x})$, по малому промежутку времени интегрируются (2).

Уравнения (2) легко решается численно. Основные вычислительные трудности при расчете ползущих течений исследуемого типа, связаны с квазистационарной задачей (1). Ее решение удалось получить аналитически в виде функции Грина [4], так что расчет ползущего течения на каждый момент времени сводится к вычислению интегралов свертки:

$$v_i(\vec{x})=g\iiint\sigma(\vec{\xi})V_i(\vec{x},\vec{\xi})d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3,$$

$$p(\vec{x})=g\iiint\sigma(\vec{\xi})P(\vec{x},\vec{\xi})d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3,$$

где $V_i(\vec{x},\vec{\xi})$, $P(\vec{x},\vec{\xi})$ — соответствующие функции Грина.

Вычисление интеграла свертки имеет большие вычислительные преимущества, по сравнению с решением системы линейных алгебраических уравнений, возникающей при реализации разностных методов [5]. Наличие точного решения краевой задачи в виде функции Грина позволяет применить теорему о свертке, с помощью процедуры быстрого преобразования Фурье [6], что и было реализовано в программе CoreModuleFFT, разработанной в лаборатории математического моделирования природных нефтегазовых систем ИНГГ СО РАН, использованной в настоящей работе.

Применение простой реологической модели для моделирования соляного тектогенеза в теоретическом плане оправдано следующими соображениями. Уравнение ньютоновской жидкости является первым приближением реологического уравнения состояния, для описания необратимого деформирования практически любого материала [7]. Это приближение адекватно для скоростей деформации, меньших некоторой критической для данного материала, которая для горных пород оценивается величиной порядка 10^{-14}с^{-1}. Ньютоновская вязкость при этом трактуется, как “естественная вязкость” данного материала, определяемая

как верхняя асимптота его вискозиметрических вязкостей. Имеющиеся данные [8] показывают: 1) скорость деформации в процессах роста соляных куполов не превосходит указанного предела; 2) несмотря на очень большую вариацию оценок эффективной вязкости осадочных пород, особенно соли, в зависимости от способа оценки и скорости деформации, верхняя асимптотика для всех близка — порядка 10^{20} Па*с; 3) характерная грибообразная форма зрелых соляных диапиров безусловно свидетельствует о близости вязкостей соли и вмещающих пород в данном процессе. Таким образом, представление среды однородно-вязкой ньютоновской жидкостью для рассматриваемого класса задач является вполне корректным. Во всяком случае, решения, полученные в рамках этого приближения, будут верным первым приближением, независимо от поведения среды в более быстрых процессах.

В практическом отношении, адекватность предлагаемой модели демонстрируется примерами расчетов, приведенными ниже.

2 Результаты

Ниже, (рис. 1–3) представлен результат подбора эволюции, сформировавшей структуру соляной тектоники на одном из участков Александровского свода в северном Прикаспии. В данном случае специально не учитывалась пространственная неоднородность осадконакопления и наложенных региональных тектонических движений (хотя использованные программы предоставляют такие возможности) — исследовалось только влияние на структуру района соляного тектогенеза в чистом виде. Для подбора эволюции пришлось рассчитать несколько десятков ее вариантов. На рис. 1 приводится несколько стадий подобранной эволюции структуры, соответствующие указанным моментам ее геологической истории.

На рис. 2 приводится итоговое, соответствующее актуальному, состояние модели, в сопоставлении с моделью этой же поверхности (кровля кунгурской соленосной толщи), построенной в результате интерпретации данных сейсморазведки.

На рис. 3. демонстрируется сопоставление разреза итогового состояния рассчитанной модели с сейсмическим разрезом и его существующей геологической интерпретацией.

Сопоставление рассчитанной поверхности с данными интерпретации сейсморазведки показывает следующее.

1. Согласно расчетам, заметные деформации начинаются в мелу, наиболее существенный их рост происходит в позднем палеогене, продолжаясь в неогене и квартере, что согласуется с геологическими данными.

2. Общая конфигурация структур в плане совпадает.

3. Амплитуды структур (как куполов, так и мульд) также, практически совпадают.

4. Рассчитанные структуры, в отличие от приведенной интерпретации, имеют грибовидную форму, что позволяет предположить более высокий поисковый потенциал зон примыкания под шляпками диапиров (анализ закономерностей динамики развития плотностной неустойчивости и сопоставление с данными по другим регионам развития соляного диапиризма показывает, что именно грибообразную форму и должны иметь зрелые диапиры при данных соотношениях толщины неустойчивого слоя и глубины его залегания).

5. В отношении структуры подсолевого комплекса, расчеты предсказывают глубокое засасывание верхних подсолевых отложений в диапир, создающее очень благоприятные условия для накопления УВ, и развитие в нижележащих отложениях характерной складчатости — инверсионной, по отношению к надсолевому разрезу (под диапирами формируются синклинали, а под мульдами — антиклинали), что также стоит учитывать при планировании поисково-разведочных работ (вопрос о механизме развития в подсолевых слоях инверсионной складчатости, регулярно обнаруживаемой детальными работами в последнее время, специально рассмотрен в работе [9]).

Таким образом, рассчитанная модель согласуется с интерпретацией сейсморазведки там, где последняя дает надежные результаты (вершины куполов и днища мульд), и дает новую информацию на крутопадающих крыльях соляных структур и под солью, где интерпретация данных сейсморазведки затруднена и неоднозначна.

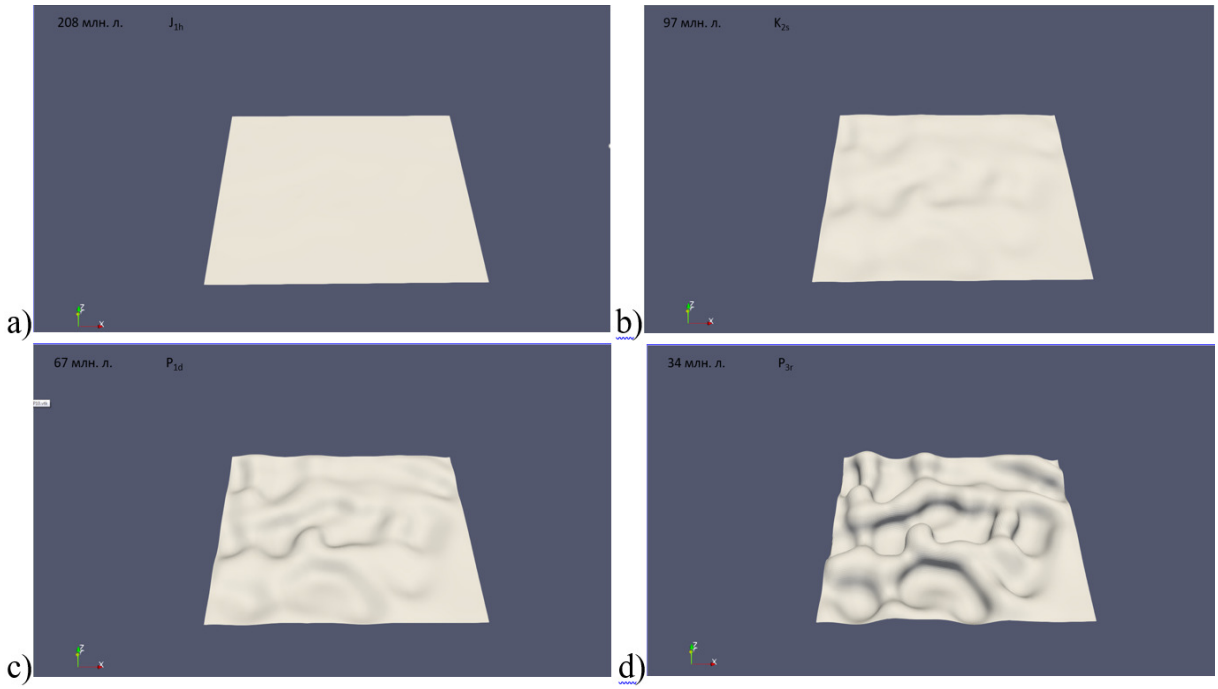


Рис. 1: Рассчитанные стадии эволюции кровли кунгурской соленосной толщи на моменты времени: a) 208 млн лет назад; b) 97 млн лет назад; c) 67 млн лет назад; d) 34 млн лет назад.

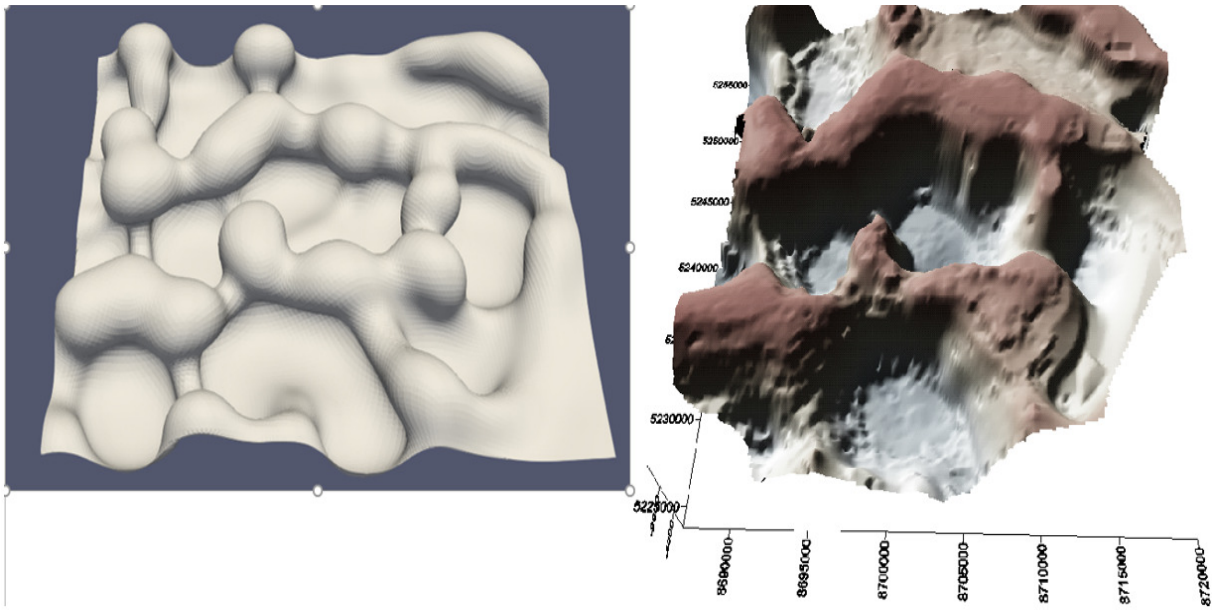


Рис. 2: Итоговое состояние поверхности соли в рассчитанной модели (слева) и модель этой поверхности, построенная по данным сейсморазведки (справа).

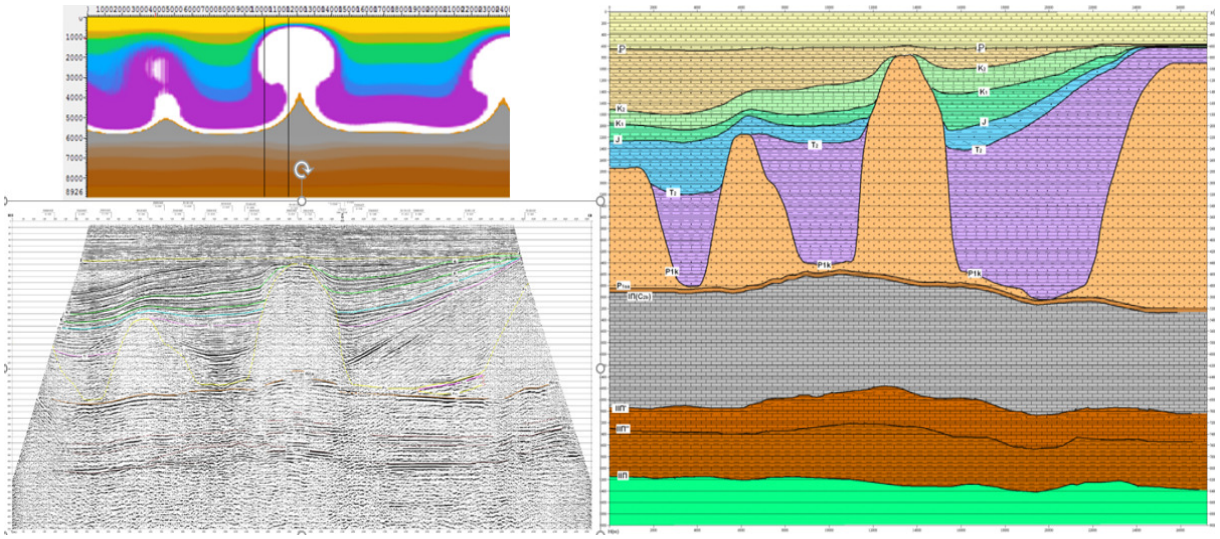


Рис. 3: Разрез рассчитанной модели (слева вверху), сейсмический разрез (слева внизу) и его существующая геологическая интерпретация (справа).

Обсуждение результатов

Понятно, что можно рассчитывать волновое поле от итоговых состояний различных вариантов модели и сопоставлять его с сейсмическими данными непосредственно, потребовав минимизации невязки в той или иной норме. Тогда, расчет модели формирования структуры можно рассматривать, как регуляризатор, при решении обратной задачи сейсморазведки. Такой регуляризатор, в силу его естественности, представляется весьма удачным — он требует, чтобы решение не противоречило механизму формирования исследуемой структуры. Можно считать, что использование модели первого приближения (однородно-вязкая ньютоновская жидкость), в этом случае, будет соответствовать поиску глобального минимума функционала невязок, настройке на отыскание устойчивого решения обратной задачи, которое, при необходимости, можно будет потом из тех, или иных соображений уточнить.

В плане достоверности реконструкции истории формирования и, соответственно, актуального состояния солянокупольных структур указанным образом, важным представляется еще одно соображение. При том, что рассматривается развитие неустойчивости, сам процесс является довольно сильно детерминированным. С точностью до внешних возмущающих воздействий, он определяется макропараметрами системы, прежде всего — соотношением толщин и плотностей неустойчивого, перекрывающего и подстилающего слоев. Случайным является, практически, лишь конкретная локализация и характер начальных возмущений, которые вместе с внешними возмущениями (региональные движения и изменения литологии) являются объектом подбора, при расчете различных вариантов эволюции.

По мнению авторов, предложенный метод может с успехом использоваться для уточнения геологической структуры объектов соляной тектоники в тех, наиболее интересных с поисковой точки зрения зонах, которые плохо определяются обычной сейсморазведкой.

Список литературы

[1] Наймарк Б.М. Существование и единственность решения задачи Рэлея–Тейлора // Вычислительная сейсмология. 1986. Вып. 18. С. 35–45.

[2] Исмаил-Заде А.Т., Наймарк Б.М., Тэлбот К., Реконструкция истории движения стратифицированной среды: обратная задача гравитационной неустойчивости. // Проблемы динамики и сейсмичности Земли. Вычисл. Сейсмология, 2000, М., ГЕОС, вып.31, С. 53–61.

[3] Ismail-Zadeh A.T., Tsepelev I.A., Talbot C.J., Korotkii A.I. Three-dimensional forward and backward modelling of diapirism: Numerical approach and its applicability to the evolution of salt structures in the Pricaspian basin // Tectonophysics, 2004, V. 387, P. 81–103.

[4] Лунёв Б.В. Изостазия как динамическое равновесие вязкой жидкости. // Доклады АН СССР, 1986, Т. 290, № 1, С.72–76.

[5] Abramov T, Lavrentiev M, Lunev B. Implementation and Testing of the Fast Numerical Algorithm for Simulation of 3D Gravity Creeping Flow of Incompressible Newtonian Fluid // Proceedings of the 2^{nd} International Conference on Applications in Information Technology. Aizu-Wakamatsu, Japan, October 6–8, 2016. The University of Aizu Press, 2016. P. 121–124

[6] Абрамов Т.В. Быстрое численное решение краевых задач с известной функцией Грина через циклическую свертку // Вычислительные технологии. 2016. Т. 21, № 2. С. 3–11.

[7] Астарита Дж., Марруччи Дж. Основы гидромеханики неньютоновских жидкостей. М., Мир, 1978, 309с.

[8] Jackson M.P.A., Talbot C.J. External shapes, strain rates and dynamics of salt structures.// Geological Society of America Bulletin, 1986, V.97, P. 305–323.

[9] Лунёв Б.В., Лапковский В.В. Механизм развития инверсионной складчатости в подсолевом комплексе. // Физика Земли, 2014, № 1, С. 59–65.

Лунёв Борис Валентинович — к.ф.-м.н., с.н.с. Института нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН;
e-mail: bobvalmail@mail.ru;
Лапковский Владимир Валентинович — к.г.-м.н., зав. лабораторией Института нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН;
e-mail: lapk@ngs.ru;
Канаков Михаил Сергеевич — н.с. Института нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН;
e-mail: KanakovMS@ipgg.sbras.ru;
Застрожнов Андрей Станиславович — к.г.-м.н., зав. лабораторией Всероссийского научно-исследовательского геологического института;
e-mail: bobvalmail@mail.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

СЕТЕВЫЕ МОДЕЛИ СТРАТЕГИЧЕСКОГО ПЛАНИРОВАНИЯ ПРОЕКТОВ

О. А. Ляхов

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.876:3

Стратегическое планирование включает выбор проектов для выполнения в перспективных планах. На больших интервалах времени ресурсно-календарные ограничения в математических моделях отображаются укрупненно, что порождает систематические ошибки в планировании. Здесь предлагается постановка задачи выбора проектов для реализации с детализированным учетом ограниченности во времени нескладируемых ресурсов. Рассмотрены сетевые модели управления и алгоритмы построения долгосрочных планов для реальных производственных условий.

Ключевые слова: сетевые модели проектов, стратегический план, расписание работ.

Введение

Стратегическое планирование проектов включает выбор из предварительного перечня таких заказов, которые обеспечивают наилучшие показатели деятельности на длительный период. При этом учитываются ограничения по ресурсам для больших интервалов времени и прогнозы экономических показателей деятельности предприятий [1, 2]. Отбор проектов связан с оценкой эффективности при построении долгосрочных планов, здесь ресурсные ограничения учитываются укрупненно на больших интервалах времени [3]. Затем решается задача календарного планирования большой размерности (см., например, [4]), в которой детализировано отображаются ресурсно-временные условия. Процедуры согласования стратегических и тактических планов выявляют систематические ошибки в планировании, связанные с укрупненным учетом ресурсов в долгосрочном плане [5].

Рассматривается задача выбора проектов и построения календарных планов. Постановка задачи отбора проектов для реализации с детализированным учетом ограниченности во времени нескладируемых ресурсов выполнена на базе моделей сетевого планирования (нескладируемыми называются ресурсы, которые теряются при их неиспользовании). Предложены модели и алгоритмы построения долгосрочных планов для реальных производственных условий.

1 Обозначения

$RESSP$ — список нескладируемых ресурсов.

Постоянные величины.

R_{kt} — имеющееся количество k-го нескладируемого ресурса (в единицах времени) в интервале времени $t, t = \overline{1, t_{\text{гор}}}$;

V_{kt} — требуемое количество k-го нескладируемого ресурса для выполнения календарного плана в t-й временной интервал, $k = \overline{1, R},\ t = \overline{1, t_{\text{гор}}}$;

OH_l — признак обязательной номенклатуры.

Перечень значений признака обязательной номенклатуры:

$OH_l = 0$ — заказ необязательно должен быть завершен в плановом периоде.

$OH_l = 1$ — выполнение заказа обязательно должно быть завершено в плановом периоде (это более легкое требование по отношению к директивным срокам выполнения заказов). Это означает, что дата выпуска заказа должна быть меньше t_ω (т.е., окончания планового периода). В случае скользящего планового периода после очередного расчета необходимо утверждать даты таких заказов. Таким образом, в следующем расчете

заказ уже не будет обязательной номенклатурой, он будет иметь более строгое условие - директивную дату выпуска (т.е., точную плановую дату выпуска).
D_{1l}, D_{2l} — директивные даты начала и окончания работ по заказу, необязательные входные параметры; отсутствие директивных дат соответствует нулевому значению параметра.

Данные об операциях заказов:
$G_l = (E_l, M_l)$ — сетевая модель, описывающая процесс изготовления l-го заказа (ориентированный без контуров граф, $l = \overline{1, L}, L$ — количество заказов в портфеле заказов);
M_l — множество дуг (операций, работ) l-го заказа;
E_l — множество вершин (событий) l-го заказа;
$(i_l, j_l) \in M_l$ — операция l-го заказа;
$i_l, j_l \in E_l$ — начальная и конечная вершины операции;
$\Gamma^{-1}(i) = \{j|(j,i) \in M, j \in E\}$ — множество событий, непосредственно предшествующих событию $i \in E$;
$\Gamma^{+1}(i) = \{j|(i,j) \in M, j \in E\}$ — множество событий, непосредственно следующих за событием $i \in E$;
$t(i_l, j_l)$ — продолжительность операции;
$\omega_l \in E_l$ — выходные события сетевых моделей заказов: $\Gamma^{+1}(\omega_l) = \emptyset$;
$\alpha_l \in E_l$ — входные события сетевых моделей заказов: $\Gamma^{-1}(\alpha_l) = \emptyset$;
$RES(i_l, j_l)$ — список нескладируемых ресурсов, необходимых для выполнения операции $(i_l, j_l) \in M_l$;
$V_k(i_l, j_l)$ — нормативно необходимый объем k-го нескладируемого ресурса для выполнения операции $(i_l, j_l) \in M_l, k \in RES(i_l, j_l)$;
$S_k(i_l, j_l)$ — объем k-го ресурса, потребляемый операцией (i_l, j_l) в одном интервале времени (интенсивность), $k = \overline{1, R}, (i_l, j_l) \in M_l, k \in RES(i_l, j_l)$.

Интенсивность — в этой задаче это постоянная расчетная (нормативная) величина для каждой операции, предназначенная для измерения расхода ресурса, которая показывает, сколько единиц времени данного ресурса потребляет данная операция в каждую (одну) единицу времени. Входными параметрами для расчета интенсивности являются $V_k(i_l, j_l)$ и $t(i_l, j_l)$. Они однозначно определяют интенсивность для всех операций, потребляющих ресурсы: $S_k(i_l, j_l) = V_k(i_l, j_l)/t(i_l, j_l)$; $S_k(i_l, j_l) > 0$ для $k \in RES(i_l, j_l)$ и $k \in RESSP$; $S_k(i_l, j_l) = 0$ для $k \notin RESSP$. $DOK_{\text{пл}}(i_l, j_l)$ соответственно даты планового (расчетного) начала и окончания операции (i_l, j_l).

Данные о плановом периоде и горизонте планирования:
$T = [t_\alpha, t_\omega]$ — плановый период;
t_α — начало планового периода;
t_ω — окончание планового периода;
$T_{\text{гор}} = [t_\alpha, t_{\text{гор}}]$ — горизонт планирования;
$t_{\text{гор}}$ — конец горизонта планирования;
$t_{\text{гор}} > t_\omega$.

Переменные величины.
$t_p(i_l)$ — раннее время наступления события $i_l \in E_l$ с учетом:
для задачи аналитических расчетов — только временных ограничений типа PERT (выполнение работы может быть начато после завершения всех предшествующих ей работ);
для задачи построения объемно-календарного плана — топологии и ограничений по ресурсам;
Δ_{kt} — переменная, характеризующая неравномерность потребления k-го нескладируемого ресурса в t-й интервал времени, $k = \overline{1, R}, t = \overline{1, t_\omega}$. $\Delta_{kt} = R_{kt} - V_{kt}$.

2 Постановка задачи

Для составления объемно-календарного плана, для включения заказов обязательной номенклатуры используется период $T = [t_\alpha, t_\omega]$. Для прогноза по заказам с длительным циклом изготовления, учета незавершенного производства, прогнозирования производственных показателей на перспективу, аналитических расчетов возможности выполнения отдаленных во времени заказов используется горизонт планирования период $T_{\text{гор}} = [t_\alpha, t_{\text{гор}}]$.

Задача заключается в определении времен начала и окончания работ заказов, при выполнении ограничений по ресурсам во времени, при соблюдении сроков выполнения заказов. В качестве критерия могут быть выбраны различные показатели эффективности деятельности предприятия. Здесь целевая функция — минимизация отклонений сроков выполнения заказов от директивных дат.

Модель задачи включает условия (1—7).

$$DH_{\text{пл}}(i_l, j_l) \geq \max(t_\alpha, D_{1l}) \text{ для } (i_l, j_l) \in M_l,\ l = \overline{1, L},\ OH_l = 1 \tag{1}$$

Заказ обязательной номенклатуры не может быть включен в план раньше начала планового периода и раньше заданного директивного срока начала работ по заказу. Для заказов необязательной номенклатуры, или с неограниченными сроками завершения, в принципе не исключена ситуация не включения в план, т.е. $DH_{\text{пл}}(i_l, j_l)$ в этом случае не определено.

$$DH_{\text{пл}}(i_l, j_l) \geq DOK_{\text{пл}}(z_l, i_l), l = \overline{1, L}, z_l \in \Gamma^{-1}(i_l) \tag{2}$$

Условия (2) означают, что каждая операция должна начинаться после завершения всех предшествующих ей операций.

$$DOK_{\text{пл}}(i_l, \omega_l) \leq D_{2l} + \Delta_l, l = \overline{1, L}, (i_l, \omega_l) \in M_l \tag{3}$$

Условия (3) означают, что каждая операция должна заканчиваться не позднее директивной даты.

$$DOK_{\text{пл}}(i_l, \omega_l) \leq t_\omega + \Delta_l, l = \overline{1, L}, (i_l, \omega_l) \in M_l, OH_l = 1 \tag{4}$$

$\omega_l \in E_l$ — выходные события сетевых моделей заказов: $\Gamma^{+1}(\omega_l) = \emptyset$.

Условия (4) означают, что операция заканчивается не позднее окончания планового периода для заказов обязательной номенклатуры.

Переменная $\Delta_l > 0$ показывает превышение над директивной датой или окончанием планового периода в зависимости от типа заказа (обязательная номенклатура, директивная дата, другие).

$$DOK_{\text{пл}}(i_l, j_l) = DH_{\text{пл}}(i_l, j_l) + t(i_l, j_l), l = \overline{1, L}, (i_l, j_l) \in M_l \tag{5}$$

Условия (5) означают, что время окончания операции определяется по известным формулам сетевого планирования.

Ресурсные ограничения

$$V_{kt} = \sum_{(i_l, j_l) \in M_l, l = \overline{1, L}, DH_{\text{пл}}(i_l, j_l) \leq t \leq DOK_{\text{пл}}(i_l, j_l)} S_k(i_l, j_l) k \in RESSP, k = \overline{1, R}, t = \overline{1, t_{\text{гор}}} \tag{6}$$

Потребность в ресурсе рассчитывается по фронту работ в момент времени t (работ, выполняемых в момент времени t) и только для ресурсов из списка $RESSP$.

$$\Delta_{kt} = R_{kt} - V_{kt} \geq 0\ k = \overline{1, R}, t = \overline{1, t_{\text{гор}}}, k \in RESSP \tag{7}$$

Ограничения по ресурсам. В каждый промежуток времени должно строго соблюдаться не превышение потребности имеющемуся ресурсу.

Критерий задачи — минимизация отклонений от заранее заданных дат выпуска:

$$\sum_{l: D_{2l} > 0} (t_p(\omega_l) - P_{2l})^2 + \sum_{l: OH_l = 1} \max((t_p(\omega_l) - t_\omega), 0)^2 \to \min$$

3 Алгоритм поиска решения

Сетевые модели топологически упорядочиваются [6]. Затем строится допустимый план, в котором соблюдаются ограничения по нескладируемым ресурсам. Начальная информация списка вершин формируется следующим образом: для входных и выходных событий сетевых моделей фиксируются предельные сроки наступления, для внутренних вершин моделей в начале полагается $DH_{\text{пл}}(i_l, j_l) = 0$. Затем в этих полях рассчитывается раннее время наступления событий с учетом топологии и ограничений по ресурсам.

Далее выполняется процедуры второго этапа решения задачи, улучшающие исходное решение. Здесь использован многопоточный случайный поиск. Уменьшение критериальной функции достигается последовательными просмотрами с возвратами топологически упорядоченного списка дуг (операций) вперед и назад с использованием информации списка вершин (предварительное допустимое расписание, полученное на первом этапе).

Поиск решения организован в виде процессов многопоточного программирования: запускается сразу несколько независимых процедур случайного поиска, каждой из которых соответствует один поток. Алгоритм реализуется последовательными просмотрами вперед и назад массива дуг (операций) в каждом из потоков, выполняемых независимо. При просмотрах вперед реализуются попытки сдвига операций назад по оси времени с целью сократить значение критерия. При обратных проходах выполняются сдвиги вперед (так называемый алгоритм “метла”). Используются различные правила приоритетов, накапливается статистика удачных и неудачных правил. Возможна реализация случайного поиска с самообучением. Организация просмотра одинакова во всех процессах.

При просмотрах вперед выполняется сдвиг операций по оси времени назад (к началу планового периода), сохраняющий допустимость расписания по ресурсным условиям (не превышение имеющегося количества ресурсов).

Обработка одной дуги (операции) включает следующие вычисления:

- расчет допустимого интервала выполнения операции;
- определение новых значений начала и окончания операции на допустимом интервале с использованием эвристических правил случайного и детерминированного поиска;
- перенос операции влево по оси времени для увеличения допустимого интервала выполнения последующих операций списка;
- формирование новых значений матрицы потребностей в ресурсах в связи с включением операции в план, перерасчет критериальной функции и времени наступления конечного события операции.

В результате просмотра множества операций, заканчивающихся в вершине j_l, новое значение $DH_{\text{пл}}(i_l, j_l)$ не увеличивается. Таким образом, все операции с началом в вершине j_l имеют не меньший интервал для перестановки при проходе вперед по списку дуг, что увеличивает область выбора дат начала и окончания последующих операций.

Просмотр назад аналогичен просмотру вперед, выполняется с конца топологически упорядоченного списка дуг к началу. Также сдвигаются операции (к их допустимому окончанию) со случайным использованием правил приоритетов.

Выполнение проходов назад-вперед в многопоточном режиме является процедурой нижнего уровня.

Несколько таких унифицированных блоков с одинаковыми входными данными и однотипной организацией программного обеспечения запускаются родительским процессом.

Центральный процесс запускает потоки случайного поиска, которые реализуют функции решения задачи. Они выполняются независимо, взаимодействуют с породившим их процессом по данным и управлению (оценка скорости изменения целевой функции, настройка в процессе вычислений правил выбора способов построения расписания операций и т.д.).

По структуре входных и выходных данных все потоки идентичны. Блоки нижнего уровня отличаются процедурами случайного или детерминированного определения дат. Модульность блоков позволяет "собирать"(настраивать, добавлять, комбинировать) алгоритм из отдельных правил поиска без изменения остальных частей программного обеспечения.

Заключение

Для практического использования в управлении проектами разработана модель выбора заказов (стратегическое планирование), позволяющая оценивать распределение нескладируемых ресурсов во времени на основе сетевых методов (тактическое планирование). Предложены алгоритмы приближенного решения задачи. Система сетевых моделей предназначена для использования на реальных производственных объектах. Учет ресурсно-временных детализированных условий в сетевых моделях на стадии выбора заказов для выполнения позволяет строить более достоверны е объемно-календарные и оперативные планы проектов в сравнении с известными моделями планирования.

Разработанные приближенные алгоритмы расчета стратегических и тактических планов по управлению проектами позволяют обрабатывать объемы информации больших сетевых моделей (несколько сотен тысяч работ) на персональных вычислительных машинах, достаточные для практических целей.

Список литературы

[1] Данилин В. И. Операционное и финансовое планирование в корпорации (методы и модели). М.: Наука, 2006. 334 с.

[2] Плещинский А. С. Оптимизация межфирменных взаимодействий и внутрифирменных управленческих решений. М.: Наука, 2004. 254 с.

[3] Мауэргауз Ю. Е. «Продвинутое» планирование и расписания (AP&S) в производстве и цепочках поставок. М.: Экономика, 2012. 574 с.

[4] Борисовский П.А., Еремеев А.В. Построение расписаний многопродуктового производства с использованием целочисленного линейного программирования и эволюционных вычислений. — "Информационные технологии №6. Том 21. 2015, С. 412–421

[5] Ляхов О.А. Согласование в двухуровневых моделях управления сложными комплексами работ. — Новосибирск, 1998, — 26с. — (Препринт / РАН. Сиб. отд-ние. ИВМ и МГ, — 1114).

[6] Ляхов О.А. Алгоритмы расчета параметров сетевых моделей. — Новосибирск, 1986, — 21с. — (Препринт / РАН. Сиб. отд-ние. ВЦ; 662).

Ляхов Олег Алексеевич — к.э.н., науч. сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: loa@rav.sscc.ru
Дата поступления — 25 апреля 2017 г.

НЕЛИНЕЙНОЕ УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ С ОПЕРАТОРОМ ЛИЗЕГАНГА НА ОТРЕЗКЕ

Б. А. Марков

Южно–Уральский государственный университет, 454080, Челябинск

УДК 517.928

В настоящей работе рассматривается нелинейное уравнение «реакция-диффузия» с т.н. оператором Лизеганга, моделирующем химические реакции, в правой части на конечном отрезке. Решение задачи строится как разложение по собственным функциям смешанной задачи Штурма — Лиувилля для второй пространственной производной на отрезке. Решение может быть построено как решение бесконечной системы дифференциальных уравнений, а движение границы определится из отдельного соотношения.

Ключевые слова: нелинейное уравнение диффузии, решение с разрывом производной, задача Флорина на отрезке, бесконечная система дифференциальных уравнений.

Введение

В коллоидной химии широко распространено явление под названием «кольца Лизеганга» [1], открытое Лизегангом в 1897-ом году. Для описания колец Лизеганга школа [2] предложила ряд методов, однако в коллоидной химии из-за обилия химических веществ, превращающихся друг в друга (десятки тысяч химических реакций), их весьма затруднительно применить. В силу этого необходимо искать иные методы, позволяющие решать задачу, или же каким-то образом обосновать применение методов [2] в коллоидной химии.

С нашей точки зрения удобно пойти по первому пути: будем применять иные математические методы, отличные от методов школы [2]. Для этой цели мы воспользуемся следующим предположением. Пусть всё коллоидное вещество может быть разделено на собственно мицеллы геля и межмицеллярную жидкость. Межмицеллярную жидкость мы рассматривать не будем, полагая, что мицеллы просто берут из неё в нужном количестве все необходимые вещества или, наоборот, выбрасывают избыточные вещества в межмицеллярную жидкость. При этом веществ оказывается столько, сколько нужно и они всегда расположены там, где это требуется.

Само же поведение коллоида подчиним так называемому оператору Лизеганга, который обозначим как $L[u]$. Мы будем считать, что оператор Лизеганга внутренне присущ мицеллам геля. Обоснование нашего утверждения следует из большого количества экспериментальных данных. Также отметим, что такое предложение высказывал в 1950-ые годы Б. Дельмон, однако он не сформулировал краевой задачи [8].

Далее, для описания поведения мицелл коллоида воспользуемся обычным уравнением диффузии, к которому добавим оператор Лизеганга (уравнение «реакция-диффузия», где химические реакции моделирует оператор Лизеганга). И будем считать, что тем самым поведение мицелл в коллоиде задано полностью.

В настоящей работе рассматривается вариант решения уравнения нелинейной диффузии на отрезке, что, с точки зрения химических процессов, является более физико-химическим, чем аналогичная задача на полупрямой, так как подобные процессы обычно и происходят в ограниченной области. Для решения уравнения воспользуемся обычным способом — замена переменной с последующим разложением по решениям смешанной задачи Штурма — Лиувилля второй пространственной производной на отрезке, границы которого неподвижны.

1 Оператор Лизеганга

Для того, чтобы читателю не было надобности разыскивать предыдущие работы, кратко рассмотрим оператор Лизеганга и задачи, к которым он приводит. Для этого рассмотрим уравнение «реакция-диффузия»

с оператором Лизеганга в правой части

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\mathrm{div}(\mathrm{grad}u) + L[u], \tag{1}$$

где $\vec{r}$ — радиус-вектор, D — коэффициент диффузии, зависящий, вообще говоря, от времени, координат и решения уравнения $u(\vec{r},t)$, который мы для простоты примем равным 1, $u \equiv u(\vec{r},t)$ — искомая функция, по физико-химическому смыслу — концентрация коллоидного вещества, $\mathrm{div}(\mathrm{grad}u) \equiv \Delta u$ — оператор Лапласа, заданный в пространстве R^3.

Задачу (1) будем рассматривать на отрезке $x \in [0;1]$, диффузия постоянна и её коэффициент $D = 1$. С учётом этих предположений оператор Лапласа Δ для этого отрезка запишем просто как вторую производную по координате, $\Delta = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$. Дальше в данной работе слова «оператор Лапласа» будут пониматься в значении «вторая производная по координате», а сама задача (1) примет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + L[u], \tag{2}$$

Оператор Лизеганга $L[u]$ определим следующим образом.

Определение. Пусть u_{max} и u_{min} — два фиксированных числа. Оператором Лизеганга $L[u]$ назовём оператор, который функции $u(x,t)$ ставит в соответствие функцию $g(x,t) = L[u(x,t)]$. Область определения оператора $L[.]$ — непрерывные функции $u(x,t)$, $x \in R^1$, $t \geq 0$ такие, что $u_{min} \leq u(x,t) \leq u_{max}$.

1. $g(x,t) = +\alpha u(x,t)$, $\alpha > 0$ либо если функция $u(x,\tau) < u_{max}$ $\forall \tau < t$, либо если $\exists \overline{\tau} < t$, такое что $u(x,\overline{\tau}) = u_{min}$ и $u_{min} < u(x,t) < u_{max}$ $\forall \tau : \overline{\tau} < \tau < t$;

2. $g(x,t) = -\alpha u(x,t)$, $\alpha > 0$ если $\exists \overline{\tau} < t$, такое что $u(x,\overline{\tau}) = u_{max}$ и $u_{min} < u(x,\tau) < u_{max}$ $\forall \tau : \overline{\tau} < \tau < t$

(α невелико, обычно не более 0.1).

Под решением начальной задачи для уравнения (2) будем понимать функцию $u(x,t)$ из указанного класса, которая равна заданной функции $\phi(x)$ при $t = 0$, если выполнены дополнительные условия:

1) существует конечное число непрерывных кривых $s_k = \{(x,t) : x = \sigma_k(t), 0 \leq c_k \leq t \leq d_k\}$, при этом разные кривые могут иметь общие точки только на своих концах при $t = c_k$ или $t = d_k$;

2) функция $u(x,t)$ непрерывна всюду при $0 \leq t \leq T$ и удовлетворяет уравнению (1) всюду при $0 \leq t \leq T$ вне кривых s_k;

3) существуют односторонние производные $\dfrac{\partial u}{\partial x}$ на кривых s_k и значения оператора $L[u(x,t)]$ имеют разные знаки по разные стороны от кривой s_k при $c_k < t < d_k$.

Функцию $u(x,t)$ в областях, расположенных по разные стороны от кривой s_k, будем называть разными фазами исследуемого вещества.

В [3] с помощью асимптотических рядов исследовано поведение решения. Заметим, что производная $\dfrac{\partial u}{\partial x}$ на кривой s_k будет разрывна.

Таким образом, мы можем рассматривать задачу (2) как совокупность задач, каждая из которых представляет собой частный случай классической задачи Флорина на конечном отрезке, и существование такого решения (т.е. совокупности решений набора задач) следует, например, из работы [5]. Из условий, наложенных на начальную функцию, вытекает, что $u(x,t) > u_{min}$ при всех $x \geq \sigma(t)$, а при $x < \sigma(t)$ функция убывает и в некоторый момент функция $u(0,t)$ достигнет значения u_{min}. После этого процесс повторится, но уже «в другую сторону», для другого знака оператора Лизеганга.

2 Задача на одном из отрезков

Рассмотрим задачу Флорина на одном из отрезков в смысле [5]. Пусть этот отрезок $x \in [0;x_0(t)]$, где $x_0(t)$ — координата правого конца отрезка, соответствующего положительному знаку оператора Лизеганга $L[u(x,t)]$. В результате задача (2) с добавленными начальными и краевыми условиями примет вид:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}u + \alpha u, \quad u = u(x,t) \\ \dfrac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x=x_0(t)} = 0, \quad x \in (0; x_0(t)), \quad t \in (0;\infty) \\ u|_{t=0} = u_{min} + (u_{max} - u_{min})\sin(\pi x), \quad u|_{x=0} = u_{min}, \quad u|_{x=x_0(t)} = u_{max}, \quad x_0(0) = \dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{3}$$

Существование и единственность решения (3) в смысле [5] гарантируется работой [5], мы же попытаемся построить решение этой задачи. Для этого выполним замену переменной [7]: $\xi = \dfrac{x}{x_0(t)}$, в результате получим из задачи (3)

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{x_0'(t)}{x_0(t)}\xi\dfrac{\partial u}{\partial \xi} + \dfrac{1}{x_0^2(t)}\dfrac{\partial^2}{\partial \xi^2}u + \alpha u, \quad u = u(\xi,t) \\ \dfrac{\partial u}{\partial \xi}\Big|_{\xi=1} = 0, \quad \xi \in (0;1), \quad t \in (0;\infty) \\ u|_{t=0} = u_{min} + (u_{max} - u_{min})\sin(\pi\xi/2), \quad u|_{\xi=0} = u_{min}, \quad u|_{\xi=1} = u_{max}, \quad x_0(0) = \dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{4}$$

где $x_0'(t) \equiv \dfrac{dx_0(t)}{dt}$.

В (4) сделаем замену: $y(t) = x_0^2(t)$.

Решение (4) будем искать в виде ряда по собственным функциям смешанной (краевые условия первого и второго рода) задачи Штурма — Лиувилля для второй производной на отрезке $\xi \in [0;1]$:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2 z}{d\xi^2} + \lambda^2 z = 0, \quad \xi \in (0;1), \\ z|_{\xi=0} = 0, \quad \dfrac{dz}{d\xi}\Big|_{\xi=1} = 0, \end{cases}$$

то есть в виде:

$$u(\xi,t) = u_{min} + \sum_{j=0}^{\infty} v_j(t)\sin(\lambda_j \xi),$$

где $\lambda_j = \dfrac{\pi}{2}(2j+1)$. В результате замен и преобразований получаем:

$$\begin{cases} y\dfrac{dv_j}{dt} = \dfrac{1}{2}y' \sum\limits_{k=0}^{\infty} \beta_{jk} v_k - \lambda_j^2 v_j + \alpha y v_j + \alpha y \gamma_j, \\ v_j|_{t=0} = p_j, \quad p_j = (u_{max} - u_{min})\delta_{j1}, \quad \gamma_j = 2u_{min}\int\limits_0^1 \sin(\lambda_j\xi)d\xi \\ \sum\limits_{j=0}^{\infty}(-1)^j v_j = (u_{max} - u_{min}) \equiv u_0, \quad \beta_{jk} = 2\lambda_k \int\limits_0^1 \sin(\lambda_j\xi)\cos(\lambda_k\xi)\xi d\xi, \quad y(0) = \dfrac{1}{4} \end{cases} \tag{5}$$

(здесь и далее штрих будет означать производную по времени, δ_{ij} — символ Кронекера).

Таким образом, необходимо решить задачу (5). Отметим, что система $\{\sin(\lambda_j\xi)\}_{j=0}^{\infty}$ полна и ортогональна на отрезке $\xi \in [0;1]$ [6]. Таким образом, если удастся построить решение (5), то мы сможем решить и (2). Более того, по построению (5) должна иметь единственное решение (далее мы проведём доказательство).

3 Свойства функций v_j

Докажем, что функции v_j в (5) определены единственным образом и их можно найти с помощью итерационного процесса.

Из [5] известно, что y и $\dfrac{dy(t)}{dt} \equiv y'(t)$ существуют и единственны. По построению y ограничена: $0 < \max\limits_{t\in(0;+\infty)} |y| \le 0.25$, y' — существует и также ограничена.

Докажем сходимость ряда $\sum\limits_{k=0}^{\infty}\beta_{jk}v_k$. Для этого построим итерационный процесс, считая, что y уже известна, и покажем, что процесс сходится.

Итерационный процесс будем строить как решение дифференциального уравнения для всех $j > J$, таких, что $\lambda_J \geq \max\limits_{t\in(0;\infty)}\left|B_j\dfrac{A}{y}\dfrac{dy}{dt}\right| \equiv Q_0$, где A — постоянная, обусловленная функцией в начальном условии (в нашем случае она не превышает u_{max}), B_j — величина, зависящая от индекса j, определяемая суммированием ряда. Будем считать, что решения всех дифференциальных уравнений для $j \leq J$ известны.

Пусть на итерации номер m построено решение $v_j^{(m)}$. Итерационный процесс при $j \geq J$ имеет вид:

$$\begin{cases} \dfrac{dv_j^{(m+1)}}{dt} = p_j\exp(-\lambda_j^2 t) + \int\limits_0^t\left(\dfrac{y'(\tau)}{2y(\tau)}\sum\limits_{k=0}^{\infty}\beta_{jk}v_k^{(m)}(\tau) + \alpha v_j^{(m)}(\tau) + \alpha\gamma_j\right)\exp\left(-\lambda_j^2\int\limits_\tau^t\dfrac{ds}{y(s)}\right)d\tau, \quad j \geq J, \\ v_j^{(0)} = p_j\exp(-\lambda_j^2 t) \end{cases} \tag{6}$$

Несложно видеть, что итерационный процесс (6) будет сходиться для всех $j > J$. Действительно, ряд $\sum\limits_{k=0}^{\infty}\beta_{jk}v_k^{(0)}$ состоит всего из одного слагаемого и допускает равномерную оценку по j и t: $|\sum\limits_{k=0}^{\infty}\beta_{jk}v_k^{(0)}| < K$, $K = const$. Учитывая вид интегрального оператора, заметим, что мы получим оценку вида $\max\limits_{t\in(0;+\infty)}|v_j^{(1)} - v_j^{(0)}| \leq \dfrac{Q_0}{\lambda_j^2} \leq 1$, откуда $v_j^{(1)} \leq v_j^{(0)} + \dfrac{Q_0}{\lambda_j^2}$. Несложно видеть, что все последующие шаги итерационного процесса также будут приводить к сходящимся рядам.

Теперь пусть первые J функций $v_j^{(m+1)}$ найдены как решения соответствующих дифференциальных уравнений (ряды в этих уравнениях будут сходящимися) по известным $v_j^{(m)}$, полученным на предыдущей итерации с помощью, например, численного метода (заметим, что система таких уравнений конечна). Будет справедлива оценка $\max\limits_{t\in(0;+\infty)}|v_j^{(m+1)} - v_j^{(m)}| \leq \dfrac{Q_0}{\lambda_j^2}\max\limits_{t\in(0;+\infty),k}|v_k^{(m)} - v_k^{(m-1)}|$, где $B_j = \sum\limits_{k=0}^{\infty}\dfrac{\beta_{kj}}{\lambda_k^2}$. Несложно видеть, что коэффициент $|B_j| \leq \dfrac{S}{\lambda_j}$, где $S = const > 0$. (Напомним, что Q_0 содержит B_j). Таким образом, итерационный процесс сходится, решение системы (5) единственно, и процесс сходится к точному решению.

4 Вывод уравнения для y

Рассмотрим сначала систему (5). Разделим дифференциальное уравнение на $\lambda_j^2 - \alpha y$, и получим в результате выражение:

$$\begin{cases} \dfrac{y}{\lambda_j^2 - \alpha y}\dfrac{dv_j}{dt} = \dfrac{1}{2}y'\sum\limits_{k=0}^{\infty}\dfrac{v_k\beta_{jk}}{\lambda_j^2 - \alpha y} - v_j + \alpha y\dfrac{\gamma_j}{\lambda_j^2 - \alpha y}, \\ v_j|_{t=0} = p_j, \quad y(0) = \dfrac{1}{4}, \quad \sum\limits_{j=0}^{\infty}(-1)^j v_j = u_0 \end{cases} \tag{7}$$

Построим уравнение для y. Для этого в (7) дифференциальное уравнение умножим на $(-1)^j$ и просуммируем по переменной j.

$$\begin{cases} y\sum\limits_{j=0}^{\infty}\dfrac{(-1)^j}{\lambda_j^2 - \alpha y}\dfrac{dv_j}{dt} = \dfrac{1}{2}y'\sum\limits_{j=0}^{\infty}\sum\limits_{k=0}^{\infty}\dfrac{v_k(-1)^j\beta_{jk}}{\lambda_j^2 - \alpha y} - \sum\limits_{j=0}^{\infty}(-1)^j v_j + \alpha y\sum\limits_{j=0}^{\infty}\dfrac{(-1)^j\gamma_j}{\lambda_j^2 - \alpha y}, \\ v_j|_{t=0} = p_j, \quad y(0) = \dfrac{1}{4}, \quad \sum\limits_{j=0}^{\infty}(-1)^j v_j = u_0 \end{cases} \tag{8}$$

Вычислим суммы, присутствующие в (8). Отметим, что $\sum\limits_{j=0}^{\infty}(-1)^j v_j = u_0$. Введём сумму $U_2 = \sum\limits_{j=0}^{\infty}\dfrac{(-1)^j v_j}{\lambda_j^2 - \alpha y}$ и $U_4 = \sum\limits_{j=0}^{\infty}\dfrac{(-1)^j v_j}{(\lambda_j^2 - \alpha y)^2}$. Несложно видеть, что, раз v_j равномерно ограничены, а функция y и параметр α невелики, то ряды U_2 и U_4 сходятся равномерно.

Учитывая $\beta_{jk} = 2\lambda_k \int_0^1 \sin(\lambda_j\xi)\xi\cos(\lambda_k\xi)d\xi$, переставляя суммы (ряд сходится абсолютно), получим [9] для двойной суммы $\sum\limits_{j=0}^{\infty}\sum\limits_{k=0}^{\infty}\dfrac{v_k(-1)^j\beta_{jk}}{\lambda_j^2-\alpha y}$:

$$\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{j=0}^{\infty}\frac{v_k(-1)^j\beta_{jk}}{\lambda_j^2-\alpha y} = u_0\frac{\mathrm{tg}(\sqrt{\alpha y})}{\sqrt{\alpha y}} + \{\sqrt{\alpha y}\mathrm{tg}(\sqrt{\alpha y})-2\}\,U_2 - 2\alpha y U_4.$$

Учитывая выражение для γ_j, получим для суммы $\alpha y\sum\limits_{j=0}^{\infty}\dfrac{(-1)^j\gamma_j}{\lambda_j^2-\alpha y}$ соотношение [9]:

$$\alpha y\sum_{j=0}^{\infty}\frac{2(-1)^j\gamma_j}{\pi\lambda_j^2-\alpha y} = \frac{u_{min}}{\cos(\sqrt{\alpha y})}(1-\cos(\sqrt{\alpha y})).$$

Таким образом, задача (8) примет вид:

$$\begin{cases} y\sum\limits_{j=0}^{\infty}\dfrac{(-1)^j}{\lambda_j^2-\alpha y}\dfrac{dv_j}{dt} = \dfrac{1}{2}y'\Big(u_0\dfrac{\mathrm{tg}(\sqrt{\alpha y})}{\sqrt{\alpha y}} + \{\sqrt{\alpha y}\mathrm{tg}(\sqrt{\alpha y})-2\}U_2 \quad -2\alpha y U_4\Big) - u_0 + \\ \qquad\qquad + \dfrac{u_{min}}{\cos(\sqrt{\alpha y})}(1-\cos(\sqrt{\alpha y})), \\ v_j|_{t=0} = p_j, \quad y(0) = \dfrac{1}{4}, \quad \sum\limits_{j=0}^{\infty}(-1)^j v_j = u_0 \end{cases}$$

Теперь отметим, что $\sum\limits_{j=0}^{\infty}\dfrac{(-1)^j}{\lambda_j^2-\alpha y}\dfrac{dv_j}{dt} = \dfrac{dU_2}{dt} - \alpha y' U_4$ и окончательно получим уравнение для $y(t)$:

$$\begin{cases} yU_2' = \dfrac{1}{2}y'\Big(u_0\dfrac{\mathrm{tg}(\sqrt{\alpha y})}{\sqrt{\alpha y}} + \big\{\sqrt{\alpha y}\mathrm{tg}(\sqrt{\alpha y})-2\big\}\,U_2\Big) - u_0 + \dfrac{u_{min}}{\cos(\sqrt{\alpha y})}(1-\cos(\sqrt{\alpha y})), \\ v_j|_{t=0} = p_j, \quad y(0) = \dfrac{1}{4}, \quad \sum\limits_{j=0}^{\infty}(-1)^j v_j = u_0 \end{cases} \tag{9}$$

Уравнение (9) включим в итерационный процесс (6), рассматривая $y^{(m+1)}$ как решение дифференциального уравнения при известных $U_2^{(m)}$ и $U_4^{(m)}$, т.е. считая, что $v_j^{(m)}$ найдены на предыдущих шагах итерационного процесса, и из них можно построить равномерно сходящиеся ряды $U_2^{(m)}$ и $U_4^{(m)}$.

Отметим, что при таком подходе рассуждения, сделанные выше для итерационного процесса с истинным значением y, остаются в силе. В силу единственности решения обыкновенного дифференциального уравнения (9) алгоритм с добавленным уравнением (9) будет сходиться к точному решению всей задачи на заданном отрезке.

Таким образом, шаг итерационного метода для решения задачи на отрезке имеет вид (одна итерация):

1. Задачи для v_j, $j \le J$ решаются обычным численным методом (эта система жёсткая) по известным значениям с предыдущего шага итерационного процесса.
2. Задачи для v_j, $j > J$ решаются итерациями, процесс сходится.
3. Задача для y — обычное дифференциальное уравнение, которое решается численно.

Фактически, учитывая очень быструю сходимость при достаточно больших j, мы получим конечную (и не очень большую) систему обыкновенных дифференциальных уравнений.

Заключение

Таким образом, с помощью разложения исходной задачи в ряд построен итерационный процесс для решения задачи (2). Решение задачи требует применения численного метода и итераций.

По известному решению задачи о движении границы может быть найдено и полное решение задачи как решение неограниченной системы уравнений. Численные методы для сходных задач приводятся в [4].

Для других отрезков, на которые задача (2) разобьёт область решения, алгоритм может быть построен сходным образом (необходимо только сдвинуть одну из известных границ в нуль, после чего рассуждения можно воспроизвести почти полностью).

Список литературы

[1] Liesegang R. Silberchromatringe und –spiralen // Z. Physik. Chemie. 1914. V. 88 P. 1–12.

[2] Лурье А. А. Теория колец Лизеганга // Коллоидный журнал. 1966. Т. 28. С. 534–537.

[3] Ильин А. М., Марков Б. А. Уравнение нелинейной диффузии и кольца Лизеганга // ДАН РФ, серия “Математика”, 2011. Т. 2. С. 164–167.

[4] Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. // Москва: Editorial URSS. 2003. — 427 с.

[5] Бижанова Г.И. О классической разрешимости одномерных задач со свободной границей Флорина, Маскета-Веригина и Стефана // Краевые задачи математической физики и смежные вопросы теории функций. 28, Зап. научн. сем. ПОМИ, 243, ПОМИ, СПб. 1997. Т. 243. С. 30–60.

[6] Свешников А. Г., Боголюбов А. Н., Кравцов В. В. Лекции по математической физике // Изд-во МГУ. 1993. — 352 с.

[7] Карташов Е. М. Аналитические методы теплопроводности в твёрдых телах // М., 2001. — 550 с.

[8] Дельмон Б. Кинетика гетерогенных реакций // Изд-во Мир. 1972. — 560 с.

[9] Прудников А.П, Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Элементарные функции. // Т 1. Изд-во ФизМатЛит. 2003. — 688 с.

Борис Анатольевич Марков — к.ф.-м.н., доцент кафедры вычислительной математики и эффективных вычислений Южно-Уральского государственного университета;
e-mail: smpx1969@mail.ru.

Дата поступления — 10 мая 2017 г.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КОНФОРМНЫХ И НЕКОНФОРМНЫХ КОНЕЧНОЭЛЕМЕНТНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕСЖИМАЕМЫХ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ — СТОКСА

С. И. Марков[1,2], Н. Б. Иткина[1]

[1] *Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск*

[2] *Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.635.4

Рассмотрены два подхода для решения несжимаемых уравнений Навье — Стокса. Первая идея основана на применении современного математического аппарата на базе разрывного метода Галёркина (DG — Discontinuous Galerkin method), который входит в семейство неконформных конечноэлементных методов. Рассматриваются вопросы применения специальных конечноэлементных пространств Teylor-Hood и Crouzeix-Raviart на тетраэдрах, которые удовлетворяют условию Ладыженской — Бабушки — Брецци. Вторая идея основана на применении стабилизированных конформных конечноэлементных методов и использовании базисных функций первого порядка как для поля давления, так и для поля скоростей. Приводится сравнительный анализ полученных результатов математического моделирования несжимаемых течений с программным комплексом ANSYS CFX.

Ключевые слова: система уравнений Навье — Стокса, разрывный метод Галёркина, стабилизированный метод конечных элементов.

Введение

Существуют две сложности при численном решении системы уравнений Навье — Стокса с помощью метода конечных элементов. Первая проблема связана с дискретизацией нелинейного конвективного члена в векторном уравнении движения для течений с высоким значением числа Рейнольдса. Вторая проблема заключается в определении единственного численного решения задачи о седловой точке, в которой переменная давления интерпретируется как множитель Лагранжа в уравнении неразрывности.

Для решения описанных проблем необходимо использовать метод, который легко адаптируется под определённый класс задач и позволяет получить физически адекватное решение при минимальных затратах вычислительных ресурсов.

Среди эффективных численных подходов для решения системы уравнений Навье — Стокса можно выделить вычислительные схемы конечных элементов на базе разрывного метода Галёркина (DG-method) и противопотоковые стабилизированные методы (например, Stream-line Upwind Petrov-Galerkin method или SUPG).

DG-метод входит в семейство неконформных конечноэлементных методов [1], [2], [3]. Высокая эффективность данного подхода обусловлена тем, что каждый конечный элемент снабжен собственным пространством решения, а поведение решение на межэлементной границе определяется с помощью специальных lifting-операторов [1], [2].

SUPG-метод входит в семейство конформных конечноэлементных методов [4] и использует специальное пространство тестовых функций. Особенно эффективен данный подход при решении задач с доминирующей конвекцией.

Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии президента Российской Федерации (СП-3627.2016.5).

1 Математическая модель

Пусть область $\Omega \subset R^3$ является объединением конечного числа подобластей $\Omega = \Omega_1 \cup \cdots \cup \Omega_N$ с межэлементными границами $\Gamma_{ij} = \Omega_i \cap \Omega_j$. Вязкие несжимаемые течения в области $\Omega \subset R^3$ описываются системой уравнений Навье — Стокса [1]

$$\rho\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}\right) = -\rho\nabla p + \nabla\cdot(\mu\nabla\mathbf{u}), \tag{1}$$

с дополнительным ограничением [1]

$$\nabla\cdot\mathbf{u} = 0, \tag{2}$$

где $\mathbf{u}$ — вектор скорости [m/s], p — давление флюида [Pa], μ — коэффициент динамической вязкости [Pa · c], ρ — плотность вещества $\left[\mathrm{kg/m^3}\right]$.

Система уравнений (1)–(2) дополняется начальными условиями и краевыми условия Дирихле для вектора скорости

$$\mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}_0, \tag{3}$$

$$\mathbf{u}|_{\partial\Omega} = \mathbf{u}_g. \tag{4}$$

2 Функциональные пространства

Введём функциональные пространства для аппроксимации полей давления и скоростей. Как будет показано далее, слабая формулировка задачи Навье — Стокса не содержит пространственных производных от давления, поэтому для функции давления требуется только её интегрируемость с квадратом. Кроме того, для переменной давления не существует начального условия. Это означает, что давление определяется с точностью до константы, поэтому пространство пробных и тестовых функций для поля давления можно определить в виде [1], [2], [3]

$$P = \left\{ p|\, , p \in L_0^2(\Omega) : p \in L^2(\Omega), \int_\Omega p d\Omega = 0 \right\}. \tag{5}$$

Множество $\mathbf{H}(\mathrm{div}, \Omega)$ является замыканием множества бесконечно дифференцируемых функций $\left[C^\infty\left(\bar{\Omega}\right)\right]^3$ по отношению к норме $\|\cdot\|_{(\mathrm{div},\Omega)}$. Поэтому для векторного поля скоростей введём пространство пробных и тестовых функций в виде [4], [5], [6]

$$\mathbf{U} = \left\{ \mathbf{u} \in \left[H^1(\Omega)\right]^3 \middle|\, , \mathbf{u} = \mathbf{u}_g \text{ on } \partial\Omega \right\}, \tag{6}$$

$$\mathbf{V} = \left\{ \mathbf{v} \in \left[H^1(\Omega)\right]^3 \middle|\, , \mathbf{v} = 0 \text{ on } \partial\Omega \right\}. \tag{7}$$

Обозначим через $\mathbf{w}^h$ и p^h конечноэлементные интерполянты для вектора скорости и давления, соответственно. Ассоциируем их с тестовыми функциями $\mathbf{v}^h$ and q^h. Аналогично введём конечномерные подпространства $\mathbf{U}^h \subset \mathbf{U}$, $\mathbf{V}^h \subset \mathbf{V}$, $P^h \subset P$, $\mathrm{Q}^h \subset P$. Обратим внимание, что $\mathbf{w}^h = \mathbf{u}^h + \mathbf{u}_\mathrm{g}$. Учёт условия Дирихле для неконформных конечноэлементных методов реализуется в слабой форме. В свою очередь, для конформных методов — путём исключения соответствующих степеней свободы из матрицы конечноэлементной СЛАУ.

3 Условие Ладыженской — Бабушки — Брецци (ЛББ условие)

Матрица дивергентного оператора (2) имеет вырожденное ядро. Данное свойство выполняется, если конечноэлементные интерполянты для поля давления и векторного поля скоростей удовлетворяют условию Ладыженской — Бабушки — Брецци [1], [2], [3]

$$\inf_{q^h \in Q^h} \sup_{\mathbf{w}^h \in \mathbf{V}^h} \frac{\left(q^h, \nabla\cdot\mathbf{w}^h\right)}{\|q^h\|_{L_0^2(\Omega)} \|\mathbf{w}^h\|_{H^1(\Omega)}} \geq \alpha > 0, \tag{8}$$

где α не зависит от размера конечноэлементной сетки.

Рассмотрим два конечноэлементных пространства, которые удовлетворяют ЛББ условию. Пространство Teylor-Hood состоит из полного векторного базиса второго порядка для аппроксимации вектора скорости и базиса первого порядка для аппроксимации поля давления. Пространство Crouzeix-Raviart содержит дополнительные bubble-функции третьего порядка для аппроксимации вектора скорости. Обратим внимание, что базисные векторные функции принадлежат пространству $\mathbf{H}(\mathrm{div}, \Omega)$. Алгоритм построения данных функций на симплексах можно найти в работе [7].

4 DG-метод для системы несжимаемых уравнений Навье — Стокса

Скалярно умножим уравнения (1) и (2) на тестовые функции из пространств P, $\mathbf{V}$ и применим формулы Остроградского для векторных функций. Вариационная формулировка разрывного метода Галёркина имеет вид [4]: найти такие $\mathbf{u}^h \in \mathbf{U}^h \times [0, \mathrm{T}]$, $p^h \in P^h \times [0, \mathrm{T}]$, что $\forall \mathbf{v}^h \in \mathbf{V}^h \times [0, \mathrm{T}]$ и $q^h \in Q^h \times [0, \mathrm{T}]$ выполняется

$$a\left(\mathbf{v}^h, \mathbf{u}^h\right) + d\left(\mathbf{v}_t^h, \mathbf{u}^h\right) + c\left(\mathbf{u}^h; \mathbf{v}^h, \mathbf{u}^h\right) + b\left(p^h, \mathbf{v}^h\right) = \left(\mathbf{v}^h, \mathbf{F}^h\right), \tag{9}$$

$$b\left(q^h, \mathbf{u}^h\right) = 0, \tag{10}$$

где билинейные и трилинейные формы определяются как [4]

$$\begin{gathered} a\left(\mathbf{v}^h, \mathbf{u}^h\right) = \int_\Omega \left(\frac{\mu}{\rho}\nabla \mathbf{u}^h\right) : \nabla \mathbf{v}^h d\Omega + \\ + \int_{\Gamma_{\mathrm{int}} \cup \partial\Omega} \left([\frac{\mu}{\rho}\mathbf{u}] : \{\nabla \mathbf{v}\} - [\mathbf{v}] : \left\{\frac{\mu}{\rho}\nabla \mathbf{u}\right\}\right) dS + \int_{\Gamma_{\mathrm{int}} \cup \partial\Omega} \vartheta [\mathbf{u}] : [\mathbf{v}] dS, \end{gathered} \tag{11}$$

$$d\left(\mathbf{v}^h, \mathbf{u}^h\right) = \int_\Omega \mathbf{u}_t^h \cdot \mathbf{v}^h d\Omega \tag{12}$$

$$c\left(\mathbf{u}^h; \mathbf{v}^h, \mathbf{u}^h\right) = \int_\Omega \left(\mathbf{u}^h \cdot \nabla\right) \mathbf{u}^h \cdot \mathbf{v}^h d\Omega \tag{13}$$

$$b\left(p^h, \mathbf{v}^h\right) = \int_\Omega \nabla p^h \cdot \mathbf{v}^h d\Omega + \int_{\Gamma_{int} \cup \partial\Omega} [p^h] \cdot \left\{\mathbf{v}^h\right\} dS \tag{14}$$

$$\left(\mathbf{v}^h, \mathbf{F}^h\right) = \int_\Omega \mathbf{F}^h \cdot \mathbf{v}^h d\Omega - \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\mu}{\rho}\left(\mathbf{u}_{\mathrm{g}} \cdot \mathbf{v}^h\right) + \mathbf{u}_{\mathrm{g}} \cdot \left(\frac{\mu}{\rho}\nabla \mathbf{v}^h : \mathbf{n}\right)\right) dS \tag{15}$$

$$b\left(q^h, \mathbf{u}^h\right) = \int_\Omega \nabla \cdot \mathbf{u}^h q^h d\Omega - \int_{\Gamma_{\mathrm{int}} \cup \partial\Omega} [q^h] \cdot \left\{\mathbf{u}^h\right\} dS \tag{16}$$

Здесь Γ_{int} — множество внутренних границ. Операторы среднего $\{..\}$ и скачка $[..]$ скалярной функции имеют вид [1]

$$\begin{gathered} \{p\}_{\partial\Omega} = p, \ \{p\}_{int} = \tfrac{1}{2}\left(p|_K + p|_N\right), \\ [p]_{\partial\Omega} = p\mathbf{n}, \ [p]_{int} = p|_K \mathbf{n}_K + p|_N \mathbf{n}_N, \end{gathered} \tag{17}$$

для векторной функции [1]

$$\begin{gathered} \{\mathbf{u}\}_{\partial\Omega} = \mathbf{u}, \ \{\mathbf{u}\}_{int} = \tfrac{1}{2}\left(\mathbf{u}|_K + \mathbf{u}|_N\right), \\ [\mathbf{u}]_{\partial\Omega} = \mathbf{u} \otimes \mathbf{n}, \ [\mathbf{u}]_{int} = \mathbf{u}|_K \otimes \mathbf{n}_K + \mathbf{u}|_N \otimes \mathbf{n}_N. \end{gathered} \tag{18}$$

Параметр стабилизации ϑ вычисляют по формуле $\vartheta = \mu h / \|\mathbf{u}\|$, где h — диаметр сферы, описанной вокруг конечного элемента [1].

5 Стабилизированный метод конечных элементов для несжимаемых уравнений Навье — Стокса

Вариационная формулировка стабилизированного метода конечных элементов имеет вид [8]: найти такие $\mathbf{u}^h \in \mathbf{U}^h \times [0,\mathrm{T}]$, $p^h \in P^h \times [0,\mathrm{T}]$, что $\forall \mathbf{v}^h \in \mathbf{V}^h \times [0,\mathrm{T}]$ и $q^h \in Q^h \times [0,\mathrm{T}]$ выполняется

$$\begin{gathered} a\left(\mathbf{v}^h,\mathbf{u}^h\right)+d\left(\mathbf{v}_t^h,\mathbf{u}^h\right)+c\left(\mathbf{u}^h;\mathbf{v}^h,\mathbf{u}^h\right)+b\left(p^h,\mathbf{v}^h\right)-\left(\mathbf{v}^h,\mathbf{F}^h\right)+ \\ +\sum_{\Omega_K}\tau_1\left(\left(\mathbf{u}^h\cdot\nabla\right)\mathbf{v}^h,R\left(\mathbf{u}^h\right)\right)_{\Omega_K}+\sum_{\Omega_K}\tau_2\left(\nabla\cdot\mathbf{v}^h,\nabla\cdot\mathbf{u}^h\right)_{\Omega_K}=0, \\ b\left(q^h,\mathbf{u}^h\right)+\sum_{\Omega_K}\tau_3\left(\nabla q^h,R\left(\mathbf{u}^h\right)\right)_{\Omega_K}=0, \end{gathered} \tag{19}$$

невязка уравнения движения определяется выражением [8]

$$R\left(\mathbf{u}^h\right)=\mathbf{u}_t^h+\left(\mathbf{u}^h\cdot\nabla\right)\mathbf{u}^h-\nabla\cdot\left(\frac{\mu}{\rho}\nabla\mathbf{u}^h\right)+\nabla p^h-\mathbf{F}^h. \tag{20}$$

Параметр τ_1 требуется для стабилизации классической формулировки Галёркина с доминирующим конвективным членом и может быть выбран в виде [8]

$$\tau_1=\frac{h}{2\left\|\mathbf{u}\right\|}\left(cth\left(\mathrm{Pe}\right)-\frac{1}{\mathrm{Pe}}\right), \tag{21}$$

где h — характерный размер конечного элемента, например, диаметр описанной вокруг тетраэдра сферы, $\mathrm{Pe}=\frac{h\|\mathbf{u}\|}{\mu}$ — число Пекле.

Параметр τ_2 даёт вклад искусственной диффузии и определяется как [8]

$$\tau_2=\frac{\left\|\mathbf{u}\right\|h}{2}. \tag{22}$$

Параметр стабилизации по давлению τ_3 характерен для задачи Стокса и имеет вид [8]

$$\tau_3=\frac{h^2}{12\mu}. \tag{23}$$

Устойчивость вычислительной схемы (19) зависит от корректного выбора параметров стабилизации (21)–(23).

6 Результаты

Рассмотрим стационарное течение газа в прямой трубе (см. Рис. 1). Диаметр прямой трубы $l=1.4$ м, длина трубы $L=100$ м. В трубе течёт бутан ($\mu=7.44\ \mathrm{mPa\cdot s}$, $\rho=2700\ \mathrm{kg/m^3}$). Давление p_1 задано на границе Γ_1, давление величины p_2 задано на границе Γ_2. Условие $\mathbf{u}=0$ установлено на стенках Γ_3 и Γ_4.

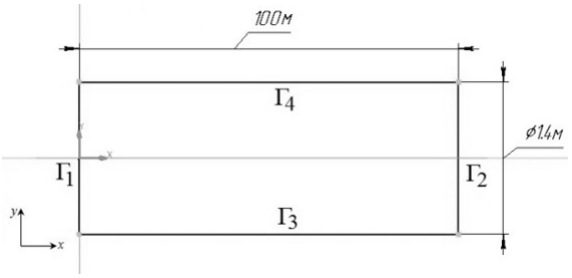


Рис. 1: Область моделирования

Данная задача имеет аналитическое решение

$$p=-\frac{|p_1-p_2|}{L}x+p_1,\ u_x=\rho\frac{|p_1-p_2|}{2\mu L}\left(\left(\frac{l}{2}\right)^2-y^2\right). \tag{24}$$

В качестве результатов приведём погрешности вычисленных полей давления и скорости с помощью программного комплекса ANSYS CFX, стабилизированного метода конечных элементов (Stab.FEM) и разрывного метода Галёркина (DG-method) с точным решением в норме пространства $L^2(\Omega)$

$$\|\Delta\|_{L^2(\Omega)} = \left\|I^{EX} - I^{COM}\right\|^2_{L^2(\Omega)} = \int_\Omega \left(I^{EX} - I^{COM}\right)^2 d\Omega. \tag{25}$$

Триангуляция расчётной области представлена на Рис. 2. Использовано 122602 тетраэдра, средний размер ребра конечного элемента 0.1 м.

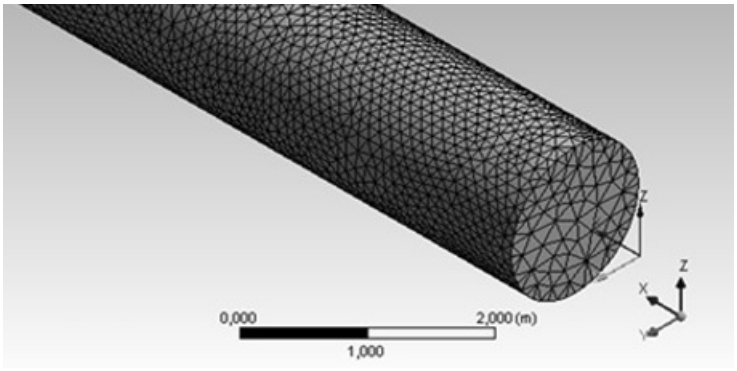


Рис. 2: Триангуляция расчётной области

Для решения конечноэлементной СЛАУ воспользуемся BCG (BiConjugate Gradient method) с SQ-факторизацией и точностью решения $\varepsilon = 10^{-10}$. В качестве метода линеаризации уравнений Навье — Стокса выберем метод Ньютона-Галёркина. Для решения поставленной задачи с помощью пакета ANSYS была выбрана модификация решателя с использованием ICCG (Incomplete Cholesky Conjugate Gradient) с ILU-преобусловливанием.

Таблица 1: Точность и время решения (пространство Teylor-Hood)

Метод	Перепад давления,кПа	Δ, давление	Δ, скорость	Время решения,мин.
ANSYS CFX	200	5.69E–6	2.37E–4	35
	400	4.15E–5	3.81E–3	48
	1200	8.98E–4	8.56E–2	225
Stab.FEM	200	1.63E–8	4.35E–10	10
	400	3.92E–8	6.71E–10	13
	1200	5.15E–8	8.62E–10	15
DG-method	200	4.23E–7	3.85E–10	40
	400	5.35E–7	5.13E–10	42
	1200	7.54E–6	8.36E–10	45

Пространство Teylor-Hood содержит 882734 степени свободы в стабилизированном методе конечных элементов и 2206836 степеней свободы в разрывном методе Галёркине.

Таблица 2: Точность и время решения (пространство Crouzeix-Raviart)

Метод	Перепад давления,кПа	Δ, давление	Δ, скорость	Время решения,мин.
ANSYS CFX	200	5.69E–6	2.37E–4	35
	400	4.15E—5	3.81E–3	48
	1200	8.98E–4	8.56E–2	225
Stab.FEM	200	9.71E—9	4.01E—11	12
	400	1.29E—8	6.29E—11	15
	1200	4.62E—8	7.83E-–11	17
DG-method	200	5.54E—10	2.19E—11	48
	400	7.28E-–10	4.83E-–11	50
	1200	8.63E-–10	5.37E—11	51

Пространство Crouzeix-Raviart содержит 937259 степеней свободы в стабилизированном методе конечных элементов и 2942448 степеней свободы в разрывном методе Галёркине.

Заключение

В работе реализованы вычислительные схемы стабилизированного конформного метода конечных элементов и разрывного метода Галёркина для решения несжимаемых уравнений Навье — Стокса на тетраэдральных конечноэлементных сетках. Приведён сравнительный анализ методов на задаче, имеющей аналитическое решение, с программным комплексом ANSYS CFX.

Конвективный член в уравнениях Навье — Стокса вносит несимметричность в матрицу СЛАУ, а также знаконеопределённость при больших значениях критерия Рейнольдса. Практически установлено, что для числа Пекле 10^3 итерационные решатели начинают стагнировать и не достигают требуемой точности. Применение схем стабилизированных конечноэлементных методов и разрывного метода Галёркина позволяет получить решение задачи с требуемой точностью, потратив на порядок меньше времени по сравнению с программным комплексом ANSYS.

Конечноэлементные пространства типа Teylor-Hood (полный векторный базис второго порядка для поля скоростей и базис первого порядка для поля давления) целесообразно применять для стабилизированных конечноэлементных методов (СМКЭ), поскольку данные подходы позволяют вычислить распределение давление с большей точностью по сравнению с разрывным методом Галёркина. Кроме того, вычислительные затраты по времени решения СЛАУ сокращается в 3 раза при использовании схем СМКЭ.

Конечноэлементные пространства типа Crouzeix-Raviart (полный векторный базис второго порядка с дополнительными bubble-функциями третьего порядка для вектора скорости и линейный базис для поля давления) целесообразно применять для неконформных конечноэлементных методов, поскольку в данном случае и поле давление, и поле скоростей определяются с большей точностью, чем при использовании стабилизированных методов.

Список литературы

[1] Bassi F., Crivellini A., Pietro D. A., Rebay S. An artificial compressibility flux for the discontinuous Galerkin solution of the incompressible Navier-Stokes equations. J. Comput. Phys., 218, 2006, 794–815.

[2] Brezzi F., Douglas J., Marini L. D. Two families of mixed finite elements for second order elliptic problems. Numerische Mathematik 47:217–235, 1985, doi:10.1007/BF01389710.

[3] Cockburn B., Kanschat G., Schotzau D. The local discontinuous Galerkin method for the Oseen equations. Math. Comp., 73, 2003, 569–593.

[4] Tezduyar T. E., Osawa Y. Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors. Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 190(3-4), 2001, 411–430.

[5] N. C. Nguyen, J. Peraire, B. Cockburn. A hybridizable discontinuous Galerkin method for the incompressible Navier-Stokes equations (AIAA Paper 2010-362). In Proceedings of the 48th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Orlando, Florida, Janury 2010.

[6] Younes A., Makradi A., Bouhala L., Zidane A., Shao Q. A combination of Crouzeix–Raviart, discontinuous Galerkin and MPFA methods for buoyancy-driven flows. Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow, 24, 2014, 735–759.

[7] Webb J. P. Hierarchal vector basis functions of arbitrary order for triangular and tetrahedral finite elements. IEEE Trans. on antennas and propagation, 47(8), 1999, 1244–1253.

[8] Tezduyar T. E., Osawa Y. Finite element stabilization parameters computed from element matrices and vectors. Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 190(3-4), 2001, 411–430.

Сергей Игоревич Марков — аспирант Новосибирского государственного технического университета, мл. науч.сотр. Института нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН;
e-mail: www.sim91@list.ru;
Иткина Наталья Борисовна — к.т.н., доцент кафедры Вычислительных технологий;
Новосибирский государственный технический университет;
e-mail: itkina.nat@yandex.ru.
Дата поступления — 10 мая 2017 г.

РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНОЙ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ НА МУЛЬТИКОМПЬЮТЕРАХ

В. П. Маркова, М. Б. Остапкевич

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.688

В работе предлагается параллельная реализация алгоритма клеточно-автоматной интерференции двух волн с использованием технологии фрагментированного программирования и базирующейся на ней системы LuNA. Технология базируется на стратегии управления потоками данных. В отличие от большинства современных технологий, технология фрагментированного программирования и LuNA наряду с такими технологиями, как StreamIt и Lift реализуют унифицированных подход к реализации параллельных программ на гетерогенных мультикомпьютерах. Программа на LuNA содержит описания фрагментов данных, фрагментов вычислений и информационные зависимости между ними. Результаты сравнения параллельных реализаций в LuNA и MPI показали, что время выполнения программы в текущей версии LuNA больше, чем в MPI. Это связано с особенностями алгоритмов распределения, поиска и пересылок фрагментов данных и фрагментов вычислений на кластере. Сложность построения LuNA программы существенно ниже, чем программы.

Ключевые слова: параллельное программирование, фрагментированное программирование, система LuNA, клеточный автомат, решеточный газ, моделирование интерференции.

Введение

В настоящее время для написания параллельных программ на мультикомпьютерах (компьютерах с распределенной памятью) используется стандарт MPI. Он получил самое широкое распространение на большинстве мультикомпьютеров с однородными узлами благодаря тому, что он позволяет создавать переносимые программы. Используя MPI, программист при написании программ помимо описания собственно вычислений должен программировать выделение ресурсов, межузловые коммуникации, балансировку нагрузки между узлами и определять порядок вычислений.

С появлением компьютеров с гетерогенными узлами задача распараллеливания усложнилась, так как разные вычислители в составе узла имеют разную архитектуру и каждый из них программируется с использованием отдельного интерфейса (технологии). Построение эффективной программы для таких компьютеров выполняется двумя способами. Первый заключается в использовании MPI для организации межузлового параллелизма, а OpenMP, OpenCL, CUDA, HLS — для организации внутриузлового параллелизма.

Второй способ предполагает построение единой технологии реализации параллельных программ на гетерогенном мультикомпьютере. Примерами таких технологий являются StreamIt [1, 2] и Lift [3]. В рамках второго способа в ИВМиМГ СО РАН была реализована технология фрагментированного программирования, основанная на стратегии управления потоками данных. На ее основе построена система программирования LuNA [4].

В статье исследованы реализации алгоритма клеточно-автоматной интерференции двух волн. Одна реализация построена с использованием MPI, а другая — на базе системы LuNA. перечислены характеристики системы LuNA. Проведено их сравнение, и сформулированы преимущества использования системы LuNA.

Работа выполнена в рамках работ по проектам РАН 14.1 и 15.4 программы фундаментальных исследований президиума РАН.

1 Основные определения и характеристики системы LuNA

Система LuNA — это инструмент для построения параллельных программ на базе технологии фрагментированного программирования. LuNA система состоит из транслятора языка сборки и подсистемы исполнения фрагментированных программ. Базовыми понятиями в системе являются фрагменты данных, фрагменты кода и фрагменты вычислений. *Фрагмент данных* — это множество соседних ячеек массива заданного размера. *Фрагмент кода* — это функция, которая получает значения некоторых входных фрагментов данных и вычисляет по ним значения выходных фрагментов данных. При построении фрагментированных программ (ФП) используются два типа фрагментов кода: атомарные и структурированные. *Атомарные фрагменты кода* в системе представляются как функции Си программ. *Структурированные фрагменты кода* содержат сборку из фрагментов вычислений. *Фрагмент вычислений* — это обращение (вызов на исполнение) к фрагменту кода с указанием имен всех входных и выходных фрагментов данных. Написание LuNA-программы состоит из следующих шагов.

- В исходной последовательной программе на языках Си/Си++ выделяются участки кода, которые отвечают за вычисления. В этих участках кода обработка произвольных объектов данных заменяется обработкой фрагментов данных, а сами участки оформляются как атомарные фрагменты кода.
- На языке сборки LuNA описываются структурированные фрагменты кода и информационные зависимости между фрагментами вычислений и фрагментами данных. В отличие от MPI программы, в сборочной программе (это синоним LuNA-программы) нет необходимости жестко задавать порядок вычислений, управлять выделением ресурсов и программировать межузловые коммуникации (см. табл. 1).
- Вставляются инструкции, которые обеспечивают освобождение памяти, занимаемой фрагментами данных, которые больше не используются.
- Определяются размеры фрагментов данных, при которых время выполнения минимально.

На вход системы LuNA поступает фрагментированная программа на языке сборки и модуль на Си/Си++, реализующий атомарные фрагменты кода. Эта программа содержит все фрагменты кода, фрагменты данных и информационные зависимости между ними. Система LuNA выполняет следующие шаги.

- Транслятор системы преобразует исходную LuNA-программу во внутреннее представление, с которым может работать исполнительная подсистема.
- Исполнительная подсистема LuNA автоматически распределяет фрагменты кода и данных по узлам в соответствии с имеющимися ресурсами мультикомпьютера. При программировании с использованием MPI программист должен сам проводить такое распределение (см. табл. 1).
- При выполнении фрагментированной программы исполнительная подсистема определяет окончательный порядок выполнения фрагментов вычислений. Для этого она ведет учет фрагментов кода, готовых к исполнению, и распределяет их на исполнение по потокам. При выполнении программы на нескольких узлах система автоматически обеспечивает необходимую пересылку фрагментов данных между узлами. При написании же MPI программы разработчик в явном виде определяет порядок выполнения и описывает все межузловые пересылки данных (см. табл. 1). При несбалансированности вычислительной нагрузки на узлы, исполнительная подсистема перераспределяет нагрузку между узлами. В MPI такую балансировку нагрузки реализует сам программист в своей программе.
- Исполнение фрагментированной программы продолжается, пока есть исполняющиеся или готовые к исполнению фрагменты кода.

2 Клеточно-автоматное моделирование волновых процессов

Для моделирования интерференции двух волн используется простейший класс одночастичных недетерминированных клеточных автоматов с одной частицей покоя массой 2, известный в литературе как HPP1rp [5]. Клеточные автоматы (КА) описывают природные явления множеством гипотетических частиц, которые

Таблица 1: Реализация системных функций в MPI и LuNA

Функция	MPI	LuNA
порядок вычислений	Жестко задается программистом, неизменен при выполнении.	Окончательный порядок определяется уже при исполнении, когда есть информация о фрагментах кода, для которых готовы и собраны в одном узле все исходные данные и которые могут запускаться.
управление выделением ресурсов в узле	Реализуется программистом.	Реализуется системой LuNA.
распределение данных по узлам	Реализуется программистом.	Выполняется системой на основании информации о доступных ресурсах вычислительной системы.
межузловые коммуникации	Явно кодируются программистом.	Активизируются подсистемой исполнения на основе информации о местонахождении затребованных данных.
балансировка нагрузки	Не реализуется или реализуется программистом.	Реализуется системой LuNA.

движутся в решеточном пространстве по некоторым правилам. Эти правила представляют моделируемое явление на микроуровне, исходя из общих законов физики.

Интерес к клеточно-автоматному (КА) моделированию объясняется рядом его достоинств. Во-первых, отсутствие ошибок округления и способность моделировать нелинейные и разрывные процессы. Во-вторых, простота задания граничных условий. И наконец, неограниченные возможности параллельной реализации задач на современных суперкомпьютерах.

Клеточный автомат HPP1rp определен на 2D решетке. Каждый узел решетки соединен с соседями единичными решеточными векторами e_i, $i = 1, 2, 3, 4$, и содержит 4 движущиеся частицы и частицу покоя. *Движущиеся* частицы имеют единичную массу и единичную скоростью $\boldsymbol{c}_i$ направленную вдоль одного из четырех векторов решетки. В каждом направлении может двигаться только одна из частиц, находящихся в узле решетки. Частица покоя имеет массу 2 и нулевую скорость.

Каждому узлу решетки с именем $\boldsymbol{r}$ поставлена в соответствие клетка с тем же именем. Множество частиц в клетке определяет ее состояние $\boldsymbol{s(r)}$. Вектор $\boldsymbol{s(r)}$ состоит из 5 элементов. Значение первых четырех элементов вектора s показывает наличие $(s_i(\boldsymbol{r})=1)$ или отсутствие $(s_i(\boldsymbol{r})=0)$ движущейся частицы со скоростью c_i в клетке с именем $\boldsymbol{r}$ последний элемент вектора $\boldsymbol{s(r)}$ показывает наличие $s_i(\boldsymbol{r})=1$ или отсутствие $s_i(\boldsymbol{r})=0$ частицы покоя массой 2 в клетке с именем $\boldsymbol{r}$. Пара $(\boldsymbol{s},\boldsymbol{r})$ называется *клеткой*. Общая сумма масс частиц в клетке с именем $\boldsymbol{r}$ называется *модельной плотностью* $\rho(\boldsymbol{r})$ Множество клеток, в котором все клетки имеют уникальные имена, образуют *клеточный массив*. Множество состояний всех клеток массива $\omega(t)$ в момент времени t называется *глобальным* состоянием автомата. Смена глобальных состояний автомата описывает *эволюцию* КА.

Клеточный автомат работает синхронно: все клетки автомата меняют свои состояния одновременно на каждом итерационном шаге. Шаг состоит из 2-х фаз: столкновение и сдвиг. На фазе *столкновения* частицы в каждой клетке соударяются друг с другом таким образом, что суммарные масса и импульс частиц сохраняются. Функция столкновения создает или разрушает движущуюся частицу со скоростью в клетке с именем r в момент времени t и зависит только от ее исходного состояния в данный момент времени. Например, клетка в состоянии (00101_2=$\mathbf{5_{10}}$) на фазе столкновения меняет его на одно из трех состояний: (00101_2=$\mathbf{10_{10}}$) с вероятностью $p_5 \to_{10}$ (рис. 1а), (10000_2=$\mathbf{16_{10}}$) с вероятностью $p_5 \to_{16}$ (рис.1б) и остается в своем состояние с вероятностью $p_5 \to_5$ (рис.1в). На фазе *сдвига* движущиеся частицы в каждой клетке сдвигаются в сторону ближайшего соседа с единичной скоростью.

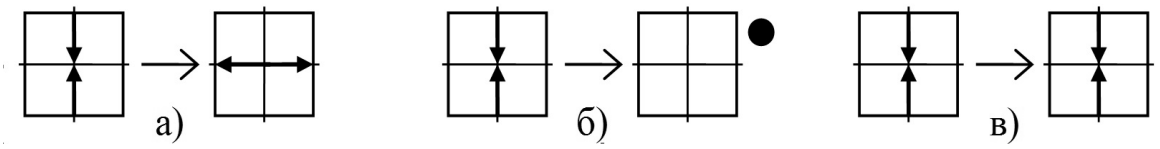


Рис. 1: Пример правила столкновения: а) переход 5→10, б) переход 5→16, в) переход 5→5.

3 Моделирование интерференции двух волн

Интерференция двух волн моделируется эволюцией клеточного автомата размера 1400x1200 и плотности клеток среды 3.3. Два круговых источника периодических волн находятся на расстоянии четырех длин волны (целое число длин волн — условие существования конструктивной интерференции [6]). На рис. 2 показаны две похожие интерференционные картины двух волн, которые получены разными способами и на разных шагах моделирования. Первая промоделирована традиционным способом на шаге времени 100 (рис. 2а), а вторая — клеточно-автоматным способом на 975-м шаге эволюции клеточного автомата (рис. 2б).

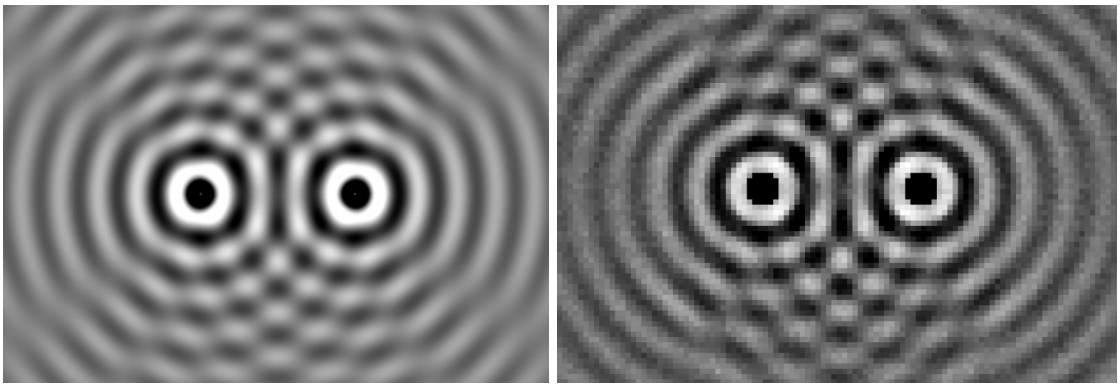


Рис. 2: Интерференция по формуле сферической волны (а) и в модели HPPrp (б)

4 Описание фрагментированного алгоритма КА-интерференции

В реализации исходный клеточный массив разбивается на фрагменты данных с топологией линейка. Главными фрагментами данных в реализации являются:

- a[t][x] — фрагменты, хранящие начальное состояние клеточного массива на шаге моделирования t,
- b[t][x] — фрагменты, хранящие состояние клеточного массива после вычисления столкновения частиц на шаге моделирования t.
- bu[t][x], bd[t][x] — фрагменты для хранения теневых граней.

Во фрагменте bu[t][x] дублируется верхняя строка фрагмента b[t][x]. Во фрагменте bd[t][x] дублируется нижняя строка фрагмента b[t][x]. Введение фрагментов данных bu[t][x], bd[t][x] позволяет уменьшить объем пересылок между узлами, так как их размер существенно меньше, чем у фрагмента b[t][x].

Индекс x определяет положение фрагмента в пространстве. Для фрагмента, содержащего самые верхние строки клеточного массива, значение x равно 0. x для фрагмента, содержащего самые нижние строки массива, равно числу фрагментов, на которое разбит массив минус единица.

Фрагментированная реализация алгоритма КА-интерференции представлена фрагментами кода:

- init — инициализация начального состояния клеточного массива,
- collision — вычисление операции столкновения частиц в клетках,

- propagation — вычисление перелета частиц между клетками,
- print — печать результата моделирования в файл.

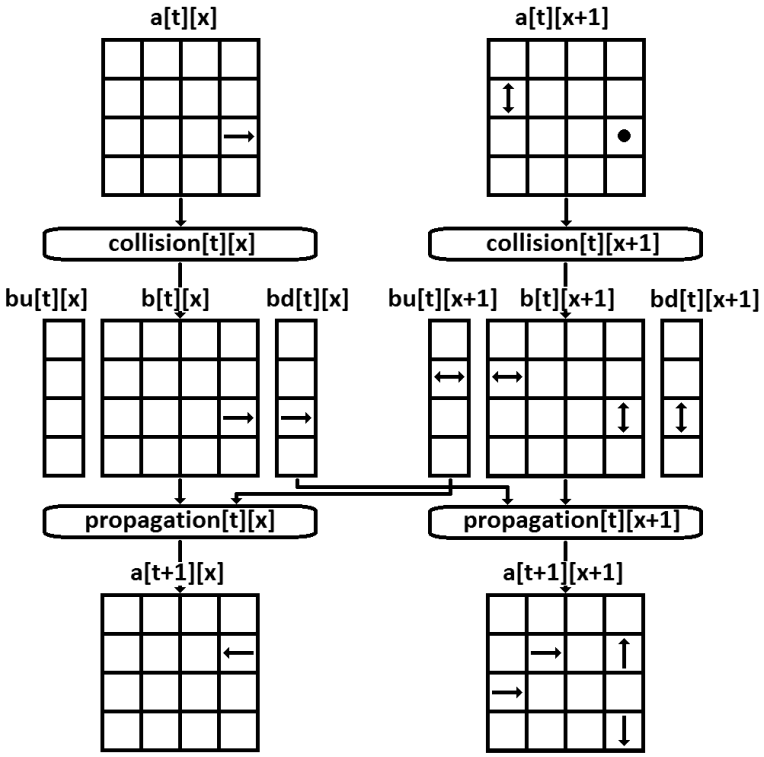


Рис. 3: Часть графа информационных зависимостей реализации HPPrp в LuNA

На рис. 3 показан граф информационных зависимостей для двух исходных фрагментов данных a[t][x] и a[t][x+1] на шаге времени t. Они являются исходными для фрагментов вычислений collision[t][x] и collision[t][x+1]. Как только a[t][x] и a[t][x+1] вычислены, collision[t][x] и collision[t][x+1] готовы к выполнению. В какой-то момент времени они запускаются на исполнение. После завершения выполнения collision[t][x] создаются фрагменты данных b[t][x], bu[t][x], bd[t][x]. Они хранят состояние частей клеточного массива на шаге t после применения правила коллизии. Аналогично, после завершения collision[t][x+1] создаются b[t][x+1], bu[t][x+1], bd[t][x+1]. В этот момент a[t][x] и a[t][x+1] больше не будут использоваться никакими фрагментами вычислений, и могут быть удалены из системы, а освободившаяся память использоваться для хранения новых данных. Когда вычислены bd[t][x-1], b[t][x], bu[t][x+1], фрагмент вычислений propagation[t][x] готов к исполнению. Аналогично, propagation[t][x+1] может запускаться, когда посчитаны bd[t][x], b[t][x+1], bu[t][x+2]. Результатом работы propagation[t][x], propagation[t][x+1] являются a[t+1][x] и a[t+1][x+1], хранящие состояние клеточного массива на шаге времени t+1.

LuNA-программа реализует КА-интерференцию в клеточном массиве размером 4096x4096. На рис. 4 показана зависимость времени выполнения программы от размера фрагментов. Замеры для выявления этой зависимости проводились при числе узлов 1, потоков 8. Минимальное время наблюдается при размере фрагментов 256. При уменьшении размера фрагментов увеличивается их число и растут накладные расходы системы на их обработку. При увеличении размера фрагментов количество обрабатываемых потоком фрагментов становится слишком маленьким, и система менее качественно балансирует вычислительную нагрузку между потоками.

Результаты сравнения времени выполнения реализаций на MPI и LuNA представлены на рис. 5. Время выполнения LuNA реализации при использовании нескольких узлов существенно превышает время выполнения MPI реализации. Уменьшение времени выполнения может быть достигнуто за счет оптимизации алгоритмов распределения, поиска и передачи фрагментов данных между узлами мультикомпьютеров и алгоритмов управления выделением памяти для фрагментов данных внутри узлов.

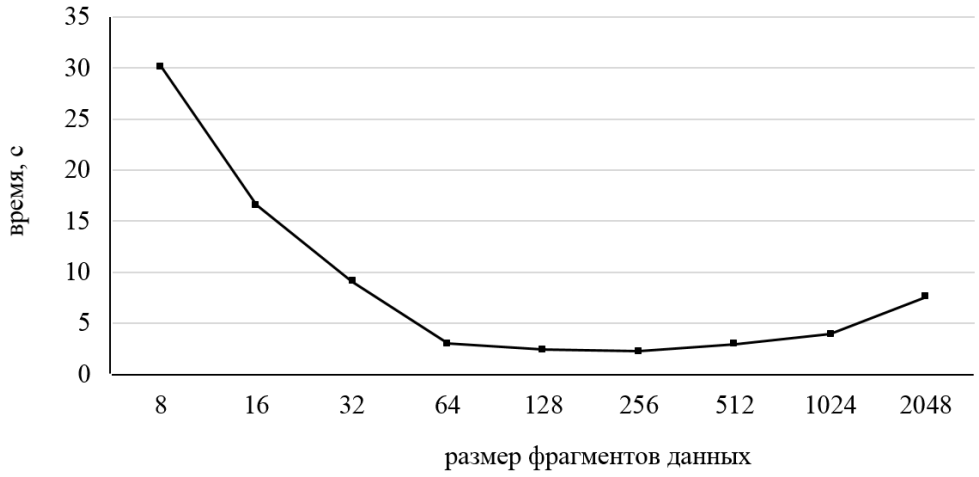


Рис. 4: Зависимость времени выполнения программы от размера фрагмента

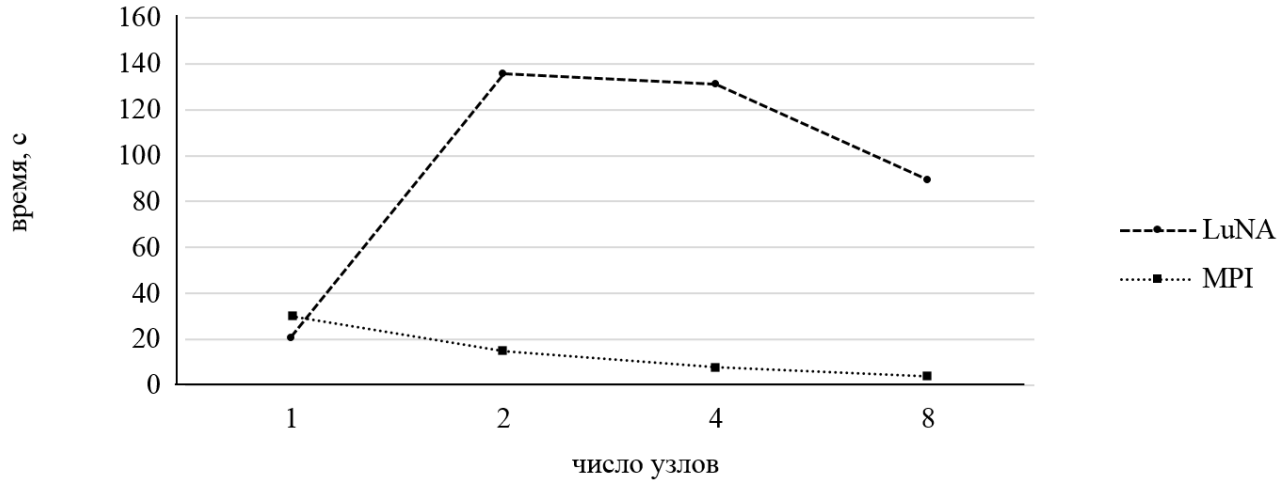


Рис. 5: Зависимость времени выполнения программы от числа используемых узлов

Заключение

Опыт реализации программ в системе LuNA выявил ее основные достоинства и недостатки. Главным недостатком является то, что текущая реализация LuNA существенно проигрывает MPI в плане времени выполнения программ. Рассмотрим достоинства системы LuNA.

Для задач с неравномерной вычислительной нагрузкой на узлы использование встроенной в LuNA динамической балансировки дает сопоставимый по времени выполнения результат по сравнению с ручной реализацией балансировки в MPI программе [7].

LuNA-программы не имеют такой привязки к архитектуре и доступным ресурсам компьютера, как MPI-программы. Поэтому, LuNA программы обладают существенно более высокой переносимостью.

Отсутствие необходимости задавать порядок вычислений и программировать межузловые коммуникации существенно упрощает программирование в LuNA по сравнению с MPI. Эти же особенности LuNA устраняют появление некоторых видов ошибок, свойственных при программировании в MPI. Описание информационных зависимостей между фрагментами имеет локальный характер, в отличие от задания порядка вычислений в MPI. Это упрощает отладку LuNA программ. Все это вместе уменьшает время разработки параллельных реализаций вычислительных алгоритмов в системе LuNA по сравнению с MPI.

Список литературы

[1] StreamIt Project Homepage, http://groups.csail.mit.edu/cag/streamit/

[2] William Thies, Michal Karczmarek, Saman P. Amarasinghe. StreamIt: A Language for Streaming Applications. Proceeding CC '02 Proceedings of the 11th International Conference on Compiler Construction, 2002, P. 179–196.

[3] Michel Steuwer, Toomas Remmelg, Chistophe Dubach.: Lift: a functional data-parallel IR for high-performance GPU code generation. CGO'17 Proceedings of the 2017 International Symposium on Code Generation and Optimization, P. 74–85.

[4] Victor Malyshkin.: Active Knowledge, LuNA and Literacy for Oncoming Centuries. LNCS, V. 9465. P. 292–303. Springer, Heidelberg, 2015.

[5] M. Zhang, D. Cule, L. Shafai, G. Bridges and N. Simons. Computing Electromagnetic Fields in Inhomogeneous Media Using Lattice Gas Automata. In: Proceedings of 1998 Symposium on Antenna Technology and Applied Electromagnetics, Aug. 14–16, Ottawa, Canada.

[6] Conditions for interference, http://physics.bu.edu/ duffy/sc545_notes09/interference_conditions.html

[7] V. Malyshkin, V. Perepelkin The PIC implementation in LuNA system of fragmented programming // Journal of Supercomputing. 2014. V. 69, iss. 1. P. 89–97

Валентина Петровна Маркова — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: markova@ssd.sscc.ru;
Михаил Борисович Остапкевич — мл. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: ostap@ssd.sscc.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

РАСПРЕДЕЛЕННОЕ ЧИСЛЕННОЕ СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЕТВЯЩИХСЯ ПРОЦЕССОВ С УЧЕТОМ АРХИТЕКТУРЫ СУПЕР-ЭВМ

М. А. Марченко[1, 2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.6 + 519.21 + 519.245 + 537.523

В работе предлагается методика распараллеливания алгоритмов численного статистического моделирования траекторий ветвящихся случайных процессов с учетом архитектуры гибридных вычислительных системах. Приводится формула для оценки ускорения от распараллеливания. Используются распределительный способ получения псевдослучайных чисел и методика распределенного численного статистического моделирования. Разработанная методика апробирована при моделировании процесса развития электронных лавин в газе.

Ключевые слова: ветвящиеся процессы, численное статистическое моделирование, параллельные алгоритмы, суперкомпьютеры, электронные лавины.

Введение

В работе предлагается вычислительная технология распараллеливания алгоритмов численного статистического моделирования траекторий ветвящихся процессов [1] на гибридных вычислительных системах. Новизна предлагаемого подхода заключается в эффективном применении распределительного способа получения псевдослучайных чисел и методики распределенного численного статистического моделирования с одновременным использованием основных процессоров и сопроцессоров гибридной вычислительной системы.

Разработанная нами методика апробирована при моделировании процесса развития электронных лавин в газе, причем известные способы «огрубления» моделирования эволюции ансамбля частиц (методы «русской рулетки», «утолщенных траекторий», «групповых соударений» и др. [2]) не применялись.

1 Моделирование траекторий ветвящихся процессов

Ограничимся классом ветвящихся процессов, определяемых следующей схемой [1]:

- в момент времени $t = 0$ в некоторой области Ω в d-мерном пространстве согласно плотности распределения $p_0(x)$ рождаются n_0 независимых частиц в точках $x_i^{(0)}$ $(i = 1, 2, \ldots, n_0)$, характеризующих состояние соответствующих частиц;

- в следующий момент времени (соответственно шагу Δt) каждая из существующих на предыдущем шаге частиц либо погибает с вероятностью $0 \le g(x_i^{(0)}) < 1$, либо с вероятностью $1 - g(x_i^{(0)})$ выживает, после чего определяется случайное число ее потомков m согласно дискретного распределения $P(m = k|x_i^{(0)}), 0 \le k \le m^*$ (величина m^* фиксирована); при $m \ge 1$ в точках $y_1, y_2, \ldots, y_m$, имеющих совместную плотность распределения $p(x_i^{(0)} \to y_1, y_2, \ldots, y_m)/(1-g(x_i^{(0)}))$, моделируются порожденные ею вторичные частицы; каждая из выживших частиц далее меняет свое состояние согласно плотности распределения $r(x_i^{(0)} \to x')$;

Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ № 15–01–08988, 15–01–09230, 15–01–00894, 16–01–00755, 16–01–00530; программы фундаментальных исследований Президиума РАН I.33П.

- обработка всех частиц (первичных и вторичных) на следующем шаге производится аналогично изложенному в предыдущем пункте.

В процессе моделирования траектории в определенные моменты времени по набору частиц из соответствующего поколения (скажем, с номером k) вычисляются заданные случайные оценки $\zeta^{(k)}$, дающие вклад при вычислении выборочных средних $L^{-1}\sum\zeta^{(k)}$ для оценки требуемых функционалов (скорость распространения эпидемии в медицинских задачах, коэффициента размножения электронов задачах расчета реакторов и др.). Предполагается, что $\zeta^{(k)}$ является аддитивной функцией переменных $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)}$ $(n = n(k))$:

$$\zeta^{(k)} = \sum_{i=1}^{n} f(x_i^{(k)})$$

В лексикографической схеме (при обходе дерева «в глубину») в памяти выделяется место под массив — т.н. магазин частиц, в каждом элементе которого хранится текущее состояние частицы. После «рождения» новая частица помещается в магазин для дальнейшей обработки, а до конца обрабатывается только одна траектория частицы. После того, как произведено моделирование всех переходов для рассматриваемой частицы, приступают к обработке других частиц из магазина, причем целесообразно все время выбирать частицы с конца магазина (т.е. действовать по методу LIFO). Для каждой выбранной частицы моделируются оставшиеся ей переходы по той же методике, т.е. все вторичные частицы также помещаются в магазин. Обработка дерева завершается, когда будут выбраны все частицы из магазина.

Ясно, что при использовании лексикографической схемы размер магазина соответствует максимальному числу переходов в дереве, равному $t_{max}/\Delta t$. Следовательно, использование лексикографической схемы предпочтительнее счета по поколениям, так как число переходов заранее известно и до начала расчетов можно зарезервировать необходимый объем машинной памяти.

Вычислительная трудоемкость рассматриваемого алгоритма численного статистического моделирования деревьев частиц (как для счета по поколениям, так и для лексикографической схемы) является достаточно большой, поскольку среднее время на обработку всего дерева зависит от величины t_{max} по экспоненциальному закону:

$$t_1 = C_1 n_0 \exp(C_2 t_{max}),\ C_1, C_2 > 0 \tag{1}$$

Множитель n_0 при экспоненте объясняется тем, что для каждой начальной частицы соответствующие ей деревья моделируются независимо. Кроме того, при моделировании деревьев большой глубины величина дисперсии оценок функционалов для больших значений времени может быть большой. Ясно, что такого рода численные алгоритмы практически нереализуемы без применения технологий распараллеливания и использования современных высокопроизводительных вычислительных систем.

2 Методы распараллеливания численного статистического моделирования траекторий ветвящихся процессов

1. Под **массивно-параллельной вычислительной системой** будем понимать однородную (из одинаковых процессоров или вычислительных ядер) систему с распределенной памятью, где у каждого процессора (вычислительного ядра) — своя оперативная память. Процессоры при этом обычно объединены в вычислительные узлы, причем в самой вычислительной системе вычислительные узлы могут иметь различную производительность. Под **гибридной вычислительной системой** будем понимать систему, состоящую из вычислительных узлов, на каждом из которых расположены основные многоядерные процессоры (CPU) и сопроцессоры, например, Intel Xeon Phi или Nvidia GPU.

2. Методику распределенного статистического моделирования, в которой моделирование независимых реализаций дерева частиц распределяется по разным процессорам (вычислительным ядрам), будем называть **крупноблочным распараллеливанием**. Такая методика эффективно реализуется на массивно-параллельных вычислительных системах.

3. Более «глубокое» распараллеливание заключается в моделировании отдельной реализации дерева частиц совместно на нескольких ядрах. А именно, моделирование условно независимых поддеревьев от вторичных частиц, появившихся к некоторому моменту времени, распределяется по разным ядрам. Будем называть такую методику **мелкоблочным распараллеливанием**. Ее применение помогает обрабатывать быстро растущее число частиц, тем самым ускоряя расчет реализации дерева, и использовать бо'льший объем оперативной памяти для размещения массивов частиц.

Для реализации мелкоблочного распараллеливания можно совместно использовать вычислительные ядра процессоров (одного или нескольких) массивно-параллельной вычислительной системы, а также ядра основных процессоров и сопроцессоров гибридных вычислительных систем.

Допустим, что для заданного (основного) процессора выделено N дополнительных процессоров; например, на вычислительном узле к одному ядру основного процессора «прикрепляются» N ядер сопроцессора. Моделирование одной реализации дерева определим следующим образом:

1. на основном процессоре производится моделирование дерева до определенного момента времени t_p; пусть «накопленное» к этому моменту число частиц $n(t_p) \approx n_p(N+1), n_p \geq 1$;
2. на дополнительные процессоры передаются примерно n_pN частиц, на основном процессоре при этом также остается примерно n_p частиц;
3. на основном и дополнительных процессорах начинается моделирование поддеревьев из соответствующих частиц;
4. в определенные моменты времени на каждом процессоре производится расчет функционалов;
5. в конце моделирования на всех процессорах массивы с рассчитанными функционалами передаются на основной процессор, где производится окончательный расчет функционалов для смоделированной реализации.

4. На каждом вычислительном узле гибридной вычислительной системы целесообразно комбинировать крупно- и мелкоблочное распараллеливание:

- одна часть CPU-ядер на процессорах узла будет моделировать реализации согласно методике крупноблочного распараллеливания;
- другая часть CPU-ядер на процессорах узла и «прикрепленных» к ним ядер сопроцессоров будут моделировать реализации дерева по методике мелкоблочного распараллеливания.

При использовании такой методики **комбинированного распараллеливания** вычислительные ресурсы будут задействованы максимально полно.

5. Выведем формулу для ускорения при комбинированном распараллеливании на гибридной вычислительной системе. Производительность ядра основного процессора примем за единицу, производительность ядер дополнительных процессоров обозначим как α. Для современных сопроцессоров, как правило, $\alpha < 1$.

Пусть из общего числа $M = M_1 + M_2$ ядер основных процессоров на M_1 производится моделирование по методике крупноблочного распараллеливания, а к каждому из M_2 ядер «прикреплено» по N ядер сопроцессора и на них производится моделирование по методике мелкоблочного распараллеливания; каждое из M_2 ядер назовем **основным ядром**.

Представим среднее время моделирования одной реализации на основном ядре в виде суммы

$$t_1 = \tau_1 + \tau_2,$$

где τ_1 — время, затраченное на моделирования $n_p(N+1)$ частиц (п. 1 упомянутого выше алгоритма), τ_2 — время на обработку остальной части дерева. Предполагается, что $\tau_1 \ll \tau_2$, т.е. переход к мелкоблочному распараллеливанию осуществляется достаточно быстро сравнительно с общем временем счета.

При мелкоблочном распараллеливании среднее машинное время на получение одной реализации равно

$$t_1^{'} = \tau_1 + \frac{\tau_2}{(N+1)\alpha} + \tau_s + \tau_b, \tag{2}$$

где τ_s — машинное время на передачу массивов с функционалами из памяти сопроцессора в память основного процессора, их получение и «объединение» с соответствующими массивами на основном процессоре, τ_b — машинное время на возможную синхронизацию и обмен частицами при балансировке нагрузки между основными ядрами и ядрами сопроцессора.

В (2) второе слагаемое соответствует времени на параллельное моделирование условно независимых поддеревьев на основном ядре и ядрах сопроцессора. Поскольку каждому ядру при распараллеливании «достанется» n_p начальных частиц и процедура распараллеливания не меняет вероятностных характеристик реализаций ветвящегося процесса, то, в силу (1), время моделирования лавины уменьшиться в среднем в

$N+1$ раз. Поскольку время счета до синхронизации определяется самым медленным процессом, а для ядер сопроцессора, как правило, $\alpha < 1$, то максимальное время будет достигнуто именно на них.

Если учесть, что $\tau_1 \ll \tau_2$, а также пренебречь величинами τ_s и τ_b, то ускорение от применения мелкоблочного распараллеливания на одном ядре можно оценить величиной

$$S = t_1/t_1^{'} \approx \alpha(N+1)$$

В частности, эта величина выражает максимальный выигрыш от применения методики комбинированного распараллеливания по сравнению с методикой крупноблочного в предельном случае (по видимому, практически нереальном), когда $M_1 = 0$, т.е. к каждому основному ядру «прикреплен» сопроцессор.

Для всей вычислительной системы при использовании только основных процессоров при крупноблочном распараллеливании за машинное время T будет получено в среднем $L = MT/t_1$ реализаций, а при использовании методики комбинированного распараллеливания будет получено

$$L^{'} = M_1 T/t_1 + M_2 T/t_1^{'} \approx M_1 T/t_1 + M_2 T\alpha(N+1)/t_1$$

реализаций. Таким образом, величина выигрыша от применения методики комбинированного распараллеливания по сравнению с методикой крупноблочного $L^{'}/L$ приближенно равна

$$g = \frac{1+\alpha\beta(N+1)}{1+\beta},\ \beta = M_2/M_1 \tag{3}$$

Следовательно, ускорение от применения методики комбинированного распараллеливания выражается величиной

$$S \approx M\frac{1+\alpha\beta(N+1)}{1+\beta}.$$

3 Распределительный способ получения псевдослучайных чисел и методика распределенного численного статистического моделирования для различных архитектур вычислительных систем

1. Для получения базовой последовательности псевдослучайных чисел $\{\alpha_n\}$ предлагается использовать следующий 128-битный конгруэнтный генератор псевдослучайных чисел (метод вычетов) [4]:

$$u_0 = 1,\ u_n \equiv u_{n-1}A \pmod{2^{128}}, \qquad \alpha_n = u_n 2^{-128}, \qquad n = 1, 2, \ldots, \tag{4}$$

где множитель A определяется выражением $A \equiv 5^{100109} \pmod{2^{128}}$.

2. При реализации методики распределенного статистического моделирования целесообразно определять различные подпоследовательности базовых псевдослучайных чисел для вычислительных экспериментов (конкретных расчетов для выбранной задачи), процессоров, реализаций (отдельных случайных испытаний) и их элементов. Такой способ можно назвать **распределительным**, так как он особенно удобен для распределенных вычислений.

Базовая последовательность $\{\alpha_n\}$ предварительно разделяется на подпоследовательности заданной длины μ, начинающиеся с чисел $\alpha_{k\mu}$, $k = 0, 1, 2, \ldots$. Значение μ должно выбираться из тех соображений, что μ псевдослучайных чисел практически достаточно для реализации соответствующего укрупненного блока. Для метода вычетов начальное значение k-й подпоследовательностей получается по формуле

$$u_{(k+1)\mu} \equiv u_{k\mu}A^{\mu} (\mathrm{mod}\ 2^{128}),\ \alpha_{k\mu} = u_{k\mu}2^{-128}, k = 0, 1, 2, \ldots. \tag{5}$$

Такая методика распределения псевдослучайных чисел позволяет определять одинаковые подпоследовательности целиком для каждого вычислительного эксперимента, процессора, реализации и ее элементов. Ее использование улучшает корреляционную зависимость между результатами расчетов для разных вариантов задач, что особенно полезно при параметрическом анализе вероятностных моделей.

3. Для получения псевдослучайных чисел при моделировании по методике комбинированного распараллеливания на гибридной вычислительной системе предлагается применять следующую процедуру:

- базовая последовательность $\{\alpha_n\}$ разделяется на подпоследовательности для вычислительных экспериментов (обозначим их длину как n_e);

- подпоследовательности для вычислительных экспериментов разделяются на подпоследовательности для вычислительных узлов (обозначим их длину как n_n);
- подпоследовательности для вычислительных узлов разделяются на подпоследовательности для групп вычислительных ядер (обозначим их длину как n_g);
- подпоследовательности для групп вычислительных ядер разделяются на подпоследовательности для вычислительных ядер (обозначим их длину как n_c);
- подпоследовательности для вычислительных ядер разделяются на подпоследовательности для реализаций (обозначим их длину как n_r);
- подпоследовательности для реализаций разделяются на подпоследовательности для элементов реализации (обозначим их длину как n_l).

Таким образом, предлагаемая методика позволяет эффективно организовать проведение коррелированных расчетов при моделировании деревьев частиц с учетом архитектуры гибридных вычислительных систем. Отметим, что эту методику можно также использовать при моделировании на массивно-параллельных вычислительных системах.

Подчеркнем, что при моделировании элементов реализации дерева частиц, распределение которых сильно меняются при изменении параметров задачи, целесообразно использовать псевдослучайные числа из подпоследовательностей для элементов реализации, в частности, это важно при применении метода исключения [3].

4. Для практической реализации алгоритмов моделирования траекторий ветвящихся процессов предлагается использовать библиотеку `PARMONC` [5], предназначенную для запуска приложений распределенного численного статистического моделирования на массивно-параллельных и гибридных вычислительных системах с использованием сопроцессоров Intel Xeon Phi. В настоящее время библиотека установлена на вычислительных кластерах ЦКП «Сибирский суперкомпьютерный центр» СО РАН [6].

При использовании библиотеки `PARMONC` алгоритм, использующий методику крупноблочного распараллеливания, на массивно-параллельной вычислительной системе можно исполнять с помощью библиотечных процедур `parmonc1d` или `tparmonc1d`; методику комбинированного распараллеливания на гибридной вычислительной системе — с помощью процедур `parmonc1d_h` или `tparmonc1d_h` [7]. В каждой из выбранных процедур соответствующий вариант распределительного способа получения псевдослучайных чисел автоматически реализуется путем использования библиотечных функций `rnd128` (параллельный 128-битный генератор), `rnd128el` (параллельный 128-битный генератор с выбором номера моделируемого элемента реализации). Библиотечные процедуры позволяют проводить коррелированные расчеты с использованием распределительного способа получения псевдослучайных чисел путем явного выбора пользователем номера подпоследовательности для вычислительных экспериментов.

4 Апробация предложенных методов распараллеливания при моделировании процесса развития электронных лавин в газе

1. Рассматриваемая ниже вероятностная модель процесса развития электронных лавин в газе описана в работе [8].

В ходе моделирования с катода из точки $r = (0, 0, 0)$ в момент времени $t = 0$ происходит эмиссия n_0 электронов с нулевыми энергиями. Траектории движения каждого из электронов прослеживаются либо до достижения времени t_{max}, либо до достижения уровня $z = d$; с этой целью делаются одинаковые шаги Δt по времени.

За один шаг по времени электрон с энергией T_{i-1} перемещается из точки r_{i-1} в точку r_i, где i — номер шага, а его координата и скорость $V_i = (V_x, V_y, V_z)$ изменяются по формулам

$$r_i = r_{i-1} + V_{i-1}\Delta t - eE(\Delta t)^2/(2m_0), \qquad V_i = V_{i-1} - eE\Delta t/m_0, \tag{6}$$

где e — заряд электрона, m_0 — его масса; здесь учитывается ускорение электронов в электрическом поле.

В конце каждого временного шага разыгрывается столкновение с вероятностью

$$P = 1 - \exp\Big(-\sigma_{tot}(T_i)N\Delta\ell\Big), \tag{7}$$

где σ_{tot} — полное микроскопическое сечение взаимодействий, $\Delta\ell = |r_i - r_{i-1}|$. Затем разыгрывается тип взаимодействия в соответствии с заданными сечениями упругого рассеяния, возбуждения и ионизации; для этого используются сечения 24-х типов взаимодействий для азота. Параметры частицы после взаимодействия определяются в зависимости от его типа, при ионизации определяются параметры вторичной частицы [8].

В соответствии с описанными выше особенностями вычисления элементов реализации и значений функционалов, моделирование осуществляется по следующим шагам:

1. инициализация начального состояния лавины в момент времени $t = 0$: в магазин помещается n_0 частиц с параметрами $x = y = z = V_x = V_y = V_z = t = 0$;

2. выбор из магазина очередной частицы $\{x, y, z, V_x, V_y, V_z, t\}$; установка параметра $\tau = t$; если в магазине не осталось частиц — переход к п. 8;

3. вычисление новых координаты и скорости частицы согласно (6); установка параметра $\tau = \tau + \Delta t$; если $\tau \geq t_{max}$ или $z \geq d$ — переход к п. 2;

4. розыгрыш столкновения с вероятностью (7);

5. розыгрыш типа взаимодействия в соответствии с заданными сечениями упругого рассеяния, возбуждения и ионизации; изменение скорости частицы в соответствие с типом взаимодействия; при рождении новой частицы — помещение ее в магазин;

6. вычисление функционалов в момент времени τ, при необходимости;

7. переход к п. 2;

8. окончание моделирования реализации.

2. Расчеты по методике комбинированного распараллеливания производились на кластере МВС-10П в МСЦ РАН, где на каждом вычислительном узле доступны два 8 ядерных процессора Intel Xeon E5-2690 (2.9 GHz) и два 61 ядерных сопроцессора Intel Xeon Phi SE10X (1.1 GHz) [9]. При вычислениях использовалась библиотека `PARMONC` [5] и модифицированная для сопроцессоров Intel Xeon Phi параллельная программа `ELSHOW` [8].

Физические параметры задачи: расстояние между катодом и анодом $d = 0.7$ см, давление газа $P = 300$ Торр, z-компонента напряженности электрического поля $E_z = -1.65 \cdot 10^5$ В/см; параметры для моделирования деревьев: $n_0 = 1$, $\triangle t = 10^{-7}$ нс. Рассматривалось значения $t_{max} = 4 \cdot 10^{-11}$ нс и $t_{max} = 6 \cdot 10^{-11}$ нс. Функционалы оценивались в 10 узлах по времени с шагом $0.1 \cdot t_{max}$.

Особенности моделирования одной реализации лавины по методике мелкоблочного распараллеливания:

- моделирование на основном ядре производилось до накопления примерно 620 частиц (п. 1 алгоритма мелкоблочного распараллеливания); это занимало в среднем менее 1 с машинного времени;

- накопленные вторичные частицы (примерно 610 частиц) отправлялись на сопроцессор, около 10 частиц оставалось на основном ядре (п. 2 алгоритма мелкоблочного распараллеливания); магазины частиц располагались в общей для всех сопроцессоров области памяти;

- массивы с функционалами располагались на сопроцессоре в общей для всех его ядер области памяти (п. 3 алгоритма мелкоблочного распараллеливания);

- массивы с функционалами отправлялись с сопроцессора на основной процессор после каждой смоделированной реализации (п. 4 алгоритма мелкоблочного распараллеливания); объем пересылаемых данных составил примерно 14 Mb;

- метод «русской рулетки» не применялся.

На одном вычислительном узле сравнивались методики крупноблочного и комбинированного распараллеливания; для каждого сочетания методики распараллеливания и величины t_{max} оценивались значения функции $L = L(t_{max})$, где $L(t_{max})$ — среднее число реализаций лавины частиц, полученных к моменту машинного времени t_{max}. При крупноблочном распараллеливании использовались только 16 ядер двух

Таблица 1: Сравнение двух методик распараллеливания.

t_{max}	$4 \cdot 10^{-11}$ нс	$6 \cdot 10^{-11}$ нс
$< n(t_{max}) >$	$\approx 3.3 \cdot 10^4$	$\approx 5.1 \cdot 10^6$
t_1	37.2 с	5697.1 с
$t_1^{(comb)}$	8.3 с	1291.3 с

основных процессоров: $M = 16$; при комбинированном распараллеливании помимо основного процессора использовались два сопроцессора: $M_1 = 14, M_2 = 2, N = 61$.

В таблице 1 представлены данные расчетов для двух значений t_{max}. Приводится среднее число частиц в лавине к моменту времени t_{max}; среднее время моделирования одной реализации: t_1 — для крупноблочной методики распараллеливания, $t_1^{(comb)}$ — для комбинированной. Для каждой методики распараллеливания величина t_1 рассчитывалась по формуле $t_1 = T(L(t_{max}))/L(t_{max})$, где $T(L)$ — машинное время, затраченное на моделирование L реализаций.

Отметим что в формуле (3) для использованной при расчетах гибридной вычислительной системы $M_2/M_1 = 2/14 = 1/7$ и величина $\alpha \approx 0.4$ (т.е. ядро сопроцессора рассчитывает часть «дерева» примерно в 2.5 медленнее, чем основное ядро); практически достигнутая величина выигрыша составила примерно 4.4. Заметим, что при таких значениях параметров максимальная («нереальная») величина выигрыша равна $62 \cdot 0.4 \approx 25$.

Результаты проведенного сравнения показывают целесообразность применения методики комбинированного распараллеливания для численного статистического моделирования траекторий ветвящихся процессов.

Список литературы

[1] Ермаков С. М., Некруткин В. В., Сипин А. С. Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. М.: Наука, 1984.

[2] Кольчужкин А. М., Учайкин В. В. Введение в теорию прохождения частиц через вещество. М.: Атомиздат, 1978.

[3] Михайлов Г. А., Войтишек А. В. Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. М.: Издательский центр «Академия», 2006. 368 с.

[4] Марченко М. А., Михайлов Г. А. Распределенные вычисления по методу Монте-Карло // Автоматика и телемеханика. 2007. № 5. С. 157–170.

[5] Marchenko M. A. PARMONC — A Software Library for Massively Parallel Stochastic Simulation // Lecture Notes in Computer Science. 2011. Vol. 6873. P. 302–315.

[6] Центр коллективного пользования «Сибирский суперкомпьютерный центр» (ЦКП ССКЦ СО РАН): [Электронный ресурс]. Новосибирск. 2001–2016. http://www.sscc.icmmg.nsc.ru.

[7] Марченко М. А. Документация для библиотеки PARMONC: [Электронный ресурс] // Центр коллективного пользования «Сибирский Суперкомпьютерный центр». http://www2.sscc.ru/PPP/Mat-Libr/parmonc.pdf.

[8] Lotova G. Z., Marchenko M. A., Mikhailov G. A. et al. Numerical statistical modelling algorithms for electron avalanches in gases // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2014. Vol. 29, no. 4. P. 251–263.

[9] Межведомственный суперкомпьютерный центр Российской академии наук (МСЦ РАН): [Электронный ресурс]. Москва. 2017. http://www.jscc.ru.

Михаил Александрович Марченко — к.ф.-м.н., заведующий лабораторией Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: marchenko@sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ В ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЁТАХ ГЕНЕРАЦИИ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЦУНАМИ

А. Г. Марчук

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 551.466.62

В работе анализируются граничные условия, которые применяются при численном моделировании процессов генерации и распространения волн цунами в различных случаях. Особое внимание уделяется генерирующим граничным условиям, которые позволяют легко генерировать волну с заданными характеристиками (амплитуда, период и, вообще, форма сигнала или мареограмма). Известно, что в распространяющейся волне цунами скорость водного потока однозначно определяется высотой волны и глубиной.Поэтому, путём принудительного изменения уровня водной поверхности в граничных узлах расчётной сетки и заданием компонент скорости водного потока можно получить волну, распространяющуюся от границы внутрь области. При помощи такого приёма реализован численный расчёт распространения цунами от очага до берега на последовательности сгущающихся сеток. В этом вычислительном эксперименте параметры волны цунами из области в подобласть передаются именно через граничные условия. Ещё таким способом можно модельным источником малого размера генерировать очень длинную волну цунами. В частности, такую волну, которая на заданной линии имеет заданный профиль. Иногда такое требуется при тестировании численных методов расчёта цунами.

Ключевые слова: численный расчёт распространения цунами, граничные условия.

При численном моделировании различных динамических процессов, например, распространения волн область моделирования обычно является ограниченной в пространстве. Поэтому, при достижении волной границ расчётной области необходимо учитывать реакцию оставшейся части океана (не входящей в область моделирования) на колебания водной поверхности внутри расчётной области. По большому счёту, возможны два варианта: свободный выход волны за пределы расчётной области без отражения и отражение от тех границ, которые представляют береговые линии. Следовательно, в численных расчётах распространения длинных волн обычно используются два типа граничных условий: отражения и свободный выход волны за пределы расчётной области. Рассмотрим, каков конкретно вид должны иметь оба эти граничные условия при численных расчётах распространения волн цунами по модели мелкой воды [1].

Рассмотрим одномерную систему дифференциальных уравнений мелкой воды. В одномерном случае при отсутствии внешних сил (кроме силы гравитации) эти уравнения могут быть записаны в виде

$$\frac{\partial u}{\partial t} + g\frac{\partial \eta}{\partial x} = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial (Du)}{\partial x} = 0. \tag{2}$$

Здесь u — горизонтальная скорость потока воды в волне, η — возвышение водной поверхности относительно невозмущенного уровня, g — ускорение силы тяжести, D — глубина. Из уравнений мелкой воды следует, что скорость волны не зависит от её длины и определяется формулой Лагранжа [1]

$$c = \sqrt{gD}. \tag{3}$$

Эта формула имеет основополагающее значение для кинематики длинных волн (в том числе цунами). Фронт волны может быть определён, как граница между той частью акватории, где вода покоится (возвышение η и компоненты скорости равны нулю), и той частью, куда к этому моменту возмущение от источника

уже дошло ($\eta \neq 0$). Для описания динамики волн цунами в прибрежной зоне, где амплитуда цунами возрастает, а глубина становится меньше, применяется нелинейная модель мелкой воды [2], в рамках которой скорость распространения волн выражается формулой

$$c = \sqrt{g(D+\eta)}. \tag{4}$$

Итак, сначала получим приближённую формулу для величины горизонтальной скорости u воды при движении волны цунами, если глубина равна D. Такую зависимость можно получить явным образом из линеаризованных уравнений мелкой воды (1)–(2). Мы уже знаем, что в рамках этой модели волна распространяется со скоростью, определяемой формулой Лагранжа (3). Представим бегущую волну в виде гармонической функции

$$\eta = a \cdot cos(kx - \omega t), \tag{5}$$

которая описывает волну высотой a, бегущую в сторону увеличения x координаты со скоростью $c{=}\omega/k$. Подставив выражение для смещения водной поверхности (5) в уравнение (1), получаем

$$\frac{\partial u}{\partial t} = gka \cdot sin(kx - \omega t). \tag{6}$$

Интегрируя по t обе части уравнения (6), получаем зависимость скорости потока в волне от амплитуды и глубины

$$u = \int \frac{gk}{-\omega} a \cdot sin(kx - \omega t) d(kx - \omega t) = \frac{g}{c}(a \cdot cos(kx - \omega t)) = \frac{g}{\sqrt{gD}}\eta = \eta\sqrt{\frac{g}{D}}. \tag{7}$$

Таким образом, в гармонической волне вида (5) скорость течения воды определяется по формуле (7). Но в силу линейности процесса, для любой длинной волны, которая может быть представлена в виде суперпозиции гармонических волн разной частоты и является решением системы линейных дифференциальных уравнений мелкой воды (1)–(2), формула (7) будет справедлива. А для квазилинейной системы уравнений мелкой воды, где скорость фронта и гребня волны несколько различаются и определяются зависимостью (3), формула для горизонтальной скорости потока в движущейся волне будет иметь вид

$$u = \eta\sqrt{\frac{g}{D+\eta}}, \tag{8}$$

где η — высота волны, D — глубина, g — ускорение силы тяжести. Вот такая корреляция скорости водного потока в волне и её амплитуды позволяет строить граничные условия при численном моделировании цунами в ограниченной области океана.

Рассмотрим сначала более простое граничное условие полного отражения волны (или непротекания), которое обычно ставится в узлах расчётной сетки вдоль береговой линии, являющейся хорошим отражателем волны цунами. Пусть для определённости левая граница прямоугольной расчётной области является береговой линией, от которой волна должна отразиться. Обычно для численного решения дифференциальных уравнений мелкой воды используется прямоугольная сетка. В данной области динамическими параметрами волнового движения являются дискретные переменные $\eta(i,j)$, $u(i,j)$ и $v(i,j)$ $(i = 1,\ldots,n;\ j = 1,\ldots,m)$, дающие значения возвышения свободной поверхности и компонент скорости водного потока в узлах сетки. Также в каждом узле задана глубина $D(i,j)$. В результате расчёта по явной разностной схеме на очередном n-ом шаге по времени вычислены значения дискретных переменных во всех внутренних узлах расчётной сетки $\eta_{i,j}^{n+1}$, $u_{i,j}^{n+1}$, $v_{i,j}^{n+1}$, $(i = 2,\ldots,n-1;\ j = 2,\ldots,m-1)$. Для того, чтобы на левой границе были реализованы условия отражения волны, могут быть использованы следующие простейшие граничные условия:

$$\eta_{1,j}^{n+1} = \eta_{2,j}^{n+1}, \quad u_{i,j}^{n+1} = 0, \quad v_{1,j}^{n+1} = v_{2,j}^{n+1}, \tag{9}$$

означающие, что компонента скорости в направлении оси X в граничных узлах равна нулю.

Граничные условия свободного выхода волны за пределы расчётной области имеют более сложный вид. В литературе они иногда называются условиями Зоммерфельда. Суть их заключается в переносе параметров течения из ближайших внутренних узлов сетки в граничные, учитывая направление движения волны и скорость, определяемую из (3). В частности, на левой границе расчётной области для реализации свободного выхода волны из области могут быть использованы следующие граничные условия:

$$\eta_{1,j}^{n+1} = \eta_{1,j}^{n} \cdot \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x}\sqrt{gD_{1,j}} \cdot \cos(\alpha)\right) + \eta_{2,j}^{n} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x}\sqrt{gD_{2,j}} \cdot \cos(\alpha), \tag{10}$$

$$u_{1,j}^{n+1} = u_{1,j}^{n} \cdot \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x}\sqrt{gD_{1,j}} \cdot \cos(\alpha)\right) + u_{2,j}^{n} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x}\sqrt{gD_{2,j}} \cdot \cos(\alpha), \tag{11}$$

$$v_{1,j}^{n+1} = v_{1,j}^{n} \cdot \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x}\sqrt{gD_{1,j}} \cdot \cos(\alpha)\right) + v_{2,j}^{n} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x}\sqrt{gD_{2,j}} \cdot \cos(\alpha), j = 2, \ldots, m-1. \tag{12}$$

Здесь α обозначает направление движения волны и вычисляется по формуле

$$\cos(\alpha) = \sqrt{\frac{(u_{2,j}^{n})^2}{(u_{2,j}^{n})^2 + (v_{2,j}^{n})^2}}. \tag{13}$$

Здесь следует заметить, что коэффициент при первых слагаемых в формулах (10)–(12) не может быть отрицательным ввиду условия устойчивости Куранта для явных разностных схем, которое не допускает продвижения волны более чем на один шаг сетки по пространству за один шаг по времени. На других границах такого рода граничные условия слегка изменятся.

Остановимся теперь на "генерирующих" граничных условиях. Они позволяют генерировать волну, распространяющуюся внутрь расчётной области. При этом, это может быть не только внешняя граница области, но и граница какой-либо подобласти. Ввиду того, что скорость водного потока в движущейся волне однозначно определяется из (8), то путём принудительного задания на какой-либо границе ненулевых значений амплитуды и компонент скорости потока можно получить волну цунами с заданными параметрами, распространяющуюся внутрь расчётной области. С помощью такого приёма можно вести расчёт распространения цунами на последовательности вложенных сеток.

Численный расчёт распространения цунами на последовательности сгущающихся сеток позволяет получить детальное распределение высоты волны вдоль некоторых участков побережья, которые мы считаем важными с точки зрения прогноза цунами. Если вести расчёт во всей области, включающей в себя и район генерации и береговую линию с очень малым шагом по пространству, обеспечивая тем самым детальность оценок, то из-за условия устойчивости придётся считать с очень малым шагом по времени, что приведёт к большим затратам машинного времени и вычислительных ресурсов. Приведём пример численного расчёта распространения цунами от очага, находящегося на значительном расстоянии от берега до мелководных бухт, где обычно сосредоточены объекты инфраструктуры и жилые дома.

Рассмотрим прямоугольную акваторию у северо-восточного побережья острова Хонсю (Япония), которая включает в себя цунамигенную зону вдоль глубоководного желоба. Назовём эту расчётную область — B_1. Длина шагов расчётной сетки 3219×3219 в этой области равно 0.00248 географического градуса, что примерно составляет 280 м в направлении с севера на юг. Цифровой рельеф дна и суши этой расчётной области B_1, простирающейся от 140 до 147.9944 градусов В.Д. и от 34.00 до 41.9948 градусов С.Ш., который был построен на основе данных [3] и [4], показан на рис. 1.

На первом этапе рассчитывается распространение волны цунами в области B_1 от модельного очага, изображенного на рис. 1, и, практически, до берега. При этом расчёте шаг по времени был выбран равным 0.5 сек. В процессе расчёта на каждом временном шаге мы записываем в файл значения параметров волны (возвышение свободной поверхности и компоненты скорости течения) во всех точках границы области B_2 , которая расположена внутри исходной расчётной области B_1 (рис. 2). Естественно, рассматриваются только те границы, где есть точки, располагающиеся в море, то есть в данном случае это верхняя, правая и нижняя границы области B_2. Записывать граничные данные можно с самого начала расчёта в области B_1. Прекратить запись можно после того, как волна цунами полностью (как минимум один полный период) пройдёт границу области B_2. После этого начинаем расчёт цунами в области B_2 на сетке с шагом 70 м. При этом в начальный момент водная поверхность там покоится. На каждом очередном временном шаге происходит считывание сохранённых параметров течения вдоль границ расчётной области B_2. Одновременно эти данные интерполируются на более детальную расчётную сетку, шаг которой в данном случае в 4 раза меньше, чем в области B_1. В результате от границ внутрь области B_2 распространяется волна цунами в точности с теми же параметрами, как в области B_1 (рис. 2, 3).

На втором этапе в процессе расчёта на каждом временном шаге, как и в области B_1 мы записываем в файл значения параметров волны (возвышение свободной поверхности и компоненты скорости течения) во всех точках границы подобласти B_3, которая расположена внутри расчётной области B_2 (рис. 3).

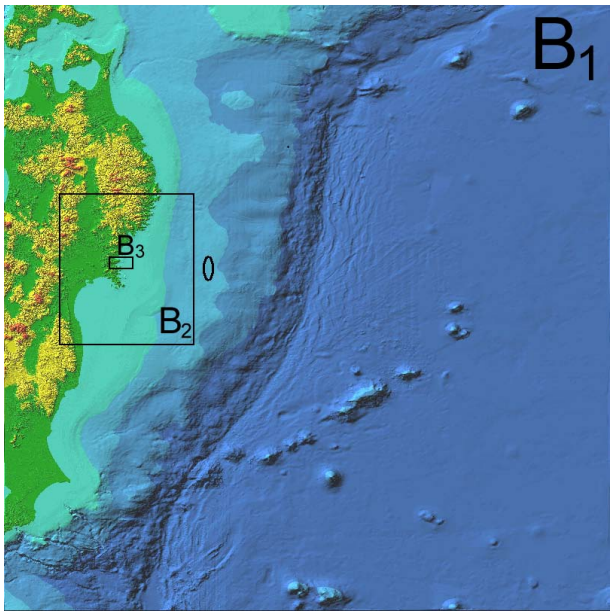


Рис. 1: Визуализация цифровой батиметрии исходной расчётной области у берегов Японии, а также расположение очага цунами и вложенных сеток

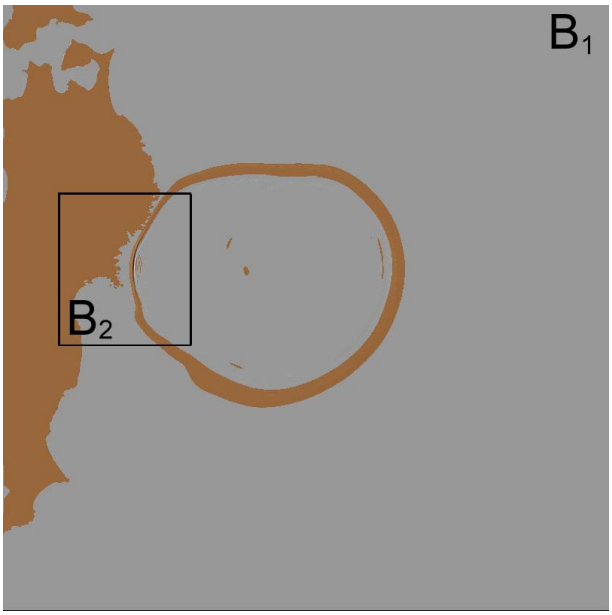


Рис. 2: Положение волны цунами, распространяющейся от модельного источника в области B_1

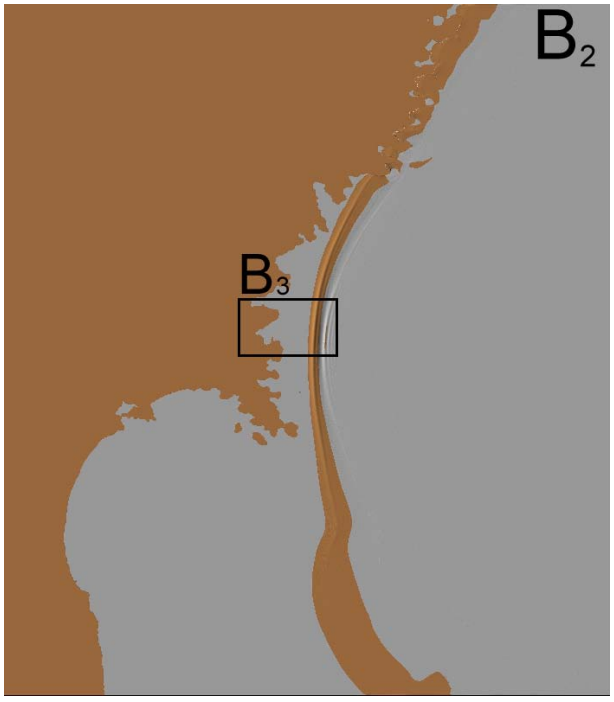


Рис. 3: Визуализация результатов расчёта распространения цунами в подобласти B_2

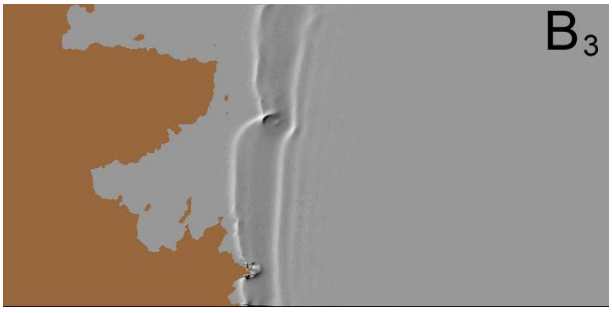


Рис. 4: Визуализация одного из моментов распространения цунами в расчётной области B_3

На последнем этапе рассчитывается распространение волны в подобласти B_3, покрывающей прибрежную акваторию с несколькими мелководными бухтами (рис. 4). Здесь, как и раньше, параметры волны цунами передаются в эту расчётную подобласть через граничные условия на верхней, правой и нижней границе. Значения параметров течения здесь генерируются путём интерполяции результатов расчёта в области B_2 на более детальную расчётную сетку с шагом 17 м. Результатом всех этапов расчёта является распределение высоты волны цунами вдоль побережий бухт.

а *б*

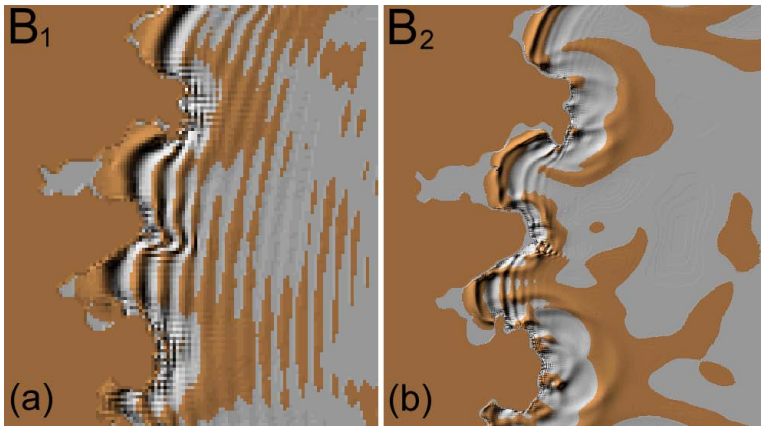


Рис. 5: Сравнение водной поверхности в расчётных областях B_1 и B_2

а *б*

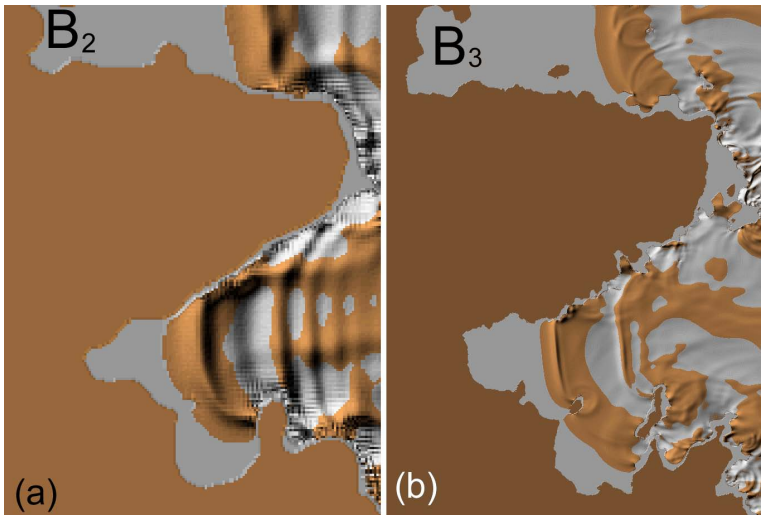


Рис. 6: Результаты расчётов распространения цунами в областях B_2 и B_3 с применением двухэтапного $B_1 - B_2$ (слева) и трёхэтапного $B_1 - B_2 - B_3$ (справа) вычислительного эксперимента

Численные расчёты выявили существенную разницу у берега в параметрах волны, вычисленной на последовательности сгущающихся сеток и при использовании единой сетки детальностью 277 м для всей расчётной области B_1. Сравнение водной поверхности для случаев единой сетки и при использовании только двух сеток B_1 и B_2 показано на рис. 5*а*, *б*. Из рисунков видно, что на более грубой сетке у волны наблюдается значительно больший "хвост", состоящий из последовательности волн меньшей амплитуды, чем головная волна. Аналогичная картина наблюдается и при сравнении результатов двухэтапного расчёта $B_1 - B_2$ и расчёта на последовательности из трёх сгущающихся сеток $B_1 - B_2 - B_3$ (рис. 6*а*, *б*).

Генерирующие граничные условия могут ставиться не только на внешних границах расчётной области, но и внутри области, например, вокруг модельного источника цунами. При этом таким способом можно генерировать волну с заданными параметрами (период и форма волнового сигнала). Такой способ позволяет небольшому по размерам источнику породить волну, имеющую длину, значительно превышающую поперечник этого источника, чего не может быть при использовании для генерации поршневой модели.

Заключение

Граничные условия при численных расчётах распространения цунами могут использоваться не только для обеспечения отражения волн от береговых линий и других отражающих границ и свободного выхода волны

из области расчётов, но и для передачи параметров волны, распространяющейся из одной части расчётной области в подобласть, где дальнейший расчёт ведётся на более детальной сетке. Таким способом можно находить детальное распределение высоты волны вдоль интересующего нам участка побережья. Ещё с помощью генерирующих граничных условий можно получать волну цунами с заданными параметрами, что немаловажно для тестирования численных алгоритмов.

Список литературы

[1] Стокер Дж. Дж. Волны на воде. — М.: ИЛ, 1959. 617 с.

[2] Марчук Ан.Г., Чубаров Л.Б., Шокин Ю.И. Численное моделирование волн цунами. — Сиб. Отд. Изд. Наука, Новосибирск, 1983, 174 с

[3] http://jdoss1.jodc.go.jp/cgi-bin/1997/depth500_file

[4] http://www.gdem.aster.ersdac.or.jp/search.jsp

Андрей Гурьевич Марчук — д.ф.-м.н., вед. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: mag@omzg.sscc.ru.
Дата поступления — 26 мая 2017 г.

СЛЕДЫ ПРИРОДНЫХ КАТАСТРОФ: ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ИЗОБРАЖЕНИЙ НА ОСНОВЕ ШИАРЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

А. Г. Марчук[1], А. Г. Зотин[2], М. А. Курако[3], К.В. Симонов[4]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Сибирский государственный университет науки и технологий, 660037, Красноярск*

[3] *Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск*

[4] *Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск*

УДК 550.3

Разработана методика обработки изображений, включающая в себя применение алгоритмов шиарлет-преобразования в сочетании с процедурой контрастирования изображений. На экспериментальном материале показано, что предлагаемая методика является эффективным инструментом для анализа внутренних геометрических черт изучаемых объектов — следов проявлений морских природных катастроф в береговой зоне.

Ключевые слова: обработка изображений, шиарлет-преобразование, следы морских природных катастроф, геометрический анализ, контрастирование.

Введение

В последнее годы появляются всё более совершенные и сложные инструментальные комплексы, применяемые в экспериментальных исследованиях в проблеме цунами, в частности, связанных с анализом их проявлений в береговой зоне. При этом известные алгоритмические средства не вполне соответствуют требованиям по быстродействию и качеству обработки сложных визуальных данных, которые регистрируются вновь создаваемыми приборами.

В современной литературе приводятся различные варианты для автоматизации процесса обработки таких изображений. В то же время получаемые результаты не всегда отвечают требованиям современной практики. Успешные методики для эффективного и более точного решения этой задачи могут быть в действительности применены к гораздо более широкому кругу областей, в том числе к визуализации изображений для целей морфологического анализа, применительно к исследованию проявлений морских природных катастроф.

Во многих работах приводятся варианты применения различных вычислительных средств для решения указанных актуальных задач. В то же время применение алгоритмов шиарлет-преобразования в сочетании с предлагаемой методикой контрастирования является новым вычислительным подходом в данной предметной области. Описаны отдельные схемы выполнения конкретных исследований с применением частных специализированных алгоритмов в данных предметных областях при решении указанных задач.

1 Шиарлет-преобразование данных наблюдений

В работах Д. Донохо и Г. Кутинек [1] и Дж. Старка, М. Елада и Д. Донохо [2] описан метод разделения изображений на основе анализа морфологических компонентов. В этом подходе предполагается, что каждое из изображений является линейной комбинацией из нескольких компонентов, которые морфологически различны, например, точки, кривые и текстуры. Успех этого метода основывается на предположении, что каждый из компонентов редко представлен в определённой системе представлений. Донохо и Кутинек [1] разработали математическую основу, в которой понятие успешного разделения строго определяется и может

быть математически доказано в случае разделения точечных и криволинейных структур, которую назвали геометрическим разделением.

В работе используются две реализации дискретного шиарлет-преобразования. В [3] представлен алгоритм быстрого дискретного шиарлет-преобразования (FFST — fast finite shearlet transform). В его основу положены дискретное быстрое прямое и обратное преобразования Фурье. В качестве материнского вейвлета используется вейвлет Мейера. Область частот разбивается на четыре конуса и область низких частот. В теории указанный алгоритм применим к изображениям произвольных размеров, однако данная реализация принимает на вход только квадратные изображения, поскольку возникают затруднения при обращении с коэффициентами на диагоналях.

Альтернативный подход к вычислению шиарлет-преобразования (алгоритм ShearLab) описан в работе [4]. Данная реализация основывается на дискретном быстром преобразовании Фурье, однако иным образом интерпретирует область частот. Плоскость, согласно общей схеме, разбивается на конусы, область низких частот и множество точек, оказавшихся на стыках конусов. Затем осуществляется переход к псевдополярным координатам, в которых вычисляется модифицированное преобразование Фурье. Поскольку переход к псевдополярным координатам не является изометрическим отображением, возникает необходимость в восстановлении «плотности» фрагментов, получающихся при дискретизации области частот.

Данная реализация алгоритма шиарлет-преобразования выполняет следующую последовательность действий: классическое преобразование Фурье; замена переменных и переход к псевдополярной системе координат; компенсация радиальной плотности путём домножения на довешивающие функции; разбиение плоскости на прямоугольные фрагменты; обратное преобразование Фурье каждого фрагмента.

Восстановление исходного изображения из коэффициентов его шиарлет-преобразования выполняется на основе сопряжённых действий в обратном порядке.

Известны следующие результаты, которых можно добиться, применяя к коэффициентам шиарлет-преобразования различные фильтры: выделение контуров объектов на изображениях; шумоподавление; разделение изображений (геометрический анализ).

2 Методика обработки данных

Исходя из описанных выше теоретических и алгоритмических результатов, представлена методика обнаружения закономерностей и спектральной декомпозиции пространственных данных и изображений, которая позволяет решать широкий класс задач аппроксимации выделенных структур-объектов в рамках обработки и анализа изображений проявлений природных катастроф. При этом на основе базовых алгоритмов шиарлет-преобразования решаются следующие задачи: разделение точек и кривых на изображениях, выделение контуров, эффективная визуализация данных (контрастирование).

Исследование алгоритма FFST показало, что контуры объектов можно получить в виде суммы коэффициентов шиарлет-преобразования для фиксированного масштаба и всевозможных значений сдвигов и смещений. В связи с этим предлагается использовать эту особенность при решении указанной задачи аппроксимации:

$$f_{\mathrm{contour}} = \sum_{k=0}^{k_1} \sum_{m=0}^{m_1} sh_\psi[f](j^*, k, m),$$

где sh_ψ ставит в соответствие исследуемой функции f шиарлет-коэффициенты $sh_\psi[f](j^*, k, m)$, полученные для масштаба j^*, сдвига k и смещения m, k_1 — количество сдвигов, m_1 — количество смещений.

Для оценки эффективности работы алгоритмов шиарлет-преобразования использовалось несколько критериев. Один из них — среднее время работы алгоритма на одном изображении. Анализ результатов показал, что алгоритм ShearLab работает быстрее FFST на изображениях больших размеров, в то время как FFST имеет незначительное преимущество на небольших изображениях.

Предлагается следующая методика выполнения контрастирования изображений после применения алгоритмов шиарлет-преобразования:

- преобразования осуществляются поэлементно для выделения интересующих деталей изучаемого объекта;
- выполняется исключение несущественных особенностей на изображении (фон);
- выполняется приведение изображения к виду, который удобен для визуальной интерпретации и дальнейшего анализа;

- выполняется оценка расчётных искомых параметров (решение задач на выделение контуров и шумоподавление).

3 Процедура контрастирования

Отметим, что алгоритмическая процедура контрастирования — подбора цветов и распределение плотности изолиний на изображении — соответствует известной методике построения упругой карты по пространственным данным [5]. Рассмотрим, следуя [5], алгоритмическое обеспечение для контрастирования изучаемых изображений. Пусть анализируемый объект представляет собой ограниченное двумерное многообразие, вложенное во множество исследуемых данных наблюдений (изучаемое изображение) таким образом, чтобы форма и расположение многообразия отражали основные особенности распределения точек исходных данных на изображении.

Для описания такой карты используется вектор-функция $\vec{r} = \vec{r}(x, y)$ от двух координат x и y, называемых внутренними координатами. Линии, вдоль которых одна из внутренних координат принимает постоянное значение, задают внутреннюю координатную сетку. Каждая точка данных на изображении задаётся, с одной стороны, m «внешними» (исходными) координатами, а с другой стороны, двумя внутренними координатами. При построении вычислительных процедур предполагается, что расчёты выполняются не с многообразием (картой), а с его точечной аппроксимацией, определяемой сеткой узлов. Для описания сетки достаточно mpq чисел, где m — размерность пространства, а p и q — количество узлов сетки по каждому измерению. Предполагается также, что длина ребра сетки не велика, поскольку карта аппроксимирует данные и достаточно плотно к ним прилегает. Простейшим способом проецирования является сопоставление каждой точке данных ближайшего узла сетки. Множество данных располагается на поверхности сетки так, чтобы квадрат расстояния от точек данных до ближайшего узла был минимальным.

Сформулируем в соответствии с указанной постановкой задачи критерий оптимальности, в который бы входили не начальные и конечные положения точек (до и после проецирования на карту), а положения узлов карты относительно исходных данных. Это позволит существенно снизить размерность задачи оптимизации.

Рассмотрим двумерную прямоугольную сетку узлов, в которой p узлов по горизонтали и q узлов по вертикали. Перенумеруем узлы этой сетки с помощью двух индексов — $y^{ij}, i = 1, \ldots, p,\ j = 1, \ldots, q$. Построенная сетка располагается во множестве точек данных так, чтобы каждой точке данных сопоставлялся ближайший узел сетки. Точки данных имеют вид $t_{ij}(x, y, M)$, где (x, y) — её условные координаты, M — интенсивность (цвет), характеризующая особенности изучаемого объекта. Такой способ разбивает множество данных на pq подмножеств K_{ij}, в пределах каждого из которых точки подмножества окажутся ближе к y^{ij}, чем к любому другому узлу. Определим K_{ij} следующим образом:

$$K_{ij} = \{t \mid t \in P_k, ||y^{ij} - t||^2 \leqslant \varepsilon\}.$$

В общем случае сетку можно деформировать двумя способами — растягивать её вдоль и изгибать поперёк. В одном случае она стремится сохранить свою длину, а в другом — свою плоскую форму. Следовательно, сетка должна иметь следующие свойства: свойство растяжения (это свойство обеспечивает равномерность сетки); свойство гладкости; свойство близости к точкам данных.

Чтобы сетка обладала этими свойствами, необходимо в минимизируемый критерий добавить меру суммарного растяжения сетки, меру суммарного изгиба и меру суммарной близости, что достигается следующим функционалом:

$$D = \frac{D_1}{|P_k|} + \lambda\frac{D_2}{pq} + \mu\frac{D_3}{pq} \to \min,$$

где $|P_k|$ — число точек, λ, μ — коэффициенты упругости, отвечающие за растяжение и изогнутость сетки соответственно, D_1, D_2, D_3 — слагаемые, отвечающие за свойства сетки.

На основе изложенной постановки задачи предложен способ построения упругой карты, учитывающий значения введённого физического признака для исследуемых данных, характеризующего изучаемый объект. Далее представлено краткое описание основных элементов алгоритмического обеспечения разрабатываемой методики анализа и визуализации данных.

Пусть метрика является евклидовой. В этом случае функционал D является квадратичным по положениям узлов y^{ij}. Это значит, что при заданном разбиении множества точек данных на таксоны K_{ij} для его минимизации потребуется решить систему линейных уравнений размера $pq \times pq$.

Следовательно, эффективным методом минимизации функционала D окажется такой алгоритм:

Шаг 0. Узлы сетки так или иначе располагаются в пространстве данных;

Шаг 1. При заданных положениях узлов сетки производится разбиение на таксоны K_{ij};

Шаг 2. При заданном разбиении множества на таксоны производится минимизация функционала D.

Шаги 1 и 2 повторяются до тех пор, пока функционал D не перестанет изменяться в пределах заданной точности. Процесс сходится, поскольку на каждом этапе минимизации величина D, очевидно, будет уменьшаться; вместе с тем она ограничена снизу нулём. Более того, она сходится за конечное число шагов, так как число вариантов разбиения точек данных на таксоны конечно (хотя и может быть весьма велико).

Ниже показаны возможности применения этой методики для обработки и анализа сложных изображений, в частности, в проблеме цунами и изучении следов катастрофических наводнений в береговой зоне. Представлена общая вычислительная схема модифицированного геометрического анализа при выполнении численных экспериментов с изучаемыми изображениями. Последовательность действий для оценки результатов анализа имеет вид:

- для каждого снимка формируется карта эталонов, в которой пользователь-эксперт выделяет контуры объектов интереса;
- для каждого снимка применяются фильтры с разными настройками (размер ядра и параметры);
- по каждому снимку формируется серия отфильтрованных изображений, к которой применяются методы выделения контуров.

Результат применения фильтров оценивается на основе следующих положений:

- насколько видны объекты интереса — их контуры (в процентном соотношении от эталона);
- сколько лишней информации (в процентах от размеров изображения).

Применяется разработанная методика контрастирования для изображений с выделенными контурами и оцениваются результаты расчётов: цветового выделения, т.е. насколько видны объекты интереса — их контуры (в процентном соотношении от эталона), а также в сравнении с простым выделением контуров; доля незначимых участков; в итоге, формируется заключение о том, какой вариант лучше.

Далее выполняется общая оценка пригодности фильтров для обработки изучаемых снимков. Для наилучшего метода (алгоритмы шиарлет-преобразования в сочетании с контрастированием) проводятся дополнительные эксперименты для изображений каждого класса. Формируются искусственно зашумлённые изображения с добавлением шума $(5\%, 10\%, 15\%)$, где представлено следующее распределение шумовых компонентов — 70% аддитивного и 30% импульсного. После этого подготовительного этапа выполняются следующие исследования:

- формируется набор отфильтрованных изображений фильтрами с разными настройками (размер ядра и параметры);
- применяется разработанная методика (шиарлет-преобразование и контрастирование);
- выполняется сравнение полученных результатов с результатами, полученными на не зашумлённых изображениях.

В итоге, оцениваются результаты по контрастированным объектам интереса — насколько они близки к тем, что получены на не зашумлённых снимках (в процентном соотношении) и выдаётся заключение о качестве решения задачи различными фильтрами.

Предлагаемые в данной работе авторами подходы к визуализации изображений и методы их обработки позволяют повысить объективность обнаружения и разрешающую способность, а также возможность создания трёхмерно виртуального изображения изучаемого объекта. База данных изображений представляет набор снимков с различными вариантами нарушений в береговой зоне.

Заключение

Применение разработанной методики обработки и анализа визуальных данных на основе алгоритмов шиарлет-преобразования в сочетании с процедурой контрастирования позволяет значительно улучшить результаты описания следов природных катастроф в проблеме цунами. Таким образом, разработанный вычислительный инструментарий для анализа внутренних геометрических черт экспериментальных изображений позволяет успешно решать задачу количественного морфологического (геометрического) представления визуальных данных на основе применения алгоритмов шиарлет-преобразований в сочетании с процедурой контрастирования изображений.

Предлагаемая методика позволяет повысить точность выделения квази-круглых структур и линейных структур, а также повысить визуальное качество изображений изучаемых объектов в рамках процедуры контрастирования снимка для адекватной количественной оценки их основных характеристик (длина, ширина, площадь). А также для построения на этой основе отдельных моделей контуров и линий. При решении указанных задач точность оценок повышена в среднем на $25 - 30\%$.

Таким образом, на экспериментальном материале проведённых исследований в проблеме цунами показано, что разработанная методика является эффективным инструментом для анализа внутренних геометрических черт изучаемых объектов.

Список литературы

[1] Donoho D, Kutyniok G (2009) Geometric separation using a wavelet-shearlet dictionary. SampTA'09 (Marseille France 2009) Proc.

[2] Starck J-L, Elad M, Donoho D (2005) Image decomposition via the combination of sparse representation and a variation approach. IEEE Trans. Image Proc. 14: 1570–1582.

[3] Hauser S (2011) Fast finite shearlet transform: a tutorial. University of Kaiserslautern.

[4] Lim W-Q (2010) The discrete shearlet transform: a new directional transform and compactly supported shearlet frames. IEEE Trans Imag Proc 19: 1166–1180.

[5] Горбань А.Н., Зиновьев А.Ю., Питенко А.А. Визуализация данных методом упругих карт // Информационные технологии. — 2000. — № 6. — С. 26–35.

Андрей Гуръевич Марчук — д.ф.-м.н., вед. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: mag@omzg.sscc.ru;
Александр Геннадьевич Зотин — к.техн.н.; Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф. Решетнева;
e-mail: zotin@sibsau.ru;
Михаил Александрович Курако — аспирант Сибирского федерального университета;
e-mail: mkurako@sfu-kras.ru;
Константин Васильевич Симонов — д.техн.н., вед. науч. сотр. Института вычислительного моделирования СО РАН ФИЦ КНЦ СО РАН;
e-mail: simonovkv@icm.krasn.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ВЕКТОРНЫЕ АЛГОРИТМЫ МЕТОДА МОНТЕ — КАРЛО С КОНЕЧНОЙ ТРУДОЕМКОСТЬЮ

И. Н. Медведев[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*
[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.245 : 519.676

В работе представлена новая универсальная модификация весовой векторной оценки по столкновениям с ветвлением траектории цепи соответственно элементам матричного веса. Доказано, что трудоемкость построенного алгоритма ограничена, если ограничены базовые функционалы. Представлены результаты численных расчетов с использованием модифицированной весовой оценки для некоторых задач теории переноса излучения с учетом поляризации.

Ключевые слова: система линейных интегральных уравнений 2-го рода, весовая векторная оценка, матричный вес, ветвление траектории в цепи Маркова, конечная трудоемкость алгоритма, перенос поляризованного излучения.

1 Вводная информация

Рассмотрим систему интегральных уравнений второго рода:

$$\varphi_i(x) = \sum_{j=1}^{m} \int\limits_X k_{ij}(x,y)\varphi_j(y)dy + h_i(x) \tag{1}$$

или в векторном виде $\Phi = \mathbf{K}\Phi + H$, где $H^{\mathrm{T}} = (h_1, \ldots, h_m) \in L_\infty$,

$$\mathbf{K} \in [L_\infty \to L_\infty], \quad ||H||_{L_\infty} = \mathrm{vrai} \sup_{i,x} |h_i(x)|,$$

а интегрирование производится по мере Лебега в κ — мерном евклидовом пространстве X.

Предполагается, что спектральный радиус $\lambda(\mathbf{K}) < 1$. При этом имеет место разложение решения в ряд Неймана

$$\Phi = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{K}^n H. \tag{2}$$

Известно ([2], [3]) что для сходимости ряда (2) достаточно выполнения неравенства $||\mathbf{K}^{n_0}|| < 1$ для некоторого $n_0 \geq 1$. Отметим, что здесь

$$||\mathbf{K}|| = \sup_{x,i} \sum_{j=1}^{m} \int |k_{ij}(x,y)|dy. \tag{3}$$

Рассмотрим цепь Маркова $\{x_n\}, (n = 0, \ldots, N)$ с плотностью перехода $p(x,y)$, где N — случайный номер последнего состояния, а $x_0 \equiv x$. Известно[2], что такая цепь обрывается с вероятностью 1 и более того, $\mathrm{E}(N) < +\infty$, если $\lambda(B_p) < 1$, где B_p — интегральный оператор с ядром $p(x,y)$ (в частности, если $p(x) \geq \varepsilon > 0$).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 15-01-00894 а, 16-01-00530 а, 17-01-00823 а)) и программы фундаментальных исследований Президиума РАН I.33.

Стандартная векторная оценка метода Монте — Карло "по столкновениям" для величины $\Phi(x)$ строится на основе соотношений

$$\Phi(x) = \mathrm{E}\boldsymbol{\xi}_x, \quad \boldsymbol{\xi}_x = H(x) + \sum_{n=1}^{N} Q_n H(x_n),$$

$$Q_0 = I, \quad Q_{n+1} = Q_n K(x_n, x_{n+1})/p(x_n, x_{n+1}), \quad n = 0, 1, \ldots, \tag{4}$$

где I — единичная матрица, а $K(x,y)$ — матрица ядер $\{k_{ij}(x,y)\}, (i,j=1,\ldots,m)$. Заметим, что соотношение $\Phi(x) = \mathrm{E}\boldsymbol{\xi}_x$ справедливо при выполнении аналогичных рассмотренным в [2] для случая $m = 1$ "условий несмещенности" и дополнительного условия $\lambda(\mathbf{K}_1) < 1$, где $\mathbf{K}_1$ — оператор, получаемый из оператора $\mathbf{K}$ заменой ядер на их модули. Здесь условия несмещенности[2] преобразуются к виду:

$$p(x,y) > 0, \quad \text{если} \quad \sum_{i,j=1}^{m} |k_{ij}(x,y)| > 0, \tag{5}$$

а оценка $\boldsymbol{\xi}_x$ однозначно определяется рекурсией

$$\boldsymbol{\xi}_x = H(x) + \delta_x Q(x,y)\boldsymbol{\xi}_y, \tag{6}$$

где $Q(x,y) = K(x,y)/p(x,y)$ — матричный вес, а δ_x — индикатор необрыва цепи при переходе $x \to y$.

В [2] приведено следующее уравнение для матрицы вторых моментов $\Psi(x) = \mathrm{E}(\boldsymbol{\xi}_x \boldsymbol{\xi}_x^{\mathrm{T}})$:

$$\Psi(x) = \chi(x) + \int_X \frac{K(x,y)\Psi(y)K^{\mathrm{T}}(x,y)}{p(x,y)} dy, \tag{7}$$

или $\Psi = \chi + \mathbf{K}_p\Psi$, где $\chi = H\Phi^{\mathrm{T}} + \Phi H^{\mathrm{T}} - HH^{\mathrm{T}}$. Это уравнение рассматривается в пространстве $\mathbf{L}_\infty$ матричнозначных функций с нормой

$$||\Psi|| = \operatorname{vrai}\sup_{i,j,x} |\Psi_{i,j}(x)|.$$

и имеет место [2] следующее выражение:

$$||\mathbf{K}_p||_{\mathbf{L}_\infty} = \sup_{i,x} \int \frac{\left(\sum\limits_{j=1}^{m} |k_{ij}(x,y)|\right)^2}{p(x,y)} dy. \tag{8}$$

Оператор, получаемый из $\mathbf{K}_p$ заменой ядер на их модули, обозначим $\mathbf{K}_{p,1}$. Предполагается, что $\mathbf{K}_{p,1} \in [\mathbf{L}_\infty \to \mathbf{L}_\infty]$ и, следовательно, $\mathbf{K}_p$ обладает тем же свойством. Заметим, что $\lambda(\mathbf{K}_{p,1}) < 1$ включает $\lambda(\mathbf{K}_1) < 1$, так как $||\mathbf{K}_1^n||^2 \le ||\mathbf{K}_{p,1}^n||$, поэтому имеет место следующее утверждение [7].

Теорема 1. *Если* $\lambda(\mathbf{K}_{p,1}) < 1$, *то* $\Psi(x) = \mathrm{E}(\boldsymbol{\xi}_x \boldsymbol{\xi}_x^{\mathrm{T}})$ *является решением уравнения* (7) *и* $\Psi \in \mathbf{L}_\infty$.

Методом Монте — Карло обычно оценивают линейные функционалы вида [1]

$$I = (F, \Phi) = \int_X F^{\mathrm{T}}(x)\Phi(x)dx, \tag{9}$$

где $F^{\mathrm{T}}(x) = (f_1(x), \ldots, f_m(x))$, причем

$$||F^{\mathrm{T}}||_{L_1} = \sum_{j=1}^{m} \int_X |f_j(x)|dx < \infty.$$

Пусть точка x_0 распределена с плотностью вероятностей $\pi(x)$ такой, что $\pi(x) \ne 0$, если $F^{\mathrm{T}}(x)\Phi(x) \ne 0$. Тогда, полагая $\boldsymbol{\xi} = F^{\mathrm{T}}(x_0)\boldsymbol{\xi}_{x_0}/\pi(x_0)$, имеем

$$I = \mathrm{E}\boldsymbol{\xi} = \mathrm{E}\left\{\frac{F^{\mathrm{T}}(x_0)}{\pi(x_0)}\boldsymbol{\xi}_{x_0}\right\}, \quad \mathrm{E}\boldsymbol{\xi}^2 = \mathrm{E}\left\{\frac{F^{\mathrm{T}}(x_0)\boldsymbol{\xi}_{x_0}\boldsymbol{\xi}_{x_0}^{\mathrm{T}}F(x_0)}{\pi^2(x_0)}\right\} = \mathrm{E}\left\{\frac{F^{\mathrm{T}}(x_0)\Psi(x_0)F(x_0)}{\pi^2(x_0)}\right\}. \tag{10}$$

Таким образом, дисперсия $\mathrm{D}\boldsymbol{\xi}$ определяется матрицей вторых моментов $\Psi(x)$. В частности, $\mathrm{D}\boldsymbol{\xi} < +\infty$, если $\lambda(\mathbf{K}_{p,1}) < 1$ и $F^{\mathrm{T}}(x)/\pi(x) \in L_1(X)$[2], [4]. Если спектральный радиус $\lambda(\mathbf{K}_{p,1}) > 1$, то величина $\mathrm{D}\boldsymbol{\xi}$ может быть бесконечно большой и использование весовой оценки $\boldsymbol{\xi}$ для вычисления функционала I нецелесообразно.

2 Векторная оценка с ветвлением траектории

Рассмотрим систему уравнений (1) с неотрицательными компонентами $k_{ij}(x,y), h_i(x), (i,j=1,\dots,m)$. Здесь и далее будем предполагать, что $\forall x,y \in X$ все элементы $Q(x,y) = K(x,y)/p(x,y)$ матричного веса ограничены. Введем целочисленную неотрицательную случайную величину (число "ветвей") ν_n со следующим распределением вероятностей

$$P(\nu_n = [\mathrm{E}\nu_n]) = 1 - (\mathrm{E}\nu_n - [\mathrm{E}\nu_n]), \quad P(\nu_n = [\mathrm{E}\nu_n]+1) = \mathrm{E}\nu_n - [\mathrm{E}\nu_n]. \tag{11}$$

Нетрудно проверить, что распределение (11) определяет минимальное значение $\mathrm{D}\nu_n$ в классе случайных целочисленных величин с фиксированным значением $\mathrm{E}\nu_n$ [4]

Определим случайную векторную оценку по столкновениям с ветвлением траектории следующей рекурсией:

$$\boldsymbol{\zeta}_{x_0} = H(x_0) + \delta_{x_0}\frac{Q(x_0,x_1)}{\mathrm{E}\nu_1}\sum_{i=1}^{\nu_1}\boldsymbol{\zeta}_{x_1}^{(i)}, \tag{12}$$

$$\boldsymbol{\zeta}_{x_{n-1}} = H(x_{n-1}) + \delta_{x_{n-1}}\frac{Q(x_{n-1},x_n)}{\mathrm{E}\nu_n}\sum_{i=1}^{\nu_n}\boldsymbol{\zeta}_{x_n}^{(i)}, \tag{13}$$

где $\boldsymbol{\zeta}_{x_n}^{(\cdot)}$ — независимые реализации $\boldsymbol{\zeta}_{x_{n-1}}$.

Лемма 1. *При выполнении условий несмещенности* (5) *и* $\lambda(\mathbf{K}) < 1$, *имеет место соотношение* $\mathrm{E}\boldsymbol{\zeta}_x = \Phi(x)$.

Доказательство. Так как все элементы в выражениях (12), (13) неотрицательны, то $\forall n \geq 1$ в силу тождества Вальда имеем

$$\mathrm{E}\sum_{i=1}^{\nu_n}\boldsymbol{\zeta}_{x_n}^{(i)} = \mathrm{E}\nu_n\mathrm{E}\boldsymbol{\zeta}_{x_n}.$$

Это равенство выполняется и в случае $\mathrm{E}\boldsymbol{\zeta}_{x_n} = +\infty$, так как вследствие неотрицательности элементов задачи имеем:

$$\mathrm{E}\sum_{i=1}^{\nu_n}\boldsymbol{\zeta}_{x_n}^{(i)} = \mathrm{EE}\left(\sum_{n=1}^{\nu}\boldsymbol{\zeta}_{x_n}^{(i)}|\nu\right).$$

Следовательно, для вычисления величины $\mathrm{E}\boldsymbol{\zeta}_{x_0}$ можно последовательно применять рекурсию вида (6). □

Заметим, что, для оценки (12), (13) необходимо строить ветвящуюся цепь Маркова, а траекториями такой цепи будут деревья [3]. Согласно рекурсии (12), (13), после "успешного" ($\delta_{x_{n-1}} = 1$) перехода $x_{n-1} \to x_n$ из фиксированной вершины "дерева" в n-ом поколении "испускаются" ν_n независимых траекторий с "накопленным" матричным весом

$$\tilde{Q}_n = \frac{Q(x_0,x_1)Q(x_1,x_2)\dots Q(x_{n-1},x_n)}{\mathrm{E}\nu_1\dots\mathrm{E}\nu_n} = \frac{Q_{n-1}Q(x_{n-1},x_n)}{\mathrm{E}\nu_1\dots\mathrm{E}\nu_{n-1}\mathrm{E}\nu_n} \quad (n \geq 1). \tag{14}$$

Стоить отметить, что величина полного матричного веса $\tilde{Q}_n$ в каждой вершине дерева для n-ого поколения принимает разные значения. Формально в таких случаях каждой вершине дерева нужно однозначно сопоставить мультииндекс (набор чисел), который отображает историю появления этой вершины (см., например [3]) и переписать выражение (14) для каждой вершины с учетом таких мультииндексов. Однако такой подход на порядок усложняет изложение и восприятие последующего материала, поэтому здесь и далее мультииндексы будут опущены.

Введем обозначение для произвольного элемента $\{A\}_{ij} = a_{ij}$ матрицы A и определим последовательность среднего числа ветвей

$$\mathrm{E}\nu_1 = \sup_i\sum_{j=1}^{m}\{Q(x_0,x_1)\}_{ij}, \quad \mathrm{E}\nu_n = \sup_i\sum_{j=1}^{m}\left\{\frac{Q_{n-1}Q(x_{n-1},x_n)}{\mathrm{E}\nu_1\dots\mathrm{E}\nu_{n-1}}\right\}_{ij}, \ (n \geq 2). \tag{15}$$

Тогда, прямой подстановкой можно проверить, что $\forall n \geq 1$

$$\mathrm{E}\nu_1\mathrm{E}\nu_2\dots\mathrm{E}\nu_n = \sup_i\sum_{j=1}^{m}\{Q_{n-1}Q(x_{n-1},x_n)\}_{ij}. \tag{16}$$

Известно, что трудоемкость методов Монте — Карло определяется величиной $S(\boldsymbol{\zeta}) = T_{\boldsymbol{\zeta}}\mathrm{D}\boldsymbol{\zeta}$, где $T_{\boldsymbol{\zeta}}$ — среднее время моделирования на ЭВМ для получения одного выборочного значения $\boldsymbol{\zeta}$ [3], [2]. В свою очередь, величина $T_{\boldsymbol{\zeta}}$ пропорциональна среднему числу $\mathrm{E}N_{\boldsymbol{\zeta}}$ полного числа ветвей в цепи Маркова для получения одного выборочного значения $\boldsymbol{\zeta}$. Имеет место следующее утверждение.

Теорема 2. *Величина* $\mathrm{E}N_{\boldsymbol{\zeta}}$ *ограничена, если* $\lambda(B_p) < 1$.

Доказательство. Заметим, что величину $N_{\boldsymbol{\zeta}}$ полного числа ветвей можно интерпретировать как полное число частиц в следующей неоднородной модификации ветвящегося процесса Гальтона-Ватсона [8]. В состоянии x_0 находиться одна частица (ветвь). Далее, после реализации успешного ($\delta_{x_{n-1}} = 1$) случайного перехода $x_{n-1} \to x_n (n \geq 1)$ согласно плотности $p(x_{n-1}, x_n)$, частица производит случайное количество новых частиц (ветвей) ν_n в соответствии с распределением (11), где величина $\mathrm{E}\nu_n$ задается выражением (15). При этом величины $\mathrm{E}\nu_n$ и ν_n случайны и зависят от предыдущих состояний $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Поэтому здесь и далее в наших рассуждениях мы учитываем, что $\mathrm{E}\nu_n = \mathrm{E}\nu_n(x_0, .., x_n)$.

Получим оценку сверху для "полного" среднего количества частиц $\mathrm{E}(\mathrm{E}\nu_n)$. Согласно определения (15), для "полного" среднего количества частиц $\mathrm{E}(\mathrm{E}\nu_1)$ имеет место следующее неравенство:

$$\mathrm{E}(\mathrm{E}\nu_1) = \int\limits_X p(x_0, x_1) \sup\limits_i \sum\limits_{j=1}^m \{Q(x_0, x_1)\}_{ij} dx_1 \leq m \sup\limits_i \int\limits_X \sum\limits_{j=1}^m \{K(x_0, x_1)\}_{ij} dx_1 \leq m||\mathbf{K}|| \tag{17}$$

Заметим, что, согласно выражения для "полного" матричного веса (см. (4)), при $n \geq 2$ имеем

$$Q_n = \frac{Q_{n-1}K(x_{n-1}, x_n)}{p(x_{n-1}, x_n)} = \frac{K(x_0, x_1)K(x_1, x_2)\ldots K(x_{n-1}, x_n)}{p(x_0, x_1)\ldots p(x_{n-1}, x_n)} = \frac{K_n}{p(x_0, x_1)\ldots p(x_{n-1}, x_n)} \ .$$

где $K_n \equiv K(x_0, x_1)K(x_1, x_2)\ldots K(x_{n-1}, x_n)$. С учетом последнего соотношения и выражений (15), (16), величину $\mathrm{E}\nu_n$ можно представить в следующем виде

$$\mathrm{E}\nu_n = \sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ \frac{Q_{n-1}Q(x_{n-1}, x_n)}{\mathrm{E}\nu_1 \ldots \mathrm{E}\nu_{n-1}} \right\}_{ij} = \frac{\sup\limits_i \sum\limits_{j=1}^m \left\{ Q_{n-1}Q(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij}}{\sup\limits_i \sum\limits_{j=1}^m \{Q_{n-1}\}_{ij}} = \frac{\sup\limits_i \sum\limits_{j=1}^m \left\{ K_{n-1}K(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij}}{p(x_{n-1}, x_n) \sup\limits_i \sum\limits_{j=1}^m \{K_{n-1}\}_{ij}} \tag{18}$$

Отсюда "полное" среднее количество частиц (ветвей) в произвольной точке n-го поколения столкновений определяется следующим выражением:

$$\mathrm{E}(\mathrm{E}\nu_n) = \int\limits_X \ldots \int\limits_X p(x_0, x_1)\ldots p(x_{n-1}, x_n)\mathrm{E}\nu_n dx_1 \ldots dx_n$$

$$= \int\limits_X \ldots \int\limits_X p(x_0, x_1)\ldots p(x_{n-1}, x_n) \frac{\sup\limits_i \sum\limits_{j=1}^m \left\{ K_{n-1}K(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij}}{p(x_{n-1}, x_n) \sup\limits_i \sum\limits_{j=1}^m \{K_{n-1}\}_{ij}} dx_1 \ldots dx_n.$$

Заметим, что число $\sup\limits_i \sum\limits_{j=1}^m \{A(\cdot, \cdot)\}_{ij}$ представляет собой норму для значений матричной функции A в пространстве $\mathbf{L}_\infty$. Используя свойство нормы

$$\sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ K_{n-1}K(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij} \leq \sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ K_{n-1} \right\}_{ij} \sup_i \sum_{j=1}^m \left\{ K(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij} \tag{19}$$

и полученное выше неравенство $\mathrm{E}(\mathrm{E}\nu_1) \leq m||\mathbf{K}||$, можно получить следующую оценку

$$\mathrm{E}(\mathrm{E}\nu_n) = \int\limits_X \ldots \int\limits_X p(x_0, x_1)\ldots p(x_{n-1}, x_n) \frac{\sup\limits_i \sum\limits_{j=1}^m \left\{ K_{n-1}K(x_{n-1}, x_n) \right\}_{ij}}{p(x_{n-1}, x_n) \sup\limits_i \sum\limits_{j=1}^m \{K_{n-1}\}_{ij}} dx_1 \ldots dx_n.$$

$$\leq \int_X \dots \int_X p(x_0,x_1)\dots p(x_{n-2},x_{n-1}) \int_X \sup_i \sum_{j=1}^m \int_X \Big\{ K(x_{n-1},x_n) \Big\}_{ij} dx_1 \dots dx_n \leq ||B_p^{n-1}||m||\mathbf{K}||. \qquad (20)$$

Рассмотрим теперь "мажорантный" ветвящейся процесс Гальтона-Ватсона, в которым после успешного ($\delta_{x_{n-1}} = 1$) случайного перехода $x_{n-1} \to x_n (n \geq 1)$ согласно плотности $p(x_{n-1}, x_n)$ частица производит случайное количество новых частиц (ветвей) $\tilde{\nu}_n$ в соответствии с распределением (11), причем $\mathrm{E}\tilde{\nu}_n = ||B_p^{n-1}||m||\mathbf{K}||$. Введем обозначение $N_{\tilde{\nu}}$ для полного числа частиц в таком процессе. С учетом того, что $\mathrm{E}(\mathrm{E}\nu_n) \leq \mathrm{E}\tilde{\nu}_n$ можно утверждать (см. [6]), что $\mathrm{E}N_{\boldsymbol{\zeta}} \leq \mathrm{E}N_{\tilde{\nu}_n}$. Покажем теперь, что для такого "мажорантного" ветвящегося процесса величина $\mathrm{E}N_{\tilde{\nu}_n}$ ограничена.

Известно, что условие $\lambda(B_p) < 1$ гарантирует нам, что существует такой номер $n_0 \geq 1$, что $||B_p^{n_0}|| < 1$ [3]. Поэтому найдется такой номер $n_1 > n_0$, что $\mathrm{E}\tilde{\nu}_n = ||B_p^{n-1}||m||\mathbf{K}|| \leq 1 - \varepsilon_1 < 1$ [3] при $n > n_1$ и, с учетом распределения (11),

$$\lim_{n\to\infty} \mathrm{E}\tilde{\nu}_n = \lim_{n\to\infty} P(\tilde{\nu}_n = 1) = 0.$$

Таким образом, в построенном мажорантном ветвящемся процессе до n_1-го поколения количество частиц в каждом поколении может в среднем увеличиваться, но ограничено в силу соответствующего распределения (11) для $\tilde{\nu}_n$ и ограниченности каждого элемента в матричном весе $Q(\cdot,\cdot)$ после очередного перехода. Следовательно $\mathrm{E}N_{\boldsymbol{\zeta}} \leq \mathrm{E}N_{\tilde{\nu}} < C < \infty$. □

Теорема 3. *Если выполняются условия леммы 1 и теоремы 2 то* $\tilde{\Psi}(x) = \mathrm{E}(\boldsymbol{\zeta}_x \boldsymbol{\zeta}_x^{\mathrm{T}}) \in \mathbf{L}_\infty(X)$.

Доказательство. Как было замечено выше, для оценки $\boldsymbol{\zeta}_x$ (см. (12), (13)) необходимо строить ветвящуюся цепь Маркова. В этом случае выборочное значение вектора $\boldsymbol{\zeta}_x$ определяется случайной суммой $N_{\boldsymbol{\zeta}_x}$ слагаемых вида $\tilde{Q}_n H(x_n)$ $(n \geq 1)$, определенных в соответствующих вершинах дерева.

Прямая подстановка величины (15) в (14) дает нам следующее выражение

$$\tilde{Q}_n = \frac{Q_{n-1}Q(x_{n-1},x_n)}{\mathrm{E}\nu_1 \dots \mathrm{E}\nu_{n-1}\mathrm{E}\nu_n} = \frac{Q_{n-1}Q(x_{n-1},x_n)}{\sup\limits_i \sum\limits_{j=1}^m \{Q_{n-1}Q(x_{n-1},x_n\}_{ij}}.$$

Последнее выражение гарантирует нам, что каждый случайный элемент матрицы $\tilde{Q}_n$ ограничен единицей. Следовательно, $\forall n \geq 1$

$$||\tilde{Q}_n H(x_n)|| \leq m||H||_{L_\infty}, \quad ||H^T(x_n)\tilde{Q}_n^T|| \leq m||H||_{L_\infty}.$$

Поэтому

$$||(\boldsymbol{\zeta}_x \boldsymbol{\zeta}_x^{\mathrm{T}})||_{L_\infty} = ||\sum_{i=1}^{N_\zeta} \tilde{Q}_n H(x_n) \sum_{i=1}^{N_\zeta} H^T(x_n)\tilde{Q}_n^T||_{L_\infty} \leq m^2||H||_{L_\infty}^2 N_\zeta^2 < \infty,$$

и

$$||\mathrm{E}(\boldsymbol{\zeta}_x \boldsymbol{\zeta}_x^{\mathrm{T}})||_{L_\infty} \leq m^2||H||_{L_\infty}^2 \mathrm{E}N_\zeta^2.$$

Последовательно применяя метод "частичного" осреднения [4] к величине N_ζ^2, можно проверить, что величина $\mathrm{E}N_\zeta^2$ определяется сходящимся рядом Неймана.

□

Для оценки линейных функционалов вида (9), которые зависят от решения исходной системы (1) с знакопеременными элементами $k_{ij}(x,y), h_i(x), (i,j = 1,\dots,m)$, следует воспользоваться рекурсией $\boldsymbol{\zeta}_x^{(1)}$ вида (12), (13), если в выражениях для среднего числа ветвей (15) сделать замену $Q(\cdot,\cdot) \to Q^{(1)}(\cdot,\cdot)$, где $Q^{(1)}(\cdot,\cdot)$ — матричный вес (см. (6)), соответствующий оператору $\mathbf{K}_1$. Из определения $\boldsymbol{\zeta}_x^{(1)}$ очевидно следует, что $|\boldsymbol{\zeta}_x^{(1)}| \leq \boldsymbol{\eta}_x^{(1)}$, где $\boldsymbol{\eta}_x^{(1)}$ — оценка вида (12), (13) с (15) для системы (1) с элементами $|k((i,x)(j,y))|, |h(i,x)|$. При сделанных выше предположениях величина $\mathrm{E}\boldsymbol{\eta}_x^{(1)}$ конечна. Вследствие теоремы Лебега о мажорируемой сходимости и условия $\lambda(\mathbf{K}_1) < 1$ для оценки $\boldsymbol{\zeta}_x^{(1)}$ имеют место равенство $\mathrm{E}\boldsymbol{\zeta}_x^{(1)} = \Phi(x)$ и утверждения теорем 3, 2.

В конце раздела 1 было отмечено, что существенным ограничением на использование стандартной векторной оценки $\boldsymbol{\xi} = F^{\mathrm{T}}(x_0)\boldsymbol{\xi}_{x_0}/\pi(x_0)$ для вычисления функционала $I = (F,\Phi)$ является условие $\lambda(\mathbf{K}_{p,1}) < 1$. Для построенной выше векторной оценки с ветвлением траектории $\boldsymbol{\zeta}^{(1)} = F^{\mathrm{T}}(x_0)\boldsymbol{\zeta}_{x_0}^{(1)}/\pi(x_0)$ имеет место более слабое ограничение.

Утверждение 1 *Трудоемкость $S(\boldsymbol{\zeta}^{(1)})$ ограничена, если ограничен исходный функционал I ($\lambda(\mathbf{K}_1) < 1$ и $F^{\mathrm{T}}(x)/\pi(x) \in L_1$).*

3 Приложение в теории переноса излучения с учетом поляризации

Известно, что для описания поляризационных свойств света удобно использовать вектор Стокса [1, 2] $\tilde{\Phi}(x) = (\tilde{\varphi}_1(x), \tilde{\varphi}_2(x), \tilde{\varphi}_3(x), \tilde{\varphi}_4(x))^T$, причем, вектор функции $\tilde{\Phi}$ образуют конус S_t, определяемый соотношениями:

$$\tilde{\varphi}_1(x) \geq 0, \quad \tilde{\varphi}_2^2(x) + \tilde{\varphi}_3^2(x) + \tilde{\varphi}_4^2(x) \leq \tilde{\varphi}_1^2(x), \tag{21}$$

а компоненты вектора $\tilde{\Phi}$ удовлетворяют системе интегральных уравнений переноса с учетом поляризации вида (1):

$$\tilde{\varphi}_i(x) = \int \sum_{j=1}^{4} k_{ij}(x, x')\tilde{\varphi}_j(x')\, dx' + h_i(x), \quad i = 1, \ldots, 4, \quad \text{или} \quad \tilde{\Phi} = \mathbf{K}\tilde{\Phi} + H \tag{22}$$

Здесь $x = (\mathbf{r}, \omega)$, где $\mathbf{r}$ — точка физического пространства R, $\omega \in \Omega$ — единичный вектор направления пробега частицы и $\mathbf{K} \in [S_t \to S_t]$[2]. Введем следующие обозначения: $\mu = (\omega, \omega')$ — косинус угла рассеяния, θ — азимутальный угол рассеяния, $p_2(\mu)$ — индикатриса рассеяния, $\sigma(\mathbf{r}) = \sigma_s(\mathbf{r}) + \sigma_c(\mathbf{r})$ — полное сечение, $\sigma_s(\mathbf{r})$ и $\sigma_c(\mathbf{r})$ — сечения рассеяния и поглощения соответственно, $q(\mathbf{r}) = \sigma_s(\mathbf{r})/\sigma(\mathbf{r})$ — вероятность рассеяния, l — длина свободного пробега, $p_\chi(l; \mathbf{r}, \omega')$ — субстохастическая плотность распределения длины пробега из точки $\mathbf{r}$ в направлении ω'. Известно, что

$$p_\chi(l; \mathbf{r}, \omega') = \sigma(\mathbf{r} + \omega' l) exp\Big(- \int_0^l \sigma(\mathbf{r} + s\omega') ds \Big), \quad l \leq l^*(l\mathbf{r}, \omega'),$$

где $l^*(\mathbf{r}, \omega')$ — расстояние от точки $\mathbf{r}$ вдоль направления ω' до границы среды, которую можно считать выпуклой. С учетом введенных вспомогательных переменных μ, θ, l, матрица ядер для системы (22) задается соотношением [1], [5]:

$$K(x, y) = q p_\chi(l; \mathbf{r}, \omega') P^T(\mu, \theta) \delta(\omega' - \omega'(\omega, \mu, \theta)) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r} - \omega' l), \tag{23}$$

где $y = (\mathbf{t}', x') = (\mu, \theta, l, x')$, $P^T(\mu, \theta) = L(i_1) R^T(\mu) L(-\pi + i_2)/2\pi$,

$$R(\mu) = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & 0 & 0 \\ r_{21} & r_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_{33} & r_{34} \\ 0 & 0 & -r_{43} & r_{44} \end{pmatrix}, \quad L(i) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2i & \sin 2i & 0 \\ 0 & -\sin 2i & \cos 2i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

где $i_k = i_k(\omega, \mu, \theta)$; $k = 1, 2$; $\theta \in U(0, 2\pi)$; $r_{ij} = r_{ij}(\mu)$; $r_{11} \geq 0$; $\int_{-1}^{+1} r_{11}(\mu)\, d\mu = 1$. Предполагается, что среда изотропна и P не зависит от $\mathbf{r}$. Если рассеивающие частицы сами являются однородными сферами, то $r_{11} = r_{22}, r_{12} = r_{21}, r_{33} = r_{44}, r_{34} = r_{43}$ [1], [2].

Известно [1], [2], что для решения системы (22) методом Монте — Карло можно построить весовую векторную оценку по столкновениям $\boldsymbol{\xi}_x$ вида (6). Несмотря на знакопеременность ядер матрицы $K(x, y)$, в работах [1], [2], [9] было доказано, что, в силу свойств вектор-функций Стокса (21) и оператора $\mathbf{K} \in [S_t \to S_t]$ из системы (22), для выполнения равенства $\mathrm{E}\boldsymbol{\xi}_x = \tilde{\Phi}(x)$ достаточно, чтобы выполнялось условие $\lambda(\mathbf{K}) < 1$ — более слабое, чем в разделе 1. Если используется переходная плотность вида

$$p(x, y) = q_1\, p_\chi^{(1)}(l; \mathbf{r}, \omega')\, p_2(\mu)\, \delta(\omega' - \omega'(\omega, \mu, \varphi))\, \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r} - \omega' l)/(2\pi), \tag{24}$$

то, по сравнению с условиями теоремы 1, здесь для ограниченности элементов матрицы вторых моментов $\mathrm{E}(\boldsymbol{\xi}_x \boldsymbol{\xi}_x^{\mathrm{T}})$ достаточно потребовать, чтобы выполнялось условие: $\lambda(\mathbf{K}_p) < 1$ ([2], [5]). В работе[2] было получено следующее неравенство:

$$\lambda(\mathbf{K}_p) \leq q_0 \lambda(S_p), \quad \text{где} \quad q_0 = \sup_{\mathbf{r}, \omega} \int_0^\infty \frac{q^2}{q_1} \frac{p_\chi^2(l; \mathbf{r}, \omega)}{p_\chi^{(1)}(l; \mathbf{r}, \omega)}\, dl, \tag{25}$$

а S_p — оператор, получаемый из $\mathbf{K}_p$ подстановкой $x \to \omega$, $y \to \omega'$, $p \to p_2/2\pi$, $K \to P^T$ (S_p соответствует "чистому" рассеянию в бесконечно однородной среде).

Таким образом, если $q_0 < 1/\lambda(S_p)$, то обычно используемые оценки вида $\boldsymbol{\xi} = F^{\mathrm{T}}(x_0)\boldsymbol{\xi}_{x_0}/\pi(x_0)$ для линейных функционалов вида $\tilde{I} = (F, \tilde{\Phi})$ имеют конечную дисперсию при надлежащем выборе $\pi(x)$[2]. В частности, для молекулярного рассеяния [1]

$$r_{11}(\mu) = \frac{3(1+\mu^2)}{8},\ r_{12}(\mu) = -\frac{3(1-\mu^2)}{8},\ r_{33}(\mu) = \frac{3\mu}{4},\ r_{34}(\mu) = 0,\ \mu \in [-1,1], \tag{26}$$

при $p_2 \equiv r_{11}$ было вычислено значение $\lambda(S_p) = 1 + (3\pi - 8)/8 \approx 1.178$ [5], а следовательно, дисперсия оценки $\boldsymbol{\xi}$ в реальной среде конечна только при достаточно большом поглощении. Даже при моделировании "без поглощения" [1], [3] ($q_1 \equiv 1, p_\chi^{(1)} = p_\chi$) получаем, что $\lambda(\mathbf{K}_p) \le (1 - \sigma_c/\sigma)^2\lambda(S_p)$ и $\lambda(\mathbf{K}_p) < 1$ при $\sigma_c/\sigma > 0.0787$. Таким образом при $\sigma_c/\sigma < 0.0787$ дисперсия векторной оценки $\boldsymbol{\xi}$ может быть бесконечно большой величиной и вопрос об обоснованности применения векторного алгоритма Монте — Карло для оценки линейных функционалов от решения системы (22) в случае молекулярного рассеяния остаётся открытым.

Как было кратко упомянуто выше, исходя из свойств вектор-функций Стокса (21) и оператора $\mathbf{K} \in [S_t \to S_t]$ (см. (22)) можно заметить, что в стандартной векторной оценки $\boldsymbol{\xi}_x$ все слагаемые ее первой компоненты $\boldsymbol{\xi}_{x,1}$ неотрицательны[2]. Поэтому, при выполнении условия $\lambda(\mathbf{K}) < 1$, величину $\boldsymbol{\xi}_{x,1}$ можно осреднять почленно (т.е. $\mathrm{E}\boldsymbol{\xi}_{x,1} = \tilde{\varphi}_1(x)$), а осреднение остальных компонент производить на основе мажоратного свойства первой компоненты вектора Стокса [1], [2], [9]. Также неотрицательность первой компоненты $\boldsymbol{\xi}_{x,1}$ и условие $\lambda(\mathbf{K}_p) < 1$ гарантируют нам возможность почленного осреднения для выражения $\boldsymbol{\xi}_x\boldsymbol{\xi}_x^{\mathrm{T}}$ в силу сходимости мажорантной компоненты $\mathrm{E}\boldsymbol{\xi}_{x,1}^2 = \Psi_{11}(x)$ в ряде Неймана (7) для матрицы вторых моментов Ψ [2]. Рассмотрим теперь для решения системы (22) векторную весовую оценку $\tilde{\boldsymbol{\zeta}}_x$ с ветвлением траектории (см. (12), (13)), для которой среднее количество ветвей после каждого перехода

$$\mathrm{E}\nu_1 = \sup_i \sum_{j=1}^m |\{Q(x_0,x_1)\}_{ij}|,\quad \mathrm{E}\nu_n = \sup_i \sum_{j=1}^m \left| \left\{ \frac{Q_{n-1}Q(x_{n-1},x_n)}{\mathrm{E}\nu_1 \ldots \mathrm{E}\nu_{n-1}} \right\}_{ij} \right|,\ (n \ge 2), \tag{27}$$

будет определяться уже знакопеременным элементами матричного веса $Q(\cdot,\cdot)$ оператора $\mathbf{K}$. В силу конструкции оценки $\tilde{\boldsymbol{\zeta}}_x$, свойств вектор-функций Стокса (21) и оператора $\mathbf{K} \in [S_t \to S_t]$ легко заметить, что первая компонента $\tilde{\boldsymbol{\zeta}}_{x,1}$ будет так же мажорантной, а все ее слагаемые — неотрицательны. Поэтому, согласно изложенному выше, для оценки $\tilde{\boldsymbol{\zeta}}_x$ имеют место соответствующие аналоги утверждений леммы 1, теорем 3, 2 при выполнении условия $\lambda(\mathbf{K}) < 1$.

В качестве обобщения последних замечаний сформулируем аналог утверждения 1 для векторной оценки с ветвлением траектории $\tilde{\boldsymbol{\zeta}} = F^{\mathrm{T}}(x_0)\tilde{\boldsymbol{\zeta}}_{x_0}/\pi(x_0)$ линейного функционала $\tilde{I} = (F, \tilde{\Phi})$.

Утверждение 2 *Трудоемкость $S(\tilde{\boldsymbol{\zeta}})$ ограничена, если ограничен исходный функционал $\tilde{I}$ ($\lambda(\mathbf{K}) < 1$ и $F^{\mathrm{T}}(x)/\pi(x) \in L_1$).*

4 Тестовая задача

Рассмотрим бесконечную однородную среду, заполненную рассеивающим и поглощающим свет веществом, с источником "естественного" излучения в точке $x_0 = (\mathbf{r}_0, \omega_0) = ((0,0,0),(0,0,1))$ и $\sigma(\mathbf{r}) \equiv \sigma = 1$. Для описанной выше среды и источника рассмотрим прикладную задачу оценки интенсивности излучения, выходящего из полубесконечного слоя $z > 0$ при молекулярном рассеянии (см. (26)). Известно, что такой функционал определяется средним значением первой компоненты вектора Стокса $\tilde{\varphi}_1$ (см. (22)) для вылетающих частиц [1]. Результаты расчетов представлены в таблице 1, где в колонках приведены статистические оценки величин $\mathrm{E}(\cdot)_M$, $\sigma(\cdot)_M = \sqrt{D(\cdot)/M}$ с использованием, соответственно, стандартной векторной оценки по столкновениям $\boldsymbol{\xi}$ (6), векторной оценки $\tilde{\boldsymbol{\zeta}}$ с ветвлением траектории (см. (12), (13), (27)) и модифицированной оценки $\boldsymbol{\eta}$ с ветвлением траектории только в случае, когда среднее количество ветвей $\mathrm{E}\nu_n$ больше единицы (см. (27)). В качестве переходной плотности была использована функция вида (24) с $q_1 = (1 - \sigma_c), p_\chi^{(1)}(l;\mathbf{r},\omega') = p_\chi(l;\mathbf{r},\omega') = e^{-l}, p_2(\mu) = r_{11}(\mu)$. Заметим, что для последней модификации величина $\mathrm{D}\boldsymbol{\eta}$ заведомо меньше величины $\mathrm{D}\tilde{\boldsymbol{\zeta}}$, но, из-за дополнительных ветвей, среднее значение числа $\mathrm{E}N_{\boldsymbol{\eta}}$ столкновений может в разы превосходить величину $\mathrm{E}N_{\tilde{\boldsymbol{\zeta}}}$. Результаты расчетов показывают, что для заданного значения $\sigma_c = 0.01$, которое существенно меньше критического значения 0.0787, наблюдается рост статистических оценок дисперсии $\mathrm{D}\boldsymbol{\xi}_M$ при увеличении числа моделируемых траекторий, т.е. имеет место отсутствие сходимости статистической оценки дисперсии стандартной оценки $\boldsymbol{\xi}$. Однако, значения выборочных средних $\mathrm{E}\boldsymbol{\xi}_M$ несущественно отличаются от статистических оценок $\mathrm{E}\tilde{\boldsymbol{\zeta}}_M, \mathrm{E}\boldsymbol{\eta}_M$ с заведомо ограниченными

соответствующими статистическими оценками среднеквадратических погрешностей. $\sigma(\tilde{\boldsymbol{\zeta}})_M, \sigma(\boldsymbol{\eta})_M$. Дополнительно, при проведении расчетов с использованием стандартной весовой оценки $\boldsymbol{\xi}$, вычислялась приближенная скалярная оценка ξ интенсивности излучения (без учета поляризации) [1], которая определяется средним количеством частиц, вылетевших из слоя $z > 0$. Анализ расчетов показал, что величины относительной трудоемкости алгоритмов при использовании оценок $\xi, \tilde{\boldsymbol{\zeta}}, \boldsymbol{\eta}$ соотносятся приблизительно как 1 : 11.6 : 40.13, а размеры максимального поколения в процессе расчета $M = 10^9$ траекторий при использовании оценок $\tilde{\boldsymbol{\zeta}}$ и $\boldsymbol{\eta}$ составили 226 и 782 соответственно. Дополнительно стоит отметить, что при использовании оценки $\boldsymbol{\eta}$ можно в одном расчете получить оценку относительной погрешности между первой компонентой вектора Стокса и ее приближенной скалярной оценкой по отношению к последней. Так, для $M = 10^9$, значение этой относительной погрешности составило 0.00076, а ее среднеквадратическое отклонение составило 0.00002.

Таблица 1: Оценка интенсивности излучения, выходящего из полубесконечного слоя $z > 0$ ($\sigma_c = 0.01$)

M	$\mathrm{E}\boldsymbol{\xi}_M \pm \sigma(\boldsymbol{\xi})_M$	$V\boldsymbol{\xi}$	$\mathrm{E}\tilde{\boldsymbol{\zeta}}_M \pm \sigma(\tilde{\boldsymbol{\zeta}})_M$	$\mathrm{E}\boldsymbol{\eta}_M \pm \sigma(\boldsymbol{\eta})_M$
10^6	0.722991 ± 0.0054	29.5	0.753884 ± 0.000932	0.752787 ± 0.000740
10^7	0.732716 ± 0.0022	52.5	0.753206 ± 0.000294	0.753013 ± 0.000234
10^8	0.743028 ± 0.0026	716.8	0.753276 ± 0.000093	0.753154 ± 0.000074
10^9	0.746381 ± 0.0013	1650.1	0.753272 ± 0.000029	0.753237 ± 0.000023

Список литературы

[1] *Марчук Г.И., Михайлов Г.А., Назаралиев М.А. и др. Метод Монте — Карло в атмосферной оптике.* — Новосибирск: Наука, 1976 [Engl.transl.: Springer-Verlag, 1980]

[2] *Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте — Карло.* М.: Наука,1987 [Engl.transl.: Springer-Verlag, 1992].

[3] *Ермаков С.М., Михайлов Г.А.* Статистическое моделирование. М, Наука, 1982.

[4] Михайлов Г.А., Медведев И.Н. *Оптимизация весовых алгоритмов статистического моделирования.* — Новосибирск: Омега Принт, 2011. — 304 с.

[5] Г. А. Михайлов, С. А. Ухинов, А. С. Чимаева Дисперсия стандартной векторной оценки метода Монте — Карло в теории переноса поляризованного излучения// Ж. вычисл. матем. и матем. физ., Т.46, № 11, 2006, 2099–2113

[6] Г.А. Михайлов, И.Н. Медведев Улучшение весового статистического моделирования на основе перехода к процессу Гальтона-Ватсона // Докл. РАН. — 2009 — Т. 424, № 3, С. 311–314

[7] Михайлов Г. А., Ухинов С. А. Двойственное представление среднего квадрата векторной оценки метода Монте — Карло // Доклады РАН. 2011. Т. 438, N 5.

[8] Севастьянов Б.А. *Ветвящиеся процессы.* М.: Наука 1971 г.

[9] Ukhinov S.A., Yurkov D. I. Monte Carlo method of calculating the derivatives of polarized radiation // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1998. V. 13. N 5. P. 425–444.

Медведев Илья Николаевич — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: min@osmf.sscc.ru.

Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННЫЕ СТОХАСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ ТЕМПЕРАТУРЫ С ПЕРИОДИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ

А. М. Медвяцкая[1], В. А. Огородников[1,2],

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*
[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.245

В докладе рассматривается приближенный алгоритм моделирования периодически коррелированных случайных процессов на основе специальной модификации нерандомизированного спектрального представления стационарного случайного процесса непрерывного аргумента. Модификация этого представления состоит в том, что вместо спектральной плотности для стационарного процесса использовалось семейство спектральных плотностей, определяемое периодически меняющимся временным параметром. Показано, что случайный процесс построенный с помощью спектрального представления, в котором случайные амплитуды являются стационарным векторным случайным процессом с последующим суммированием по компонентам вектора является периодически коррелированным процессом. Численно показано, что учёт перекрёстных корреляций существенно увеличивает точность воспроизведения корреляционной структуры периодически коррелированного процесса.
Ключевые слова: периодически коррелированный случайный процесс, векторный стационарный процесс, спектральное представление.

Введение

Работа посвящена вопросам, связанным с использованием различных типов моделей периодически коррелированных процессов для моделирования реальных временных рядов. Рассматривается два типа моделей периодически коррелированных процессов. Первая основана на представлении периодически коррелированного процесса дискретного аргумента в виде векторного стационарного процесса с заданной матричной корреляционной функцией [1], [5], вторая на одном специальном спектральном представлении периодически коррелированного процесса [4]. Каждая из этих моделей имеет ряд своих преимуществ и недостатков. Например, первая модель удобна для моделирования длинных гауссовских последовательностей с постоянным шагом по времени, вторая является в общем случае приближенной гауссовской, но позволяет строить процессы как в равноотстоящих, так и не равноотстоящих точках по времени.

В работе используются данные наблюдений приземной температуры воздуха за месяц май для сроков наблюдений 6, 12, 18, 24 час. за период 1938–1984 гг. на метеорологической станции “Свердловск”. Представим эти данные в виде векторных рядов:

$$\vec{\xi}_1^{*l}, \vec{\xi}_2^{*l}, \ldots, \vec{\xi}_t^{*l}, \ldots, \vec{\xi}_M^{*l},$$

где $\vec{\xi}_t^{*l} = (\xi_{1t}^{*l}, \ldots, \xi_{pt}^{*l})^T$, $t = 1, \ldots, M$, $l = 1, \ldots, Y$, $p = 1, \ldots, P$, $P = 4$. Здесь P — число сроков наблюдений, $M = 31$ — число дней в месяце, $Y = 48$ — число лет наблюдений.

В приближении векторного стационарного процесса для оценки матричной корреляционной функции

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта No 15-01-01458-а, 16-01-00145-а, 16-31-00038-мол-а).

обычно используют формулы:

$$C_k^* = (c_{pq}^*(k)) = \frac{1}{Y}\frac{1}{M-k-1}\sum_{l=1}^{Y}\sum_{t=1}^{M-k}(\vec{\xi}_t^{*l} - \vec{\mu}^*)(\vec{\xi}_{t+k}^{*l} - \vec{\mu}^*)^T,$$
$$k = 0, \ldots, M-1, \;\; p, q = 1, \ldots, P,$$
$$R_k^* = (r_{pq}^*(k)) = \left(\frac{c_{pq}^*(k)}{\sqrt{c_{pp}^*(k)}\sqrt{c_{qq}^*(k)}}\right), \tag{1}$$
$$\vec{\mu}^* = \frac{1}{Y}\frac{1}{M}\sum_{l=1}^{Y}\sum_{t=1}^{M}\vec{\xi}_t^{*l},$$

которые обеспечивают несмещенность оценки, однако не гарантируют положительной определенности блочно-теплицевой корреляционной матрицы, соответствующей этой функции [3]. В данной работе используется смещенная оценка, в соответствии с которой в формуле (1) множитель $1/(M-k-1)$ заменяется на множитель $1/M$, что гарантирует положительную определенность корреляционной матрицы [3].

Основной целью работы является исследование точности воспроизведения в моделях реальной корреляционной структуры временных рядов приземной температуры воздуха.

1 Численные модели временных рядов температуры воздуха

В данной работе используется приближение, в соответствии с которым рассматриваемые процессы, соответствующие временным рядам температуры, являются периодически коррелированными гауссовскими процессами с математическими ожиданиями, дисперсиями и корреляционными функциями, периодически зависящими от времени [2]:

$$E\eta_t = E\eta_{t+P}, \quad D\eta_t = D_{t+P},$$
$$R_{t,s} = R_{t+P,s+P}. \tag{2}$$

В качестве первой модели рассматриваются гауссовские временные ряды, которые интерпретируются как векторные стационарные процессы [5] с заданной матричной корреляционной функцией. В дальнейшем элементы модельных векторных временных рядов будут обозначаться как $\vec{\xi}_t$. Для векторного стационарного процесса с дискретным временем на ограниченном интервале:

$$\vec{\xi}_1, \ldots, \vec{\xi}_t, \ldots, \vec{\xi}_m, \tag{3}$$

матричной корреляционной функции соответствует блочно-теплицева корреляционная матрица. Гауссовские процессы с матричными корреляционными функциями:

$$R_0,\, R_1,\, \ldots\, ,\, R_{m-1}, \tag{4}$$

(или блочно-теплицевыми корреляционными матрицами):

$$R_{(m)} = \left\| \begin{array}{cccc} R_0 & R_1 & \ldots & R_{m-1} \\ R_1^T & R_0 & \ldots & R_{m-2} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ R_{m-1}^T & R_{m-2}^T & \ldots & R_0, \end{array} \right\| \tag{5}$$

строятся на основе метода условных распределений по схеме [6]:

$$\begin{array}{l} \vec{\xi}_1 = C_0\vec{\varphi}_1, \\ \vec{\xi}_2 = \vec{B}^T[1]J_{(1)}\vec{\xi}_{(1)} + C_1\vec{\varphi}_2, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \vec{\xi}_m = \vec{B}^T[m-1]J_{(m-1)}\vec{\xi}_{(m-1)} + C_{m-1}\vec{\varphi}_m, \end{array} \tag{6}$$

где векторы $\vec{\xi}_{(k)} = (\vec{\xi}_1^T, \ldots, \vec{\xi}_k^T)^T$, C_k — нижняя треугольная матрица такая, что $C_kC_k^T = Q_k$, $Q_k = R_0 - \vec{R}_k^T R_{(k)}^{-1}\vec{R}_k$ — условная ковариационная матрица вектора $\vec{\xi}_k$ при фиксированном векторе $\vec{\xi}_{(k-1)}$, $\vec{R}_k = (R_1^T, \ldots, R_k^T)^T$, $\vec{\varphi}_k = (\varphi_1^k, \ldots, \varphi_p^k)$ — нормальный вектор с нулевым средним и единичной корреляционной матрицей, матрица $J_{(k)}$ — блочная перестановочная матрица с единичными матрицами на побочной

диагонали. Здесь $\vec{B}^T[k] = (B_1^T[k], B_2^T[k], \ldots, B_k^T[k])$ — матричные коэффициенты регрессии являются решением системы уравнений:

$$\tilde{R}_{(k)}\vec{B}[k] = \vec{R}_k, \;\; \tilde{R}_{(k)} = J_{(k)}R_{(k)}J_{(k)}$$

и определяются с использованием специального рекурсивного алгоритма [6]. Для моделирования векторных последовательностей большой длины могут быть использованы векторные модели авторегрессии фиксированного порядка K, обеспечивающие совпадение корреляционной функции периодически коррелированного процесса в первых KP точках [5], [6]. В качестве матричной корреляционной функции (4) используется выборочная матричная корреляционная функция вида (1) для случая смещенной оценки.

В качестве второй модели рассматривается нерандомизированная спектральная модель случайного процесса в виде:

$$\eta_n(t) = \sum_{i=1}^{n} p_i^{1/2}(t)\,(\zeta_i \sin(\lambda_i t) + \xi_i \cos(\lambda_i t)), \tag{7}$$

где ζ_i и ξ_i — независимые стандартные нормальные величины,

$$p_i(t) = \int_{\Lambda_i} S(\lambda, t)d\lambda, \tag{8}$$

спектральные плотности $S(\lambda, t) = S(\lambda, t+P)$ являются периодическими функциями от времени t, а Λ_i разбиение спектрального пространства, $\lambda_i \in \Lambda_i$.

В силу использования приближения периодически коррелированного процесса (или векторного стационарного процесса) в матричной ковариационной функции:

$$c_{pq}(k),\;\; k = 0, \ldots, M-1,\;\; p, q = 1, \ldots, P \tag{9}$$

последовательность элементов $c_{pp}(k)$, $k = 0, \ldots, M-1$, $p = 1, \ldots, P$ образуют ковариационные функции стационарных процессов. На Рис.1 приведены графики соответствующих выборочных корреляционных функций $r_{qq}^*(k)$, а в таблице 1 соответствующие дисперсии.

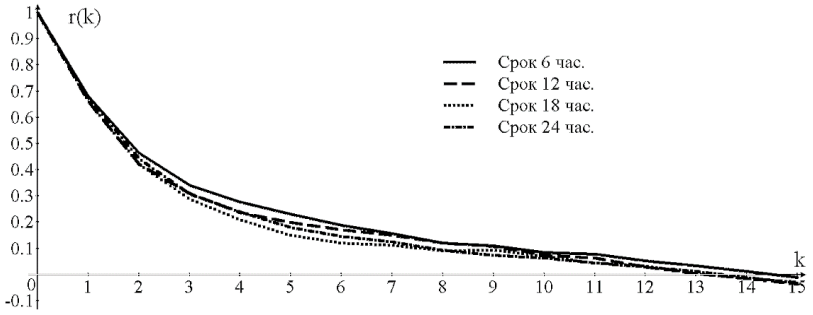


Рис. 1: Выборочные корреляционные функции $r_{qq}^*(k)$ значений ряда $\vec{\xi}_t^{*l}$ в последовательных точках, соответствующих срокам наблюдений 06, 12, 18 24 час.

Таблица 1: Дисперсии процесса в стандартные сроки наблюдения

p	1 (06 час)	2 (12 час)	3 (18 час)	4 (24 час)
дисперсия	32.345	29.471	50.297	47.532

В данной работе выборочные корреляционные функции, представленные на Рис. 1, аппроксимируются с помощью метода наименьших квадратов корреляционными функциями непрерывного аргумента вида:

$$\begin{gathered} r_q(k) = a_{1q}\exp(-\gamma_{1q}|k|)\cos(\beta_{1q}k) + a_{2q}\exp(-\gamma_{2q}|k|) + a_{3q}\exp(-\gamma_{3q}|k|)\cos(\beta_{3q}k), \\ a_{1q} + a_{2q} + a_{3q} = 1, \quad q = 1, \ldots, 4. \end{gathered} \tag{10}$$

Соответствующие спектральные плотности имеют вид:

$$s_q(\lambda) = a_{1q}\frac{\gamma_{1q}}{\pi}\frac{\gamma_{1q}^2+\beta_{1q}^2+\lambda^2}{(\gamma_{1q}^2+\beta_{1q}^2+\lambda^2)^2-4\beta_{1q}^2\lambda^2} + a_2\frac{\gamma_{2q}}{\pi(\gamma_{2q}^2+\lambda^2)} + a_{2q}\frac{\gamma_{3q}}{\pi}\frac{\gamma_{3q}^2+\beta_{3q}^2+\lambda^2}{(\gamma_{3q}^2+\beta_{3q}^2+\lambda^2)^2-4\beta_{3q}^2\lambda^2}. \quad (11)$$

Значения коэффициентов приведены в таблице 2.

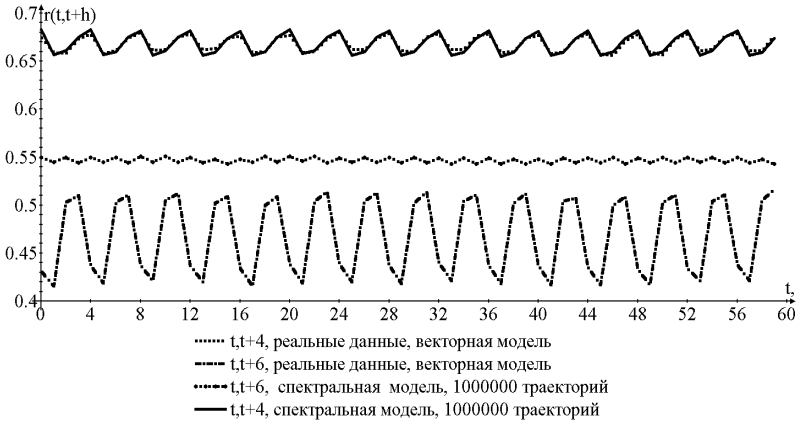


Рис. 2: Корреляции процессов (6) и (7) как функций от времени при сдвигах $h = 4, h = 6$.

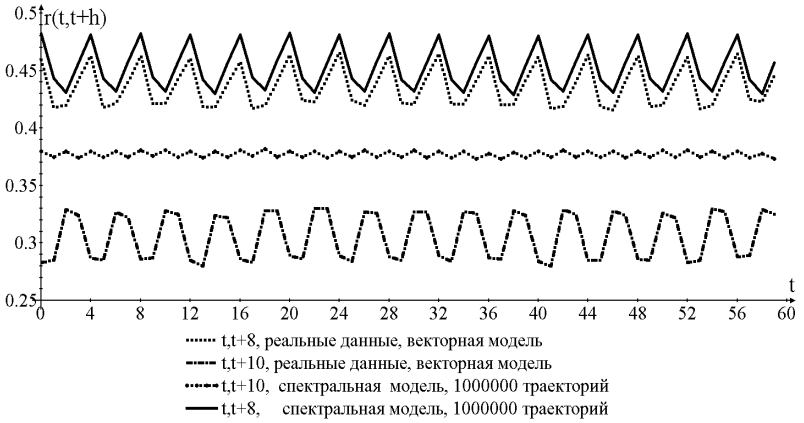


Рис. 3: Корреляции процессов (6) и (7) как функций от времени при сдвигах $h = 8, h = 10$.

На рисунках 2,3,4 приведены корреляции процесса (6) и (7) как функции от времени при различных сдвигах k. Ковариации являются периодическими функциями от времени. Результаты получены путем моделирования траекторий процессов (6) и (7) и оценкой соответствующих корреляций. При моделировании использовалось 1 000 000 модельных траекторий процесса (7). Отметим, что модель (6) позволяет строить периодически коррелированный процесс с учетом всех корреляций, полученных с помощью оценки (1), поэтому модельные корреляции совпадают с выборочными с точностью до статистической погрешности оценки по модельным траекториям процесса. В модели (7) итоговые погрешности определяются погрешностями аппроксимации корреляционных функций $r_q^*(k)$ функциями $r_q(k)$. Перекрестные корреляции в модели (6) определяются с точностью до статистической погрешности оценивания по модельным траекториям, а по модели (7) они определяются соотношением [4]:

$$R_n(t, t+h) = \sum_{i=1}^{n} p_i^{1/2}(t) p_i^{1/2}(t+h)\cos(\lambda_i(h)). \quad (12)$$

Поэтому отличие результатов по этим двум моделям, как видно из рисунков весьма существенное.

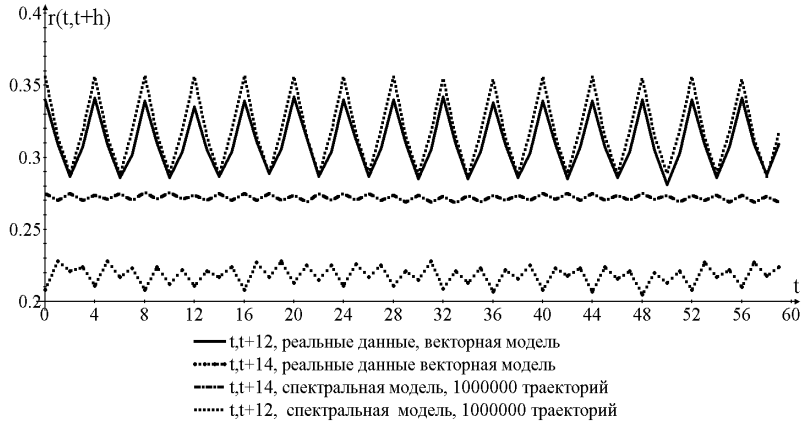


Рис. 4: Корреляции процессов (6) и (7) как функций от времени при сдвигах $h = 12, h = 14$.

Таблица 2: Значения коэффициентов α_{iq}, β_{iq}.

q \ коэфф.	a_{1q}	γ_{1q}	β_{1q}	a_{2q}	γ_{2q}	a_{3q}	γ_{3q}	β_{3q}
1 (6h)	0,7	0,54	0,001	0,2	0,078	0,1	0,2	0,001
2 (12h)	0,7	0,53	0,01	0,2	0,07	0,1	0,6	0,4
3 (18h)	0,7	0,5	0,2	0,2	0,1	0,1	0,5	0,4
4 (24h)	0,7	0,5	0,02	0,2	0,1	0,1	0,4	0,4

Заключение

Расчеты показали, что временные ряды температуры являются периодически коррелированными процессами. Однако модель (7) для их описания плохо подходит, потому что модельные корреляции не согласуются с соответствующими корреляциями, полученными по данным наблюдений, приведенными на Рис. 2. Как отмечалось, это объясняется тем, что в модели (7) перекрестные корреляции не являются входными параметрами модели, а качество их воспроизведения зависит от того, как согласуются корреляции (12) с реальными корреляциями. Поэтому для реалистичного описания временных рядов приземной температуры воздуха целесообразно использовать модель (3)–(6). Модель (7) может оказаться полезной при моделировании таких временных рядов, для которых корреляционная структура хорошо описывается классом корреляционных функций процесса (7).

Список литературы

[1] Боков В.Н., Лопатухин Л.И., Микулинская С.М., Рожков В.А., Румянцева С.А. О межгодовой изменчивости волнения // В кн. Проблемы исследования и математического моделирования ветрового волнения. — СПб: Гирометеоиздат, 1995. С. 446–454.

[2] Драган Я.П., Рожков В.А., Яворский И.Н. Методы вероятностного анализа ритмики океанологических процессов. — Л.: Гидрометеоиздат, 1987. 320с.

[3] Марпл С.Л. Цифровой спектральный анализ и его приложения. М: Мир, 1990

[4] Медвяцкая А.М., Огородников В.А. Спектральная модель одного класса периодически коррелированных процессов. // Тезисы доклада международная конференция “Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2015” ИВМиМГ СО РАН с. 39

[5] Derenok K.V., Ogorodnikov V.A. Numerical simulation of significant long-term decreases in air temperature // Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling, 2008, Vol. 23, No 3. P. 223–277.

[6] Ogorodnikov V.A. and Prigarin S.M. Numerical modeling of random processes and fields: algorithms and applications // VSP, Utrecht, The Netherlands, 1996.

Алиса Максимовна Медвяцкая — аспирант Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: medvyatskaya@mail.ru;
Василий Александрович Огородников — д.ф.-м.н., главн. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: ova@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

НОВЫЕ АЛГОРИТМЫ ОЦЕНКИ ФЛУКТУАЦИЙ ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА РАЗМНОЖЕНИЯ ЧАСТИЦ В СЛУЧАЙНОЙ СРЕДЕ МЕТОДОМ МОНТЕ — КАРЛО

Г. А. Михайлов[1,2], Г. З. Лотова[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 517.676

Рассматривается процесс переноса частиц с рассеянием и размножением в случайной среде. Для исследования флуктуаций параметров критичности в такой системе с помощью СуперЭВМ построен алгоритм метода Монте — Карло, допускающий распараллеливание. На основе теории малых возмущений и улучшенного диффузионного приближения разработан рандомизированный метод гомогенизации. Такой метод не даёт точных значений и используется для контроля результатов, полученных методом Монте — Карло. Тестовые расчёты проведены для одногрупповой сферически-симметричной модели системы. Получены достаточно согласованные результаты вычислений математических ожиданий и дисперсий эффективного коэффициента размножения обоими методами.

Ключевые слова: метод Монте — Карло, статистическое моделирование, теория переноса, эффективный коэффициент размножения.

Введение

Процесс переноса представляет собой однородную марковскую цепь столкновений частицы с элементами вещества, в результате которых может происходить рассеяние, поглощение или размножение частиц (при делении ядер вещества). Одним из параметров критичности является эффективный коэффициент размножения частиц (по столкновениям) k_{eff}, который является собственным значением интегрального уравнения (см., например, [1, 2]):

$$\Phi(r,\omega) = \frac{1}{k_{eff}} \int\int \frac{(\sigma_s(r') + \nu\sigma_f(r'))\, e^{-\tau(r,r')}}{4\pi|r-r'|^2}\, \delta\left(\omega - \frac{r-r'}{|r-r'|}\right) \Phi(r',\omega')\, dr' d\omega'. \tag{1}$$

Здесь $\Phi(r,\omega)$ — плотность потока частиц (интенсивность излучения), $r \in R^3$ — пространственная точка, ω — единичный вектор направления, $\sigma(r) = \sigma_s + \sigma_c + \sigma_f$ — полное сечение (коэффициент ослабления), σ_s — сечение рассеяния, σ_f — сечение деления, σ_c — сечение поглощения, ν — среднее число частиц, вылетающих из точки деления,

$$\tau(r,r') = \int_0^{|r-r'|} \sigma\left(r' + t\frac{r-r'}{|r-r'|}\right) dt$$

является оптической длиной отрезка (r',r). При $k_{eff} = 1$ система является критической [1].

Перепишем (1) в виде: $k_{eff}\varphi(x) = \int_X k(x',x)\varphi(x')dx'$, или $k_{eff}\varphi = K\varphi$, где $x = (r,\omega)$, $\varphi = \sigma\Phi$ и $k(x',x) = k(x' \mapsto x)$ — указанная выше плотность. Здесь k_{eff} — спектральный радиус оператора K [3], что и определяет, в принципе, предлагаемый далее алгоритм метода Монте — Карло.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 15-01-08988, 15-01-00894, 16-01-00530, 16-01-00145, 17-01-00823) и Программы Президиума РАН № I.33П.

Если параметры задачи случайны, то величина k_{eff} также случайна и, в частности, практически важно оценивать вероятность $\mathrm{P}(k_{eff} > 1)$, то есть вероятность надкритичности процесса переноса частиц с размножением в случайной среде.

Это можно осуществлять путём оценки вероятностных моментов $\mathrm{E}k_{eff}$ и $\mathrm{D}k_{eff}$, то есть среднего значения и дисперсии величины k_{eff}. Используя приближённую гауссовость распределения случайной величины k_{eff} на этой основе можно оценить и вероятность $\mathrm{P}(k_{eff} > 1)$. Тестовое численное статистическое моделирование позволяет проверить удовлетворительность такой методики.

В следующем разделе сформулированы алгоритмы метода Монте — Карло, которые вследствие использования "метода двойной рандомизации" [4] допускают эффективное распараллеливание.

"Метод двойной рандомизации" для оценки вероятностных моментов серии функционалов $\{I_k(\sigma)\}$ от интенсивности излучения в стохастической среде определяется соотношениями:

$$\mathrm{E}I_k(\sigma) = \mathrm{E}_\sigma \mathrm{E}_\Omega \xi_k(\Omega, \sigma) = \mathrm{E}_{(\Omega,\sigma)} \xi_k(\Omega, \sigma),$$

$$\mathrm{E}[I_i(\sigma) I_j(\sigma)] = \mathrm{E}_{(\Omega_1,\Omega_2,\sigma)} [\xi_i(\Omega_1, \sigma) \xi_j(\Omega_2, \sigma)].$$

Здесь Ω — случайная траектория кванта, моделируемая для предварительно построенной реализации поля σ, $\xi_k(\Omega, \sigma)$ — соответствующая оценка функционала, а (Ω_1, Ω_2) — пара таких условно-независимых траекторий. В частности,

$$\mathrm{E}[I_k^2(\sigma)] = \mathrm{E}_{(\Omega_1,\Omega_2,\sigma)} [\xi_k(\Omega_1, \sigma) \xi_k(\Omega_2, \sigma)].$$

Таким образом, для построения несмещённых оценок рассматриваемых вероятностных моментов второго порядка, например, $\mathrm{E}k_{eff}^2$, достаточно для каждой реализации σ моделировать лишь пару условно-независимых траекторий Ω_1, Ω_2. Для уменьшения относительной трудоёмкости расчётов здесь можно моделировать две условно-независимые серии траекторий $\{\Omega_1^{(n)}\}$ и $\{\Omega_2^{(n)}\}$, $n = 1, \ldots, N_\sigma$, причём произведение $\xi_i(\Omega_1, \sigma) \xi_j(\Omega_2, \sigma)$ заменяется на

$$\frac{1}{N_\sigma^2} \sum_{n=1}^{N_\sigma} \xi_i \left(\Omega_1^{(n)}, \sigma\right) \sum_{n=1}^{N_\sigma} \xi_j \left(\Omega_2^{(n)}, \sigma\right).$$

Аналогично оценивается момент порядка m на основе моделирования m условно-независимых траекторий $\Omega_1, \ldots, \Omega_m$.

1 Алгоритмы метода Монте — Карло

Достаточно ясно, что оценки величины k_{eff} методом поколений по столкновениям [5] мало эффективны при решении рассматриваемых стохастических задач, т.к. не допускают использования двойной рандомизации. Поэтому далее формулируются алгоритмы метода Монте — Карло, связанные с предельным соотношением [3]:

$$k_{eff} = \lim_{n\to\infty} k_n, \quad k_n = \sqrt[n]{\|K^n\|}, \tag{2}$$

причём

$$\|K^n\| = \sup_{x\in X} \int \ldots \int k(x, x_1) k(x_1, x_2) \ldots k(x_{n-1}, x_n)\, dx_1 \ldots dx_n \tag{3}$$

и предполагается, что известна точка x_0, в которой реализуются супремум из (3).

Согласно определению субстохастической плотности $k(x', x)$ *величина* $\|K^n\|$ *равна среднему числу столкновений* n*-го номера при условии, что нормированный на одно столкновение источник расположен в точке* x_0. Таким образом, фактически формулируется алгоритм прямого статистического моделирования для оценки величины $\|K^n\|$. Осуществляя одновременно вычисления для различных значений n согласно (2) можно построить оценки величин $\mathrm{E}k_{eff}$ и $\mathrm{E}k_{eff}^2$ на основе степенной аппроксимации функции $x^{1/n}$ и соответствующей двойной рандомизации.

Введём теперь обозначения: $K = K(\Sigma)$, $k_{eff} = k_{eff}(\Sigma)$, где Σ — совокупность случайных параметров задачи. Поскольку в данном случае величина $\|K^n(\Sigma)\|$ представляет собой линейный функционал от плотности столкновений n-го номера, то

$$\mathrm{E}_\Sigma \|K^n(\Sigma)\| = \mathrm{E}_\Sigma \mathrm{E}_\Omega\, \eta_n(\Omega, \Sigma), \tag{4}$$

где $\eta_n(\Omega, \Sigma)$ — число столкновений n-го номера на траектории Ω.

Соотношение (4) показывает, что здесь применим "метод двойной рандомизации", причём для оценки $\mathrm{D}\|K^n\|$ следует моделировать две условно независимые траектории при фиксированных параметрах Σ.

Отметим, что сформулированный алгоритм прямого моделирования удобен тем, что допускает использование геометрического алгоритма максимального сечения, который эффективен для моделирования свободного пробега частицы в случайной среде [6]. Этот алгоритм дополнительно упрощается, если не моделируется ветвление, а в качестве компенсации вспомогательный результативный вес домножается на $(\sigma_s+\nu\sigma_f)/\sigma$, т.е. на условное математическое ожидание частиц, появляющихся в точке столкновения. Дисперсию алгоритма можно уменьшить, используя более сложный вариант метода "математических ожиданий" [7], в котором очередное столкновение (r,ω) моделируется в пределах рассматриваемой среды (т.е. "без вылета") соответственно условной плотности

$$f(l;r',w)=\frac{\sigma(r'+\omega l)e^{-\tau(r',r'+\omega l)}}{1-e^{-\tau(r',r'+\omega l^*)}},\quad l<l^*,$$

где l^* — расстояние от точки r' до границы среды в направлении ω. При этом $r=r'+l\omega$ и результативный вес домножается на $1-e^{-\tau(r',r'+l^*\omega)}$. Отметим, что такой способ был эффективно использован в [8] для оценки спектрального радиуса оператора K_p, определяющего средний квадрат "оценки по столкновениям".

Необходимость вычисления величины $\tau(r',r'+l\omega)$ существенно усложняет алгоритм моделирования траектории в случайно неоднородной среде, поэтому в конкретных случаях для выбора алгоритма расчёта необходимы предварительные сравнительные расчёты.

Вероятность

$$\mathrm{P}(k_{eff}(\Sigma)>1)\approx\mathrm{P}(\|K^n\|>1)=\mathrm{P}(k_n^n>1)$$

можно оценить, предполагая, что плотность распределения $f_n(y)$ случайной величины $\|K^n\|=k_n^n$ является приближённо гауссовской. Это предположение, в частности, выполняется, если стохастическое возмущение среды определяется большим количеством слабо зависимых случайных величин. Более точным является приближение

$$f_n(y)\approx f_{norm}(y;a,d^2)\left(1+a_3\psi_3\left((y-a)/d\right)\right),\tag{5}$$

где a и d^2 — выборочные математическое ожидание и дисперсия случайной величины k_n^n, ψ_3 — полином Эрмита, ортонормированный с весом $f_{norm}(y;a,d^2)$,

$$\psi_3(z)=(z^3-3z)/\sqrt{6},\quad f_{norm}(y;a,d^2)=\frac{\exp(-(y-a)^2/(2d^2))}{\sqrt{2\pi d^2}}.$$

При этом $a_3=\mathrm{E}_\Sigma\,\psi_3((k_n^n-a)/d)$. Соотношение $a_1=a_2=0$ здесь является следствием использования статистических оценок параметров плотности f_{norm}. Для оценки величины a_3 можно использовать алгоритм двойной рандомизации с тремя условно независимыми траекториями Ω.

Тестовые расчёты показали медленную сходимость указанной выше последовательности $\{k_n\}$, которая, по-видимому, связана с тем, что в (2) итерации оператора K строятся, начиная с нерегулярной функции $\delta(x-x_0)$. Поэтому был построен новый алгоритм, в котором начальная точка x_0 траектории столкновений выбирается соответственно некоторой плотности $\varphi(x)$ и k_n заменяется на

$$k_n'=\left(\int\left(K^n\varphi\right)(x)\,dx\right)^{1/n}.\tag{6}$$

Предельное соотношение $k_n'\to k_{eff}$ здесь обосновывается по аналогии с обоснованием итераций Келлога в [2](см. также [9], раздел 4.1) в тех же предположениях, которые обычно считаются выполненными для оператора K в интегральном уравнении переноса излучения. В качестве функции φ здесь целесообразно выбирать функцию, близкую к собственной функции оператора K_0 с осреднённым ядром, причём $\int\varphi(x)\,dx=1$.

Требуемые оценки вероятностных моментов $\mathrm{E}k_{eff}$, $\mathrm{E}k_{eff}^2$ строятся на основе (6) с использованием приближения

$$\eta^{\frac{1}{n}}\approx\eta_0^{\frac{1}{n}}+\frac{1}{n}\,\eta_0^{-\frac{n-1}{n}}(\eta-\eta_0)+\frac{1-n}{2n^2}\,\eta_0^{-\frac{2n-1}{n}}(\eta-\eta_0)^2,\tag{7}$$

где η — случайная оценка величины $(k_n')^n$, то есть $\eta_0=\mathrm{E}\eta=\int(K^n\varphi)(x)\,dx$. Отсюда имеем

$$\mathrm{E}k_{eff}\approx(\mathrm{E}\eta)^{1/n}+\frac{1-n}{2n^2}(\mathrm{E}\eta)^{-(2n-1)/n}\mathrm{D}\eta,$$

$$\mathrm{D}k_{eff} \approx \frac{1}{n^2}(\mathrm{E}\eta)^{-(2n-2)/n}\mathrm{D}\eta, \quad \mathrm{E}k_{eff}^2 \approx \mathrm{D}k_{eff} + (\eta_0)^{\frac{2}{n}},$$

причём для оценки $\mathrm{D}k_{eff}$ методом рандомизации необходимо использовать две условно независимые траектории Ω_1, Ω_2. В случае необходимости разложение (7) можно продлить до кубического слагаемого, которое оценивается с использованием Ω_1, Ω_2, Ω_3.

2 Гомогенизация случайно возмущённой среды

Далее для простоты обозначений в некоторых случаях будем полагать $k_{eff} = k$. Возможности использования гомогенизации далее будут показаны на примере случайного возмущения плотности ρ среды, то есть будет предполагаться, что $\sigma = \sigma^{(0)}\rho, \sigma_s = \sigma_s^{(0)}\rho$, $\sigma_f = \sigma_f^{(0)}\rho$ и $\rho = \rho(r)$ — случайная функция, такая, что $\mathrm{E}\rho(r) = \bar{\rho}$, причём величина $d = \sqrt{\mathrm{D}\rho(r)}$ невелика, сравнительно с $\bar{\rho}$.

Предполагается также, что существует эффективная аналитическая оценка $g(x)$ решения однородного уравнения переноса для $\rho(r) \equiv \bar{\rho}$ и соответствующее достаточно точное выражение $k_{eff} = k_{eff}(\tilde{\rho})$ в подходящем интервале значений $\tilde{\rho}$.

В [10] (раздел 26.1) на основе диффузионного приближения для плоского слоя среды показано, что значение k_{eff} может достаточно хорошо сохраняться, если переходить от $\rho(r)$ к постоянной плотности $\tilde{\rho}$ (то есть использовать гомогенизацию) по формуле:

$$\tilde{\rho} = \frac{\int \rho(r) g_0(r)\, dr}{\int g_0(r)\, dr}, \tag{8}$$

где $g_0(r) = \int g(x)\, d\omega$.

Для рассматриваемого варианта задачи формулу (8) можно пояснить следующим образом. Гомогенизация с сохранением значения линейного функционала [10] осуществляется по формуле вида (8) с дополнительным умножением функции g_0 на "функцию ценности", которая равна значению функционала для источника, локализованного в точке x. В данном случае естественно определить эту функцию корнем n-й степени из интеграла в (3), предельное значение которого, соответственно сказанному в разделе 2, в достаточно широких условиях не зависит от x; это подтверждает целесообразность использования формулы (8).

Можно предложить следующий способ тестирования этой формулы с помощью дополнительных расчётов методом Монте — Карло. Если в некоторой области D_i исходной однородной среды плотность $\rho_i = \rho$ заменяется на $\rho_i + \delta$, $|\delta| \ll 1$, то величина $[k(\rho_i + \delta) - k(\rho_i)]\delta^{-1}$ даёт оценку $k'_{\delta,i}$ соответствующей производной. Эта производная эффективно оценивается методом Монте — Карло на основе дифференцирования вспомогательного веса [11]; получаемые таким способом оценки позволяют осуществить тестирование рассматриваемого метода гомогенизации путём сравнения их с $k'_{\delta,i}$, $i = 1, 2, \ldots$.

Требуемые статистические оценки моментов $\mathrm{E}k_{eff}, \mathrm{E}k_{eff}^2$ и вероятности $\mathrm{P}(k_{eff} > 1)$ получаются путём многократной реализации плотности $\rho(r)$ и формулы $k_{eff}(\tilde{\rho})$ для значений $\tilde{\rho}$, определяемые формулой (8). Трудоёмкость вычислений можно существенно сократить путём эффективного табулирования функции $k_{eff}(\tilde{\rho})$.

Как показали расчёты (см. далее), предложенный здесь способ гомогенизации даёт более точные результаты, чем разработанный в [12] способ на основе линеаризации с использованием производных по ρ_i.

3 Тестовые расчёты

Для проведения тестовых расчётов рассматривалась сферически симметричная среда с кусочно-постоянной случайной плотностью $\rho = \rho(r)$ в шаре радиуса $R = 7.72043$ с макроскопическими сечениями $\rho\sigma^{(0)}$, $\rho\sigma_s^{(0)}$, $\rho\sigma_f^{(0)}$, где

$$\sigma^{(0)} = 1,\ \sigma_s^{(0)} = 0.97,\ \sigma_f^{(0)} = 0.03,\ \nu = 2.5.$$

Для построения реализации среды шар делится на m одинаковых по объёму сферических слоёв, в каждом слое случайная величина $\rho \equiv \rho_i$ выбирается независимо и равномерно на отрезке $[1-\varepsilon, 1+\varepsilon]$. Известно, что при $\rho \equiv \tilde{\rho} = 1$ для такого шара $k_{eff} = k \approx 1$ с погрешностью около 10^{-5}.

Для такой системы были проведены расчёты величин $\mathrm{E}k_{eff}$, $\mathrm{E}k_{eff}^2$, $\mathrm{P}(k_{eff} > 1)$ с помощью гомогенизации случайных реализаций среды и диффузионного приближения, а также величин $\mathrm{E}k_{eff}$, $\mathrm{E}k_{eff}^2$ методом

Таблица 1: Оценки величины $(1-\mathrm{E}k)\cdot 10^5$ методом гомогенизации

m	$(1-\hat{\mathrm{E}}k)\cdot 10^5$, $\varepsilon=0.3$	$(1-\hat{\mathrm{E}}k)\cdot 10^5$, $\varepsilon=0.5$
1	309.561 ± 0.146	968.085 ± 0.294
2	187.764 ± 0.112	565.694 ± 0.213
3	129.893 ± 0.092	383.935 ± 0.171
4	98.422 ± 0.080	287.566 ± 0.145
5	79.117 ± 0.071	229.222 ± 0.127
6	66.035 ± 0.065	190.183 ± 0.115
7	56.566 ± 0.060	162.270 ± 0.105
8	49.466 ± 0.056	141.443 ± 0.098
9	44.031 ± 0.052	125.475 ± 0.091
10	39.654 ± 0.049	112.697 ± 0.086
11	35.998 ± 0.047	102.160 ± 0.082
12	32.986 ± 0.045	93.462 ± 0.078

Монте — Карло. В расчетах использовался метод максимального сечения и простейший вариант метода математических ожиданий (см. раздел 1).

Как было сказано в разделе 2, гомогенизацию можно осуществлять с весом собственной функции оператора $K=K_0$, которая здесь в улучшенном диффузионном приближении равна $\sin(\mu r)/r$, где r — расстояние до центра шара, $\mu = 0.3739866$ [11]; эта функция была также использована в качестве плотности φ_0 распределения начальных точек траекторий в алгоритме метода Монте — Карло. Таким образом, для каждой реализации среды получается набор из m значений ρ_i и осреднённое значение $\tilde{\rho}$ вычисляется по формуле:

$$\tilde{\rho} = \left[\int_0^R \sin(\mu r) r\, dr\right]^{-1} \sum_{i=1}^{m} \rho_i \int_{r_{i-1}}^{r_i} \sin(\mu r) r\, dr, \quad r_i = R\,(i/m)^{1/3}.$$

Соответствующая величина k_{eff} получается из диффузионного приближения [13]:

$$k_{eff}(\tilde{\rho}) = \frac{\nu\tilde{\rho}\sigma_f^{(0)} + \tilde{\rho}\sigma_s^{(0)}}{p}, \quad \frac{Rp+\alpha}{\pi}\,\mathrm{arctg}\left(\frac{\pi p}{(Rp+\alpha)\tilde{\rho}\sigma^{(0)}}\right) = 1. \tag{9}$$

Здесь $\alpha = 0.71044$. Для уменьшения трудоёмкости вычислений функция $k(\tilde{\rho})$ была достаточно точно затабулирована; здесь в диффузионном приближении $k_{eff}(1) = 0.9999999\ldots$.

В таблице 1 приведены оценки $1-\hat{\mathrm{E}}k_{eff}$ значений $1-\mathrm{E}k_{eff}$ рандомизированным методом гомогенизации при $m = 1, 2, \ldots, 12$ для вариантов с $\varepsilon = 0.3$, 0.5. В качестве погрешности здесь приведена оценка величины $\sqrt{\mathrm{D}k_{eff}/N}$ при $N = 10^8$.

Сравнительные значения производных $\partial k_{eff}/\partial\rho_i$ приведены в таблице 2. Эти значения были получены, как указано в разделе 2: методом Монте — Карло путём дифференцирования вспомогательных весов [11] и методом рандомизированной гомогенизации с вычислением $k_{eff}(\tilde{\rho})$ для $\rho_i = 1$ и $\rho_i = 1.00001$, т.е. при $\delta = 0.00001$, $i = 1, 2, \ldots$. Сравнительно плохое совпадение вариантов таких значений для двух внешних слоев объясняется увеличением погрешности диффузионного приближения вблизи границы. Хорошая, в основном, точность оценок производных методом гомогенизации показывает возможность его использования для решения рассматриваемых задач с дополнительным тестированием методом Монте — Карло.

В таблицах 3, 4 приведены оценки, полученные методом Монте — Карло (ММК) для $n = 30$ (см. соотношение (2)) и $N = 10^8$ реализаций среды, т.е. для $2N = 2\cdot 10^8$ траекторий в алгоритме двойной рандомизации, а также соответствующие диффузионные оценки.

В таблице 5 приведены тестовые оценки величины $\mathrm{P}(k > 1)$ на основе метода рандомизированной гомогенизации для проверки возможности использования с этой целью оценок соответствующих вероятностных моментов; при этом, согласно изложенному в разделе 1, целесообразно переходить к оценке величины $\mathrm{P}(k^n > 1)$ на основе улучшенного нормального приближения (5) соответствующей плотности распределения. Это подтверждают результаты расчётов из таблицы 6, в первой колонке которой приведены эталонные

Таблица 2: Оценки производных $\partial k_{eff}/\partial \rho_i$ для системы из m слоёв (i считается от внутреннего к внешнему слою; $\delta = 10^{-5}$)

	$m = 2$		$m = 12$	
i	ММК	гомогенизация	ММК	гомогенизация
1	0.7823 ± 0.0127	0.7974	0.21136 ± 0.00432	0.20011
2	0.2970 ± 0.0050	0.2755	0.16202 ± 0.00336	0.16218
3			0.12707 ± 0.00282	0.13646
4			0.10585 ± 0.00217	0.11593
5			0.09229 ± 0.00189	0.09874
6			0.07968 ± 0.00170	0.08397
7			0.06636 ± 0.00151	0.07098
8			0.05947 ± 0.00124	0.05949
9			0.05153 ± 0.00104	0.04925
10			0.04437 ± 0.00060	0.04002
11			0.03940 ± 0.00063	0.03164
12			0.03362 ± 0.00043	0.02403

Таблица 3: Оценки величины $(1 - \mathrm{E}k_{eff}) \cdot 10^5$

	$(1 - \hat{\mathrm{E}}k_{eff}) \cdot 10^5$, $\varepsilon = 0.3$		$(1 - \hat{\mathrm{E}}k_{eff}) \cdot 10^5$, $\varepsilon = 0.5$	
m	ММК $n = 30, N = 10^8$	гомогенизация	ММК $n = 30, N = 10^8$	гомогенизация
1	278.27 ± 0.32	309.57 ± 0.14	622.74 ± 0.40	968.09 ± 0.29
2	156.56 ± 0.33	187.77 ± 0.11	362.83 ± 0.34	565.70 ± 0.21
6	63.74 ± 0.33	66.04 ± 0.06	143.53 ± 0.31	190.19 ± 0.11
12	38.51 ± 0.30	32.99 ± 0.04	91.41 ± 0.32	93.47 ± 0.07

Таблица 4: Оценки величины $(1 - \mathrm{E}k_{eff}^2) \cdot 10^5$

m	$(1 - \hat{\mathrm{E}}k_{eff}^2) \cdot 10^5, \varepsilon = 0.3$		$(1 - \hat{\mathrm{E}}k_{eff}^2) \cdot 10^5, \varepsilon = 0.5$	
	ММК $n = 30, N = 10^8$	гомогенизация	ММК $n = 30, N = 10^8$	гомогенизация
1	539.70 ± 0.30	596.59 ± 0.29	1202.44 ± 0.32	1840.07 ± 0.58
2	304.38 ± 0.29	362.55 ± 0.22	702.67 ± 0.31	1082.50 ± 0.42
6	124.49 ± 0.29	127.80 ± 0.13	279.06 ± 0.29	366.72 ± 0.23
12	75.54 ± 0.29	63.89 ± 0.09	158.73 ± 0.29	180.69 ± 0.16

Таблица 5: Оценки вероятностей $\mathrm{P}(k^n > 1)$, $\varepsilon = 0.3$

m	гомогенизация	норм. закон, $n = 1$	норм. закон, $n = 30$	с учётом ψ_3, $n = 30$	с учётом ψ_3, $n = 40$
1	0.500005 ± 0.000049	0.41652	0.49295	0.49517	0.51194
2	0.500011 ± 0.000049	0.43365	0.49380	0.49642	0.50725
6	0.500013 ± 0.000049	0.45957	0.49580	0.49881	0.50173
12	0.500036 ± 0.000049	0.47111	0.49691	0.49955	0.50066

статистические оценки величины $\mathrm{P}(k > 1)$. Следует заметить, что на основе таких предварительных модельных расчётов можно подбирать оптимальные значение n и аппроксимацию соответствующего закона распределения для оценки величины $\mathrm{P}(k > 1)$ методом Монте — Карло, как указано в разделе 1.

Можно полагать, что с учётом погрешностей диффузионного приближения, гомогенизации, линеаризации и реализации допредельного варианта соотношения (2) согласование полученных результатов является удовлетворительным.

Список литературы

[1] Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1960.

[2] Владимиров В.С. О применении метода Монте — Карло для отыскания наименьшего характеристического числа и соответствующей собственной функции линейного интегрального уравнения // Теория вероятностей и ее применение. 1956. Т. 1, № 1, С. 113–130.

[3] Канторович Л. В., Акилов Г. П. Функциональный анализ. М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1984.

[4] Михайлов Г. А. Эффективные алгоритмы метода Монте — Карло для вычисления корреляционных характеристик условных математических ожиданий // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1977. Т. 17, № 1. С. 246–249.

[5] Бреднихин С.А., Медведев И.Н., Михайлов Г.А. Оценка параметров критичности ветвящихся процессов методом Монте — Карло // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2010. Т. 50. № 2. С. 362–374.

[6] Амбос А.Ю. Вычислительные модели мозаичных однородных изотропных случайных полей и соответствующие задачи переноса излучения // Сибирский журнал вычислительной математики. 2016. Т. 19, № 1. С. 19–32.

[7] Ермаков С.М., Михайлов Г. А. Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.

[8] Mikhailov, G.A., Prigarin, S.M., Rozhenko, S.A. Weighted Monte Carlo estimators for angular distributions of the solar radiation reflected from a cloud layer // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2016. V. 31, № 4. P. 197–205.

[9] Соболь И.М. Численные методы Монте — Карло. М.: Наука, 1973.

[10] Марчук Г. И. Методы расчёта атомных реакторов. М.: Атомная энергия, 1961.

[11] Lotova G.Z., Mikhailov G.A., Estimates of the fluctuations of criticality parameters in the particle transport process in a random medium // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2004. V. 19, № 2. P. 173–183.

[12] Лотова Г.З., Михайлов Г.А. Моменты параметров критичности процесса переноса частиц в случайной среде // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2008. Т. 48. № 12. С. 2225–2236.

[13] Романов Ю.А. Точные решения односкоростного кинетического уравнения и их использование для расчета диффузионных задач (усовершенствованный диффузионный метод) // Исследование критических параметров реакторных систем. М.: Госатомиздат, 1960. С. 3–26.

Геннадий Алексеевич Михайлов — чл.-корр. РАН, Советник РАН Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: gam@sscc.ru;
Лотова Галия Зуфаровна — к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: lot@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 22 мая 2017 г.

КОМПЬЮТЕРНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ГЕОДИНАМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ДАННЫХ О ПРИРОДНЫХ КАТАСТРОФАХ ЗЕМЛИ

А. В. Михеева

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.254; 551.24; 552.6

В статье рассматривается наукоемкая программная система GIS-ENDDB [1], ориентированная на исследование причинно-следственных связей катастрофических событий в истории нашей планеты. Информационное обеспечение системы содержит данные о сейсмической активности Земли, тепловом потоке, детальном рельефе и аномалиях гравитационного поля и глубинной томографии, а также данные о параметрах космогенных структур. Рассмотрена функциональная структура программной системы и результаты использования её алгоритмов для анализа геодинамического процесса. Комплекс алгоритмов позволяет рассчитывать и визуализировать карты и диаграммы геофизических наблюдений, характеристики сейсмического процесса и режима кратерообразования, например, параметры энергии сейсмической активности (рис. 1), повреждаемости среды, кластеризации природных явлений. Среди последних изменений в подсистемах информационно-математического программного обеспечения — функции визуализации в разрезе характеристик сейсмического режима и данных томографии на глубинах до 700 км. В примерах анализа данных показано использование средств GIS-ENDDB при геодинамическом исследовании территорий глобального масштаба.

Ключевые слова: морфоструктурные элементы, геофизические аномалии, экспертная геоинформационная система, каталоги землетрясений и импактных структур.

Введение

Различные эндогенные (происходящие в недрах Земли) и экзогенные (например, последствия ударного воздействия) геологические процессы меняют внешний и внутренний облик нашей планеты и связаны с глобальными катастрофическими событиями её истории. Эти процессы характеризуют современную геодинамическую обстановку, и исключение из рассмотрения хотя бы одного из факторов (например, экзогенного) может привести к неправильным оценкам состояния и геодинамического развития некоторых регионов. Для решения задач, ориентированных на исследование причинно-следственных связей процессов, влияющих на региональную геодинамику, разработана Программная система GIS-ENDDB (Earth's Natural Disasters Database – база данных природных катастроф Земли [1].

1 Информационное наполнение системы

Информационная база системы содержит данные импактного каталога Земли [2], каталога вулканов, сейсмологические данные из более 10 глобальных каталогов землетрясений (мирового масштаба), а также массивы измерений теплового потока Земли, детального рельефа поверхности, аномалий гравитационного поля и глубинной томографии. Для визуализации и исследования этих данных создана методическая база на основе методов физико-математического анализа, геоинформационных технологий и геоинформационно-экспертных подходов к интерпретации полученных данных.

Сейсмологическая база данных включает в себя каталоги NEIC и Significant (геофизической службы USGS), ISC (Международной сейсмологической службы ISC), а также созданный автором комплексный

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-05-01234 А).

азиатский каталог COMPLEX, объединяющий детальные каталоги ФИЦ ЕГС РАН (Геофизической службы РАН) ряда азиатских и дальневосточных областей и каталог китайской сейсмографической сети CSN, благодаря чему является на порядок более полным и представительным каталогом (с M_{np}=3-3.5) по Центральной и Юго-Восточной Азии в сравнении с ISC или CSN (M_{np}=4-4.5).

Для построения теневой модели рельефа поверхности Земли высокого разрешения в систему ENDDB включены массивы высот рельефа ASTER GDEM (Global Digital Elevation Model) с 1-секундным разрешением. Для построения карт аномалий геофизических полей используются данные "Global marine gravity" V18.1 (гравитационного поля) [3], "The global heat flow database of the international heat flow commission" (данные измерений теплового потока Университета Северной Дакоты) [4], а также $3D$ модель "SL2013sv" (скоростная модель томографии по S_V —волнам) [5].

2 Процедуры выявления глубинных геодинамических структур

К методам физико-математического анализа, реализованного в GIS-ENDDB, относятся основные положения теории вероятности и математической статистики, физические законы разрушения сплошности среды, другие достижения отечественных и зарубежных авторов в предметной области исследования (например, [6]).

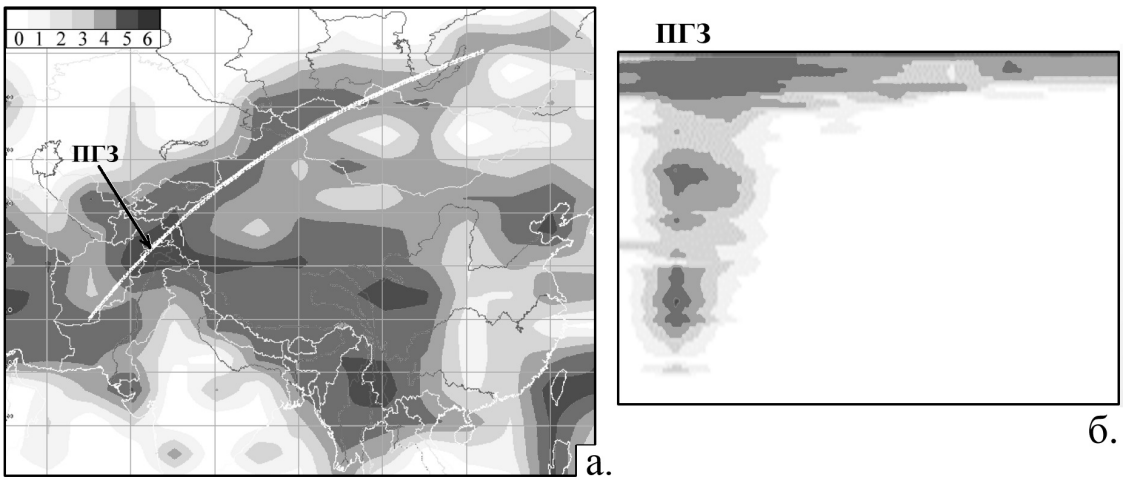


Рис. 1: Изолинии суммарной сейсмической энергии по данным каталога COMPLEX, $4 \le M_S \le 8$: а — на единицу площади (ячейка усреднения $3 \times 5°$, изолиниям $0, 2, \ldots, 6$ соответствуют верхние значения $E = 45 \cdot 10^4, 47 \cdot 10^5, 49 \cdot 10^6, 52 \cdot 10^7, 54 \cdot 10^8, 57 \cdot 10^9$ Дж/год/км^2); б — в разрезе по профилю вдоль "Афро-Байкальского" линеамента (а), глубина разреза 300 км

Методы графического и пространственно-временного анализа основных характеристик сейсмо-геодинамического процесса дополнены функциями их распределения в разрезе по назначенным пользователем разнонаправленным профилям, что позволяет, например, установить приуроченность сейсмичности к земной коре или падающим слоям, проникающим в верхнюю мантию (рис. 1б), к глубинным структурам томографического разреза; а также установить наличие корреляции по времени глубинных и коровых землетрясений. Кроме того, в среде GIS-ENDDB развиваются алгоритмы, выявляющие группирование событий в пространственном и пространственно-временном диапазоне (афтершоки, рои, эллипсы рассеяния, кластеры, цепочки и, наконец, линеаменты) [1], [8].

Всё это помогает расширить классические методы геотектонического исследования комплексным научно-экспериментальным подходом, позволяющим выделять современные тектонически-активные границы и разломы, изучать пространственную взаимосвязь сейсмичности и космогенных палео-структур (связанных с историческим прошлым Земли) и, в конечном итоге, интерпретировать данные с точки зрения построения сейсмо-геодинамических моделей литосферы. Например, сопоставление результатов формализованного расчета линеаментов с картами реальных геофизических проявлений и с данными анализа характеристик сейсмического режима позволяют выдвигать модели развития глобальных тектоногенных процессов (рис. 2).

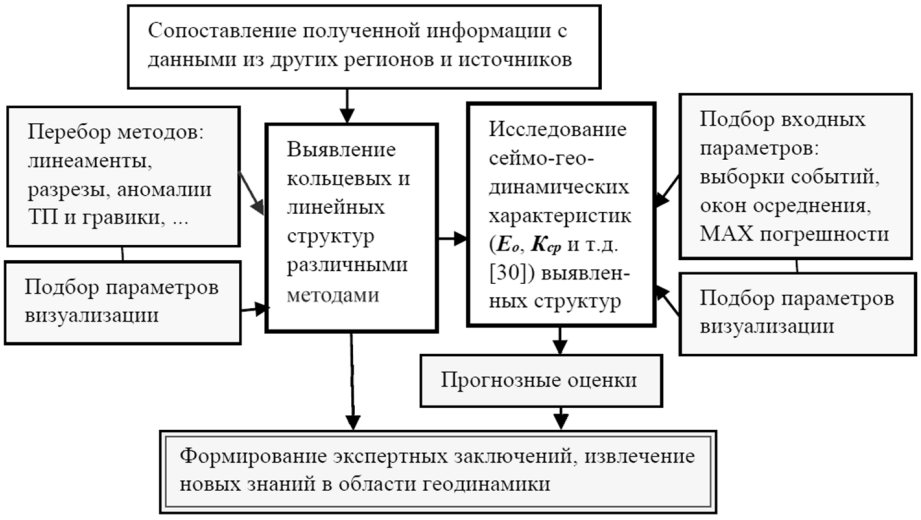


Рис. 2: Сценарий использования алгоритмов GIS-ENDDB для «геоинформационно-экспертного» анализа данных о природных катастрофах Земли

3 Алгоритм GIS-ENDDB построения глобальных линеаментов сейсмичности

Большое значение в наших исследованиях имеют алгоритмы линеаментных построений [8]. Один из этих алгоритмов, выявляющий линеаменты по большим кругам (БК) Земли предполагает, что на глобальном уровне разрушение среды происходит по сегментам большого круга Земли, если протяженный разрыв в консолидированной коре преодолевает слой Мохоровичича. На основании реализованных в GIS-ENDDB алгоритмов, по крупным землетрясениям Центральной Азии (каталог SIGN) на временном интервале 2250 лет выявляется центрально-ориентированная система глобальных линеаментов, включающая наиболее протяженный "Афро-Байкальский" линеамент (соответствующий Внутриазиатскому горному поясу) [8] (линеамент нанесен на рис. 1а, 4). Центром крестообразного схождения линеаментов этой системы является Памиро-Гиндукушская сейсмофокальная зона (ПГЗ) (рис. 1), уникальная, практически единственная на Земле узко-локализованная глубинная область в континентальных условиях, где происходит несколько тысяч землетрясений в год (с максимальной плотностью событий на глубинах 200–250 км, рис. 1б).

Существование разломной зоны, соответствующей "Афро-Байкальскому" (АБ) линеаменту, считается в настоящее время спорным, поскольку АБ-линеамент сечёт большое множество известных поперечных разломов субширотного и северо-западного простирания (особенно, в области Алтая и Саян). Это противоречие устраняется, если предположить и подтвердить геофизическими наблюдениями существование глубинного супер-разлома, соответствующего АБ-линеаменту, а многочисленные поперечные разломы интерпретировать как его производные в более хрупком верхнем слое земной коры.

Для исследования глубинных сейсмогенных структур спорного генезиса в GIS-ENDDB включены процедуры визуализации данных глубинной томографии на картах оттенённого рельефа (по слоям, с шагом по глубине 25 км) и в разрезах по профилям, выбранным пользователем.

Результаты подтвердили существование глубинной "разуплотненной" разломной зоны на протяжении "Афро-Байкальского" линеамента (линейной аномалии пониженных значений поля скоростей S_V-волн, проявившейся на глубинах 35–75 км). Данные томографии дали косвенное объяснение и обнаруженной ранее [7] корреляции сейсмо-геодинамического режима областей "Афро-Байкальского" глубинного разлома (Байкальской рифтовой зоны (БРЗ), Алтайской складчатой области, ПГЗ) с активностью таких регионов, как Дальневосточная и Западно-Тихоокеанская зоны субдукции.

4 Взаимная корреляция удаленных крупных землетрясений

В работе [7] была отмечена временная корреляция по количеству выделенной энергии в Байкальском регионе и зоне субдукции на Дальнем Востоке с 1945 по 2000 годы, что позволяет предположить межрегиональную

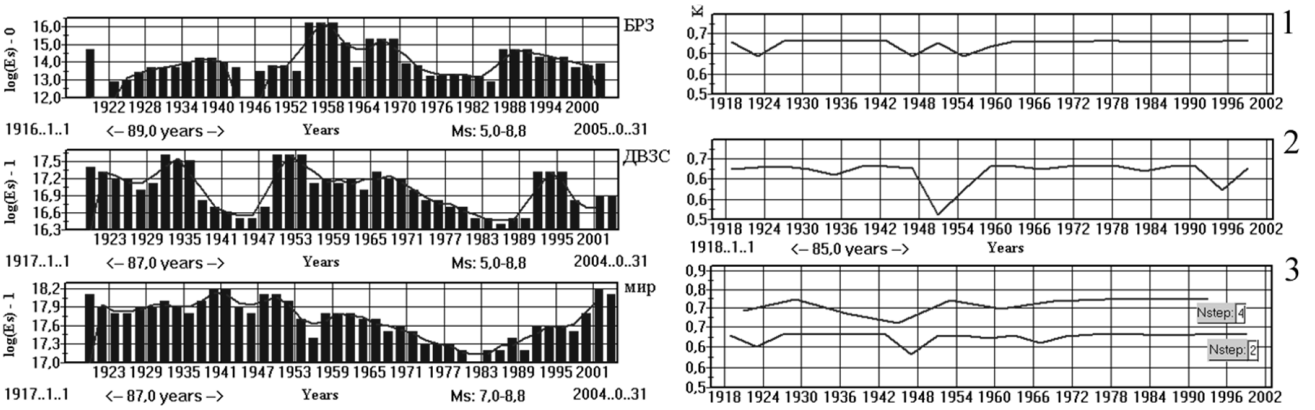


Рис. 3: Корреляция землетрясений Центральной Азии, Байкальской рифтовой зоны (БРЗ) и Дальневосточной зоны субдукции (ДВЗС): графики суммарной энергии (lgE) в БРЗ, ДВЗС и по всему миру (слева) и графики коэффициента корреляции между ними (справа): 1 — между БРЗ и ДВЗС, 2 — между ДВЗС и миром, 3 — между БРЗ и миром (с шагом расчета 4 и 2)

взаимосвязанность процессов, сообщающихся через механизм триггерных воздействий. В частности, отмечено совпадение по времени землетрясений Токачи-оки (25.9.2003, M_W=8.3) в зоне Западно-Тихоокеанской субдукции и Чуйского (27.9.2003, M_W=7.3), произошедшего на расстоянии 4300 км на Алтае [7].

Исследованиями в среде GIS-ENDDB также выявлены факты «переклички» весьма удалённых друг от друга землетрясений БРЗ и Дальневосточной зоны субдукции (рис. 3). Кривая коэффициента корреляции K_{kop} между усреднёнными графиками суммарной сейсмической энергии, выделенной в Байкальском регионе и в зоне субдукции на Дальнем Востоке всего периода инструментальных наблюдений (1917–2004гг), показывает устойчивость значения $K_{kop} = 0.6$–0.7 (даже при минимальном шаге расчёта — 2 столбца). Отметим, что алгоритм расчета предполагает задание трех параметров:

- диапазон усреднения — N_{ocp} (количество столбцов для расчёта среднего значения энергии E_{ocp}),
- количество столбцов для расчёта коэффициента — N_{point},
- шаг расчёта коэффициента — N_{step} (при отсутствии перекрытия окон расчёта принимается $N_{point} = N_{step}$).

Формула расчёта коэффициента корреляции:

$$K_{kop} = \frac{\sum_N \Delta E_{ocp}/N}{\sum_N {\Delta E_{ocp}}^2/N}, \quad \text{где } N = N_{point}. \tag{1}$$

Причиной выявленных корреляций между различными, как считалось ранее, геодинамическими структурами предполагалось [7] формирование накануне сильнейших событий на территории между ними единого регионального поля напряжений в литосфере (до глубин, достигающих астеносферу) [7]. Однако, в результате исследования с привлечением данных томографии выдвинуто другое объяснение - все связанные временной корреляцией события принадлежат к единому геотектоническому образованию.

Действительно, по данным томографии на глубине 125 км выявляется единая межрегиональная Ω-образная структура (рис. 4), включающая в себя Байкальскую рифтовую зону, Алтайскую складчатую область, Памиро-Гиндукушскую, Зондскую, Западно-Тихоокеанскую и Дальневосточную сейсмофокальные зоны и Тайвань-Филиппинскую дугу. Структура характеризуется строгой симметрией, прояляющейся не только в конфигурации границ плит (дополненной АБ-линеаментом), в распределении сейсмичности и подводных вулканов, но и в аномалиях гравиметрии. Один из центров структуры, отмечаемый по данным томографии глубинным гвоздеобразным образованием под полуостровом Индокитай (рис. 4а), указывает на предположительно ударную причину её образования, о чем свидетельствуют скоростные аномалии: наличие аномального (“разуплотненного”) кольца вокруг указанного “высокоплотностного” центра, единого кратерного вала и промежуточного вала (центрального хребта), встречаемых в осесимметричных кратерах с двойным ударом [11].

О том, что рассматриваемая структура может существовать в качестве единого геодинамического образования, могла бы свидетельствовать корреляция между коровыми и глубокофокусными землетрясениями в пределах этой структуры. Ранее подобная корреляция отмечалась, например, в Западно-Тихоокеанской зоне субдукции [9]: «коровые землетрясения предваряются возрастанием глубинной сейсмической активности, а сильный толчок возникает после глубинной активизации».

Нами подобная взаимосвязь была обнаружена в пределах "Афро-Байкальского" (АБ) сейсмического линеамента, включающего сейсмофокальную область ПГЗ. Как показывают графики временного распределения землетрясений (рис. 4б), все крупнейшие события ($M_W \geq 7$), входящие в полосу линеамента, предваряются столь же крупными глубинными землетрясениями в ПГЗ. Так, за полтора года до Чуйского события в ПГЗ произошло два глубокофокусных землетрясения (3.3.2002: с M_W=7 и M_W=7.4) на глубинах H = 209 и 225 км, после чего до 2004г по сильнейшим глубинным событиям в ПГЗ наступило затишье. Отметим, что накануне "парного" к Чуйскому событию землетрясения Токачи-оки (близ о.Хоккайдо) также произошло два глубокофокусных события под побережьем Приморья и Охотским морем (28.6.2002 и 17.11.2002: с M_W=7.3) на глубинах H = 566 и 459 км. Накануне последнего сильнейшего землетрясения области АБ-линеамента — 7 декабря 2015 в Таджикистане (M_W=7.2) также произошло глубокофокусное событие в ПГЗ (26.10.2015, M_W=7.5) на глубине H = 213 км.

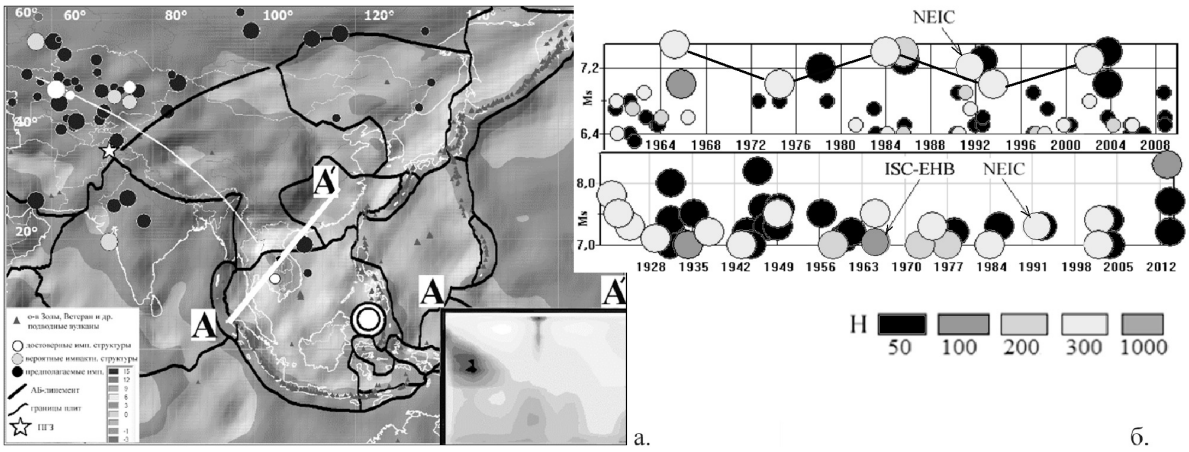


Рис. 4: Поле скоростей S_V-волн на глубине 125 км, разрез AA' до глубины 700 км и графики распределения по времени крупных событий в Δh-полосе "Афро-Байкальского" сейсмического линеамента (отмеченного черной дугой): а — Ω-образная структура, выявляемая в рельефе скоростного поля; б — вверху: магнитуды землетрясений по данным ISC-EHB за 1960-2009гг для $M_W \geq 6.4$ (одно событие добавлено из NEIC); внизу — магнитуды землетрясений по данным ISC за 1920-2013гг для $M_W \geq 7$ (2 события добавлены из ISC-EHB и NEIC). Белой дугой отмечена возможная траектория выпадения космического "дождя", пересекающая область максимальной плотности достоверных и предполагаемых импактных структур

Как показывает график 4,б (внизу), за весь период инструментальных наблюдений в области полосы АБ-линеамента (по данным наиболее полного глобального каталога ISC) за крупнейшими глубинными событиями (или их серией - для более ранней части графика) следуют столь же сильные коровые ($H \leq 50$) события.

Возвращаясь к упомянутой выше Ω-образной структуре, мы также обнаруживаем в её пределах 100-процентную корреляцию между всеми глубинными ($M_W \geq 8$) и коровыми ($M_W \geq 7$) событиями с временем задержки не более 1,5 года.

Отметим, что на графике 4,б (вверху) заметна ещё одна закономерность распределения по времени сильнейших глубинных землетрясений ($M_W \geq 7$, H=200–300 км) сейсмофокальной зоны Памира-Гиндукуша (по данным каталога ISC-EHB, наиболее очищенного и уточнённого по глубинам) — их периодичность с периодом 9-11 лет. Предполагается, что подобная периодичность может быть связана с космогенным фактором (11-летним циклом солнечной активности), с которым, например, соотносят 9–15-летние циклы повышенной активности магматических вулканов.

Восприимчивость активности глубинных землетрясений (достигающих глубин астеносферного слоя) тем же факторам, что и активность вулканов; а также узкая локализация этих землетрясений, формирующих так называемые «сейсмические гвозди» [10] (рис. 1б, врезка на рис. 5а) и закономерная передача деформаций от

них коровым землетрясениям позволяют предположить приуроченность глубокофокусных землетрясений к глубинным каналам субвертикального движения мантийного материала. Эти каналы должны иметь особые реологические свойства, вызывающие их повышенную сейсмическую активность и поддерживающие триггерный механизм передачи напряжений в верхние слои литосферы с последующим их распространением вдоль глубинного разлома. Данные томографии подтверждают наличие таких каналов в мантии, достигающих глубин от 400 до 700 км (рис. 5).

5 Глубинные структуры в литосфере и астеносфере по данным томографии

Известно, что в зонах субдукции «часть океанической литосферы (преимущественно мантийные породы) пододвигается под континенты» (рис. 5). С другой стороны, по данным сейсмичности можно предположить существование отдельных локальных областей погружения литосферных масс на глубинах от 400 до 700 км (врезка на рис. 5а). Оба эти процесса фиксируются данными томографии и графиками относительного количества землетрясений различного механизма. Графики показывают, что процесс пододвигания характеризуется преимущественно механизмом сжатия (график на рис. 5а), а процесс погружения — механизмом растяжения (рис. 5б).

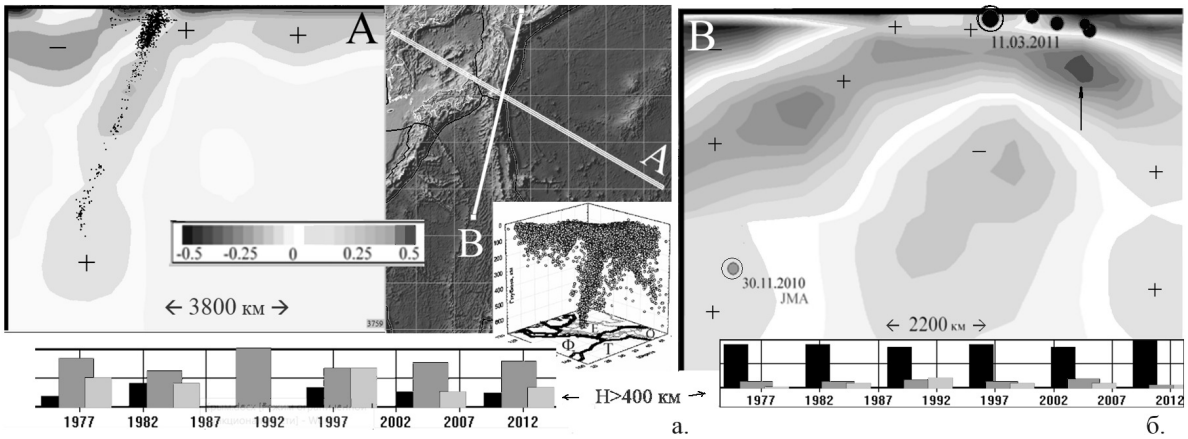


Рис. 5: Структуры «пододвигания» и «погружения» на разрезах S_V-полей (на цветовой шкале указаны возмущения в % к базовой скорости S_V, отмеченные на разрезах знаками + и -): а — канало-образная структура пододвигания океанических масс под Японское море (разрез по профилю А). Черными точками нанесены землетрясения; во врезке — канало-образное распределение сейсмичности в зоне пересечения Филиппинской, Тихоокеанской и Евроазиатской плит по [10], включающее все три показанных (а, б) канала, б — пододвигание и погружение Тихоокеанической плиты в области Курильско–Марианского структурного угла (разрез по профилю В); кружками нанесены землетрясения с $M \geq 7$, включая ВВЯЗ и его глубинный предвестник. Глубина разрезов H=700 км. Ниже показаны графики относительного количества землетрясений различного механизма в районе “Японского” (слева) и ”Идзу-Марианского” (справа) каналов в переходном слое ($H \geq 400$ км): чёрным — сбросы, серым — взбросы, светлосерым — сдвиги

Как показывает разрез рисунка 5 (б), хотя Великое Восточно-Японское землетрясение (ВВЯЗ, 11.03.2011, M_W=9.0) принадлежит более неоднородному (в поле скоростей) верхнему слою литосферы, в отдельных точках очага очевидна идентичность его плотностных и, скорее всего, упругих свойств с нижними слоями, где слева наблюдается “Идзу-Марианский” канал пододвигания (до 400 км) и последующего погружения (при $H \geq 400$ км), в котором произошло глубинное землетрясение за 3 месяца до ВВЯЗ (30.11.2010, M_W=7.1, H=494 км) (даты этих землетрясений отмечены на рис. 5б). Отметим, что и в “Японском” (ортогональном “Идзу-Марианскому”) канале (рис. 5а), который отражает процесс пододвигания масс на всем своем протяжении (вплоть до H=650 км), накануне ВВЯЗ также произошло глубинное землетрясение 18.02.2010, M_W=6.9 (за год до катастрофического события) на глубине 577 км (область пересечения "Японского” канала с плоскостью разреза 5 (б) расположена правее и ниже ВВЯЗ в виде положительной скоростной аномалиии, показанной на разрезе стрелкой).

Следовательно, глубинные события, даже произошедшие на глубинах $H \geq 400$ км могут передавать напряжения и деформации на верхние (в том числе, и коровые) уровни вдоль каналов с особыми реологическими свойствами. Таким образом, вероятно, и происходит взаимосвязь полей напряжений коровых и мантийных слоев (рис. 5), объединяющая удаленные события в единую геодинамическую систему.

Заключение

Программная оболочка GIS-ENDDB в процессе своего развития постепенно преобразовалась из информационной системы географической визуализации базы данных катастрофических событий в наукоёмкую экспертную систему. В результате ENDDB кроме исторических каталогов и графической оболочки Земли стала представлять собой целый комплекс исследовательских методик. В примерах анализа данных показано использование принципов геоинформационного и экспертного подхода [11] в исследованиях геодинамического режима территорий глобального масштаба.

Список литературы

[1] Mikheeva A.V., Marchuk An.G., Dyadkov P.G. Geoinformation Systems for Studying Seismicity and Impact Cratering using Remote Sensing Data // in Book: "Geographic Information Systems (GIS): Techniques, Applications and Technologies". Nova Science Publishers, 2014. P. 151-216Вальковский В. А., Малышкин В. Э. Синтез параллельных программ и систем на вычислительных моделях. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1988.

[2] Mikheeva A.V. The new data of "Catalogue of the Earth's impact structures" // Geochimica et Cosmochimica Acta. Suppl.1. S19 (July 2008). V. 72 (12): P. A627–A627.

[3] Sandwell D.T.. Smith W.H.F. Global marine gravity from retracked Geosat and ERS-1 altimetry: Ridge segmentation versus spreading rate // J. Geophys. Res. 2009. V. 114. P. B01411.

[4] The global heat flow database of the international heat flow commission. Site Provided by the University of North Dakota, 2015. URL: www.heatflow.und.edu/index2.html.

[5] Schaeffer A. J. Lebedev S. 1. Global shear speed structure of the upper mantle and transition zone // Geophysical Journal International. 2013. Iss. 194. P. 417–449. DOI: 10.1093/gji/ggt095

[6] Завьялов А.Д. Среднесрочный прогноз землетрясений. Основы, методика, реализация. М.: Наука, 2006. 254 с.

[7] Дядьков П.Г. Закономерности в изменениях напряжённого состояния земной коры и сейсмического режима в Байкальском регионе в условиях влияния процессов на ближайших конвергентных границах плит // Всероссийское совещание «Современная геодинамика...» (20–23 сентября 2005 г). Иркутск, 2005. С. 174–180.

[8] Kalinnikov I.I., Mikheeva, A.V. Algorithms of building lineaments in the program GIS-ENDDB // Bulletin of Novosibirsk Computer Center, Series: Mathematical Models in Geophysics. 2016. Iss. 13, P. 1–9.

[9] Mogi K. Deep seismic activities preceding the three large 'shallow' earthquakes off south-east Hokkaido, Japan - the 2003 Tokachi-oki earthquake, the 1993 Kushiro-oki earthquake and the 1952 Tokachi-oki earthquake // Earth Planets Space. 2004. No. 56. P. 353–357.

[10] Владковский В.Н. Субвертикальные скопления гипоцентров землетрясений - сейсмические "гвозди" // Вестник ОНЗ РАН. 2012. № 4. NZ1001.

[11] Михеева А.В. Геоструктурные элементы, выявляемые математическими алгоритмами и цифровыми моделями геоинформационно-вычислительной системы GIS-ENDDB. Новосибирск: Омега Принт, 2016. 300 с. elibrary.ru/item.asp?id=27622389.

Михеева Анна Владленовна — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: anna@omzg.sscc.ru.

Дата поступления — 10 мая 2017 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕВЕКТОРИЗУЕМЫХ КЛАССОВ ЦИКЛОВ НА SIMD-АРХИТЕКТУРАХ С КОРОТКИМИ ВЕКТОРНЫМИ РЕГИСТРАМИ

О. В. Молдованова, М. Г. Курносов

Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, 630102, Новосибирск

УДК 004.272.25

Одной из значимых техник оптимизации циклов является их автоматическая векторизация компилятором — преобразование выполнения итераций обработки массива векторными инструкциями (Intel SSE/AVX/AVX-512, ARM NEON SIMD, IBM AltiVec). В данной работе определены основные виды циклов, автоматическая векторизация которых современными компиляторами Intel C/C++, PGI C/C++, GCC C/C++, LLVM/Clang на архитектурах Intel 64 и Intel Xeon Phi затруднена. Для каждого цикла установлен класс его автоматической векторизуемости при заданных типе данных массива и компиляторе. Для выявленных невекторизованных циклов предложены способы их трансформации, обеспечивающие их последующую успешную автоматическую векторизацию компиляторами. В качестве целевого набора циклов использован пакет Extended Test Suite for Vectorizing Compilers.

Ключевые слова: векторизация, компиляторы, циклы, архитектура Intel 64, архитектура Intel Xeon Phi.

Введение

Современные процессоры высокопроизводительных вычислительных систем (ВС) характеризуются поддержкой и активным развитием трех основных форм параллельной обработки информации: параллелизм потоков на уровне процессорных ядер (thread level parallelism), параллелизм инструкций на уровне суперскалярного конвейера ядра (instruction level parallelism), а также параллелизм обработки данных векторными арифметико-логическими устройствами (data level parallelism). Развитию векторных наборов инструкций (Intel AVX, IBM AltiVec, ARM NEON SIMD) уделяется значительное внимание со стороны разработчиков процессоров. В частности компания Fujitsu анонсировала переход в будущей версии эксафлопсной системы K Computer на процессоры с архитектурой ARMv8.2-A, реализующей широкие векторные регистры переменной длины (scalable vector extension), а компания Intel активно развивает набор инструкций AVX-512. По этой причине постановки задач и работы по (полу)автоматической векторизации программ компиляторами в последние десятилетия получили новый виток развития: компиляторная автовекторизация; SIMD-директивы OpenMP и Cilk Plus; языковые расширения Intel ISPC, Sierra; библиотеки C++17 SIMD Types, Boost.SIMD, gSIMD, Cyme.

Цель данной работы — выполнить экспериментальный анализ эффективности подсистем автоматической векторизации циклов в современных компиляторах Intel C/C++ Compiler, GCC C/C++, LLVM/Clang, PGI C/C++, выявить циклы, не векторизованные ни одним из компиляторов, и предложить способы их трансформации, обеспечивающие их последующую успешную автоматическую векторизацию.

Учитывая отсутствие информации о реализуемых коммерческими компиляторами методах векторизации, анализ выполнен методом «черного ящика» — на тестовом наборе циклов из пакета Extended Test Suite for Vectorizing Compilers [1, 2, 3, 4]. Определены классы типовых циклов, автоматическая векторизация которых указанными компиляторами затруднена, и выполнен анализ таких циклов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 16-07-00992, 15-07-00653).

1 Наборы векторных инструкций

Наборы команд практически всех архитектур современных процессоров включают поддержку векторных инструкций: MMX/SSE/AVX в архитектурах IA-32 и Intel 64, набор AltiVec в архитектуре Power, NEON SIMD в семействе архитектур ARM, MSA в MIPS. Процессоры, реализующие поддержку векторных инструкций, содержат одно или несколько параллельно работающих векторных арифметико-логических устройств (АЛУ) и совокупность векторных регистров. В отличие от векторных систем 1990-х годов, современные процессоры поддерживают выполнение операций с векторами относительно небольшой длины (64–512 бит), предварительно загруженными из оперативной памяти в векторные регистры (класс векторных систем «регистр-регистр»).

Основная сфера применения векторных инструкций — сокращение времени работы с одномерными массивами. Как правило, ускорение, достигаемое при использовании векторных инструкций, в первую очередь определяется количеством элементов массива, помещающихся в векторный регистр. Например, каждый из 16 векторных регистров AVX имеет ширину 256 бит, что позволяет загружать в них 16 элементов типа `short int` (16 бит), 8 элементов типа `int` или `float` (32 бита) и 4 элемента типа `double` (64 бита). Соответственно, при использовании AVX ожидаемое ускорение выполнения операций с массивами типа `short int` — 16 раз, `int` и `float` — 8 раз, `double` — 4 раза.

Процессоры Intel Xeon Phi поддерживают набор векторных инструкций AVX-512 и содержат 32 векторных регистра шириной 512 бит. Каждое ядро процессора с микроархитектурой Knights Corner содержит одно векторное АЛУ шириной 512 бит, а ядра процессора с микроархитектурой Knights Landing — два АЛУ.

Достижение максимального ускорения при векторной обработке требует учета микроархитектурных параметров процессоров. В числе важнейших — выравнивание на заданную границу начальных адресов массивов, загружаемых в векторные регистры (32 байта для AVX и 64 байта для AVX-512). Чтение и запись по адресам, не выравненным на заданную границу, выполняется медленнее. Снижение эффективности также может быть обусловлено смешанным использованием SSE- и AVX-инструкций. В этом случае при переходе от выполнения команд одного векторного расширения к другому процессор сохраняет (при переходе от AVX к SSE) или восстанавливает (в противоположном случае) старшие 128 бит векторных регистров `YMM` (AVX-SSE transition penalties) [5].

При использовании векторных инструкций возможна ситуация, когда полученное ускорение будет превышать ожидаемое. Например, после векторизации цикла, в котором выполнялось поэлементное суммирование двух массивов, накладные расходы процессора на его выполнение уменьшаются за счет сокращения числа загрузок процессором инструкции сложения из памяти и ее декодирования; числа обращений к памяти за операндами операции сложения; количества вычислений условия завершения цикла (меньше обращений к модулю предсказания переходов процессора).

Кроме этого, причиной дополнительного ускорения может являться параллельное выполнение векторных инструкций несколькими векторными АЛУ. Таким образом, эффективно векторизованная версия программы в меньшей степени загружает ряд подсистем суперскалярного конвейера процессора. Последнее является причиной меньшего энергопотребления процессора при выполнении векторизованной программы по сравнению с ее скалярной версией [6].

Разработчикам прикладных программ доступны следующие способы использования векторных инструкций: ассемблерные вставки; интринсики; SIMD-директивы компиляторов, стандартов OpenMP, OpenACC; автоматическая векторизация компилятором.

В данной работе внимание уделено последнему подходу — автоматической векторизации компилятором. Такой способ векторизации не требует значительной модификации прикладных программ и обеспечивает их переносимость на уровне исходного кода между разными архитектурами процессоров.

2 Набор тестовых циклов

В качестве тестового набора в данной работе использован пакет Extended Test Suite for Vectorizing Compilers (ETSVC) [2], содержащий основные классы циклов, встречающихся в научных приложениях на языке C. Исходная версия пакета была разработана в конце 1980-х годов группой Дж. Донгарры и содержала 122 цикла на языке Fortran для оценки эффективности компиляторов векторных ВС Cray, NEC, IBM, DEC, Fujitsu и Hitachi [3, 4]. В 2011 году группа Д. Падуа транслировала пакет TSVC на язык программирования C и дополнила его новыми циклами [1]. Расширенная версия пакета содержит 151 цикл. Циклы разделены на категории: анализ зависимостей по данным (36 циклов), анализ потока управления и трансформация цик-

лов (52 цикла), распознавание идиоматических конструкций (редукции, рекуррентности и т.п., 27 циклов), полнота понимания языка программирования (23 цикла). Кроме этого, в набор включены 13 контрольных циклов — тривиальные циклы, с векторизацией которых должен справиться каждый векторизующий компилятор.

Циклы оперируют с одномерными и двумерными глобальными массивами, начальные адреса которых выравнены на заданную границу (по умолчанию 16 байт). Одномерные массивы содержат 125·1024/`sizeof(TYPE)` элементов заданного типа `TYPE`, а двумерные — 256 элементов по каждому измерению.

Каждый цикл размещен в отдельной функции. Перед выполнением цикла в функции `init` выполняется инициализация массивов значениями, характерными для данного теста. Внешний цикл используется для увеличения времени выполнения теста (формирования статистики). Вызов пустой функций `dummy` предотвращает нежелательную оптимизацию внешнего цикла (трансформацию и вынесение внутреннего цикла за пределы внешнего, как инвариантного по отношению к внешнему).

После выполнения циклов происходит вычисление и вывод на экран контрольной суммы элементов результирующего массива.

3 Результаты экспериментов

Эксперименты проводились на двух системах. Первая система — сервер на базе двух процессоров Intel Xeon E5-2620 v4 (архитектура Intel 64, микроархитектура Broadwell, 8 ядер, Hyper-Threading включен, поддержка набора векторных инструкций AVX 2.0), 64 Гбайта оперативной памяти DDR4, операционная система GNU/Linux CentOS 7.3 x86-64 (ядро linux 3.10.0-514.2.2.el7). Вторая система — установленный в сервер сопроцессор Intel Xeon Phi 3120A (микроархитектура Knights Corner, 57 ядер, поддержка AVX-512), 6 Гбайт оперативной памяти, MPSS 3.8.

Анализировалась работа следующих компиляторов: Intel C/C++ Compiler 17.0; GCC C/C++ 6.3.0; LLVM/Clang 3.9.1; PGI C/C++ 16.10.

Компиляция векторизованной версии пакета ETSVC выполнялась с опциями, указанными в табл. 1 (столбец 2). Для генерации скалярной версии теста опции оптимизации сохранялись, но отключался векторизатор компилятора (столбец 3, табл. 1).

Таблица 1: Опции компиляции

Компиляторы	Опции компиляции	Отключение векторизации
Intel C/C++ 17.0	`-O3 -xHost -qopt-report3 -qopt-report-phase=vec,loop -qopt-report-embed`	`-no-vec`
GCC C/C++ 6.3.0	`-O3 -ffast-math -fivopts -march=native -fopt-info-vec -fopt-info-vec-missed`	`-fno-tree-vectorize`
LLVM/Clang 3.9.1	`-O3 -ffast-math -fvectorize -Rpass=loop-vectorize -Rpass-missed=loop-vectorize -Rpass-analysis=loop-vectorize`	`-fno-vectorize`
PGI C/C++ 16.10	`-O3 -Mvect -Minfo=loop,vect -Mneginfo=loop,vect`	`-Mnovect`

Глобальные массивы в пакете ETSVC были выравнены на границу 32 байта для процессора Intel Xeon и 64 байта — для Intel Xeon Phi. Эксперименты выполнены для массивов с элементами типов `double`, `float`, `int` и `short`.

Для данных типа double на архитектуре Intel 64 (процессор Intel Xeon Broadwell) были получены следующие результаты. Компилятор Intel C/C++ Compiler в общей сложности векторизовал 95 циклов, из них 7 смог векторизовать только он. Для GCC C/C++ общее количество векторизованных циклов составляет 79. При этом не было ни одного такого цикла, который был бы векторизован только им. Компилятор PGI C/C++ векторизовал наибольшее количество циклов — 100, из них 13 векторизованы только этим компилятором. Наименьшее количество циклов было векторизовано LLVM/Clang — 52, 4 из которых смог векторизовать только он. Количество невекторизованных циклов ни одним из компиляторов составило 28.

Результаты векторизации для массивов с элементами типов `float` и `int` аналогичны `double` для всех компиляторов. Сопоставимые данные были получены и для типа `short int` в случае использования Intel C/C++ Compiler, GCC C/C++ и LLVM/Clang. Исключение составляет PGI C/C++, который не векторизовал ни одного цикла, оперирующего данными этого типа.

На рис. 1 показаны результаты векторизации циклов компиляторами для типа данных `double` на архитектуре Intel 64. В ячейках таблицы указаны сокращенные обозначения результатов векторизации, которые были сформированы на основании анализа отчетов компиляторов о ходе векторизации для каждого из 151

цикла. В табл. 2 приведена расшифровка этих обозначений. Для других типов данных были получены аналогичные результаты.

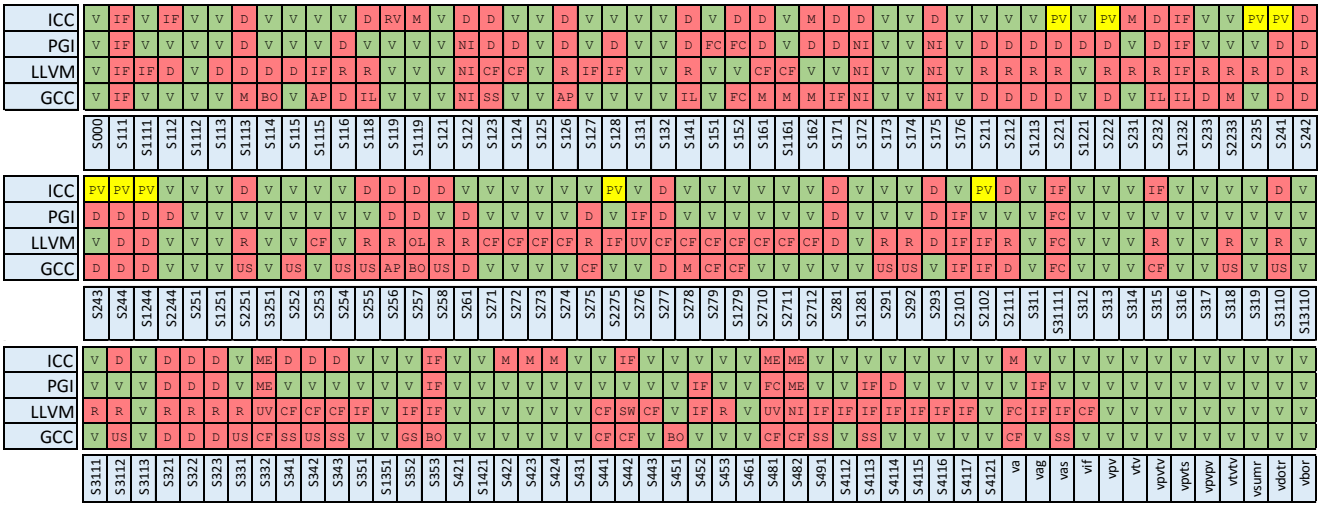


Рис. 1: Результаты векторизации циклов (архитектура Intel 64, тип данных `double`)

Таблица 2: Сокращенные обозначения результатов векторизации

V	Loop is vectorized
PV	Partial loop is vectorized (loop fission with succeeding vectorization of obtained loops)
RV	Remainder is not vectorized
IF	Vectorization is possible but seems inefficient
D	Vector dependence prevents vectorization (supposed linear or non-linear data dependence in a loop)
M	Loop is multiversioned (multiple loop versions are generated, unvectorized version is selected in runtime)
BO	Bad operation or unsupported loop bound (e.g., `sinf` or `cosf` function is used)
AP	Complicated access pattern (e.g., value of iteration count is more than 1)
R	Value that could not be identified as function is used outside the loop (induction variables are present in a loop)
IL	Inner-loop count not invariant (e.g., iteration count of inner loop depends on iteration count of outer loop)
NI	Number of iterations cannot be computed (lower and/or upper loop bounds are set by function's arguments)
CF	Control flow cannot be substituted for a select (conditional branches inside loop)
SS	Loop is not suitable for scatter store (e.g., in case of packing a two-dimensional array into a one-dimensional array)
ME	Loop with multiple exits cannot be vectorized (`break` or `exit` are present inside a loop)
FC	Loop contains function calls or data references that cannot be analyzed
OL	Value cannot be used outside the loop (scalar expansion or mixed usage of one- and two-dimensional arrays in one loop)
UV	Loop control flow is not understood by vectorizer (conditional branches inside a loop)
SW	Loop contains a `switch` statement
US	Unsupported use in statement (scalar expansion, wraparound variables recognition)
GS	No grouped stores in basic block (unrolled scalar product)

В категории «Анализ потока управления и трансформация циклов» сложными для векторизации оказались 11 циклов, требующие выполнения следующих преобразований: расщепление тела цикла, перестановка циклов, расщепление вершин в графе зависимостей по данным (для устранения контура в графе и как следствие исключения выходных зависимостей и антизависимостей в цикле [7]) и растягивание массивов. Среди причин неудач компиляторов: зависимость значений переменных-счетчиков итераций вложенных циклов друг от друга; линейные зависимости в теле цикла (рекуррентные отношения 1-го порядка); условные и безусловные переходы в теле цикла.

Следующие идиоматические конструкции из категории «Распознавание идиоматических конструкций» оказались проблемными при векторизации 6 циклов: рекуррентные отношения 1-го и 2-го порядков, поиск элемента в массиве, свертка цикла и редукция с вызовом функции. Причина невекторизации циклов, содержащих рекуррентные отношения, заключается в наличии линейной зависимости по данным. В цикле, осуществлявшем поиск первого элемента в массиве, удовлетворяющего заданному условию, проблема возникла из-за прерывания вычислений в цикле безусловным переходом `goto`.

Над циклами, для которых была выполнена раскрутка (unrolling) вручную, компиляторы выполняют операцию свертки (rerolling) прежде, чем приступить к векторизации [8]. Исследуемые компиляторы приняли решение, что векторизация таких циклов возможна, но будет неэффективной. Причиной этого является использование косвенной адресации при обращении к элементам массива: $X[Y[i]]$, где X — одномерный массив типа `float`, Y — указатель на целочисленный одномерный массив, i — переменная-счетчик итераций цикла.

Еще одна идиоматическая конструкция, вызвавшая проблемы с векторизацией — редукция, а именно нахождение суммы элементов одномерного массива. Здесь причиной невекторизации является наличие вызовов функции `test`, вычисляющей сумму 4-х элементов, начиная с того, который был ей передан в качестве аргумента. Компилятор Intel C/C++ Compiler сообщил в отчете о векторизации о том, что векторизация возможна, но не эффективна. Остальные исследуемые компиляторы указали вызов функции в качестве причины невозможности выполнения векторизации.

Категория «Полнота понимания языка программирования» содержит 2 невекторизованных ни одним из компиляторов цикла. Проблема обоих циклов — прерывание вычислений в цикле (вызов функции `exit` в первом случае и `break` во втором). Векторизаторы, реализованные в компиляторах, не смогли выполнить анализ потока управления.

На рис. 2 показано суммарное время выполнения теста (всех циклов) для каждого типа данных и компилятора. На рис. 3 и 4 показаны медиана и максимальные значения ускорения выполнения циклов после их векторизации компиляторами. Максимальное ускорение на архитектуре Intel 64 (процессор Intel Xeon Broadwell), полученное при векторизации компилятором Intel C/C++ Compiler, составило 6.96 для данных типа `double`, 13.89 для данных типа `float`, 12.39 для `int` и 25.21 для `short int`. Для GCC C/C++ величина максимального ускорения равна 4.06, 8.1, 12.01 и 24.48 для типов `double`, `float`, `int` и `short int`, соответственно. Компилятором LLVM/Clang получены следующие значения максимального ускорения: 5.12 (`double`), 10.22 (`float`), 4.55 (`int`) и 14.57 (`short int`). А для PGI C/C++ эти значения составили 14.6, 22.74, 34.0 и 68.0, соответственно. Ускорение измерялось как отношение времени выполнения скалярного кода к времени выполнения векторизованного.

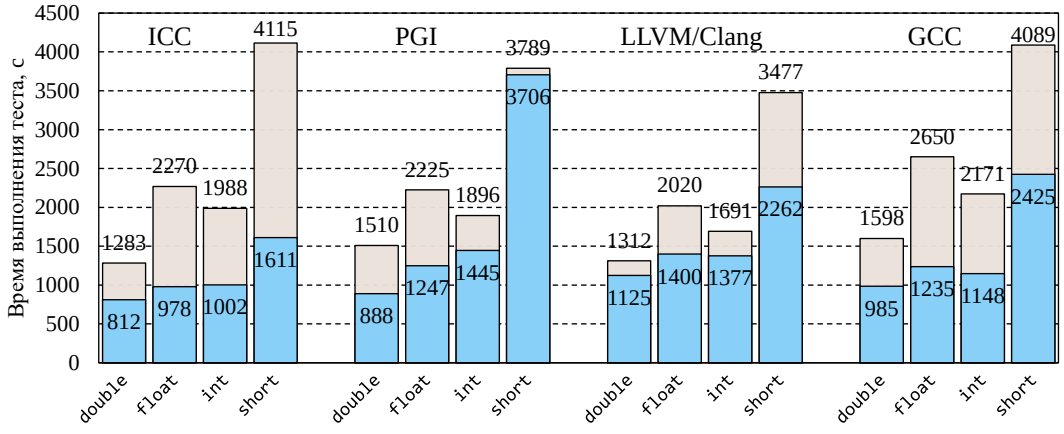


Рис. 2: Время выполнения теста (всех циклов) на процессоре Intel Xeon E5-2620 v4: *внешние столбцы* — невекторизованная версия теста; *внутренние столбцы* — векторизованная версия теста

Как показал анализ, значения максимального ускорения для компиляторов Intel C/C++ Compiler, GCC C/C++ и LLVM/Clang соответствуют циклам, выполняющим операции редукции (сумма, произведение, поиск минимального или максимального элемента) над элементами одномерных массивов всех типов данных. Эти циклы относятся в ETSVC к категории «Распознавание идиоматических конструкций». Для компилятора PGI C/C++ максимальные ускорения для типов `double` и `float` были достигнуты для цикла, формирующего единичную матрицу (категория «Анализ потока управления и трансформация циклов»), а для `int` и `short int` — в цикле из категории «Распознавание идиоматических конструкций», выполняющем операцию редукции (вычисление произведения). Однако, полученное увеличение производительности не всегда является результатом векторизации. Для компилятора PGI C/C++ ускорение 68.0 для типа данных `short int` объясняется тем, что в результате оптимизации вычисления в цикле не производились.

На архитектуре Intel Xeon Phi эксперименты проводились для компилятора Intel C/C++ Compiler 17.0. Вместо опции `-xHost` при компиляции использовалась `-mmic`. Результаты проведенных экспериментов для

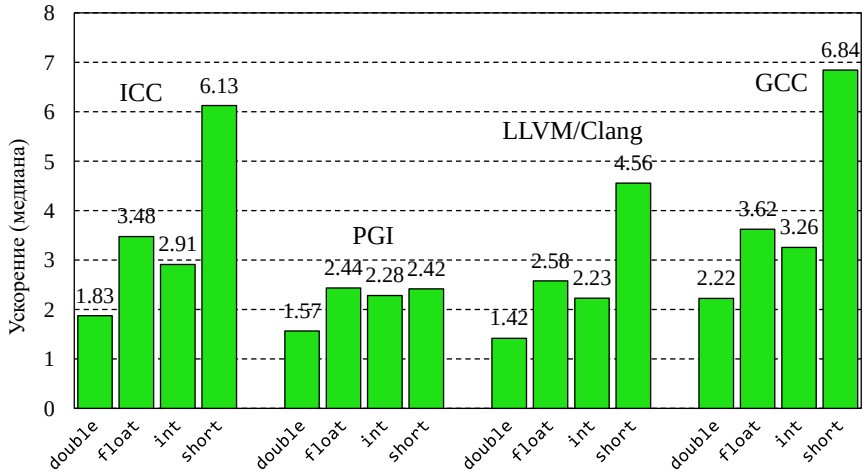


Рис. 3: Медиана ускорения выполнения векторизованных циклов на процессоре Intel Xeon E5-2620 v4

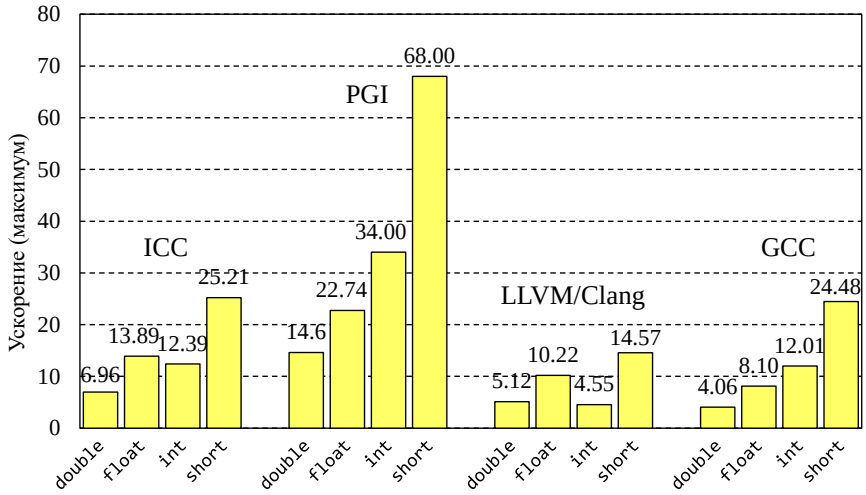


Рис. 4: Максимальное ускорение выполнения векторизованных циклов на процессоре Intel Xeon E5-2620 v4

двух типов данных представлены на рис. 5. Компилятору удалось векторизовать 99 циклов с данными типа `double` и 102 типа `float`. Основной причиной невекторизации циклов является предполагаемая зависимость по данным в вычислениях (28 циклов для типа `double` и 27 для типа `float`). Частично векторизованы 12 циклов, оперирующих массивами обоих типов. Аналогичные результаты были получены и для типов `int` и `short int`.

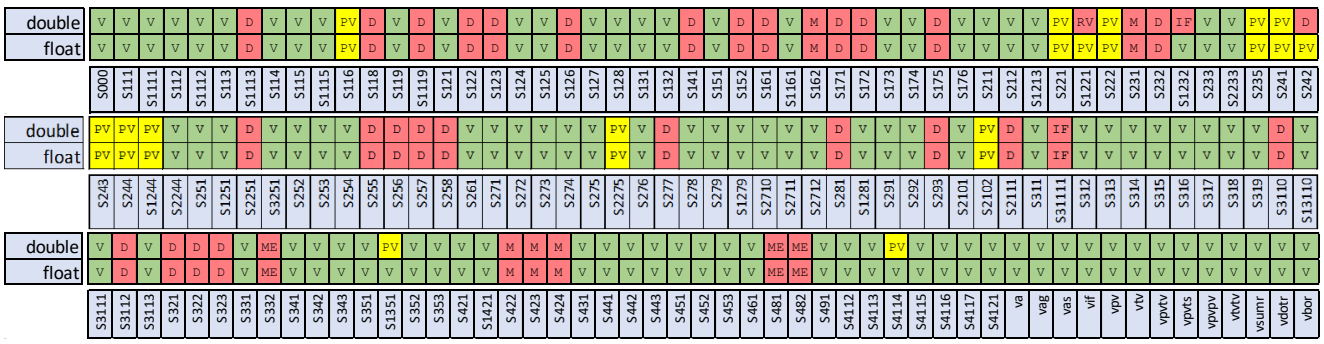


Рис. 5: Результаты векторизации (архитектура Intel Xeon Phi)

В этом случае максимальное ускорение для типа `double` составило 13.7, для типа `float` — 19.43, для `int` — 30.84, а для `short int` — 46.3. Для типов данных `float` и `short int` максимальные значения ускорения были получены для циклов, выполняющих операции редукции над элементами одномерных массивов. Для типа `double` в цикле использовались функции `sinf` и `cosf`. В случае с типом `int` речь идет о контрольном цикле `vbor`, вычисляющем скалярное произведение шести одномерных массивов.

Заключение

Выполнен анализ эффективности подсистем автоматической векторизации циклов в современных компиляторах Intel C/C++ Compiler, GCC C/C++, LLVM/Clang, PGI C/C++ на архитектурах Intel 64 и Intel Xeon Phi. Установлено, что исследуемые компиляторы способны векторизовать от 39 % до 77 % циклов от общего числа в пакете ETSVC. Наилучшие результаты показал Intel C/C++ Compiler, а наихудшие — LLVM/Clang.

Наиболее проблемными оказались циклы, содержащие условные и безусловные переходы, вызовы функций, индуктивные переменные, переменные в границах цикла и шаге выполнения итераций, а также такие идиоматические конструкции, как рекуррентности 1-го или 2-го порядка, поиск первого подходящего элемента в массиве и свертка цикла.

Направление дальнейших работ — анализа и разработка методов эффективной векторизации установленного класса проблемных циклов, анализ возможностей применения JIT-компиляции [9] и оптимизации по результатам профилирования (profile-guided optimization).

Список литературы

[1] Maleki S., Gao Ya. Garzarán M.J., Wong T., Padua D.A. An Evaluation of Vectorizing Compilers // Proc. of the International Conference on Parallel Architectures and Compilation Techniques (PACT'11), 2011. pp. 372–382.

[2] Extended Test Suite for Vectorizing Compilers URL: http://polaris.cs.uiuc.edu/ maleki1/TSVC.tar.gz (дата обращения 29.05.2017).

[3] Callahan D., Dongarra J., Levine D. Vectorizing Compilers: A Test Suite and Results // Proc. of the ACM/IEEE conference on Supercomputing (Supercomputing'88), 1988. pp. 98–105.

[4] Levine D., Callahan D., Dongarra J. A Comparative Study of Automatic Vectorizing Compilers // Journal of Parallel Computing. 1991. Vol. 17. pp. 1223–1244.

[5] Konsor P. Avoiding AVX-SSE Transition Penalties // URL: https://software.intel.com/en-us/articles/avoiding-avx-sse-transition-penalties (дата обращения 29.05.2017).

[6] Jibaja I., Jensen P., Hu N., Haghighat M., McCutchan J., Gohman D., Blackburn S., McKinley K. Vector Parallelism in JavaScript: Language and Compiler Support for SIMD // Proc. of the International Conference on Parallel Architecture and Compilation (PACT-2015). 2015. pp. 407–418.

[7] Векторизация программ: теория, методы, реализация. Сб. статей: Пер. с англ. и нем. М.: Мир, 1991. 275 с.

[8] Metzger R.C., Wen Zh. Automatic Algorithm Recognition and Replacement: A New Approach to Program Optimization. MIT Press. 2000. 219 p.

[9] Rohou E., Williams K., Yuste D. Vectorization Technology To Improve Interpreter Performance // ACM Transactions on Architecture and Code Optimization. 2013. 9 (4). pp. 26:1–26:22.

Ольга Владимировна Молдованова — к.т.н., доцент, доцент Кафедры вычислительных систем Сибирского государственного университета телекоммуникаций и информатики;
e-mail: ovm@sibguti.ru;
Михаил Георгиевич Курносов — д.т.н., доцент, заведующий Кафедрой вычислительных систем Сибирского государственного университета телекоммуникаций и информатики;
e-mail: mkurnosov@sibguti.ru.
Дата поступления — 29 мая 2017 г.

АСИМПТОТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ДВУХФАЗНОЙ RQ-СИСТЕМЫ M|M|1 В УСЛОВИИ БОЛЬШОЙ ЗАДЕРЖКИ НА ОРБИТЕ

А. А. Назаров, А. А. Анисимова

Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050, Томск

УДК 519.872

Рассматривается двухфазная система массового обслуживания с повторными вызовами (RQ-система) с простейшим входящим потоком и экспоненциальным распределением времени обслуживания на каждой фазе. Первая фаза содержит только один обслуживающий прибор, все заявки, застающие прибор занятым, покидают систему. Вторая фаза содержит обслуживающий прибор и орбиту, куда переходят заявки, не получившие обслуживания. Находясь на орбите, заявки через экспоненциально распределенные промежутки времени делают попытки вновь обратиться за обслуживанием. Методом асимптотического анализа в условии большой задержки заявок на орбите найдено распределение числа заявок на орбите и проведено сравнение с результатами имитационной модели.

Ключевые слова: система массового обслуживания, RQ-система, орбита, асимптотический анализ.

Введение

Системы массового обслуживания с повторными вызовами или RQ-системы (Retrial queueing system) [1], представляют собой математические модели телекоммуникационных систем: компьютерных и телефонных сетей, систем передачи данных, радио, телевидения, мобильной связи и других. Модели таких систем подходят под определение систем массового обслуживания (СМО) [6]: они предназначены для удовлетворения массовых запросов на выполнение каких-либо услуг. Однако в отличие от классических систем массового обслуживания, для телекоммуникационных систем характерна ситуация, при которой заявка, заставшая обслуживающий прибор занятым, не встает в очередь, а уходит на орбиту, откуда через некоторые промежутки времени предпринимает попытки вновь обратиться за обслуживанием.

Одним из вариантов СМО являются многофазные системы, состоящие из нескольких СМО, которые последовательно обрабатывают поступающие заявки. В частности, двухфазные RQ-системы были впервые рассмотрены C.M.Krishna и Y.H.Lee [3]. Также их анализом занимались B. Krishnakumar [4], G. Choudhury [2] и другие. В данной работе исследуется система M|M|1 с двумя фазами, в которой вторая фаза является RQ-системой.

1 Описание модели

Рассмотрим RQ-систему, на вход которой поступает простейший входящий поток интенсивности λ. По прибытию в систему заявка поступает на первую фазу, которая содержит только один обслуживающий прибор. Все заявки, застающие прибор занятым, покидают систему. После обслуживания на первой фазе заявка поступает на вторую фазу, которая содержит обслуживающий прибор и орбиту, куда переходят заявки, не получившие обслуживания. Продолжительность обслуживания на обеих фазах имеет экспоненциальное распределение с параметрами γ и μ соответственно. На орбите заявки осуществляют случайную задержку, имеющую экспоненциальное распределение с параметром σ, после которой делают попытки вновь обратиться за обслуживанием. После завершения обслуживания на второй фазе заявка покидает систему. Модель данной системы представлена на рис. 1.

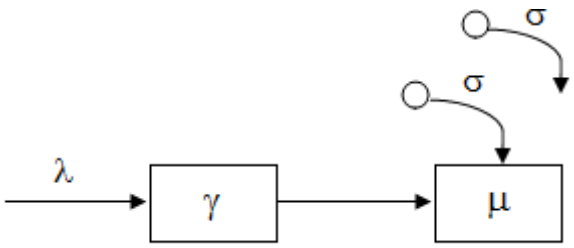


Рис. 1: Модель двухфазной RQ-системы

Обозначим через $\{i(t)\}$ число заявок в ИПВ в момент времени t. Процесс $\{i(t)\}$ не является марковским, поэтому введем дополнительную переменную:

$$\{k(t)\} = \begin{cases} 0, & \text{если оба прибора свободны,} \\ 1, & \text{если прибор на 2-й фазе занят,} \\ 2, & \text{если прибор на 1-й фазе занят,} \\ 3, & \text{если оба прибора заняты.} \end{cases}$$

Пусть $P\{k(t) = k, i(t) = i\} = P_k(i,t)$ — вероятность того, что в системе в момент времени t на орбите содержится i заявок, в то время как приборы на обеих фазах находятся в состоянии k. Будем рассматривать систему в стационарном режиме, при котором $\lim\limits_{t\to\infty} P_k(i,t) = P_k(i)$.

Процесс $\{i(t), k(t)\}$ является марковским, следовательно, для распределения вероятностей $P_k(i)$ можно составить систему уравнений Колмогорова:

$$\begin{cases} -(\lambda + i\sigma)P_0(i) + \mu P_1(i) = 0, \\ -(\lambda+\mu)P_1(i) + \gamma P_2(i) + \gamma P_3(i-1) + (i+1)\sigma P_0(i+1) = 0, \\ -(\gamma + i\sigma)P_2(i) + \mu P_3(i) + \lambda P_0(i) = 0, \\ -(\gamma+\mu)P_3(i) + (i+1)\sigma P_2(i+1) + \lambda P_1(i) = 0. \end{cases} \tag{1}$$

В системе (1) перейдем к частичным характеристическим функциям: $H_k(u) = \sum\limits_{i=0}^{\infty} e^{jui} P_k(i)$, где $j = \sqrt{-1}$ — мнимая единица. Система уравнений (1) для характеристических функций перепишется в виде:

$$\begin{cases} -\lambda H_0(u) + j\sigma \frac{dH_0(u)}{du} + \mu H_1(u) = 0, \\ -(\lambda+\mu)H_1(u) + \gamma H_2(u) + \gamma e^{ju} H_3(u) - j\sigma e^{-ju}\frac{dH_0(u)}{du} = 0, \\ -\gamma H_2(u) + j\sigma \frac{dH_2(u)}{du} + \mu H_3(u) + \lambda H_0(u) = 0, \\ -(\gamma+\mu)H_3(u) - j\sigma e^{-ju}\frac{dH_2(u)}{du} + \lambda H_1(u) = 0. \end{cases} \tag{2}$$

Систему (2) будем решать методом асимптотического анализа [?] в условии большой задержки заявок на орбите, при котором $\sigma \to 0$.

2 Асимптотический анализ

В соответствии с условием большой задержки в ИПВ выполним в системе (2) замены:

$$\sigma = \varepsilon,\ u = \varepsilon w,\ H_k(u) = F_k(w,\varepsilon), \tag{3}$$

получим:

$$\begin{cases} -\lambda F_0(w,\varepsilon) + j\frac{\partial F_0(w,\varepsilon)}{\partial w} + \mu F_1(w,\varepsilon) = 0, \\ -(\lambda+\mu)F_1(w,\varepsilon) + \gamma F_2(w,\varepsilon) + \gamma e^{j\varepsilon w} F_3(w,\varepsilon) - je^{-j\varepsilon w}\frac{\partial F_0(w,\varepsilon)}{\partial w} = 0, \\ -\gamma F_2(w,\varepsilon) + j\frac{\partial F_2(w,\varepsilon)}{\partial w} + \mu F_3(w,\varepsilon) + \lambda F_0(w,\varepsilon) = 0, \\ -(\gamma+\mu)F_3(w,\varepsilon) - je^{-j\varepsilon w}\frac{\partial F_2(w,\varepsilon)}{\partial w} + \lambda F_1(w,\varepsilon) = 0. \end{cases} \tag{4}$$

Пусть существует $\lim\limits_{\varepsilon\to 0} F_k(w,\varepsilon) = F_k(w)$. Запишем функцию $F_k(w)$ в виде:

$$F_k(w) = R_k \Phi(w). \tag{5}$$

Тогда после предельного перехода при $\varepsilon \to 0$ и деления уравнений системы на $\Phi(w)$ система (4) перепишется в виде:

$$\begin{cases} -\lambda R_0 + jR_0\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)} + \mu R_1 = 0, \\ -(\lambda+\mu)R_1 + \gamma R_2 + \gamma R_3 - jR_0\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)} = 0, \\ -\gamma R_2 + jR_2\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)} + \mu R_3 + \lambda R_0 = 0, \\ -(\gamma+\mu)R_3 - jR_2\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)} + \lambda R_1 = 0. \end{cases} \tag{6}$$

Из системы 6 следует, что $\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)}$ не зависит от w, поэтому можно записать функцию $\Phi(w)$ в виде:

$$\Phi(w) = e^{jxw}, \tag{7}$$

откуда $\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)} = jx$. Тогда после сокращения системы (6) на $\Phi(w)$ получим:

$$\begin{cases} -(\lambda+x)R_0 + \mu R_1 = 0, \\ xR_0 - (\lambda+\mu)R_1 + \gamma R_2 + \gamma R_3 = 0, \\ \lambda R_0 - (\gamma+x)R_2 + \mu R_3 = 0, \\ \lambda R_1 + xR_2 - (\gamma+\mu)R_3 = 0. \end{cases} \tag{8}$$

С учетом условия нормировки $R_0 + R_1 + R_2 + R_3 = 1$, перепишем систему (8) в матричном виде:

$$\begin{cases} RQ(x) = 0, \\ RE = 1. \end{cases} \tag{9}$$

Здесь $R = \begin{pmatrix} R_0 & R_1 & R_2 & R_3 \end{pmatrix}$, E — единичный вектор-столбец, а матрица $Q(x)$ представима в виде:

$$Q(x) = \begin{pmatrix} -(\lambda+x) & x & \lambda & 0 \\ \mu & -(\lambda+\mu) & 0 & \lambda \\ 0 & \gamma & -(\gamma+x) & x \\ 0 & \gamma & \mu & -(\gamma+\mu) \end{pmatrix}$$

Введя обозначения $M(x) = augment\,(Q(x), E)$, $v = augment\,\left(E^T 0, 1\right)$, перепишем систему (9) в виде:

$$RM(x) = v,$$

откуда уравнение для стационарного распределения значений цепи Маркова $\{k(t)\}$ имеет вид:

$$R = \left(v M(x)^T\right)\left(M(x)M(x)^T\right)^{-1}.$$

Здесь $R = R(x)$. Для нахождения значения параметра x просуммируем уравнения системы (4) и после сокращений получим:

$$\gamma(e^{j\varepsilon w} - 1)F_3(w,\varepsilon) - j(e^{-j\varepsilon w} - 1)\frac{\partial F_0(w,\varepsilon)}{\partial w} - j(e^{-j\varepsilon w} - 1)\frac{\partial F_2(w,\varepsilon)}{\partial w} = 0. \tag{10}$$

Учитывая, что $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\varepsilon}\left(e^{\pm j\varepsilon w} - 1\right) = \pm jw$, поделим уравнение (10) на ε при $\varepsilon \to 0$. После подстановки выражений (5) и (7) и сокращений получим:

$$\gamma R_3(x) - xR_0(x) - xR_2(x) = 0. \tag{11}$$

Решение x этого уравнения обозначим $x = \kappa_1$. В силу замены (3) и равенства (5) можно записать

$$H_k(u) = F_k(w,\varepsilon) \approx R_k \exp\left\{\frac{j}{\varepsilon}\kappa_1 u\right\}.$$

Отсюда характеристическая функция Me^{jui} процесса $\{i(t)\}$ имеет вид:

$$Me^{jui} = \sum_k H_k(u) \approx \exp\left\{\frac{j}{\sigma}\kappa_1 u\right\}.$$

Для более детально исследования характеристической функции рассмотрим асимптотику второго порядка. Для этого решение $H_k(u)$ системы (2) будем искать в виде:

$$H_k(u) = \exp\left\{\frac{j}{\sigma}\kappa_1 u\right\} H_k^{(2)}(u). \tag{12}$$

После подстановки (12) в систему (2) получим:

$$\begin{cases} -\lambda H_0^{(2)}(u) + j\sigma\left(\frac{j}{\sigma}\kappa_1 H_0^{(2)}(u) + \frac{dH_0^{(2)}(u)}{du}\right) + \mu H_1^{(2)}(u) = 0, \\ -(\lambda+\mu)H_1^{(2)}(u) + \gamma H_2^{(2)}(u) + \gamma e^{ju} H_3^{(2)}(u) + -j\sigma e^{-ju}\left(\frac{j}{\sigma}\kappa_1 H_0^{(2)}(u) + \frac{dH_0^{(2)}(u)}{du}\right) = 0, \\ -\gamma H_2^{(2)}(u) + j\sigma\left(\frac{j}{\sigma}\kappa_1 H_2^{(2)}(u) + \frac{dH_2^{(2)}(u)}{du}\right) + \mu H_3^{(2)}(u) + \lambda H_0^{(2)}(u) = 0, \\ -(\mu+\gamma)H_3^{(2)}(u) - j\sigma e^{-ju}\left(\frac{j}{\sigma}\kappa_1 H_2^{(2)}(u) + \frac{dH_2^{(2)}(u)}{du}\right) + \lambda H_1^{(2)}(u) = 0. \end{cases} \tag{13}$$

Введем обозначения:

$$\sigma = \varepsilon^2,\ u = \varepsilon w,\ H_k^{(2)}(u) = F_k^{(2)}(w,\varepsilon). \tag{14}$$

После подстановки (14) в (13) получим:

$$\begin{cases} -\lambda F_0^{(2)}(w,\varepsilon) - \kappa_1 F_0^{(2)}(w,\varepsilon) + j\varepsilon\frac{dF_0^{(2)}(w,\varepsilon)}{dw} + \mu F_1^{(2)}(w,\varepsilon) = 0, \\ -(\lambda+\mu)F_1^{(2)}(w,\varepsilon) + \gamma F_2^{(2)}(w,\varepsilon) + \gamma e^{j\varepsilon w} F_3^{(2)}(w,\varepsilon) + +\kappa_1 e^{-j\varepsilon w} F_0^{(2)}(w,\varepsilon) - j\varepsilon e^{-j\varepsilon w}\frac{dF_0^{(2)}(w,\varepsilon)}{dw} = 0, \\ -\gamma F_2^{(2)}(w,\varepsilon) - \kappa_1 F_2^{(2)}(w,\varepsilon) + j\varepsilon\frac{dF_2^{(2)}(w,\varepsilon)}{dw} + \mu F_3^{(2)}(w,\varepsilon) + \lambda F_0^{(2)}(w,\varepsilon) = 0, \\ -(\mu+\gamma)F_3^{(2)}(w,\varepsilon) + \kappa_1 e^{-j\varepsilon w} F_2^{(2)}(w,\varepsilon) - j\varepsilon e^{-j\varepsilon w}\frac{dF_2^{(2)}(w,\varepsilon)}{dw} + \lambda F_1^{(2)}(w,\varepsilon) = 0. \end{cases} \tag{15}$$

В системе (15) выполним предельный переход при $\varepsilon \to 0$, получим:

$$\begin{cases} -\lambda F_0^{(2)}(w) - \kappa_1 F_0^{(2)}(w) + \mu F_1^{(2)}(w) = 0, \\ -(\lambda+\mu)F_1^{(2)}(w) + \gamma F_2^{(2)}(w) + \gamma F_3^{(2)}(w) + \kappa_1 F_0^{(2)}(w) = 0, \\ -\gamma F_2^{(2)}(w) - \kappa_1 F_2^{(2)}(w) + \mu F_3^{(2)}(w) + \lambda F_0^{(2)}(w) = 0, \\ -(\mu+\gamma)F_3^{(2)}(w) + \kappa_1 F_2^{(2)}(w) + \lambda F_1^{(2)}(w) = 0. \end{cases} \tag{16}$$

После подстановки разложений (5) и (7) в (16) получим систему:

$$\begin{cases} -(\lambda+\kappa_1)R_0 + \mu R_1 = 0, \\ \kappa_1 R_0 - (\lambda+\mu)R_1 + \gamma R_2 + \gamma R_3 = 0, \\ \lambda R_0 - (\gamma+\kappa_1)R_2 + \mu R_3 = 0, \\ \lambda R_1 + \kappa_1 R_2 - (\gamma+\mu)R_3 = 0. \end{cases} \tag{17}$$

Система (17) совпадает с системой (8), полученной при рассмотрении первой асимптотики.
Запишем функцию $F_k^{(2)}(w)$ в виде разложения:

$$F_k^2(w) = \Phi(w)\{R_k + j\varepsilon f_k\} + O(\varepsilon^2). \tag{18}$$

Тогда после подстановки разложения (18) система (15) примет вид:

$$\begin{cases} -\lambda\Phi(w)(R_0 + j\varepsilon w f_0) - \kappa_1\Phi(w)(R_0 + j\varepsilon w f_0) + j\varepsilon\left(\frac{d\Phi(w)}{dw}(R_0 + j\varepsilon w f_0) + \right. \\ \left. + j\varepsilon f_0\Phi(w)\right) + \mu\Phi(w)(R_1 + j\varepsilon w f_1) = O(\varepsilon^2), \\ -(\lambda+\mu)\Phi(w)(R_1 + j\varepsilon w f_1) + \gamma\Phi(w)(R_2 + j\varepsilon w f_2) + \gamma e^{j\varepsilon w}\Phi(w)(R_3 + j\varepsilon w f_3) + \\ +\kappa_1 e^{-j\varepsilon w}\Phi(w)(R_0 + j\varepsilon w f_0) - j\varepsilon e^{-j\varepsilon w}\left(\frac{d\Phi(w)}{dw}(R_0 + j\varepsilon w f_0) + j\varepsilon f_0\Phi(w)\right) = O(\varepsilon^2), \\ -\gamma\Phi(w)(R_2 + j\varepsilon w f_2) - \kappa_1\Phi(w)(R_2 + j\varepsilon w f_2) + j\varepsilon\left(\frac{d\Phi(w)}{dw}(R_2 + j\varepsilon w f_2) + \right. \\ \left. + j\varepsilon f_2\Phi(w)\right) + \mu\Phi(w)(R_3 + j\varepsilon w f_3) + \lambda\Phi(w)(R_0 + j\varepsilon w f_0) = O(\varepsilon^2), \\ -(\mu+\gamma)\Phi(w)(R_3 + j\varepsilon w f_3) + \kappa_1 e^{-j\varepsilon w}\Phi(w)(R_2 + j\varepsilon w f_2) + \\ -j\varepsilon e^{-j\varepsilon w}\left(\frac{d\Phi(w)}{dw}(R_2 + j\varepsilon w f_2) + j\varepsilon f_2\Phi(w)\right) + \lambda\Phi(w)(R_1 + j\varepsilon w f_1) = O(\varepsilon^2). \end{cases}$$

В полученной системе выполним предельный переход при $\varepsilon \to 0$, учитывая, что $e^{\pm j\varepsilon w} = 1 \pm j\varepsilon w + O\left(\varepsilon^2\right)$. Поделив уравнения получившейся системы на $jw\Phi(w)$ и учитывая систему (17) получим:

$$\begin{cases} -\lambda f_0 - \kappa_1 f_0 + j\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)} R_0 + \mu f_1 = 0, \\ -(\lambda+\mu) f_1 + \gamma f_2 + \gamma f_3 + \gamma R_3 + \kappa_1 f_0 - \kappa_1 R_0 - j\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)} R_0 = 0, \\ -\gamma f_2 - \kappa_1 f_2 + j\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)} R_2 + \mu f_3 + \lambda f_0 = 0, \\ -(\mu+\gamma) f_3 + \kappa_1 f_2 - \kappa_1 R_2 - j\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)} R_2 + \lambda f_1 = 0. \end{cases} \tag{19}$$

Суммируя уравнения системы (19), получим:

$$\gamma R_3 - \rho\kappa_1 R_0 - \rho\kappa_1 R_2 = 0. \tag{20}$$

Из системы (19) следует, что $\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)}$ не зависит от w, поэтому:

$$\Phi(w) = e^{\frac{(jw)^2}{2}\kappa_2}, \tag{21}$$

откуда $\frac{\Phi'(w)}{\Phi(w)} = -\kappa_2$.

Подставив разложение (21) в систему (19), получим систему уравнений для функций f_k :

$$\begin{cases} -\left(\lambda+\kappa_1\right) f_0 + \mu f_1 = \kappa_2 R_0, \\ \kappa_1 f_0 - (\lambda+\mu) f_1 + \gamma f_2 + \gamma f_3 = \kappa_1 R_0 - \kappa_2 R_0 - \gamma R_3, \\ \lambda f_0 - \left(\gamma+\kappa_1\right) f_2 + \mu f_3 = \kappa_2 R_2, \\ \lambda f_1 + \kappa_1 f_2 - (\mu+\gamma) f_3 = \kappa_1 R_2 - \kappa_2 R_2. \end{cases} \tag{22}$$

Решение системы (22) можно записать в виде:

$$f = C \cdot R + g, \tag{23}$$

где g — частное решение неоднородной системы, удовлетворяющее некоторому дополнительному условию.

Просуммируем уравнения системы (15):

$$\begin{gathered} \kappa_1\left(e^{-j\varepsilon w} - 1\right) F_0^{(2)}(w,\varepsilon) + \kappa_1\left(e^{-j\varepsilon w} - 1\right) F_2^{(2)}(w,\varepsilon) + \gamma\left(e^{j\varepsilon w} - 1\right) F_3^{(2)}(w,\varepsilon) + \\ -j\varepsilon\left(e^{-j\varepsilon w} - 1\right) \frac{\partial F_0^{(2)}(w,\varepsilon)}{\partial w} - j\varepsilon\left(e^{-j\varepsilon w} - 1\right) \frac{\partial F_2^{(2)}(w,\varepsilon)}{\partial w} = 0. \end{gathered} \tag{24}$$

Подставив в уравнение (24) разложение $e^{\pm j\varepsilon w} = 1 \pm j\varepsilon w + \frac{(j\varepsilon w)^2}{2} + O\left(\varepsilon^3\right)$ и разложения (16) и (18), получим:

$$\begin{gathered} \kappa_1\left(-j\varepsilon w + \tfrac{(j\varepsilon w)^2}{2}\right)\left(R_0 + j\varepsilon w f_0\right) + \kappa_1\left(-j\varepsilon w + \tfrac{(j\varepsilon w)^2}{2}\right)\left(R_2 + j\varepsilon w f_2\right) + \\ +\gamma\left(j\varepsilon w + \tfrac{(j\varepsilon w)^2}{2}\right)\left(R_3 + j\varepsilon w f_3\right) - j\varepsilon\left(-j\varepsilon w + \tfrac{(j\varepsilon w)^2}{2}\right)\left(j^2\kappa_2 w\left(R_0 + j\varepsilon w f_0\right) + \right. \\ \left. + j\varepsilon f_0\right) - j\varepsilon\left(-j\varepsilon w + \tfrac{(j\varepsilon w)^2}{2}\right)\left(j^2\kappa_2 w\left(R_2 + j\varepsilon w f_2\right) + j\varepsilon f_2\Phi(w)\right) = 0. \end{gathered} \tag{25}$$

Поделив систему (25) на $(j\varepsilon w)^2$ и учтя условие (20) получим уравнение для нахождения κ_2:

$$\frac{1}{2}\kappa_1 R_0 - \kappa_1 f_0 + \frac{1}{2}\kappa_1 R_2 - \kappa_1 f_2 + \frac{1}{2}\gamma R_3 + \gamma f_3 - \kappa_2 R_0 - \kappa_2 R_2 = 0.$$

Учитывая (23), можно записать:

$$-\kappa_1\left(f_0 + f_2\right) + \gamma f_3 = C\left\{-\kappa_1\left(R_0 + R_2\right) + \gamma R_3\right\} - \kappa_1\left(g_0 + g_2\right) + \gamma g_3,$$

то есть для нахождения κ_2 достаточно получить частное решение системы 22. Отсюда решение уравнения (25)запишется в виде:

$$\kappa_2 = \left(\tfrac{\lambda+\kappa_1}{2}\right)\left(\frac{2\gamma\kappa_1 R_3 + 2\gamma^2 R_2 + 2\gamma^2\kappa_1 R_3 - \gamma\kappa_1 R_0(\kappa_1+\gamma+\mu) - \gamma\kappa_1 R_2(\kappa_1+\gamma+\mu) - \gamma^2 R_3(\kappa_1+\gamma+\mu) - 2\kappa_1^2 R_0(\kappa_1+\gamma+\mu) - 2\gamma\kappa_1^2 R_2(\kappa_1+\gamma+\mu) - }{\gamma\kappa_1 R_0(\kappa_1+\gamma+\mu) + \kappa_1 R_0(\lambda+\kappa_1)(\kappa_1+\gamma+\mu) + \gamma\kappa_1 R_2(\lambda+\kappa_1)(\kappa_1+\gamma+\mu) - \kappa_1^2 R_0(\lambda+\kappa_1)(\kappa_1+\gamma+\mu) + }\right.$$

$$\left.\frac{-\gamma^2 R_3(\kappa_1+\gamma+\mu) - 2\kappa_1^2 R_0(\kappa_1+\gamma+\mu) - 2\gamma\kappa_1^2 R_2(\kappa_1+\gamma+\mu) - 2\kappa_1^3 R_0(\kappa_1+\gamma+\mu) - 2\gamma\kappa_1 R_3(\kappa_1+\gamma+\mu) - 2\gamma\kappa_1^2 R_0}{+\kappa_1^3 R_0(\kappa_1+\gamma+\mu) - \kappa_1^2 R_0(\kappa_1+\gamma+\mu) + \gamma^2 R_2(\lambda+\kappa_1) - \kappa_1\gamma R_0(\lambda+\kappa_1) + \gamma\kappa_1^2 R_0 - \gamma R_0(\lambda+\kappa_1)(\kappa_1+\gamma+\mu) - \gamma R_2(\lambda+\kappa_1)(\kappa_1+\gamma+\mu)}\right)$$

Окончательно характеристическая функция числа заявок в ИПВ имеет вид:

$$H(u) = \exp\left\{ju\frac{\kappa_1}{\sigma} + \frac{(ju)^2}{2}\frac{\kappa_2}{\sigma}\right\}. \tag{26}$$

3 Сравнение с результатами имитационного моделирования

В данном разделе проводится сравнение полученных асимптотических семиинвариант первого порядка с результатами имитационного моделирования при $\sigma \to 0$. Моделирование проводилось при числе заявок во входящем потоке равным 1 миллиону.

В результате работы имитационной модели получим ряд распределения, следовательно, для сравнения с асимптотическими результатами необходимо дискретизировать полученное ранее распределение.

Функция (26) является характеристической функцией гауссовской случайной величины, следовательно, можно записать функцию распределения:

$$F(x) = N\left(x, \frac{\kappa_1}{\sigma}, \sqrt{\frac{\kappa_2}{\sigma}}\right) = \sqrt{\frac{\sigma}{2\pi\kappa_2}} \int\limits_{-\infty}^{x} \exp\left\{\frac{-\sigma\left(t - \frac{\kappa_1}{\sigma}\right)^2}{2\kappa_2}\right\} dt.$$

Отсюда вероятности $P\{i(t) = i\} = P(i)$ выражаются в виде:

$$P_{as}(i) = (F(i + 0,5) - F(i - 0,5))\,(1 - F(-0,5))^{-1}.$$

Для определения качества оценивания рассчитаем расстояние Колмогорова:

$$\Delta = \max_{0 \le i \le \infty} \left| \sum_{n=0}^{i} (P_{im}(n) - P_{as}(n)) \right|.$$

В таблицах 1–3 представлены резульаты сравнения асимптотических результатов с результатами имитационного моделирования при различных значениях параметров λ и σ.

Таблица 1: Сравнение асимптотических результатов и результатов имитационной модели при $\lambda = 0,5$, $\gamma = \mu = 1$

σ	0,1	0,05	0,03	0,01	0,005
Δ	0,104	0,067	0,041	0,017	0,015

Таблица 2: Сравнение асимптотических результатов и результатов имитационной модели при $\lambda = 0,7$, $\gamma = \mu = 1$

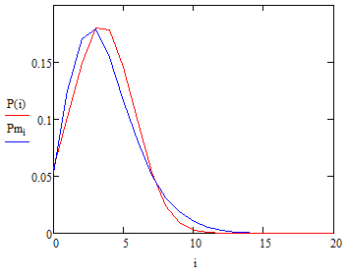
σ	0,1	0,05	0,03	0,01	0,005
Δ	0,067	0,032	0,022	0,021	0,015

Таблица 3: Сравнение асимптотических результатов и результатов имитационной модели при $\lambda = 0,9$, $\gamma = \mu = 1$

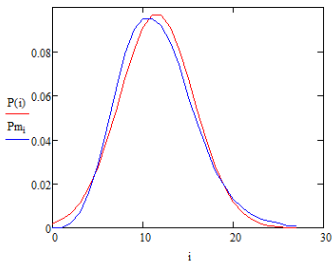
σ	0,1	0,05	0,03	0,01	0,005
Δ	0,041	0,026	0,025	0,018	0,011

В приведенных выше примерах качество оценивания становится приемлемым (расстояние Колмогорова меньше 0,05) уже при $\sigma = 0,01$. Также можно отметить, что расстояние Колмогорова уменьшается при увеличении загрузки системы.

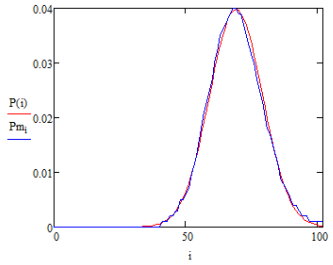
На рисунках 2 и 3 представлены графики распределений вероятности и функций распределения для распределений, полученных в результате асимптотического анализа и имитационного моделирования.



$\sigma = 0,1$

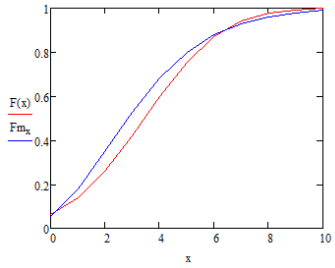


$\sigma = 0,03$

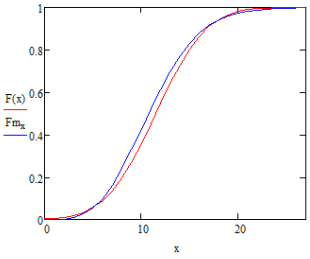


$\sigma = 0,005$

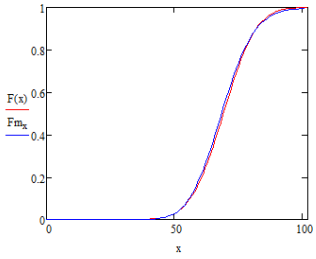
Рис. 2: Сравнение плотностей распределения для различных значений σ.



$\sigma = 0,1$



$\sigma = 0,03$



$\sigma = 0,005$

Рис. 3: Сравнение функций распределения для различных значений σ.

Заключение

В настоящей работе рассмотрена математическая модель двухфазной RQ-системы M|M|1 и с помощью метода асимптотического анализа получено асимптотическое распределение числа на орбите в условии большой задержки заявок на орбите, а также приведено сравнение полученных результатов с имитационной моделью.

Список литературы

[1] Artalejo J. R., Gomez-Corral A. Retrial Queueing Systems: A Computational Approach. Berlin: Springer. 2008, 267 p.

[2] Choudhury, G. A single server queueing system with two-phases of service and vacations // QTQM. 2008. Vol. 5,P. 33–49.

[3] Krishna C.M. and Lee Y.H. A study of two-phase service // Operations Research Letters.1990, Vol. 9, P. 91–97.

[4] Krishnakumar B. and Arivudainambi D. An M/G/1 retrial queueing system with two phases of services and preemptive resume // Annals of Operations Research. 2002, Vol. 113. P. 61–79.

[5] Nazarov A.A., Sudyko E.A. Method of asymptotic semiinvariants for studying a mathematical model of a random access network // Problems of information transmission. 2010, Vol. 46, № 1. P. 86–102.

[6] Гнеденко Б. В. Введение в теорию массового обслуживания. — 2-е изд., перераб. и доп. / Б. В. Гнеденко, И.Н. Коваленко. М. : Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1987, 336 с.

Анатолий Андреевич Назаров — д.т.н., проф., зав.каф. теории вероятности и математической статистики Томского государственного университета;
e-mail: nazarov.tsu@gmail.com;
Анна Александровна Анисимова — студентка Томского государственного университета;
e-mail: siberienne94@yandex.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

КОНСТРУИРОВАНИЕ ВЕРОЯТНОСТНЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ АНАЛИЗА ЭФФЕКТИВНОСТИ МЕТОДОВ КЛАССИФИКАЦИИ

В. М. Недельк[1,2]

[1] *Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный технический университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.246

В работе рассматривается проблема конструирования синтетических данных для анализа эффективности методов классификации. Предлагается семейство вероятностных моделей, которые позволяют отражать такие свойства реальных данных, как сложность закономерностей, степень независимости переменных, степень зашумлённости.

Моделирование с использованием специальным образом сконструированных синтетических данных позволяет не только оценить, какой из исследуемых методов более эффективен, но и понять за счёт чего эта эффективность достигается.

Ключевые слова: вероятностная модель, распознавание образов, машинное обучение, вероятность ошибочной классификации, бустинг, риск.

Введение

В настоящее время boosting является одним из методов классификации, наиболее часто используемых для решения практических задач интеллектуального анализа данных (машинного обучения). Если проанализировать решения задач на портале kaggle.com, то можно заметить, что в большинстве лучших решений используется бустинг, а именно, алгоритм XGBoost. При этом причины такой высокой эффективности бустинга в настоящее время до конца не исследованы [1], [2].

Как известно, почти для любого метода классификации можно найти (или придумать) такие данные, на которых он будет работать хорошо [3]. Если метод хорошо работает на реальных данных, значит он «угадывает» какие-то существенные свойства этих данных. Однако реальные данные обычно обладают одновременно большим числом свойств, поэтому крайне затруднительно понять, какие из них благоприятны для заданного метода, а какие — нет. Эту проблему можно решить исследованием методов на синтетических данных, свойства которых задаёт исследователь.

Задачей настоящего исследования является в том числе выявление таких особенностей данных, которые обеспечивают преимущество бустинга над другими методами. Для этого предлагается семейство вероятностных моделей, которые позволяют отражать такие свойства данных, как сложность закономерностей, степень независимости переменных, степень зашумлённости.

1 Задача построения решающей функции

Пусть X — пространство значений переменных, используемых для прогноза, а $Y = \{-1, 1\}$ — пространство значений прогнозируемых переменных, и пусть C — множество всех вероятностных мер на заданной σ-алгебре подмножеств множества $D = X \times Y$. При каждом $c \in C$ имеем вероятностное пространство $\langle D, B, \mathsf{P}_c \rangle$, где B — σ-алгебра, P_c — вероятностная мера.

Решающей функцией называется соответствие $\lambda\colon X \to Y$.

Качество принятого решения оценивается заданной функцией потерь $\mathcal{L}\colon Y^2 \to [0, \infty)$. Под риском будем понимать средние потери:

$$R(c, \lambda) = \mathsf{E}\mathcal{L}(y, \lambda(x)) = \int_D \mathcal{L}(y, \lambda(x))\ \mathsf{P}_c(dx, dy), \quad x \in X, y \in Y. \tag{1}$$

При $\mathcal{L}(y, \tilde{y}) = I(y = \tilde{y})$, где $I(\cdot)$ — индикаторная функция (равна 1, если условие истинно, и 0 — иначе), риск есть вероятность ошибочной классификации.

Задача классификации заключается в построении решающей функции, которая бы минимизировала риск.

Заметим, что значение риска зависит от c — распределения, которое неизвестно. Поэтому в приведённой формулировке задача некорректна. Однако полностью строгой общей постановки задачи распознавания в настоящее время не существует. На практике либо решаются более частные строго поставленные задачи, либо разрабатываются эвристические методы, например, методы, минимизирующие выборочную оценку риска.

Пусть $V = \big((x^i, y^i) \in D \,|\, i = 1, \ldots, N\big)$, $V \in D^N$ — случайная независимая выборка из распределения P_c.

Метод построения решающих функций есть отображение

$$Q\colon D^N \to \Lambda,$$

где Λ — заданный класс решающих функций, а $\lambda_{Q,V}$ — функция, построенная по выборке V методом Q.

Для оценивания риска обычно используются эмпирические функционалы качества, т. е. точечные оценки риска, такие как эмпирический риск, оценка скользящего экзамена, оценка bootstrap и т.п.

Эмпирический риск определяется как средние потери на выборке:

$$\widetilde{R}(V, \lambda) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathcal{L}(y^i, \lambda(x^i)).$$

Как правило, методы классификации в той или иной степени минимизируют эмпирический риск. Однако сама по себе минимизация эмпирического риска не гарантирует минимизацию риска, и тот факт, что некоторый алгоритм эффективно минимизирует эмпирический риск, ещё не объясняет эффективность этого алгоритма на реальных задачах.

Приведённые понятия являются базовым набором понятий в задаче распознавания. Однако для дальнейших рассуждений нам потребуется ввести некоторые их обобщения.

2 Вероятностная модель

Основная проблема при подборе вероятностных моделей заключается в том, что разнообразие возможных моделей слишком велико, поэтому сложно обосновать произвол в выборе конкретной модели. В связи с этим на практике обычно ограничиваются самыми простыми моделями, например нормальными распределениями.

В данной работе предлагается семейство моделей, достаточно простое по структуре, но позволяющее моделировать достаточно сложные закономерности в данных, а также свойства данных, которые существенно влияют на точность классификации.

2.1 Базовая модель

Предлагаемое семейство моделей основано на комбинировании простых моделей, которые назовём «базовыми».

В качестве базовых естественно взять модели, основанные на смеси нормальных распределений

$$\mathcal{N}(x_\theta, \Sigma_\theta), \quad \theta = 1, ..., \Theta, \tag{2}$$

где Θ — число компонент смеси, x_θ, Σ_θ — параметры распределений.

Чтобы полностью определить модель, осталось задать вероятности компонент $P(\theta)$ и отображение компонент в классы $y(\theta)$.

Рассмотренный вид модели позволяет отражать разнообразные конфигурации классов. На рис. 1 приведён пример конфигурации, известной как модель «шахматной доски» или «исключающего или».

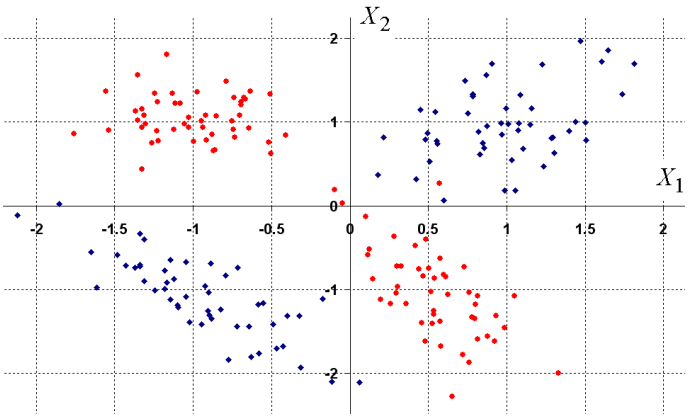


Рис. 1: Пример распределения классов для базовой вероятностной модели.

2.2 Неинформативные переменные

Неинформативные или «шумовые переменные» встречаются в большинстве реальных задач анализа данных, поэтому при исследовании эффективности методов классификации такие переменные необходимо включать в модель.

Шумовые переменные — это те, для которых распределения обоих классов совпадают. В рамках базовой модели это означает совпадение числа компонент и параметров.

2.3 Независимые переменные

Независимость переменных — это одно из основных свойств данных, которые позволяют повышать точность классификации. Если с ростом числа зависимых переменных точность решения обычно уменьшается, то с добавлением независимых переменных — растёт. При этом под независимостью понимается условная независимость (переменные независимы для каждого класса по отдельности).

Заметим, что в «чистом виде» независимость в реальных задачах встречается редко. Как правило, переменные являются частично зависимыми, а сама независимость имеет место не между отдельными переменными, а между подмножествами переменных.

Чтобы построить вероятностную модель с учётом эффекта независимости, достаточно взять несколько базовых моделей, каждую на своём подмножестве переменных.

Выборка в соответствии с такой моделью генерируется следующим образом. Сначала «разыгрывается» (выбирается случайно в соответствии с заданными безусловными вероятностями) номер класса. После этого для каждой базовой модели «разыгрывается» номер компоненты (из тех, что соответствуют выбранному классу). Наконец, для каждой выбранной компоненты генерируются значения переменных.

2.4 Обобщённая модель

Номер компоненты θ_l для базовой модели l можно рассматривать как дискретную случайную величину.

До сих пор мы номер класса рассматривали как функцию отдельных компонент.

В общем случае номер класса может быть функцией $y(\theta_1, ..., \theta_k)$ всего вектора номеров компонент. При этом на θ_l может быть задано произвольное совместное распределение.

Таким способом можно задавать достаточно сложные модели, например, можно задать многомерную модель «исключающего или» как $y(\theta_1, ..., \theta_k) = ((\theta_1 + ... + \theta_k) \mod 2) \cdot 2 - 1$.

Дальнейшее обобщение модели возможно путём создания смеси моделей, т.е. объединения в одной выборке данных, сгенерированных на основе различных моделей.

3 Случай независимых переменных

Методы построения решающих функций, использующие гипотезу независимости переменных, в зарубежной терминологии принято называть наивными байесовскими классификаторами.

В большинстве реальных задач предполагать независимость переменных нет оснований, однако с теоретической точки зрения этот случай очень важен. Если в общем случае чем больше переменных, тем больший объём выборки требуется (при прочих равных) для построения решающей функции, то при независимых переменных ситуация противоположная: чем больше переменных, тем меньший объём выборки требуется для достижения той же точности распознавания.

Гипотеза независимости переменных является очень сильной, и естественно желание иметь промежуточные варианты.

Для пространства бинарных переменных такая модель известна: это ряд Бахадура, который позволяет последовательно усложнять модель (ослаблять гипотезу) — от полной независимости, через учёт только парных зависимостей, зависимостей в тройках и т.д. до общего случая любых зависимостей.

К сожалению, обобщения ряда Бахадура для случая переменных произвольных типов автору неизвестны.

Более полную информацию, по сравнению с решающей функцией, несёт функция условной вероятности $g(x) = \mathsf{P}(y = 1 \mid x)$, которая определяет вероятность заданного класса в каждой точке пространства переменных.

Выведем формулу для вычисления условной вероятности в случае независимых переменных.

Из формулы Байеса можем записать

$$g(x) = \mathsf{P}(y = 1 \mid x) = \frac{\mathsf{P}(dx, y = 1)}{\mathsf{P}(dx, y = 1) + \mathsf{P}(dx, y = -1)} = \frac{1}{1 + \frac{1-p}{p} \cdot \frac{\mathsf{P}(dx|y=-1)}{\mathsf{P}(dx|y=1)}},$$

где $p = \mathsf{P}(y = 1)$.

Пусть условные распределения всех переменных X_j при условии обоих классов независимы, т.е. $\mathsf{P}(dx \mid y) = \prod\limits_{j=1}^{n} \mathsf{P}(dx_j \mid y)$.

Подставив это произведение в предыдущее выражение, после преобразований имеем

$$\frac{p}{1-p} \cdot \left(\frac{1}{g(x)} - 1 \right) = \prod_{j=1}^{n} \frac{p}{1-p} \cdot \left(\frac{1}{g_j(x_j)} - 1 \right),$$

где $g_j(x_j) = \mathsf{P}(y = 1 \mid x_j) = \frac{\mathsf{P}(dx_j, y=1)}{\mathsf{P}(dx_j)}$.

Логарифмируем последнее выражение и получаем

$$\sigma^{-1}(g(x)) = (n-1)(\ln p - \ln(1-p)) + \sum_{j=1}^{n} \sigma^{-1}(g_j(x_j)),$$

где $\sigma^{-1}(\cdot)$ — функция, обратная сигмоиду $\sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$.

Заметим, что полученное выражение имеет вид логистической регрессии, а именно

$$g(x) = \sigma \left(u_0 + \sum_{j=1}^{n} u_j \sigma^{-1}(g_j(x_j)) \right),$$

при $u_0 = (n-1)(\ln p - \ln(1-p))$, $u_j = 1$.

Обычно логистическую кривую получают, исходя из предположений о виде распределения, однако сейчас мы предположили независимость переменных, но не ограничивали вид распределений.

Данное выражение справедливо не только при независимых переменных, а в несколько более общем случае, поскольку здесь мы имеем лишь одно соотношение, а независимость переменных требует выполнения мультипликативности условного распределения для каждого класса, что даёт число соотношений по числу классов.

Ещё более расширить область применимости можно, если считать веса свободными параметрами.

Дальнейшее обобщение возможно, если допустить произвольные оценочные функции

$$g(x) = \sigma \left(u_0 + \sum_{j=1}^{n} u_j s_j(x_j) \right). \tag{3}$$

Мы получили метод, который можно считать разновидностью метода логистической регрессии, а также разновидностью наивного байесовского классификатора (хоть он и не является частным случаем последнего).

В рамках данной статьи будем называть метод, дающий решения, представимые в форме (3), обобщённым наивным байсовским классификатором.

Формулу (3) можно естественным образом обобщить по аналогии с рядом Бахадура, включив возможность учитывать зависимости между переменными, последовательно добавляя парные зависимости, зависимости в тройках и т.д.

$$g(x) = \sigma\left(u_0 + \sum_{j=1}^{n} u_j s_j(x_j) + \sum_{j,k} u_{jk} s_{jk}(x_j, x_k) + \sum_{j,k,l} u_{jkl} s_{jkl}(x_j, x_k, x_l) + \ldots\right). \quad (4)$$

Оказывается, что бустинг как раз и позволяет строить подобные решения. Например, метод AdaBoost на деревьях с числом конечных вершин не более M соответствует (4) с ограничением суммирования вплоть до слагаемых, соответствующих всевозможным сочетаниям из n по M переменных.

4 Эффективность методов классификации

Хотя эффект независимости переменных позволяет значительно повысить точность решения, разные методы в разной степени способны его использовать.

Пусть вероятностная модель представлена k независимыми базовыми моделями, и пусть $1 - R(\lambda_1^*)$ — точность классификации, которую заданный метод достигает на каждой базовой модели отдельно. Тогда максимально достижимая точность на полной модели есть

$$1 - R(\lambda_k^*) = \sigma\left(k * \sigma^{-1}\left(1 - R(\lambda_1^*)\right)\right).$$

Эта величина изображена на рис. 2.

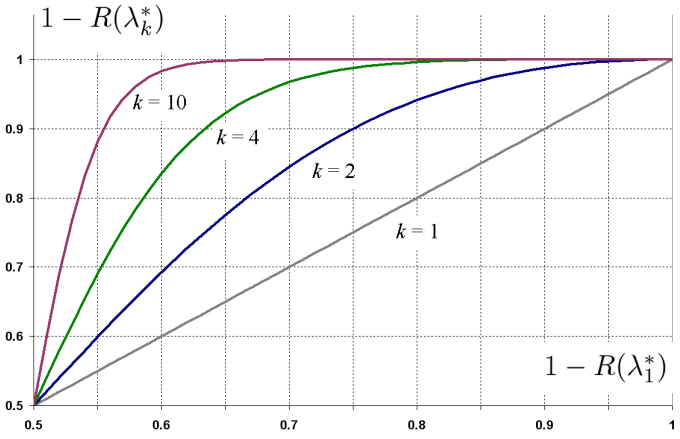


Рис. 2: Зависимость максимальной точности классификации от числа независимых переменных.

Заметим, что такое повышение точности действительно достижимо, но только в частных случаях, например, когда все переменные бинарные.

Более подходящую для практических целей оценку (см. рис. 3) можно получить в предположении нормальности распределений

$$1 - R(\lambda_k^{\mathcal{N}}) = F_{\mathcal{N}}\left(\sqrt{k} * F_{\mathcal{N}}^{-1}\left(1 - R(\lambda_1^{\mathcal{N}})\right)\right),$$

где $F_{\mathcal{N}}(\cdot)$ — функция стандартного нормального распределения.

Приведённые оценки эффекта независимости могут быть использованы для оценки того, насколько хорошо тот или иной метод классификации способен использовать независимость переменных.

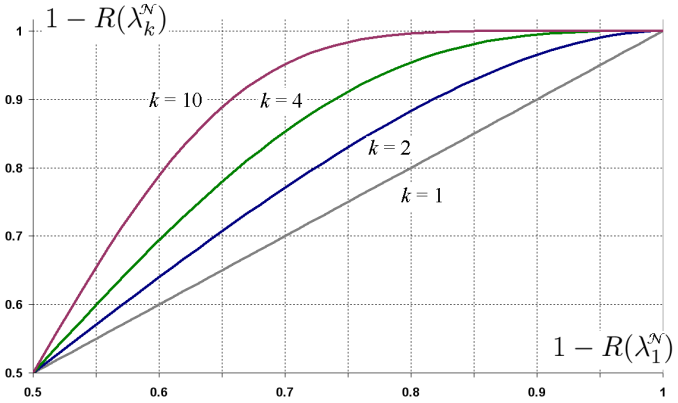


Рис. 3: Зависимость точности классификации от числа независимых переменных для нормальной модели.

Предложенное семейство вероятностных моделей было использовано в работе [4] для исследования эффективности ансамблевых методов классификации, таких как бустинг и нейронные сети (прямого распространения).

В результате удалось выявить некоторые важные свойства исследуемых методов, в частности, выявлено различие в устойчивости к шумам, а также различие в способности использовать эффект независимости (бустинг оказался лучшим по обоим характеристикам).

Заключение

Предложенное в работе семейство вероятностных моделей, несмотря на простоту, предоставляет широкие возможности по имитации реальных данных с заданными свойствами, в частности, позволяет варьировать сложность вероятностных зависимостей, моделировать независимость переменных, а также «шумовые» переменные.

Всестороннее изучение возможностей данного семейства требует большого объёма исследований в рамках целого цикла работ, однако уже предварительные исследования показывают его полезность.

Моделирование с использованием специальным образом сконструированных синтетических данных позволяет не только оценить, какой из исследуемых методов более эффективен, но и понять за счёт чего эта эффективность достигается.

Список литературы

[1] David Mease and Abraham Wyner. Evidence contrary to the statistical view of boosting // Journal of Machine Learning Research, 9:131–156, 2008.

[2] Неделько В.М. К вопросу об эффективности бустинга в задаче классификации // Вестник Новосибирского государственного университета. Математика, механика, информатика. 2015. Т. 15, вып. 2. С. 72–89.

[3] Неделько В.М. Исследование эффективности некоторых линейных методов классификации на модельных распределениях // Машинное обучение и анализ данных, 2016. Т. 2. № 3. С. 305–328.

[4] Бутаев Р.С. Сравнение эффективности методов построения решающих функций на основе бустинга и нейронных сетей. ВКР. 2007. 36 с.

Виктор Михайлович Неделько — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН;
e-mail: nedelko@math.nsc.ru.
Дата поступления — 3 июня 2017 г.

УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СТОХАСТИЧЕСКОЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ЦЕНОВОГО РЯДА

А. В. Новиков[1], А. В. Бурмистров[2,3],

[1] *ООО Мой капитал, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[3] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.865

В работе рассматривается задача построения адекватной математической модели ценового ряда в рамках стохастической дифференциальной модели [3]. Проводится анализ динамики вероятностных характеристик ценовых рядов: коэффициента роста и коэффициента волатильности. Для этих коэффициентов по историческим данным строятся стохастические дифференциальные уравнения, наиболее адекватно описывающие их историческую динамику.

Ключевые слова: ценовой ряд, стохастическое дифференциальное уравнение, геометрическое броуновское движение, случайная волатильность, коэффициент роста, непрерывное распределение.

Введение

Одной из классических задач финансовой математики является задача построения адекватной, с точки зрения практического применения определенных вероятностных характеристик в конкретной ситуации, математической модели ценового ряда. Обзор методов построения математических моделей, а также набор значимых (с практической точки зрения) вероятностных характеристик представлены, например, в статье [5]. В работе [3] проведен анализ динамики вероятностных характеристик ценовых рядов (в качестве примера таких данных были рассмотрены цены российских акций, торгуемых на ММВБ в 2002–2003 годах), на основе которого построена стохастическая дифференциальная модель (СДМ) ценового ряда. Предложенная модель учитывает случайную природу изменения коэффициентов роста и волатильности, что значительно улучшило классическую модель цены (см., например, [6])], в которой данные коэффициенты предполагались постоянными. По прошествии 15 лет назрела необходимость в обогащении предложенного алгоритма новыми распределениями в силу значительного расширения рынка ценных бумаг и накопления огромного массива исторических цен.

Прежде чем приступить к изложению основного материала, введем ряд обозначений и сокращений, используемых в работе. Случайные величины будем обозначать строчными буквами греческого алфавита (например, ξ, ζ, η). Функция плотности распределения вероятностей случайной величины ξ обозначается $f_\xi(x)$, а функция распределения — $F_\xi(x)$. Математическое ожидание ξ будем обозначать через $M\xi$, а дисперсию — через $D\xi$.

1 Недостатки классической модели

Классической моделью динамики цены рискового актива является геометрическое броуновское движение P_t, которое удовлетворяет стохастическому дифференциальному уравнению (СДУ) в смысле Ито [6]:

$$\begin{cases} dP_t = \mu P_t + \sigma P_t dw_t, \ 0 \le t \le T, \\ P(0) = P_0. \end{cases}$$

Здесь использованы следующие обозначения:

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00698).

- P_t — цена базисного актива,
- $\mu \in \mathbb{R}$ — постоянный коэффициент роста,
- $\sigma \in \mathbb{R}$ — постоянный коэффициент волатильности,
- w_t — стандартный винеровский процесс.

Степень влияния параметров модели на плотность распределения P_t подробно изучена. Также хорошо известны недостатки данной модели, основным из которых является неограниченный рост дисперсии P_t с ростом t.

Поскольку в прикладных задачах финансовой математики время дискретно в силу специфики данной предметной области (котировки акций, индексов даются с определенной периодичностью), то целесообразно перейти от непрерывной модели к дискретной:

$$P_{n+1} = P_n \exp\left\{\left(\mu - \frac{\sigma^2}{2}\right)h - \sigma\sqrt{h}\eta_n\right\},$$

где

- P_n — моделируемая цена акции в узле номер n,
- h — шаг равномерной сетки по времени,
- η_n — последовательность независимых между собой стандартных нормальных случайных величин.

Заметим, что у нас есть исторический ряд цен $\{P_i; i = 1, \ldots, T\}$. Из последней формулы по оценкам первых двух моментов выборки $\{\ln(P_{n+1}/P_n)\}_{n=0}^{N-1}$ размера N для параметров μ и σ получаем:

$$\widehat{\mu} = a + \frac{\widehat{\sigma}^2}{2}, \quad a = \frac{\ln P_N - \ln P_0}{Nh}$$

$$\widehat{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{Nh}\sum_{i=0}^{N-1}\left(\ln P_{i+1} - \ln P_i - ah\right)^2}$$

При формировании СДМ, учитывающей стохастичность параметров μ и σ, использовался метод "скользящего окна" [3, 4], который заключается в следующем:

1. Применяем формулы для подсчета $\widehat{\sigma}$ и $\widehat{\mu}$, используя сдвиг порядка ρN (величину выборки $N \ll T$ и коэффициент ρ можно оптимизировать в алгоритме, мы выбирали $N \sim 2000$, $\rho = 0.5$), получаем наборы $\widehat{\mu}_0, \widehat{\mu}_{\rho N} \ldots \widehat{\mu}_{k\rho N}$ и $\widehat{\sigma}_0, \widehat{\sigma}_{\rho N} \ldots \widehat{\sigma}_{k\rho N}$. Здесь $k = \max\{j : j\rho N + N \le T\}$.
2. Для выборки $\widehat{\mu}_0, \widehat{\mu}_{\rho N} \ldots \widehat{\mu}_{k\rho N}$ считаем выборочное среднее и выборочный второй момент

$$\overline{\mu} = \frac{1}{k+1}\sum_{i=0}^{k}\widehat{\mu}_{i\rho N}, \quad \overline{\mu^2} = \frac{1}{k+1}\sum_{i=0}^{k}\widehat{\mu}^2_{i\rho N},$$

при этом выборочная дисперсия $V_\mu = \overline{\mu^2} - (\overline{\mu})^2$.

3. Для выборки $\widehat{\sigma}_0, \widehat{\sigma}_{\rho N} \ldots \widehat{\sigma}_{kN/2}$ считаем выборочное среднее и выборочный второй момент

$$\overline{\sigma} = \frac{1}{k+1}\sum_{i=0}^{k}\widehat{\sigma}_{i\rho N}, \quad \overline{\sigma^2} = \frac{1}{k+1}\sum_{i=0}^{k}\widehat{\sigma}^2_{i\rho N},$$

при этом выборочная дисперсия $V_\sigma = \overline{\sigma^2} - (\overline{\sigma})^2$.

Таким образом, в СДМ коэффициенты роста и волатильности ведут себя как стационарные случайные процессы на $\mathbb{R}$ и $\mathbb{R}^+$ соответственно. Далее для аппроксимации распределений $\widehat{\mu}$ и $\widehat{\sigma}$, с помощью критерия согласия χ^2 Пирсона [8] в случае, когда по выборке оцениваются параметры распределения, определяются наиболее адекватные распределения в множестве анализируемых непрерывных распределений на $\mathbb{R}$ и $\mathbb{R}^+$ соответственно.

2 Выбор непрерывных распределений

По результатам анализа динамики изменения коэффициента роста $\widehat{\mu}$ ранее в [3, 4] было предложено приближать его распределение одним из следующих симметричных непрерывных распределений с возможными значениями на всей числовой оси R: нормальное распределение, логистическое распределение, а также распределения Лапласа и Чампернауна.

С другой стороны, аппроксимировать распределение коэффициента волатильности $\widehat{\sigma}$ было предложено следующими распределениями с возможными значениями на положительной полуоси R^+: гамма распределение, логнормальное распределение, а также распределения Вальда и Рэлея.

Целесообразность выбора именно этих распределений вытекала из практических наблюдений выборок $\widehat{\mu}$ и $\widehat{\sigma}$ для ценовых рядов, соответствующих различным акциям в 2002–2003 годах. Однако сейчас на рынке гораздо больше акций, чем 15 лет назад и описанный в [3, 4] арсенал распределений часто оказывается недостаточным. Поэтому, кроме разобранных в [3, 4] распределений обновленный алгоритм будет дополнительно рассматривать следующие распределения.

Для коэффициента роста $\widehat{\mu}$ рассмотрим два распределения.

1. Обобщённое нормальное распределение ($\alpha > 0,\ \beta > 0$).

$$f_\xi(x) = \frac{\beta}{2\alpha\Gamma(1/\beta)} e^{-\left(\frac{x-m}{\alpha}\right)^\beta},$$

$$M\xi = m,$$

$$D\xi = \frac{\alpha^2\Gamma(3/\beta)}{\Gamma(1/\beta)}.$$

2. Распределение Стьюдента ($n > 3$).

$$f_\xi(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)\sqrt{\pi n}s}\left(1 + \frac{1}{n}\left[\frac{x-m}{s}\right]^2\right)^{-\frac{n+1}{2}},$$

$$M\xi = m,$$

$$D\xi = \frac{s^2 n}{n-2}.$$

Для коэффициента волатильности $\widehat{\sigma}$ рассмотрим четыре распределения.

1. Распределение Накагами ($m \geq 0.5, \omega > 0$).

$$f_\zeta(x) = \frac{2m^m}{\Gamma(m)\,\omega^m} x^{2m-1} \exp\left(-\frac{m}{\omega}x^2\right),$$

$$M\zeta = \frac{\Gamma\left(m+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(m)}\left(\frac{\omega}{m}\right)^{1/2},$$

$$D\zeta = \omega - (M\xi)^2.$$

2. Распределение Вейбулла ($\lambda > 0,\ k > 0$).

$$f_\zeta(x) = \frac{k}{\lambda}\left(\frac{x}{\lambda}\right)^{k-1} e^{-(x/\lambda)^k},$$

$$M\zeta = \lambda\Gamma(1 + 1/k),$$

$$D\zeta = \lambda^2\Gamma(1 + 2/k) - (M\xi)^2.$$

3. Распределение Эрланга ($\lambda > 0,\ k \in \mathbb{N}$).

$$f_\zeta(x) = \frac{\lambda^k x^{k-1} e^{-\lambda x}}{(k-1)!},$$

$$M\zeta = \frac{k}{\lambda},$$

$$D\zeta = \frac{k}{\lambda^2}.$$

4. Распределение Максвелла ($a > 0$).

$$f_\zeta(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{x^2}{a^3} e^{-x^2/(2a^2)},$$

$$M\zeta = 2a\sqrt{\frac{2}{\pi}},$$

$$D\zeta = 3a^2 - (M\xi)^2.$$

Для всех рассмотренных в данном пункте распределений в обновленном алгоритме строятся соответствующие СДУ на коэффициенты μ и σ (см. подробнее [1, 3]) и в итоге получается СДМ в виде системы нелинейных СДУ вида:

$$P_{n+1} = P_n + h\mu_n P_n + \sqrt{h}\sigma_n P_n \eta_{n,1},$$

$$\mu_{n+1} = \mu_n - hA_1(\mu_n - M\xi) + \sqrt{A_1 h}\Phi_1(\mu_n)\eta_{n,2},$$

$$\sigma_{n+1} = \sigma_n - hA_2(\sigma_n - M\zeta) + \sqrt{A_2 h}\Phi_2(\sigma_n)\eta_{n,3},$$

здесь

- $\eta_{n,i}$ — независимые стандартные нормальные величины,
- $A_1 > 0$, $A_2 > 0$ — положительные константы, встречающиеся в экспоненте соответствующих корреляционных функций, которые также оцениваются по историческим данным,
- Φ_1 и Φ_2 — функции связанные с распределениями, аппроксимирующими выборочные распределения для коэффициентов роста и волатильности, соответственно.

Полученная система СДУ используется в режиме реального времени для моделирования цены, в том числе для прогноза цены при использовании торговых алгоритмов.

Заключение и дальнейшие планы

В заключение отметим, что добавление СДУ для коэффициента роста и коэффициента волатильности заметно улучшило адекватность модельной цены по отношению к историческим данным. Кроме того, добавление новых непрерывных распределений в алгоритм выбора СДУ, описывающих поведение коэффициентов роста и волатильности, позволило рассматривать более широкий набор финансовых инструментов. Практические расчеты с помощью расширенной СДМ мы приведем в следующих работах.

Также планируется дальнейшее расширение модели ценового ряда в рамках модели больцмановского типа [2, 7]. В этой модели цена изменяется вследствие случайных флуктуаций, моделируемых как стандартное броуновское движение с некоторой волатильностью ς, а также в результате дискретных сделок между двумя группами: продавцами и покупателями. Данные группы в каждый момент времени t описываются двумя положительными плотностями: плотностью покупателей $f(x,t)$ и плотностью продавцов $g(x,t)$, здесь x — цена покупки или цена продажи (для покупателя и продавца, соответственно). В момент времени достижения согласия по цене происходит сделка, после чего продавец и покупатель меняются ролями. Поскольку в модели существует внешний параметр “цена транзакции” $a > 0$, то покупатель реально платит $x + a$ и поэтому, став продавцом, он будет просить за товар не менее этой величины. С другой стороны, прибыль продавца равна $x - a$, следовательно, став покупателем, в следующую сделку он не будет платить больше

этой величины. Рассматривая сделки как акты кинетических взаимодействий (подобно столкновению молекул в газовой динамике), мы получим модель, в которой изменение во времени плотности покупателей $f(x,t)$ и плотности продавцов $g(x,t)$ описываются следующими дифференциальными уравнениями

$$f_t^k(x,t) = \frac{\varsigma^2}{2} f_{xx}^k(x,t) - k f^k(x,t)\, g^k(x,t) + k f^k(x+a,t)\, g^k(x+a,t),$$

$$g_t^k(x,t) = \frac{\varsigma^2}{2} g_{xx}^k(x,t) - k f^k(x,t)\, g^k(x,t) + k f^k(x-a,t)\, g^k(x-a,t),$$

с начальными данными $f^k(x,0) = f_0(x) \geq 0$ и $g^k(x,0) = g_0(x) \geq 0$. Здесь k — частота сделок. При моделировании плотности заменяются на доли продавцов и покупателей, готовых в момент времени t к сделке в некоторой окрестности цены x. При этом покупатель в состоянии x совершит сделку с продавцом в состоянии y с вероятностью, зависящей от их текущих состояний. Вся информация о возможных сделках описывается интегральным ядром $K(x,y,x',y')$ равным числу сделок, в которых покупатели хотят купить товар за цену x и перепродать за цену x', а продавцы хотят продать товар за цену y и купить еще за цену y'. Вид ядра $K(x,y,x',y')$ нужно восстанавливать по историческим данным. В итоге получим систему интегральных уравнений больцмановского типа:

$$f_t(x,t) - \frac{\varsigma^2}{2} f_{xx}(x,t) = \int_{R^3} K(x',y',x,y) f(x',t) g(y',t) dy dx' dy' - \int_{R^3} K(x,y,x',y') f(x,t) g(y,t) dy dx' dy',$$

$$g_t(x,t) - \frac{\varsigma^2}{2} g_{xx}(x,t) = \int_{R^3} K(x',y',y,x) f(y',t) g(x',t) dx dx' dy' - \int_{R^3} K(y,x,x',y') f(y,t) g(x,t) dx dx' dy'.$$

Решая эту систему, находим цены сделок в момент времени t и используем их для построения прогноза цены при использовании торговых алгоритмов.

Список литературы

[1] Аверина Т.А., Артемьев С.С. Моделирование стационарных случайных процессов с заданным одномерным распределением и экспоненциальной корреляционной функцией // Препринт 495. ВЦ СО АН СССР, Новосибирск, 1984, 24 с.

[2] Коротченко М.А., Бурмистров А.В. Моделирование динамики многочастичных ансамблей при использовании кинетических моделей // Образовательные ресурсы и технологии. 2016. Т. 14, № 2. С. 324–330.

[3] Новиков А.В. Адаптированные стохастические дифференциальные модели ценового ряда // Препринт 1157. ИВМиМГ СО РАН, Новосибирск, 2003, 27 с.

[4] Новиков А.В. Математические модели и вычислительные алгоритмы для решения некоторых задач финансовой математики // Диссертация ... кандидата физико-математических наук: 01.01.07. Новосибирск, 2003. 108 с.

[5] Artemiev S.S., Novikov A.V., Ogorodnikov V.A. Mathemmatical aspects of Computer aided share trading // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2002. Vol. 17, No. 4. P. 331–346.

[6] Black F., Scholes M. The Pricing of Options and Corporate Liabilities // Journal of Political Economy. 1973. Vol. 81, No. 3. P. 637–654.

[7] Burger M., Caffarelli L., Markowich P., Wolfram M.-T. On a Boltzmann-type price formation model // Proceedings of the Royal Society A. 2013. Vol. 469, N 2157, 20130126.

[8] Greenwood P.E., Nikulin M.S. A guide to chi-squared testing. New York: John Wiley & Sons, 1996. 280 p.

Алексей Владимирович Новиков — к.ф.-м.н., директор по развитию ООО Мой капитал;
e-mail: allex.novikov@moikapital.com,
Александр Васильевич Бурмистров — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
ст. преподаватель Новосибирского государственного университета;
e-mail: burm@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

АДАПТИВНЫЕ КОМПАКТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ ОСНОВНЫХ ТИПОВ ЭВОЛЮЦИОННЫХ УРАВНЕНИЙ С ОДНОЙ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

В. И. Паасонен[1,2]

[1] *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.6

Исследование посвящено разработке компактных разностных схем третьего порядка точности на адаптивной сетке для ряда эволюционных уравнений (теплопроводности, волнового, Шрёдингера и Гинзбурга — Ландау). Методика расчета опирается на совмещении в рамках одного алгоритма разнородных факторов, улучшающих эффективность вычислений. Это неравномерная сетка, повышенный порядок аппроксимации схем, модифицированный механизм адаптации сетки и адекватная по точности интерполяция. Представлены результаты численных экспериментов в сравнении с другими методами.

Ключевые слова: уравнение Шрёдингера, уравнение Гинзбурга — Ландау, волновое уравнение, неравномерная сетка, компактная схема, адаптивная схема, солитон

Введение

Рассматривается задача Дирихле на конечном пространственном и временном отрезке для дифференциального уравнения

$$\frac{\partial^k U}{\partial t^k} = a\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + f, \quad k = 1, 2. \tag{1}$$

В случае положительного коэффициента a при $k = 1$ имеем уравнение теплопроводности, а при $k = 2$ — волновое уравнение. Если же a является мнимой величиной (в безразмерном виде $a = i/2$), а $k = 1$, то при специальной правой части $f = i|U|^2U$ имеем уравнение Шрёдингера [1]. При комплексном $a = \beta + i/2$ с положительной вещественной частью $\beta > 0$ и при более сложной правой части $f = (\delta + z|U|^2 + w|U|^4)\,U$, где $z = \varepsilon + i$, $w = \nu + i\,\mu$ уравнение (1) превращается в уравнение Гинзбурга — Ландау [2]. Независимые переменные в уравнении Шрёдингера и уравнении Гинзбурга — Ландау имеют иной смысл, чем для классических уравнений математической физики (для некоторого класса задач x — 'медленное' время, а t — циклическая переменная), но для простоты всюду ниже условно будем именовать эволюционную переменную t временем, а x — пространственной переменной, как принято в классической математической физике.

Тестовые расчеты в данной работе приведены для решений с резко переменным характером профилей типа солитонов. Для таких задач чаще применяют методы, основанные на спектральных разложениях [3], так как традиционные схемы на равномерных сетках для достижения достаточной точности требуют чрезвычайно мелкого шага сетки. Однако в отличие от спектральных методов разностные схемы без осложнений распараллеливаются, что особенно важно при переходе к многомерным задачам. Попытки использовать вместо обычных схем компактные схемы четвертого порядка точности на равномерной сетке [4, 5, 6] дают существенное улучшение результатов в сравнении с традиционными схемами, однако аппроксимационные требования к шагу сетки и для них оказываются довольно жесткими, поскольку противоречие между необходимостью детализации сетки в зоне больших градиентов и ненужностью настолько мелкого шага на обширных промежутках вне таких зон является общей чертой любых схем на равномерной сетке. Естественным выходом из такого противоречия представляется использование адаптивных неравномерных сеток, особенно если при этом удастся сохранить также и повышенный порядок аппроксимации.

Данная работа посвящена разработке технология, основанная на сочетании ряда факторов, улучшающих качество расчетов. Это неравномерная сетка, компактные разностные схемы третьего порядка аппроксимации на ней, механизм динамической адаптация сетки к решению, и аккуратная интерполяция решения без потери порядка точности.

1 Компактные разностные схемы повышенной точности

Зафиксируем произвольно узел неравномерной сетки по переменной x и обозначим через h_+ и h_- локальные значения шагов сетки справа и слева от этого узла, а через Δ_+ и Δ_- — соответствующие простейшие разделенные разности 'вперед' и 'назад'. Введем также обозначения для разности, суммы и произведения соседних шагов h_+ и h_-:

$$d = h_+ - h_-, \qquad s = h_+ + h_-, \qquad p = h_+ h_-.$$

Для разностных аппроксимаций

$$\Delta = \frac{h_-\Delta_+ + h_+\Delta_-}{s}, \qquad \Lambda = \frac{\Delta_+ - \Delta_-}{s/2}$$

операторов однократного и двукратного дифференцирования справедливы разложения

$$\Delta w = \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{p}{6}\,\frac{\partial^3 w}{\partial x^3} + O(h^3),$$

$$\Lambda w = \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{d}{3}\,\frac{\partial^3 w}{\partial x^3} + \frac{d^2+p}{12}\,\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + O(h^3).$$

Представим формально уравнение (1) в виде ОДУ

$$a\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = F, \qquad F = -f + \frac{\partial^k U}{\partial t^k}, \tag{2}$$

не обращая пока внимания на зависимость функций от t и на конкретный вид правой части F. Тогда в силу выписанных выше разложений разностных операторов можно построить трёхточечную компактную разностную схему третьего порядка аппроксимации по переменной x:

$$a\Lambda U = \Sigma F, \qquad \Sigma = E + \frac{d}{3}\Delta + \frac{d^2+p}{12}\Lambda. \tag{3}$$

Схема (2) является основой для создания компактных схем для всех рассматриваемых уравнений; необходимо лишь подставить в (3) выражение F из (2), осуществить дискретизацию по эволюционной переменной t, аппроксимировать производные по t и выполнить необходимые осреднения функций. Так, в случае $k = 1$ для уравнения теплопроводности, уравнения Шрёдингера и Гинзбурга — Ландау получается двухслойная схема

$$\Sigma\frac{U^{n+1} - U^n}{\tau} = a\Lambda\frac{U^{n+1} + U^n}{2} + \frac{f^{n+1} + f^n}{2} + (\Sigma - E)f^n, \tag{4}$$

аппроксимирующая уравнение (1) с погрешностью $O(\tau^2 + h^3)$. При наличии нелинейности в правой части схема (4) потребовала бы итераций по нелинейности, однако есть возможность избежать этого, следуя рекомендациям [5] и записывая схему (4) по трем слоям с двойным шагом по времени, а правую часть аппроксимируя на среднем слое:

$$\Sigma\frac{U^{n+1} - U^{n-1}}{2\tau} = a\Lambda\frac{U^{n+1} + U^{n-1}}{2} + \Sigma f^n. \tag{5}$$

Схема (5) является безитерационной, но на старте вычислений требует задания решения на двух начальных слоях, тогда как из начальных условий краевой задачи решение известно только на одном. Поэтому на первом шаге необходимо использовать какую-нибудь линеаризацию двухслойной схемы (4), например

$$\Sigma\frac{V^{k+1} - U^0}{\tau} = a\Lambda\frac{V^{k+1} + U^0}{2} + \frac{f(V^k) + f(U^0)}{2} + (\Sigma - E)f^0, \quad V^0 = U^0, \quad k = 1, 2, ... \tag{6}$$

Формально в (4)–(6) объединены схемы для уравнения теплопроводности, уравнения Шрёдингера и уравнения Гинзбурга — Ландау в зависимости от вида правой части и типа константы a. В частном случае равномерной сетки схема совпадает с классической схемой Микеладзе [7] четвертого порядка точности по пространственной переменной, в случае уравнений Шрёдингера и Гинзбурга — Ландау — со схемой [4] и [8] соответственно.

Заметим, что если в разностном операторе Σ удержать лишь два слагаемых ($\Sigma = E + \frac{d}{3}\Delta$) или одно ($\Sigma = E$), то порядок погрешности схемы (5) по пространственной переменной понизится до второго или соответственно до первого. Именно с этими схемами вида (5) с разными усеченными версиями осредняющего оператора Σ проводилось сравнение компактной схемы.

Построим на основе исходной схемы (3) компактную схему для волнового уравнения. С этой целью подставим в (3) вместо правой части F ее представление, проведем симметричное осреднение слагаемых по трем временным слоям с весом σ и отбросим несущественные слагаемые, сравнимые по порядку аппроксимации с погрешностью. В результате получим схему

$$\Sigma\frac{U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1}}{\tau^2} = a\Lambda(\sigma\frac{U^{n+1} + U^{n-1}}{2} + (1-\sigma)U^n) + G^n, \tag{7}$$

где

$$G^n = \Sigma f^n + \frac{\sigma\tau^2}{2}\frac{f^{n+1} - 2f^n + f^{n-1}}{\tau^2}.$$

Нетрудно показать, что при $\sigma = 1/6$ схема (7) достигает четвертого порядка аппроксимации по времени, т. е. имеет погрешность $O(\tau^4 + h^q)$, где $q = 1, 2, 3$ — число удержанных слагаемых в выражении разностного оператора Σ. При любом другом значении веса σ порядок аппроксимации падает до второго, т. е. погрешность составляет величину $O(\tau^2 + h^q)$.

Для старта вычислений по трехслойной схеме необходимо задать значения решения на двух первых временных слоях по заданным в начальный момент функции и ее производной по времени:

$$U(x,0) = \Phi(x), \quad \frac{\partial U}{\partial t}(x,0) = \Psi(x).$$

Очевидно, на нулевом слое $U^0 = \Phi$. А для вычисления решения на первом слое с достаточной точностью необходимо воспользоваться разложением решения в ряд Тейлора и заменить старшие производные по времени с помощью дифференциальных следствий уравнения (1), а затем аппроксимировать дифференциальные операторы разностными. Например, для схемы $O(\tau^4 + h^3)$ в результате получим

$$U^1 = (E + \frac{a\tau^2}{2}\Lambda)\Phi + \tau(E + \frac{a\tau^2}{6}\Delta)\Psi + \frac{\tau^2}{6}(2f^0 + f^1) + O(\tau^4 + h^3).$$

Следует заметить, что в частном случае равномерной сетки схема (7) совпадает с компактной схемой [9, 10] четвертого порядка точности.

2 Описание алгоритма расчета

Для схемы на неравномерной сетке необходим эффективный механизм адаптации сетки к решению. Существует два основных подхода к построению сетки с регулируемым масштабом изменения решения на шаге. Первый использует специальную замену переменных, с тем чтобы в исходных переменных подходящее масштабирование достигалось бы автоматически при использовании в новых переменных равномерной сетки. Этот способ очень широко применяется, например, при расчете течений в пограничном слое. Другой подход предполагает расчеты в исходных переменных на неравномерной сетке, перестраиваемой во времени. В данном случае предпочтителен именно второй подход, так как при первом способе нелинейное преобразование сильно усложняет дифференциальное уравнение, что приводит к непреодолимым осложнениям при попытке построения компактных высокоточных аппроксимаций.

Известны различные алгоритмы адаптации сетки к решению, например, по длине дуги кривой, по норме погрешности, по скорости изменения решения и другие. Здесь применяется оригинальная модификация классического метода [11] построения сетки, квазиравномерной по приращению функции на шаге.

Алгоритм расчета для трехслойных схем выглядит следующим образом: Сначала решение на предыдущем $(n-1)$-м слое интерполируется на сетку текущего n-го слоя. Затем решается разностное уравнение, и

в результате на сетке текущего n-го слоя получается решение на следующем слое. После этого осуществляется перестройка сетки на следующем $(n+1)$-м слое с адаптацией к характеру полученного решения. Завершает алгоритм интерполяция вычисленного решения на новую сетку. Заметим, что для схем второго и выше порядка точности линейная интерполяция неприемлема, для сохранения порядка точности метода в целом необходимо прибегать к более точным инструментам, например, к сплайновой или локальной полиномиальной. В нашем случае для схем точности $O(h^q)$ использовалась локальная лагранжева интерполяция по ближайшим $(q+1)$ узлам.

Новая сетка $\hat{x}$, почти равномерная относительно приращения данной функции U на сетке x, строится способом, близким к [11], с некоторой модификацией. Вначале строится монотонная сеточная функция переменной $x_i, (i = 0, \cdots, N)$, где N — число шагов сетки:

$$W_i = \sum_{j=1}^{i} |U_j - U_{j-1}| \simeq \int_{x_0}^{x_i} \left| \frac{\partial U}{\partial \xi} \right| d\xi.$$

После этого добавлением линейной функции с весом $\alpha > 0$, строится безразмерная строго возрастающая управляющая сеточная функция

$$Z_i = (1-\alpha)\frac{W_i}{W_N} + \alpha \frac{x_i - x_0}{x_N - x_0}, \quad \alpha > 0,$$

обеспечивающая взаимно-однозначное отображение $Z(x)$ на единичный отрезок. Затем в области значений $(0,1)$ функции Z строится равномерная сетка, и обратная функция $x(Z)$ определяет однозначно новую сетку с равномерным изменением управляющей функции Z. Вес α позволяет регулировать размер шага на промежутках постоянства функции $U(x)$. Испытания данного метода на решениях в виде солитонов выявили его недостаток, проявляющийся в резком изменении шага сетки в областях большой кривизны, например, у 'пьедестала' солитона, на его вершине и вблизи фронта волны. Поэтому и была предпринята попытка модификации метода [11], направленные на детализацию сетки в зонах, где вторая производная значительна.

Суть модификации заключается в следующем. Вычисляются значения разностной второй производной

$$D_i = \Lambda Z_i = \frac{2}{h_+ + h_-} \left(\frac{Z_{i+1} - Z_i}{h_+} - \frac{Z_i - Z_{i-1}}{h_+} \right)$$

от управляющей функции, и в случае превышения по модулю заранее заданного порога ($|D_i| > d$) компоненты вычисленного вектора D обрезаются по амплитуде до пороговой величины, а затем по скорректированному таким способом вектору $\hat{D}$ строится подправленная управляющая функция $\hat{Z}$ как решение разностной задачи

$$\Lambda \hat{Z}_i = \hat{D}, \quad i = 1, ..., N-1, \quad \hat{Z}_0 = 0, \quad \hat{Z}_N = 1,$$

и уже по обновленной управляющей функции строится сетка. Данная модификация позволила добиться благоприятного перераспределения узлов сетки и более плавного изменения шага в проблемных зонах.

Важным элементом алгоритма является старт, так как в классе рассматриваемых решений начальная функция может иметь резкие изменения. По этой причине основному вычислительному процессу должна предшествовать стандартная процедура построения стартовой сетки, согласованной с характером начальной функции. Кроме того, для дифференциальных уравнений первого порядка по времени с нелинейностью в правой части на первом временном шаге ввиду трехслойности схем требуется отдельный итерационный процесса. Для волнового уравнения процедура вычисления решения на первом слое также особая, связанная с обработкой двух исходных начальных условий. В результате работы стартового блока начальные данные на двух первых слоях, необходимые для основной разностной задачи, оказываются сформированными на неравномерной сетке, соответствующей характеру начальных данных.

3 Результаты численных экспериментов

Для уравнения теплопроводности точное решение взято в виде волны, сосредоточенной на отрезке $|w| \leq 1$, где

$$w = \frac{x - vt}{\mu},$$

v — скорость, а μ — полуширина. Форма волны симметричная полиномиальная

$$U = \left(1 - w^2\right)^4, \qquad |w| \le 1,$$

гладко примыкающая с обеих сторон к оси x, а правая часть

$$f = 8\left(\frac{7w^2 - 1}{\mu^2} - \frac{vw(1 - w^2)}{\mu}\right)(1 - w^2)^2, \qquad |w| \le 1.$$

Вне отрезка $|w| \le 1$ решение U и правая часть f уравнения равны нулю.

Задача решалась в области $(0 < x < 1) \times (0.4 \le t \le 1.6)$. Скорость волны была $v = 0.5$, ее полуширина $\mu = 0.1$. Ошибка в C-норме, полученная на последовательности сеток по трем схемам различного порядка точности по x, приведены в таблице 1. Параметры n_x и n_t обозначают число шагов по x и t соответственно. В левой половине таблицы приводятся результаты при одновременной детализации сетки по обеим переменным, а в правой — при фиксированном заведомо мелком шаге по времени.

Таблица 1: Результаты расчета уравнения теплопроводности по схемам различных порядков точности на последовательности неравномерных сеток

n_x	n_t	$q=1$	$q=2$	$q=3$		n_x	n_t	$q=1$	$q=2$	$q=3$
20	40	0.450	0.740	0.526		20	1280	0.316	0.383	0.277
40	80	0.344	0.321	0.116		40	1280	0.279	0.318	0.123
80	160	0.192	0.196	0.050		80	1280	0.185	0.195	0.051
160	320	0.100	0.101	0.013		160	1280	0.098	0.102	0.013
320	640	0.046	0.045	0.003		320	1280	0.045	0.045	0.003

По трем схемам для однородного волнового уравнения рассчитано взаимодействие солитонов с полушириной 0.5 и 0.25, движущихся из начальных положений -0.5 и 0.5. На рис. 1 приведены решения на момент времени $t = 1$, когда после взаимопроникновения солитоны обменялись местами.

Ниже приводятся результаты расчета уравнения Шрёдингера при известном точном решении

$$U = \exp\left(-\frac{it}{2}\right) sech(x).$$

В таблице 2 приведены результаты расчета в области $(0 \le t \le 10) \times (-20 \le x \le 20)$ на последовательности сеток при $\alpha = 0.2$.

Таблица 2: Результаты расчета нелинейного уравнения Шрёдингера на последовательности неравномерных сеток

n_x	n_t	$q=1$	$q=2$	$q=3$		n_x	n_t	$q=1$	$q=2$	$q=3$
20	40	0.193	0.277	0.1701		20	1280	0.199	0.246	0.1807
40	80	0.038	0.028	0.0144		40	1280	0.026	0.016	0.0016
80	160	0.141	0.011	0.0028		80	1280	0.371	0.114	0.0126
160	320	0.022	0.004	0.0005		160	1280	0.090	0.015	0.0031
320	640	0.051	0.002	0.0001		320	1280	0.109	0.003	0.0004

На старте вычислений итерации по нелинейности проводились до достижения различия между итерациями $\epsilon = 10^{-8}$. Результаты, приведенные в таблице 2, также свидетельствуют об очень высокой эффективности компактной схемы.

Таким образом, на примере простых уравнениях показано, как в рамках одного алгоритма удается совместить несколько инструментов повышения эффективности разностных методов. Это повышение порядка точности, применение неравномерных сеток, надежного механизма адаптации сетки к решению и интерполяции, не снижающей порядка точности. Следует заметить, что формальное построение компактных схем

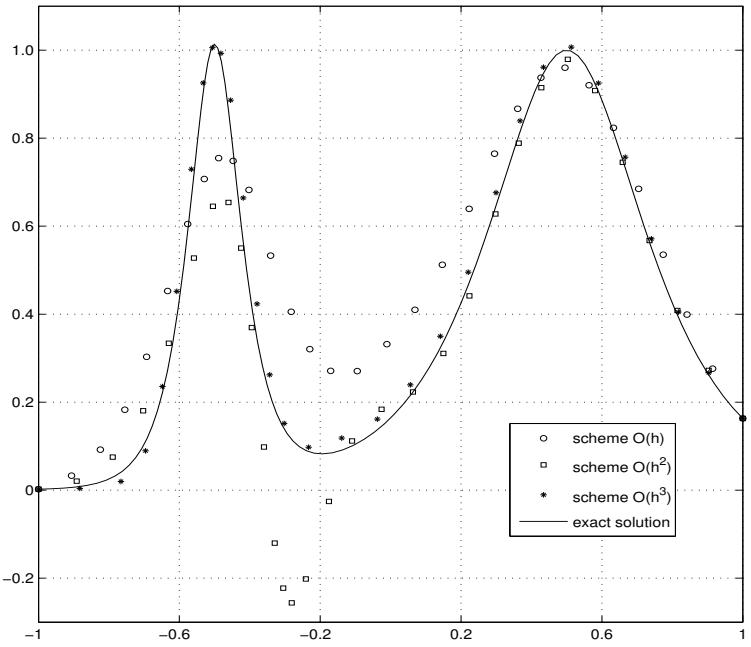


Рис. 1: Результаты расчетов взаимодействия солитонов по схемам различной точности

для аналогичных уравнений с несколькими пространственными переменными также возможно. Однако в многомерном случае прямоугольная неравномерная сетка может быль полезна лишь для специального класса задач (например, для расчета пограничного слоя, для моделирования задач с точечными источниками). В общем случае расположения особенностей решения неколлинеарно одному из семейств координатных линий востребованность таких сеток снижается. В одномерном же случае нет никаких ограничений на класс решений, для которых с успехом может применяться описанная здесь технология высокоточных вычислений.

Список литературы

[1] Кившарь Ю. С., Агравал Г. П. Оптические солитоны. От волоконных световодов к фотонным кристаллам. Москва: Физматлит, 2005.

[2] Akhmediev N. N., Afanasiev V. V. Singularities and special soliton solutions of the cubic-quintic complex Ginsburg-Landau equation // Physical Review E. 1996. V. 53, iss.1, P. 1190–1201.

[3] Lu S., Lu Q., Twizell E. H. Fourier spectral approximation to long-time behaviour of the derivative three-dimensional Ginzburg-Landau equation // J. Comput. Appl. Math. 2007. V. 198, P. 167–186.

[4] Паасонен В. И., Федорук М. П. Компактная диссипативная схема для нелинейного уравнения Шредингера// Вычислительные технологии. 2011. Т. 16, № 6, С. 68–73.

[5] Паасонен В. И., Федорук М. П. Компактная безитерационная схема для нелинейного уравнения Шредингера// Вычислительные технологии.2012. Т. 17, № 3, С. 83–90.

[6] Shu-Sen Xie, Guang-Xing Li, Sucheol Yi. Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation b,2.// Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 2009. V. 198, P. 1052–1061.

[7] Микеладзе Ш. Е. О численном интегрировании уравнений эллиптического и параболического типов// Известия АН СССР. Серия матем. 1941. Т. 5, № 1, С. 57–74.

[8] Паасонен В. И., Федорук М. П. Трехслойная безытерационная схема повышенного порядка точности для уравнения Гинзбурга — Ландау// Вычислительные технологии. 2015. Т. 20, № 3, С. 46–57.

[9] Валлиулин А.Н., Паасонен В.И. Экономичные разностные схемы повышенного порядка точности для многомерного уравнения колебаний // Численные методы механики сплошной среды, 1, № 1, 1970, 34–47.

[10] Паасонен В.И. Компактные схемы для систем уравнений второго порядка с конвективными членами // Вычислительные технологии, 3, № 1, 1998, 55–66.

[11] Dwyer H. A. Grid adaptive for problem in fluid dynamics // AIAA Journal, 22, № 12, 1984, 1705–1712.

Виктор Иванович Паасонен — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: paas@ict.nsc.ru.
Дата поступления — 4 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ШРЁДИНГЕРА И ГИНЗБУРГА — ЛАНДАУ С ПОВЫШЕННЫМ ПОРЯДКОМ ТОЧНОСТИ

В. И. Паасонен[1,2], М. П. Федорук[1,2]

[1] *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.6

В работе обсуждается вопросы применения разностных схем четвертого порядка аппроксимации по 'медленному' времени и второго порядка по эволюционной переменной для численного решения нелинейных уравнений Шрёдингера и Гинзбурга — Ландау. Исследуется устойчивость и диссипативные свойства разностных схем. С целью построения экономичного безитерационного алгоритма используется трехслойная запись формально двухслойной схемы, с аппроксимацией нелинейной правой части уравнения на среднем слое. Приводятся результаты расчетов типичных тестовых задач на последовательности сгущающихся сеток в сравнении с расчетами по схеме второго порядка точности.

Ключевые слова: уравнение Шрёдингера, уравнение Гинзбурга — Ландау, схема повышенной точности, диссипативная схема.

Введение

Рассматривается задача Дирихле или периодическая начально-краевая задача для уравнения Шрёдингера и уравнения Гинзбурга — Ландау(см., например, [1]). В нелинейной оптике уравнение Гинзбурга — Ландау обычно используется в форме

$$i\,\frac{\partial U}{\partial t}+\frac{D}{2}\,\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}+|U|^2\,U=i\,\delta\,U+i\,\varepsilon\,|U|^2\,U+i\,\beta\,\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}+(i\,\mu-\nu)\,|U|^4\,U \tag{1}$$

с комплексной искомой функцией U, зависящей от эволюционной переменной t, которая имеет смысл нормированной длины распространения, и 'медленного' времени x. Здесь i — мнимая единица, коэффициент $D=1$ или $D=-1$ в зависимости от того, нормальна или аномальна дисперсия, а коэффициенты $\delta,\varepsilon,\beta,\mu,\nu$ в правой части вещественны, причем для корректности задачи требуется неотрицательность коэффициента β. В частном случае нулевых коэффициентов в правой части уравнение (1) переходит в нелинейное уравнение Шрёдингера.

Уравнения Шрёдингера и уравнения Гинзбурга — Ландау моделируют процессы, происходящие в волоконно-оптических линях связи, волоконных лазерах и других оптических устройствах (см., например, [2]). Типичные решения таких уравнений имеют вид функции с обширным фоном плавного изменения и отдельных сигналов в виде солитонов, сосредоточенных в узких зонах. Ввиду наличия зон больших градиентов для успешного применения традиционных разностных схем требуется настолько детальная сетка, что процесс вычислений решения даже на современных компьютерах требует больших вычислительных затрат. Для решения таких задач чаще, чем разностные схемы, используются спектральные методы [3], основанные на применении быстрого преобразования Фурье. Они позволяют получить более высокую точность, однако в случае больших задач сталкиваются с серьезными затруднениями при попытках параллельной реализации. Разностные схемы, напротив, перспективны именно в отношении возможности распараллеливания, но обычно имеют более низкую точность. Поэтому одним из актуальных путей для повышения эффективности алгоритмов расчета представляется повышение порядка точности разностных схем. Исследования разностных схем четвертого порядка точности [4, 5, 6] убеждают в перспективности этого направления.

Данная работа посвящена вопросам применения для решения уравнения Гинзбурга — Ландау и уравнения Шрёдингера схем повышенного порядка точности на основе безитерационной технологии, исследованию устойчивости и оценке диссипативных свойств схем и численному исследованию метода в сравнении со схемой второго порядка точности.

1 Разностные схемы различных порядков точности

Для удобства представим уравнение (1) в канонической форме, умножив его на $-i$ и объединив слагаемые правой части. В результате получим уравнение

$$\frac{\partial U}{\partial t} = a\,\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + f(U), \quad f(U) = g(U)\,U, \quad g(U) = \delta + z|U|^2 + w\,|U|^4, \tag{2}$$

где

$$a = \beta + \frac{D}{2}\,i, \quad z = \varepsilon + i, \quad w = \mu + \nu\,i.$$

Формальное отличие уравнения (2) от уравнения Шрёдингера состоит в наличии ненулевой действительной части в коэффициенте при второй производной (в уравнении Шрёдингера коэффициент a чисто мнимый, так как $\beta = 0$) и в более сложной структуре правой части, состоящей из линейной части, кубичной нелинейности и нелинейности пятой степени. Вместе с тем уравнение (2) по форме в точности соответствует также и уравнению теплопроводности, хотя ввиду того, что коэффициенты и решение комплексные, относится к более сложному типу.

Пусть h и τ суть шаги равномерной сетки по x и t соответственно, а Λ - обычный разностный оператор, аппроксимирующий двойное дифференцирование по x. В этих обозначениях классическая разностная схема с весами для уравнения (2) имеет вид

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\tau} = a\,\Lambda(\sigma U^{n+1} + (1-\sigma)U^n) + F^n. \tag{3}$$

Общая формулировка (3) включает в себя различные схемы. Например, при равных весах ($\sigma = 0.5$) имеем схему Кранка-Николсон второго порядка точности по обеим переменным, а при специальном значении веса схемы

$$\sigma = \frac{1}{2} - \frac{1}{12\,K}, \quad K = \frac{a\,\tau}{h^2}, \tag{4}$$

и специальной аппроксимации правой части

$$F^n = \frac{f^{n+1} + f^n}{2} + \frac{h^2}{12}\Lambda f^n$$

получаем классическую схему [7], имеющую погрешность аппроксимации $O(\tau^2 + h^4)$.

Ввиду зависимости правой части от решения схема (3) требует итераций по нелинейности, однако этот недостаток нетрудно ликвидировать, переходя к трехслойной схеме

$$\frac{U^{n+1} - U^{n-1}}{2\,\tau} = a\,\Lambda(\sigma U^{n+1} + (1-\sigma)U^{n-1}) + F^n, \tag{5}$$

которая получается из (3) элементарным удвоением шага τ, и изменяя способ аппроксимации F^n так, чтобы схемы стала линейной относительно решения на верхнем слое. Для этого, например, правую часть можно взять полностью со среднего слоя:

$$F^n = f^n + \frac{h^2}{12}\Lambda f^n, \quad f(U) = (\delta + z|U|^2 + w\,|U|^4)\,U.$$

При этом в выражении (4) для веса схемы следует также заменить τ на 2τ. Аналогично модифицируется в трехслойную безитерационную любая схема с весами, в частности, схема Кранка-Николсон.

Трехслойная схема требует задания начальных профилей решения на двух первых слоях по эволюционной переменной. Поэтому на старте вычислений приходится использовать двухслойную схему и итерационный процесс ее реализации с помощью некоторой линеаризации, например:

$$\frac{V^{k+1} - U^0}{\tau} = a\,\Lambda(\sigma\,V^{k+1} + (1-\sigma)\,U^0) + \frac{f(V^k) + f(U^0)}{2} + \frac{h^2}{12}\Lambda f(U^0),$$

где $k = 0, 1, ...$ — номер итерации, $V^0 = U(0)$ — начальное приближение. На практике для достижения удовлетворительной точности более трех-четырех итераций не требовалось, но если пришлось бы организовывать итерации на каждом слое, то общее время счета увеличилось бы более чем втрое. Чтобы избежать этого, следует предпочесть трехслойную безитерационную схему (5).

2 Дисперсионный анализ устойчивости схем

Исследуем устойчивость двухслойной однородной схемы в линейном приближении. Результат в равной степени относится также и к трехслойной схеме, так как в отсутствие правой части она представляет собой запись той же двухслойной схемы, но с двойным шагом. Дисперсионный анализ устойчивости приводит к выражению для множителя возрастания гармоники $\exp(ikx)$:

$$\rho_k = \frac{1 - 4\,K\,(1-\sigma)\,\lambda_k}{1 + 4\,K\,\sigma\,\lambda_k}, \quad \lambda_k = sin^2\,\frac{k\,h}{2}, \quad K = \frac{a\,\tau}{h^2}. \tag{6}$$

В случае уравнения Гинзбурга — Ландау и уравнения Шрёдингера $a = \beta + i\ D/2$, и это отличает их от уравнения теплопроводности, в котором коэффициент теплопроводности вещественный. В связи с этим в высокоточной схеме для уравнений нелинейной оптики вес σ также комплексный, поскольку он связан алгебраическим соотношением (4) с комплексным параметром K.

Поясним схематично способ исследования неравенства $|\rho_k| \le 1$ и приведем лишь результат, пропуская громоздкие выкладки. Записав выражения σ и K в виде комбинации вещественной и мнимой части и выполнив операции умножения в числителе и знаменателе дроби (6), представим ее в виде отношения комплексных чисел

$$\rho_k = \frac{r + i\,q}{R + i\,Q}.$$

Тогда исследуемое неравенство эквивалентно тому, что квадрат модуля знаменателя не меньше квадрата модуля числителя, т. е.

$$(R - r)(R + r) + (Q - q)(Q + q) \ge 0.$$

Входящие сюда разности и суммы имеют достаточно простой вид, и после сокращения на положительные величины получается неравенство

$$Re\ K + 2\,(2\ Re\ \sigma - 1)\,|K|^2\,\lambda_k \ge 0.$$

Когда k пробегает все номера гармоник, λ_k пробегает множество точек отрезка $(0, 1)$. А так как наше неравенство линейно по λ_k, то следует потребовать его выполнения лишь на концах отрезка, т. е. в нуле и единице. Отсюда ввиду положительности β следует необходимое условие устойчивости Неймана

$$Re\ K + 2\,(2\ Re\ \sigma - 1)\,|K|^2 \ge 0. \tag{7}$$

Ясно, что при вещественном $\sigma \ge 0.5$ устойчивость абсолютна.

В случае схемы повышенной точности для уравнения Гинзбурга — Ландау (и для уравнения теплопроводности) подстановка выражения (4) превращает неравенство (7) в строгое истинное неравенство

$$\frac{2}{3} Re\ K > 0.$$

Поэтому схема повышенной точности для этих уравнений диссипативна, т. е. множители возрастания любой гармоники строго меньше единицы:

$$|\rho_k|^2 = 1 - \frac{8\,\lambda_k\,Re\ K\,(1 - \lambda_k/3)}{|1 + 4\,K\sigma\lambda_k|^2} < 1, \quad (\lambda_k \ne 0).$$

Заметим, что для уравнения Шрёдингера $\beta = Re\ K = 0$, и поэтому любая схема с весами теряет свойство диссипативности. В том числе и схема Кранка-Николсон, и схема четвертого порядка точности не является диссипативной, т. е. для каждой гармоники $|\rho_k| \equiv 1$. Между тем для улучшения качества расчетов, особенно при большом числе шагов по эволюционной переменной, диссипативность представляется весьма желательным свойством схемы.

Диссипативности можно добиться (см. [5]) путем добавления в выражение для веса σ дополнительного слагаемого $c\tau$ со свободным параметром c. Объединяя в одной формуле выражения для веса σ в обеих схемах, запишем его в виде

$$\sigma = \frac{1}{2} + c\,\tau - \frac{p}{12\,K}, \quad K = \frac{a\,\tau}{h^2},$$

где p принимает значения 0 в случае схемы Кранка-Николсон и значение 1 для схемы повышенной точности. При этом порядок точности схем относительно τ не уменьшается, и при положительном c обе схемы становятся диссипативными ввиду неравенства

$$|\rho_k|^2 = 1 - 32\,\frac{c\,\tau\,|K|^2\,\lambda_k^2}{|1 + 4\,K\sigma\lambda_k|^2} < 1.$$

Произвольный параметр c при этом играет роль регулятора степени диссипативности схемы.

3 Результаты численных экспериментов

Схемы для уравнения Шрёдингера сравнивались в численных экспериментах. В таблице 1 приведены результаты расчетов задачи с заранее известным точным решением в виде солитона

$$U(x,t) = \exp\left(-\frac{i\,t}{2}\right)\mathrm{sech}(x).$$

Задача решалась в области $(0 \le t \le 4\pi) \times (-10 \le x \le 10)$. В первых двух столбцах таблицы 1 помещены размеры сетки по x и t, а затем группами по три столбца приведены значения глобальной C-нормы ошибки δ, коэффициента P убывания ошибки при дроблении сетки, а также времени счета T. Результаты в первой тройке столбцов соответствует двухслойной итерационной схеме второго порядка точности, во второй тройке — двухслойной итерационной схеме повышенной точности, в третьей — безитерационной трехслойной схеме четвертого порядка точности. Результаты свидетельствуют о существенном преимуществе высокоточных схем в сравнении со схемой второго порядка точности и о полезности использования безитерационной технологии.

Таблица 1: Результаты решения уравнения Шрёдингера на сгущающихся сетках по схемам второго и четвертого порядков точности

N_x	N_t	δ_2	P_2	T_2	δ_4	P_4	T_4	δ	P	T
20	20	2.4197-00		0.09	8.7966-01		0.11	1.7320-00		0.04
40	80	7.1275-01	3.39	0.17	6.6587-02	13.21	0.19	2.3239-02	74.53	0.06
80	320	2.2153-01	3.22	0.90	6.2449-03	10.66	0.94	1.8797-02	12.36	0.30
160	1280	7.6367-02	2.90	4.31	5.5693-04	11.21	4.54	1.6632-03	11.30	1.47
320	5120	2.6835-02	2.85	24.10	4.9901-05	11.16	24.57	1.441-05	11.31	5.72
640	20480	9.4732-03	2.83	169.32	4.3687-06	11.42	170.76	1.3006-06	11.31	54.48

Для итерационных схем внутренние итерации проводились в данном примере до достижения различия между итерациями $\epsilon = 10^{-8}$ с верхним ограничением до пяти итераций.

Из таблицы 1 видно, что коэффициенты убывания ошибки для обеих схем оказались несколько ниже, чем следовало бы ожидать в соответствии с теоретическим порядком точности. Анализ результатов показывает, что практически наблюдаемые порядки сходимости для схем второго и четвертого порядка аппроксимации составляют приблизительно величины 1.6 и 3.5 соответственно. Авторы полагают, что это связано с влиянием ошибок округления, которые в условиях сильной нелинейности при достаточно малых шагах сетки становятся сравнимыми с аппроксимационной ошибкой. Для подтверждения этого предположения были проведены расчеты той же задачи на более грубых сетках. Соответствующие результаты приведены в таблице 2, из которой видно, что при детализации сетки коэффициент убывания ошибки сначала приближается к теоретическим значениям 2^2 и 2^4, а при дальнейшем уменьшении шага снижается ввиду влияния ошибок округления. Это обычное явление для любых краевых задач, но в задачах с сильной нелинейностью влияние неточности машинной арифметики при детализации сетки наступает быстрее, чем в более спокойных условиях.

Таблица 2: Результаты расчета нелинейной задачи по безитерационным схемам второго и четвертого порядков точности на грубых сетках

N_x	N_t	δ_2	P_2	δ_4	P_4
4	8	1.4541-00		1.1474-00	
8	32	2.0410-00	0.712	1.5821-00	0.725
16	128	2.4684-00	0.827	1.9784-00	0.800
32	512	1.3302-00	1.856	1.1152-01	17.740
64	2048	3.1587-01	4.211	6.6918-03	16.665
128	8192	1.0722-01	2.946	5.7731-04	11.591

С целью определения влияния коэффициента диссипации на точность расчета проведена серия численных экспериментов при различных значениях c для этой же задачи. В таблице 3 приведена зависимость ошибки решения на сетке $Nx \times Nt = 320 \times 1280$ от параметра c для модифицированной схемы Кранка-Николсон и схемы повышенной точности.

Таблица 3: Зависимость ошибки от параметра диссипации для безитерационных схем второго и четвертого порядков точности

c_2	0	-0.2	-0.4	-0.6	-0.8	-1.0
$10^2 \times \delta_2$	2.65	2.37	2.08	1.79	1.52	21.67
c_4	0	0.008	0.016	0.024	0.032	0.04
$10^5 \times \delta_4$	26.29	14.88	7.62	9.32	20.54	32.01

Как и следовало ожидать, масштабы ошибок по схемам второго и четвертого порядков точности существенно различаются. Результаты таблицы 3 свидетельствуют о полезности искусственной диссипации, хотя вопрос о выработке рекомендаций к выбору оптимального параметра c остается открытым. Более того, для схемы второго порядка точности оптимальный параметр c неожиданно оказался в отрицательной области. Очевидно, это обстоятельство свидетельствует о том, что дисперсионный анализ схемы с нулевой правой частью не отражает в полной мере реалии вычислительного процесса. В надежде понять этот неожиданный факт авторами был проведен дисперсионный анализ схем для уравнения Шрёдингера с линеаризованной правой частью, в которой $\omega = |U|^2 > 0$ выступает в качестве 'замороженного' коэффициента. В этом предположении интервал для параметра c, при котором схема остается диссипативной, оказался несколько шире; к положительной оси присоединяется небольшой интервал отрицательных значений, причем оптимальный параметр в данном случае оказался принадлежащим именно отрицательной области.

Схемы для уравнения Гинзбурга — Ландау тестировались на многочисленных точных решениях из обширной коллекции [1], однако здесь приводятся результаты расчетов только одной задачи. Точное решение в расчетной области $(-2 \le x \le 2) \times (0 < t \le 1)$ имеет вид

$$U(x,t) = \alpha(x)\, \exp[i\, (\phi(x) - \omega\, t)], \tag{8}$$

где ω — вещественная постоянная, α и ϕ — вещественные функции, связанные равенством $\phi(x) = d\ \ln(\alpha(x))$, d — так называемый параметр чирпа. Параметры нелинейности пятой степени в правой части уравнения (2) нулевые: $\nu = \mu = 0$.

Условия совместности двух ОДУ для вещественной и мнимой компонент решения удовлетворяются при следующих соотношениях между коэффициентами уравнения (2):

$$d = \frac{\sqrt{9\ S^2 + 8\ H^2} - 3\ S}{2H}, \quad \omega = -\frac{\delta\ (1 - d^2 + 4\ \beta\ d)}{2\ R},$$

где

$$S = 1 + 2\ \varepsilon\ \beta, \quad H = 2\ \beta - \varepsilon, \quad R = d - \beta + \beta\ d^2.$$

При этих условиях функция $\alpha(x)$ однозначно определяется в явной форме

$$\alpha(x) = B\ C\ \mathrm{sech}(B\ x), \quad C = \sqrt{\frac{3\ d\ (1 + 4\beta^2)}{2\ H}}, \quad B = \sqrt{\frac{\delta}{R}}. \tag{9}$$

Задача решалась при значениях параметров $D = 1, \quad \delta = 1, \quad \beta = 1; \quad \varepsilon = 0.25$ на сгущающихся вложенных сетках, начиная с сетки 100×400, с уменьшением шага по h вдвое и по τ в четыре раза.

На рис. 1, 2 приведены результаты расчетов для конечного значения эволюционной переменной $t = 1$, полученные по двум трехслойным безитерационным схемам: схеме Кранка-Николсон и схеме повышенной точности. Значение N на рисунках означает число шагов по x.

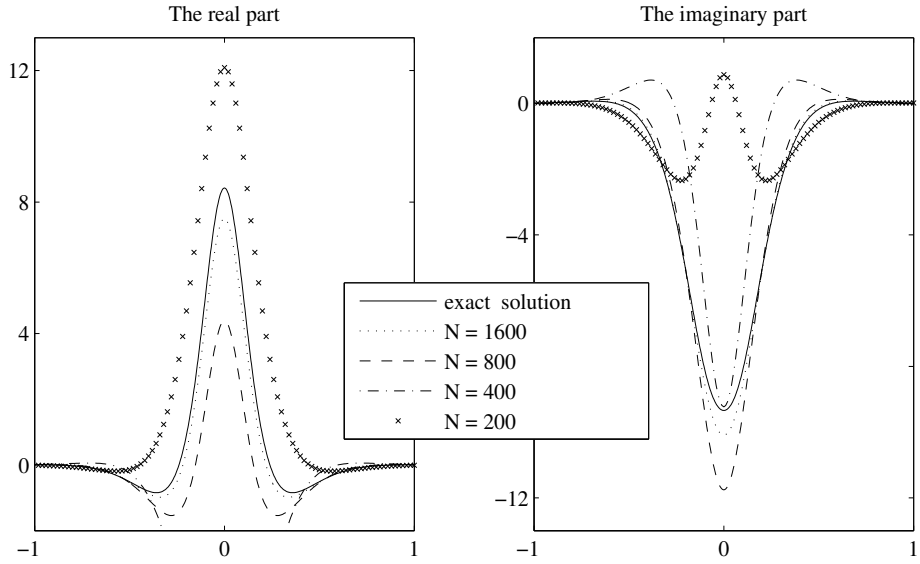


Рис. 1: Результаты расчетов по схеме Кранка-Николсон на последовательности сеток

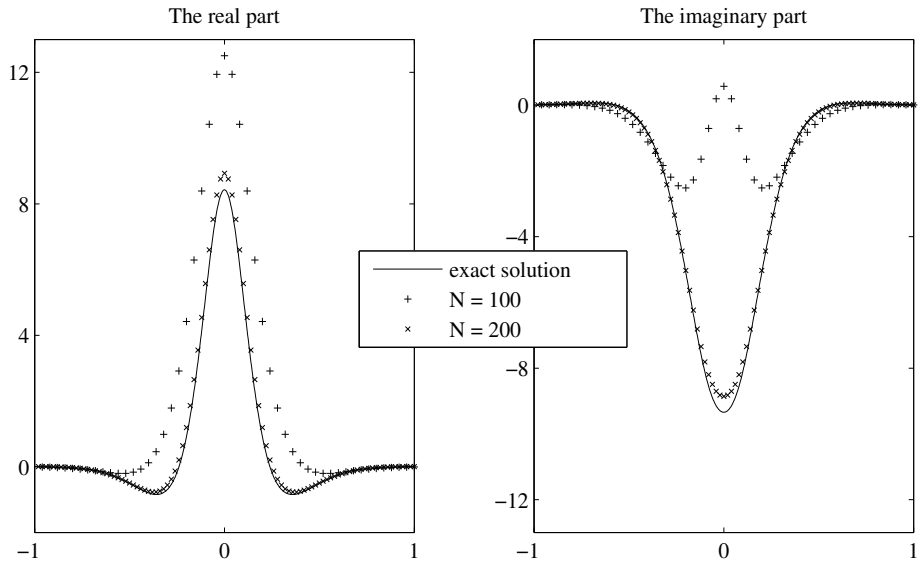


Рис. 2: Результаты расчета по схеме четвертого порядка точности на последовательности сеток

Из рис. 1 видно, что при детализации сетки численное решение по схеме второго порядка сходится к точному довольно медленно. В противоположность этому результаты расчеты по схеме четвертого порядка (рис. 2) сходятся настолько быстро, что при числе шагов $N > 200$ их уже нет необходимости приводить, так как они визуально сливаются с точным решением.

В таблице 4 для обеих схем приведены нормы относительных ошибок в процентах. Из таблицы видно,

что для достижения точности около 3% для схемы второго порядка приемлемой оказалась сетка с $N = 3200$ шагами. В противоположность ей схема повышенной точности дает превосходные результаты с погрешностью менее 0.4% уже на существенно более грубой сетке с $N = 400$ шагами. Заметим также, что соотношение погрешностей при каждом дроблении сетки, равное приблизительно 2^q для схем точности $O(h^q)$ ($q = 2$ или $q = 4$), подтверждает соответствие результатов теоретически ожидаемым порядкам точности.

Таблица 4: Относительная ошибка при численном решении уравнения Гинзбурга — Ландау

Число шагов N	100	200	400	800	1600	3200
Ошибка δ_2	162.8	86.26	133.43	37.41	9.47	2.72
Ошибка δ_4	85.25	5.52	0.35	2.16E-2	1.35E-3	8.41E-5

Список литературы

[1] Akhmediev N. N., Afanasiev V. V. Singularities and special soliton solutions of the cubic-quintic complex Ginsburg-Landau equation // Physical Review E. 1996. V. 53, iss.1, P. 1190–1201.

[2] Кившарь Ю. С., Агравал Г. П. Оптические солитоны. От волоконных световодов к фотонным кристаллам. Москва: Физматлит, 2005.

[3] Lu S., Lu Q., Twizell E. H. Fourier spectral approximation to long-time behaviour of the derivative three-dimensional Ginzburg-Landau equation // J. Comput. Appl. Math. 2007. V. 198, P. 167–186.

[4] Shu-Sen Xie, Guang-Xing Li, Sucheol Yi. Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation b,2.// Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 2009. V. 198, P. 1052–1061.

[5] Паасонен В. И., Федорук М. П. Компактная диссипативная схема для нелинейного уравнения Шредингера// Вычислительные технологии. 2011. Т. 16, № 6, С. 68–73.

[6] Паасонен В. И., Федорук М. П. Компактная безитерационная схема для нелинейного уравнения Шредингера// Вычислительные технологии.2012. Т. 17, № 3, С. 83–90.

[7] Микеладзе Ш. Е. О численном интегрировании уравнений эллиптического и параболического типов// Известия АН СССР. Серия матем. 1941. Т. 5, № 1, С. 57–74.

Виктор Иванович Паасонен— к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительных технологий СО РАН, доцент Новосибирского государственного университета; e-mail: paas@ict.nsc.ru;
Михаил Петрович Федорук— д.ф.-м.н., зав. лабораторией Института вычислительных технологий СО РАН, Ректор Новосибирского государственного университета; e-mail: mife@ict.nsc.ru.
Дата поступления — 4 мая 2017 г.

О ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДА ФИКТИВНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В РЕШЕНИИ ЗАДАЧ О ВИБРАЦИИ ШТАМПОВ, ПЛОСКИХ ЖЕСТКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ И ПОЛОСТЕЙ

А. В. Павлова

Кубанский государственный университет, 350040, Краснодар

УДК 539.3

Работа посвящена развитию методов решения интегральных уравнений (ИУ) и систем ИУ смешанных динамических задач теории упругости, задаваемых в односвязных областях сложной формы. Представлено обобщение метода фиктивного поглощения на случай невыпуклой в плане области, занимаемой дефектом или штампом. Указанный метод позволяет описывать решения не только внутри, но и в окрестности границ области контакта и может быть использован при решении контактных задач о вибрации штампов, полостей или жестких включений произвольной в плане формы. Для областей сложной конфигурации предполагается возможным представление их в виде объединения выпуклых ограниченных замкнутых областей, возможно с общими граничными множествами. Предлагается модификация метода в части подбора базисных функций, присутствующие в решении лишь под знаками операторов, в качестве последних выбираются производные дельта-функций, что упрощает построение решения.

Ключевые слова: метод фиктивного поглощения, интегральное уравнение, осциллирующее ядро, область сложной конфигурации, факторизация.

Построение моделей поведения деформируемых сред, в том числе структурно-неоднородных, подверженных вибрационным воздействиям, приводит к смешанным динамическим задачам. Для исследования последних необходимо дальнейшее развитие подходов к решению систем интегральных уравнений, порождаемых такими задачами.

Метод фиктивного поглощения может быть применен для решения интегральных уравнений (ИУ) и систем ИУ смешанных динамических задач теории упругости, задаваемых в односвязных областях сложной формы. К подобным уравнениям приводят контактные задачи о колебании штампов на поверхности упругой среды, а также вибрации внутренних дефектов: полостей и плоских жестких включений, имеющих произвольную форму.

В основе развиваемого подхода, названного методом фиктивного поглощения [1, 2], лежит преобразование символа ядра ИУ или матрицы-символа системы ИУ (СИУ), позволяющее перейти от решения ИУ с медленно убывающим и сильно осциллирующим ядро к ИУ с экспоненциально убывающими с ростом аргумента ядром. Задачам для обладающих сильным затуханием сред соответствует именно такое поведение ядер ИУ. А для решения интегральных уравнений подобных задач имеется большое количество хорошо зарекомендовавших себя приближенных методов.

Применение метода фиктивного поглощения дает возможность выделять составляющие решения с осцилляцией, оставляя неосциллирующую функцию в качестве неизвестной. Далее решение исходной задачи строится посредством обратных преобразований. Предлагаемая схема метода, в отличие от развитой в [2], использует в качестве базисных функций производные δ-функций Дирака с носителями в граничных множествах рассматриваемых областей. Более сложный вид используемых функций обеспечивает в данном случае представление решения в более удобной форме.

Рассмотрим общую схему метода для решения СИУ в области произвольной конфигурации Ω. При этом полагается, что область контакта Ω, возможно, невыпуклая, представляет собой объединение выпуклых

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-41-230184_р).

ограниченных замкнутых областей $\Omega = \bigcup\limits_{m=1}^{M} D_m$, $M < \infty$. Общими у D_m могут быть лишь граничные множества S_k. Тогда вместо уравнения можно рассматривать систему

$$\mathbf{K}_m q_m = \sum_{m=1}^{M} K_m q_m = f_s(x_1, x_2), \quad s = \overline{1, M}, \tag{1}$$

$$K_m q_m = \iint\limits_{D_m} k(x_1 - \xi_1, x_2 - \xi_2)\, q_m(\xi_1, \xi_2)\, \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2, \quad (x_1, x_2) \in D_m,$$

$$k(x_1, x_2) = \frac{1}{4\pi^2} \int\limits_{\Gamma_1} \int\limits_{\Gamma_2} K(\alpha_1, \alpha_2) \exp(-i\alpha_1 x_1 - i\alpha_2 x_2)\, \mathrm{d}\alpha_1 \mathrm{d}\alpha_2, \quad \alpha_1^2 + \alpha_2^2 = \alpha^2.$$

Во внутренних точках соответствующих областей $O_m \in D_m$ с координатами a_m, b_m введем локальные системы координат $x_1^m O_m x_2^m$, оси которых параллельны осям $x_1 O x_2$. Уравнения границ S_m в системе $x_1 O x_2$ описываются функциями $R_m = R_m(\psi)$.

В соответствии со схемой метода фиктивного поглощения [1, 2] строится функция

$$K_0(\alpha) = K(\alpha)^{-1}(\alpha), \quad \Pi(\alpha) = E_N(\alpha^2)\, Q_N^{-1}(\alpha^2) \equiv \prod_{k=1}^{N} (\alpha^2 - z_k^2)(\alpha^2 - p_k^2)^{-1}.$$

Здесь через p_k и z_k соответственно обозначены полюса и нули $K(\alpha)$, $p_k, z_k \in R$, $K_0(\alpha)$ соответствует символу ядра уравнения для среды с сильным поглощением.

Далее решение ищется в форме $q(x_1, x_2) = p(x_1, x_2) + \varphi(x_1, x_2)$, где вводится следующая вспомогательная функция φ:

$$\varphi^s(x_1, x_2) = \sum_{k=1}^{N} G_k(-\Delta) \int\limits_0^{2\pi} \delta[x_1 - a_s - R_s(\psi)\cos\psi]\, \delta[x_2 - b_s - R_s(\psi)\sin\psi]\, g_{ks}(\psi)\, \mathrm{d}\psi,$$

$$G_k(\alpha^2) = (\alpha^2 - p_1^2) \ldots (\alpha^2 - p_{k-1}^2)(\alpha^2 - p_{k+1}^2) \ldots (\alpha^2 - p_N^2),$$

Δ — двумерный оператор Лапласа, g_{ks} — некоторые подлежащие определению однозначные функции.

Здесь используется модификация метода фиктивного поглощения в части выбора базисных вспомогательных функций. Проделав ряд преобразований, решение (1) можно представить в виде

$$q(x_1, x_2) = \mathrm{V}^{-1} \Pi^{-1}(\alpha, N)\, \mathrm{V}\left[\varphi_2 + K_0^{-1} f(x_1, x_2) - K_0^{-1} \mathrm{P}_{[\Omega]} K_0 \varphi_2\right], \tag{2}$$

$$\varphi_2 = \mathrm{V}^{-1} \sum_{k=1}^{N} \sum_{s=1}^{M} E_N(p_k^2)(\alpha^2 - p_k^2)^{-1} e^{i(a_s\alpha_1 + b_s\alpha_2)} \int\limits_0^{2\pi} g_{ks}(\psi)\, e^{i\alpha R(\psi)\cos(\psi - \gamma)} d\psi, \tag{3}$$

V, V^{-1} — соответственно операторы прямого и обратного двумерного преобразований Фурье, $\mathrm{P}_{[\Omega]}$ — проектор на область Ω.

Дополнительное выделение у функции φ_2 составляющих с носителем в области D_s $\varphi_{2s}^{+} = \varphi_2(x_1, x_2)$, $(x_1, x_2) \in D_s$, и вне ее $\varphi_{2s}^{-} = \varphi_2(x_1, x_2)$, $\varphi_2^{-} = \varphi_2(x_1, x_2) - \sum\limits_{s=1}^{M} \varphi_{2s}^{+}$, $s = \overline{1, M}$, позволяет проделать дальнейшие упрощения в (3). Обозначив $q_s(x_1, x_2) \equiv q(x_1, x_2, D_s) = q(x_1, x_2)$, $(x_1, x_2) \in D_s$, (2) можно переписать следующим образом:

$$q(x_1, x_2, D_s) = \mathrm{V}^{-1} \Pi^{-1}(\alpha, N)\, F(\alpha_1, \alpha_2, D_s),$$

$$F(\alpha_1, \alpha_2, D_s) = \mathrm{VP}_{[D_s]}\left[K_0^{-1} f - K_0^{-1} \mathrm{P}_{[\Omega]} \mathrm{K}_0 \varphi_2^{-}\right] + \mathrm{V}\varphi_{2s}^{-}.$$

Подлежащие определению g_{ks} находятся из системы [1]

$$F(\alpha_1, \alpha_2, D_s) = 0, \quad \alpha^2 = z_n^2, \quad n = \overline{1, N}.$$

Описанная модификация метода фиктивного поглощения для решения ИУ в областях сложной конфигурации применима для решения СИУ

$$\mathbf{K}_m\mathbf{q}_m = \sum_{m=1}^{M} \iint\limits_{D_m} \mathbf{k}\left(x_1-\xi_1, x_2-\xi_2\right)\mathbf{q}_m\left(\xi_1,\xi_2\right)\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2 = \mathbf{f}_s\left(x_1,x_2\right), \tag{4}$$

$$(x_1,x_2)\in D_m, \quad s=\overline{1,M},$$

$$\mathbf{k}\left(x_1,x_2\right) = \frac{1}{4\pi^2}\int\limits_{\Gamma_1}\int\limits_{\Gamma_2}\mathbf{K}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)\exp\left(-i\alpha_1x_1 - i\alpha_2x_2\right)\mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2.$$

Решение строится в предположении, что система разрешима для вектора-функции $\mathbf{f}\left(x_1,x_2\right)\in {}^1\left(\Omega\right)$, контуры интегрирования Γ_1, Γ_2 определяются условиями излучения, а элементы $\mathbf{K}\left(\alpha_1,\alpha_2\right) = \left\|K_{ij}\right\|_{i,j=1}^{N}$ обладают свойствами, описанными в [1, 2], в частности $K_{ij}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)$ допускают представление вида, где

$$K_{ij}\left(\alpha_1,\alpha_2\right) = \sum_{k=1}^{m(i,j)} P_{ij}^k\left(\alpha_1,\alpha_2\right)R_{ij}^k\left(\alpha\right), \quad m\left(i,j\right)<\infty,$$

полиномы $P_{ij}^k\left(\alpha_1,\alpha_2\right)$ зависят от переменных α_1, α_2, $R_{ij}^k\left(\alpha\right)$ — такие аналитические функции переменной α, что $\det\mathbf{K}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)=\Delta\left(\alpha\right)$.

Следуя схеме метода фиктивного поглощения [1], построим матрицу-функцию

$$\mathbf{K}_0\left(\alpha_1,\alpha_2\right) = \mathbf{K}_0\left(\alpha_1,\alpha_2\right)\mathbf{\Pi}^{-1}\left(\alpha_1,\alpha_2\right).$$

Здесь матрица-функция $\mathbf{\Pi}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)\approx\mathbf{E}+\mathbf{O}\left(\alpha^{-1}\right)$, $\mathbf{E}$ — единичная матрица, у элементов матрицы $\mathbf{K}_0\left(\alpha_1,\alpha_2\right)$ на вещественной оси нет особенностей и она имеет такое же асимптотическое поведение на бесконечности, что и $\mathbf{K}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)$. Решение СИУ отыскивается в виде $\mathbf{q}\left(x_1,x_2\right)=\mathbf{p}\left(x_1,x_2\right)+\boldsymbol{\varphi}\left(x_1,x_2\right)$, $\mathbf{p}=\{p_n\}$, $\boldsymbol{\varphi}=\{\varphi_n\}$, где $\boldsymbol{\varphi}\left(x_1,x_2\right)=\sum\limits_{s=1}^{M}\boldsymbol{\varphi}^s\left(x_1,x_2\right)$. При этом необходимо потребовать, чтобы компоненты $\boldsymbol{\varphi}$ удовлетворяли условиям $\mathrm{V}\boldsymbol{\varphi}^s\left(x_1,x_2\right)=\mathrm{V}\mathbf{q}\left(x_1,x_2,D_s\right)$ при $\left(\alpha_1,\alpha_2\right)\in P_{jn}$, P_{jn} — полярные множества Π_{ij} элементов $\mathbf{\Pi}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)$. Тогда $P_n\left(\alpha_1,\alpha_2\right)=\mathrm{V}p_n\left(x_1,x_2\right)=0$ для $\left(\alpha_1,\alpha_2\right)\in P_{jn}$.

Введя неизвестную $\mathbf{t}\left(x_1,x_2\right)=\mathrm{V}^{-1}\mathbf{\Pi}\left(\alpha,N\right)\mathrm{V}\mathbf{p}\left(x_1,x_2\right)$, следуя схеме метода, получим

$$K_0\mathbf{t} = \mathbf{f}\left(x_1,x_2\right) - K_0\mathrm{V}^{-1}\mathbf{\Pi}\left(\alpha,N\right)\mathrm{V}\boldsymbol{\varphi},$$

где матрица-символ ядра оператора K_0 представляется как $\mathbf{K}_0=\mathbf{K}\mathbf{\Pi}^{-1}$.

Разделяя классическую $\boldsymbol{\varphi}_2$ (имеющую носитель во всей плоскости) и обобщенную $\boldsymbol{\varphi}_0$ (с носителем в Ω) составляющие $\boldsymbol{\varphi}$, $\mathbf{t}$ можно представить в виде

$$\mathbf{t}\left(x_1,x_2\right) = K_0^{-1}\mathbf{f}\left(x_1,x_2\right) - \boldsymbol{\varphi}_0\left(x_1,x_2\right) - K_0^{-1}\mathrm{P}_{[\Omega]}K_0\boldsymbol{\varphi}_2.$$

Используя представление

$$\boldsymbol{\varphi}_2^- = \boldsymbol{\varphi}_2\left(x_1,x_2\right) - \sum_{s=1}^{M}\boldsymbol{\varphi}_{2s}^+, \quad \boldsymbol{\varphi}_{2s}^- = \boldsymbol{\varphi}_2\left(x_1,x_2\right), \quad \left(x_1,x_2\right)\notin D_s, \quad \boldsymbol{\varphi}_{2s}^+ = \boldsymbol{\varphi}_2\left(x_1,x_2\right), \quad \left(x_1,x_2\right)\in D_s,$$

решение СИУ (4) можно выразить

$$\mathbf{q}\left(x_1,x_2,D_s\right) = \mathrm{V}^{-1}\mathbf{\Pi}^{-1}\left(\alpha,N\right)\left\{\mathrm{VP}_{[D_s]}\left[K_0^{-1}\mathbf{f} - K_0^{-1}\mathrm{P}_{[\Omega]}K_0\boldsymbol{\varphi}_2^-\right] + \mathrm{V}\boldsymbol{\varphi}_{2s}^+\right\}.$$

При этом должны выполняться условия [1]

$$\mathrm{VP}_{[D_s]}\left[K_0^{-1}\mathbf{f} - K_0^{-1}\mathrm{P}_{[\Omega]}K_0\boldsymbol{\varphi}_2^-\right] + \mathrm{V}\boldsymbol{\varphi}_{2s}^+ = 0, \quad \left(\alpha_1,\alpha_2\right)\in Z_{jn},$$

где Z_{jn} — нулевые множества Π_{ij} элементов $\mathbf{\Pi}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)$.

В окончательном решении, как и в случае решения ИУ, введенная вектор-функция $\boldsymbol{\varphi}$ присутствует только под знаками интегральных операторов. Введенные неизвестные на стыковочных границах D_s взаимно уничтожаются.

В работе [3] описанная модификация метода фиктивного поглощения применена для решения интегрального уравнения задачи об установившихся колебаниях круглого штампа на поверхности упругого слоя при наличии системы вертикальных включений, а в работе [4] — для задачи, описывающей вибрации упругого слоя под действием поверхностной нагрузки и системы жестких горизонтальных включений, в осесимметричной постановке.

Элементы матриц-символов ядер интегральных уравнений для задач об установившихся колебаниях полуограниченной упругой среды, вызванных вибрациями внутренних полостей-трещин или покрытий, моделируемых пластинами Кирхгофа, не удовлетворяют условию убывания на бесконечности. В таких случаях можно осуществить регуляризацию K, например, вынося из обеих частей уравнения дифференциальный оператор. Такое преобразование уравнения приводит к ИУ с классической функцией ядра, решение которого строится в соответствии с описанной схемой.

Список литературы

[1] Бабешко В.А. Обобщенный метод факторизации в пространственных динамических смешанных задачах теории упругости. М.: Наука, 1984. 26 с.

[2] Ворович И.И., Бабешко В.А., Пряхина О.Д. Динамика массивных тел и резонансные явления в деформируемых средах. М.: Научный мир, 1999. 248 с.

[3] Капустин М.С., Павлова А.В., Рубцов С.Е., Телятников И.С. К моделированию взаимодействия фундамента с деформируемой грунтовой средой // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества (ЧЭС). 2015. № 3. С. 44–51.

[4] Капустин М.С., Павлова А.В., Рубцов С.Е., Телятников И.С. К исследованию реакции деформируемой грунтовой среды на воздействие поверхностного и внутренних вибрационных источников // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества (ЧЭС). 2016. № 3. С. 37–43.

Павлова Алла Владимировна — д-р. физ.-мат. наук, профессор кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета;
e-mail: pavlova@math.kubsu.ru.
Дата поступления — 12 мая 2017 г.

К КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНЫМ МОДЕЛЯМ КОНВЕКЦИОННО-ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

А. В. Павлова, С. Е. Рубцов

Кубанский государственный университет, 350040, Краснодар

УДК 510.67:554

Работа посвящена развитию методов моделирования механизмов переноса и рассеяния субстанций, разработке и сопоставлению моделей, основанных на применении конечно-разностных методов решения задач распространения примесей, а также клеточно-автоматных (КА) моделей указанных процессов. В основу модели распространения примеси в атмосфере положена двумерная КА диффузия с окрестностью Марголуса (ТМ-диффузия), распространенная на трехмерное пространство, добавлены процессы переноса субстанций под действием ветра и взаимодействия с препятствиями (строения, неровности рельефа). При отсутствии препятствий перенос осуществлен синхронным сдвигом состояний клеток вдоль координатных осей с вероятностью, пропорциональной соответствующим составляющим скорости ветра. Сдвиг добавляется третьим тактом к ТМ-диффузии, при наличии препятствий после сдвига выполняется еще один такт. Для сравнения с результатами конечно-разностного моделирования реализован переход от булевых значений к непрерывным функциям распределения примеси путем осреднения значений состояний клеток по задаваемой окрестности.

Ключевые слова: пространственная модель, примесь, диффузия, клеточно-автоматные модели, препятствие, перенос.

Результаты изучения процессов миграции субстанций востребованы в различных областях научной и хозяйственной деятельности. Работа направлена на развитие методов моделирования механизмов переноса и рассеяния субстанций, разработку и сопоставлению моделей, основанных на применении конечно-разностных методов решения задач распространения примесей, а также клеточно-автоматных (КА) моделей указанных процессов. КА моделирование позволяет расширить возможности исследования миграционных и диффузионных процессов в водной среде и атмосфере.

В основу модели распространения примеси в атмосфере положена двумерная КА диффузия с окрестностью Марголуса (ТМ-диффузия) [1], распространенная на трехмерное пространство. Используемые КА подходы дают возможность моделировать сложные процессы посредством относительно простых функций перехода [1, 2, и др.], они могут быть использованы в дополнение к хорошо зарекомендовавшим себя в гидродинамике математическим моделям и развитым численным методам, используемым для изучения рассеяния загрязняющих субстанций [3].

Двумерные клеточно-автоматные модели течения жидкости и диффузии примесей, ранее реализованные авторами [4, 5] получили дальнейшее развитие в настоящей работе. Пространственная область аналогично плоскому случаю представляется клеточным массивом, в множестве имен которого $M = \{(i,j,k) :\ i,j,k = 0,\dots,N\}$ выделяются подмножества имен с четными $M_1 = \{(i,j,k) :\ i \bmod 2 = j \bmod 2 = k \bmod 2 = 0\}$ и нечетными $M_2 = \{(i,j,k) :\ i \bmod 2 = j \bmod 2 = k \bmod 2 = 1\}$ индексами. Для каждого имени $(i,j,k) \in M$ шаблон

$$T(i,j,k) = \{(i,j,k)\,, (i,j+1,k)\,, (i+1,j+1,k)\,, (i+1,j,k)\,,$$

$$(i,j,k+1)\,, (i,j+1,k+1)\,, (i+1,j+1,k+1)\,, (i+1,j,k+1)\}$$

задает локальную конфигурацию в виде блока из восьми кубиков

$$S(i,j) = \{(u_1,(i,j,k))\,, (u_2,(i,j+1,k))\,, (u_3,(i+1,j+1,k))\,,$$

$$(u_4,(i+1,j,k))\,, (u_5,(i,j,k+1))\,, (u_6,(i,j+1,k+1))\,,$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-41-230175_р).

$$(u_7, (i+1, j+1, k+1)), (u_8, (i+1, j, k+1))\}.$$

Функционирует клеточный автомат в двухтактном синхронном режиме. На первом шаге каждой итерации, подразделяемой на два такта, к четным блокам применяется базовая подстановка, на втором — соответственно к нечетным. В результате подстановки в клетках блока с вероятностью p реализуется поворот состояний вокруг одной из трех осей по часовой стрелке и с вероятностью $(1-p)$ — против часовой стрелки. При этом в каждую подстановку с целью выбора оси поворота блока вводится контекстная клетка (x_q, m_q), для определения его направления — контекстная клетка (x_p, m_p). Контекстная клетка (x_t, m_t) служит для управления чередованием четного и нечетного тактов. Контекстные подстановки можно описать следующим образом:

$$\Theta_q:\ (x,\ m_q) \to (\alpha_q, m_q);$$

$$\Theta_p:\ (x,\ m_p) \to (\alpha_p, m_p);$$

$$\Theta_t:\ (x,\ m_t) \to (\alpha_t, m_t),$$

где

$$\alpha_p = \begin{cases} 1,\ \text{rand} < p; \\ 0,\ \text{rand} \geqslant p, \end{cases} \qquad \alpha_t = \begin{cases} 1,\ (i,j) \in M_1; \\ 0,\ (i,j) \in M_2, \end{cases} \qquad \alpha_q = \begin{cases} X,\ \text{rand} < q; \\ Y,\ q \leqslant \text{rand} < 2q; \\ Z,\ \text{rand} \geqslant 2q, \end{cases} \qquad q \leqslant \frac{1}{3}.$$

Так как атмосферные процессы можно считать квазигоризонтальными [3] и горизонтальные коэффициенты диффузии превышают коэффициент диффузии в вертикальном направлении, вероятность выбора осей X или Y меньше, чем оси Z. Выполнение законов сохранения (массы, импульса и энергии) обеспечивается формулировкой правил перемещения и столкновения. Полная система подстановок не приводится в силу громоздкого вида.

В случае, когда граница рассматриваемой области имеет сложную конфигурацию, а также при наличии разного рода препятствий внутри области при использовании конечно-разностных методов возникают определенные трудности. Применение КА моделей позволяет этих трудностей избежать.

При моделировании препятствий вместе с массивом состояния атмосферы $U(i,j,k)$ с элементами значений 0 или 1, соответствующими отсутствию или наличию примеси, в классическую модель ТМ-диффузии, введен массив $P(i,j,k)$, описывающий расположения препятствий на клеточно-автоматной решётке, с аналогичными значения элементов (0 соответствует отсутствию, 1 — наличию препятствия). Функционирует КА в четырехтактном синхронном режиме.

После определения оси вращения аналогично классическому случаю на первом такте четные блоки разбиения массива $U(i,j,k)$ с заданной вероятностью p поворачиваются на $\pi/2$ по часовой стрелке и с вероятностью $(1-p)$ — против часовой стрелки. На втором такте осуществляется сравнение значений элементов массива $U(i,j,k)$ и соответствующих значений элементов $P(i,j,k)$. В случае, когда оба сравниваемых значения равны единице $U(i,j,k) = P(i,j,k) = 1$, производится обратный поворот содержащего клетку (i,j,k) блока. На третьем и четвертом тактах этот же алгоритм выполняется для блоков нечетного разбиения.

Если препятствия нет, перенос выполняется путем синхронного сдвига вдоль координатных осей состояний клеток массива $U(i,j,k)$ с вероятностью, пропорциональной составляющим вектора скорости ветра. Синхронным сдвиг производится третьим тактом после двухтактной ТМ-диффузии. При этом основную проблему составляет выбор коэффициента пропорциональности.

При наличии препятствия следует выполнить еще один такт после сдвига, необходимо сопоставить значения соответствующих элементов массивов $U(i,j,k)$ и $P(i,j,k)$. Если $U(i,j,k) = P(i,j,k) = 1$, случайным образом производится перенос значения $U(i,j,k) = 1$ в ближайшую ячейку, имеющую нулевое значение.

С помощью изложенного подхода произведены численные эксперименты, исследована пространственно-временная структура распределения примеси. Выполнен переход от булевых к непрерывным функциям, описывающим распределения концентрации примеси, путем осреднения по заданной пользователем окрестности значений состояния клеток. Путем сопоставления характеристик КА (начального состояния, размеров КА, правил переходов, вероятностей их использования) с данными простых конечно-разностных моделей осуществляется подбор параметров для более сложных КА моделей.

Результаты изучения пространственно-временного распределения и закономерностей распространения загрязняющих примесей в воздушной и водной средах чрезвычайно важны для оценки экологической ситуации и тенденций ее изменения. Применение клеточно-автоматных методов моделирования диффузионно-миграционных процессов может быть использовано в качестве дополнения опробованных численно-аналитических методик исследования распространения загрязнителей, хотя при сопоставлении КА-модельных

величин физическим характеристикам процесса зачастую возникают трудности. На сегодняшний день проблемы масштабирования КА моделей не до конца решены, однако их исследователи предпринимают попытки корректной формализации перехода от физического описания процессов к их КА-представлению, так в работах [6, 7] представлены общие принципы сопоставления физических и модельных величин.

Список литературы

[1] Toffolli T., Margolus N. Cellular Automata Machines. USA: MIT Press, 1987. 279 p.

[2] Бандман О.Л. Клеточно-автоматное моделирование пространственной динамики. Новосибирск: СО РАН. 2000. 113 с.

[3] Марчук, Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 315 с.

[4] Рубцов С.Е., Павлова А.В., Сунозов А.А. К клеточно-автоматному моделированию процесса диффузии и взаимодействия субстанций // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. 2014. № 2. С. 30–34.

[5] Рубцов С.Е., Павлова А.В., Шкурат И.И. О клеточно-автоматных моделях процесса течения жидкости при наличии препятствий и примеси // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. 2014. № 7. С. 39–44.

[6] Бандман О.Л. Отображение физических процессов на их клеточно-автоматные модели // Вестник Томского государственного университета. 2008. № 2(3). С. 1–13.

[7] Бандман О.Л. Инварианты клеточно-автоматных моделей реакционно-диффузионных процессов // Прикладная дискретная математика. 2012. № 3(17). С. 108–120.

Павлова Алла Владимировна — д-р физ.-мат. наук,
профессор кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета;
e-mail: pavlova@math.kubsu.ru;
Рубцов Сергей Евгеньевич — канд. физ.-мат. наук,
доцент кафедры математического моделирования Кубанского государственного университета;
e-mail: rub_serg@mail.ru.
Дата поступления — 15 мая 2017 г.

ВАРИАЦИОННАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ КОРРЕКТНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ПРЯМЫХ, СОПРЯЖЕННЫХ И ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ

В. В. Пененко

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.63

Для построения корректных методов используются вариационные принципы со строгими и слабыми ограничениями. При их формулировке мы исходим из того, что математические модели и данные мониторинга представляют описание одних и тех же исследуемых объектов, но разными средствами. Вариационные принципы предоставляют универсальный инструмент для согласования пространственно-временных масштабов изучаемых процессов и объединения всех компонентов технологии моделирования. Для построения численных моделей используется концепция сопряженных интегрирующих множителей в сочетании с методами расщепления операторов моделей процессов и декомпозиции функционалов вариационного принципа. В результате получается так называемая «бесшовная» технология математического моделирования, согласовывающая алгоритмы решения прямых, сопряженных и обратных задач. Эффекты регуляризации и корректность этих алгоритмов обеспечиваются свойствами безусловной корректности сопряженных задач, полученных с использованием интегрирующих множителей. Особую роль в этой технологии играют прямые алгоритмы последовательного усвоения доступных данных наблюдений с оценкой неопределённостей.

Ключевые слова: вариационный принцип, строгие и слабые ограничения, дискретно-аналитические аппроксимации, сопряженные интегрирующие множители, корректность

Введение

Здесь мы представим некоторые аспекты построения корректных методов для решения условно-корректных, сопряженных и обратных задач. Их теоретическую основу составляют вариационные принципы Эйлера—Лагранжа для минимизации целевых функционалов с ограничениями и метод множителей Лагранжа для учета этих ограничений [2].

Принципиальные положения этого подхода разрабатывались для четырехмерных задач гидротермодинамики геофизических жидкостей (атмосфера, водные объекты) и охраны окружающей среды в условиях природных и антропогенных воздействий. Для их решения используются математические модели и данные мониторинга исследуемых процессов.

К числу основных факторов, приводящих к условной корректности постановок и методов решения задач, относятся неопределенности как в формулировке самой модели исследуемых процессов, так и в задании входных данных, начальных и граничных условий для их решения. Особенно это проявляется в тех случаях, когда в качестве входной информации используются данные мониторинга процессов, а входные данные и параметры моделей, функции состояния моделей и функции неопределенностей оцениваются посредством решения обратных задач.

1 Организация методов с оценками неопределённостей

Для работы в условиях неопределенностей в моделях и данных универсальный математический инструмент обеспечивают вариационные принципы в формулировке со слабыми ограничениями. При этом целевой функционал определяет меру отклонений между результатами расчетов по моделям процессов и результатами

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00137) и Программ фундаментальных исследований РАН I.33П и II.2П/1.3.

мониторинга их реального поведения в некоторой, удобной для вычислений и физического представления, энергетической норме. Математическая модель выступает в роли ограничений на класс функций состояния и как связь между функциями состояния, параметрами и входными данными, а также с функциями неопределенностей. Объединение моделей с целевыми функционалами осуществляется с помощью метода распределенных в пространстве и времени множителей Лагранжа Он дает возможность при работе с многомерными моделями процессов учитывать дополнительные условия и связи между искомыми и входными объектами моделей, не меняя их внутренней структуры. Это удобно для организации сложных вычислительных технологий. Для их определения вариационный принцип дает систему соответствующих сопряженных уравнений.

Заметим, что в прикладных задачах вместо термина "множитель Лагранжа" используется термин "функция ценности" целевого функционала по отношению к его содержанию [3, 4]. Целевые функционалы подлежат оценке в пространстве функций состояния. Поэтому система моделирования строится так, чтобы обеспечить согласование решений прямых, сопряженных и обратных задач.

Таким образом, из вариационного принципа получаются три вида искомых функций: функции состояния, сопряженные функции и функции неопределённостей моделей. Заметим, что выбор условий для сопряженной задачи определяется исследователем, исходя из общей цели изучаемой проблемы. Самое главное при этом: сформулировать сопряженную задачу так, чтобы она была безусловно корректна и чтобы не нарушались соотношения баланса, определенные вариационным принципом.

В свою очередь, функции неопределенностей выражают количественную оценку ошибок прогнозирования на основе системы модель-данные наблюдений. Их роль подобна роли невязки в методе минимальных невязок в линейной алгебре. Это значит, что в процессе решения задачи с усвоением данных мы получаем диагностическую оценку качества системы прогнозирования. По ней можно судить о предсказуемости моделируемых процессов по отношению к данным их мониторинга различными системами наблюдений. Если используется метод расщепления, то система для нахождения этих трех искомых функций также представляет совокупность локально-одномерных этапов расщепления, которые решаются прямыми неитерационными алгоритмами. Если модель предполагается точной, то функция неопределённостей не участвует непосредственно в постановке задачи в системе уравнений, и вариационный принцип получается со строгими ограничениями. В этом случае оценке подлежит только функция начального состояния модели. И для решения задачи усвоения данных в модели требуется организация итерационных процессов.

Исходную задачу можно рассматривать также с позиций оптимального управления системой по заданному целевому функционалу. В этом случае, в рамках вариационного принципа со слабыми ограничениями, искомые функции неопределённостей и управления формально равноправны. Поэтому для их нахождения применимы предлагаемые прямые алгоритмы с использованием множителей Лагранжа в роли сопряженных функций.

2 Сопряженные интегрирующие множители в технологиях моделирования

В структуре вариационных принципов для решения многомерных и разномасштабных задач мы используем концепцию сопряженных интегрирующих множителей. Конструктивно она применяется вместе с методами декомпозиции и расщепления и техникой конечных элементов/объемов [12]. При таком сочетании базовых объектов вычислительной математики получаются совокупности локально-одномерных задач по координатным переменным и по процессам с учетом их характерных масштабов. Все задачи согласованы в рамках функционала интегрального тождества для общей модели процессов и обладают свойствами суммарной аппроксимации [6]. Схемы расщепления выбираем так, чтобы они допускали параллельную реализацию [7].

После вычисления функций состояния, сопряженных функций, функций неопределенностей, которые связаны в единую структуру, на их основе проводится расчет функций чувствительности целевых функционалов для общей системы уравнений к вариациям параметров моделей, источников, начальных данных и граничных условий. Эти функции необходимы для организации алгоритмов решения обратных задач, для идентификации перечисленных объектов с использованием данных наблюдений. При этом нет ограничений на состав и объемы данных и на пространственно-временное разрешение численных моделей. Количество таких функций чувствительности равно числу варьируемых компонент в дискретном представлении моделей и областей их определения.

Фундаментальные свойства концепции сопряженных интегрирующих множителей проявляются в том,

что при её применении понижается порядок исходной задачи на единицу. Для нахождения решений строятся соотношения баланса типа законов сохранения. Эти соотношения определяются для всей области в целом и для каждого конечного элемента её декомпозиции. При этом в рамках вариационного принципа набор сопряженных задач согласован на границах конечных элементов/объемов с условиями непрерывности и дифференцируемости функции состояния основной задачи. Как следствие, численные схемы получаются сбалансированными во всей области решения задачи. Например, для операторов задач конвекции-диффузии-реакции в предположении кусочно-постоянных коэффициентов и источников получаются точные дискретно-аналитические схемы с точным учетом граничных условий всех известных типов.

Такие свойства численных схем безусловно востребованы в задачах конвекции-диффузии с преобладающей конвекцией. Обсуждение возникающих проблем имеется в [10]. Аналогично, модели процессов трансформации различных субстанций основаны на системах жестких уравнений. В них каждый из механизмов реакции имеет свой горизонт предсказуемости. Методы их согласования с использованием технологии сопряженных интегрирующих множителей представлены в [11].

Сопряженные уравнения, возникающие при реализации нашей концепции в рамках вариационного принципа, однородны, а сопряженные задачи на их основе мы формулируем так, чтобы они были безусловно корректными. Это обеспечивает корректность алгоритма в целом для корректных и условно корректных постановок исходных задач. Алгоритмы на основе вышеупомянутых соотношений баланса организуются так, чтобы одновременно с расчетом функций состояния получались и функции потоков этих субстанций. Это необходимо для решения обратных задач.

3 Эффективность применения методики

К условно-корректным задачам можно отнести задачи в многомерных областях со сложными границами. Часто такие задачи формулируются в рамках метода «фиктивных» областей. Суть этого метода состоит в следующем. Область со сложной геометрией дополняется «фиктивными» частями до более простой регулярной структуры. Соответственно, исходная математическая постановка заменяется близкой, в некотором смысле, задачей, но уже в расширенной простой области. Здесь возможны различные подходы в организации метода фиктивных областей.

Так, для задач эллиптического типа В.К.Саульев предложил метод с модификацией коэффициентов диффузии в фиктивной области [8]. Развитие этого метода представлено в [5]. Однако при таком подходе при построении численных схем часто возникают сингулярные, условно-корректные задачи в окрестности границ фиктивных областей при согласовании решений в основной и фиктивной частях расширенной области.

Аналогичные проблемы с этими и другими типами операторов возникают в задачах геофизической гидродинамики и охраны окружающей среды при необходимости учета рельефа Земной поверхности, сложной конфигурации береговых очертаний и рельефа дна водных объектов, компоновки объектов в структуре городских агломераций и т.д.

Использование в этих задачах вариационной концепции сопряженных интегрирующих множителей в структуре методов расщепления и методов конечных элементов дает возможность строить регулярные конструкции численных схем без модификации основной постановки задачи на границах фиктивной области с точным учетом условий Дирихле и естественных условий второго и третьего рода на фактических границах задачи в формате расширенной области. При этом дополнительные фиктивные области вводятся только для обеспечения регулярности структуры массивов с позиций удобства программирования и параллельной организации вычислений.

Для решения широкого класса задач в различных областях науки и техники активно используются вариационные методы конечных элементов/объемов, вариационно-разностные и проекционно- сеточные методы. С ними связаны так называемые разрывные методы Галеркина и Галеркина — Петрова. Для таких методов необходимо строить базисные функции с учетом специфики задачи [5,9].

В этом плане эффективное дополнение перечисленным методам составляют методы, основанные на применении концепции сопряженных интегрирующих множителей в сочетании с методами расщепления. В них не требуется формирование базисных пространств. Вместо этого, для построения аппроксимаций привлекаются решения однородных уравнений сопряженных задач на каждом интервале сеточной области. Затем на основании соотношений баланса строятся уравнения, связывающие значения функций и потоков на границах локальных областей. В результате получаются трехточечные дискретно-аналитические численные схемы. Этот подход также применим в случае методов конечных элементов на регулярных и нерегулярных представлениях конструкций сеточных областей [12].

Заключение

Таким образом, применение вариационного подхода и концепции сопряженных интегрирующих множителей дает возможность построить корректные алгоритмы для решения широкого круга научных и практических задач, которые в принципе могут быть условно-корректными по постановке, методам решения или при наличии неопределённостей различного происхождения как в моделях, так и доступной информации, сопровождающей эти модели.

Список литературы

[1] Айнс Э.Л. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Харьков: ОНТИ, 1939

[2] Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики. т.1. М.— Л.: Государственное издательство технико-теоретической литературы. 1951. 476 с.

[3] Льюинс Дж. Ценность. Сопряженная функцияю М: Атомиздат, 1972. 174 стр.

[4] Марчук Г. И. Численные методы расчёта ядерных реакторов. — М.: Атомная энергия, 1959. 162 с.

[5] Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М.:Наука 1980. 534 с.

[6] Пененко В.В. Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоиздат, 1981. 352 с

[7] Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Аддитивные схемы для задач математической физики. — М., Наука, 2001, 319 с.

[8] Саульев В.К. О решении некоторых краевых задач на быстродействующих вычислительных машинах методом фиктивных областей.— Сиб. Мат. журнал, 1963, №4

[9] Buffa A., Hughes T.J.R. and Sangalli Analysis of a multiscale discontinuous Galerkin method for convection-diffusion problems. SIAM J. Numer. Anal. 44, 1420–1440 (2006).

[10] John V., Knobloch, P.: On spurious oscillations at layers diminishing (SOLD) methods for convection-diffusion equations: part I—a review. Comput. Methods Appl.Mech.Engrg, 2007, v.196, p. 2197–2215.

[11] Penenko, V.V., Tsvetova E.A. Variational methods of constructing monotone approximations for atmospheric chemistry models.– Numerical analysis and applications, 2013, vol. 6, p. 210–220.

[12] Penenko V.V., Tsvetova E.A., Penenko A.V. Variational approach and Euler's integrating factors for environmental studies//Computers and Mathematics with Applications. 2014. V. 67. P. 2240–2256.

Владимир Викторович Пененко — д.ф.-м.н., проф., заведующий лабораторией Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: penenko@sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫНУЖДЕННЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ КОЛЕБАНИЙ В ОДНОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МИКРОРЕЗОНАТОРА

Д. О. Пиманов[1], С. И. Фадеев[1,2], Э. Г. Косцов[3]

[1] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск*

[3] *Институт автоматики и электрометрии СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 517.927.4

Рассматривается математическая модель микрорезонатора, в котором происходят колебания недеформируемой платформы с заданной массой на пружине под воздействием упругой силы пружины, силы трения и периодически меняющейся силы электростатического притяжения. В связи с этим формулируется нелинейная краевая задача для уравнения второго порядка с условием периодичности. Для численного исследования краевой задачи применяется метод продолжения решения по параметру на основе дифференциальных прогонок метода множественной стрельбы. Показано, что в зависимости от частоты изменения силы электростатического притяжения возможно возникновение хаотических колебаний по сценарию Фейгенбаума через удвоение периода.

Ключевые слова: нелинейные колебания, краевая задача, метод множественной стрельбы, продолжение по параметру, электростатическое притяжение, бифуркация удвоения периода, каскад Фейгенбаума.

Введение

Работа посвящена исследованию свойств решения дифференциального уравнения, имеющего вид

$$\frac{d^2y}{dt^2} + b\frac{dy}{dt} + \Omega y = \frac{q\cos^2 t}{(1-y)^2}, \tag{1}$$

где b, Ω и q — неотрицательные параметры. Уравнение (1) описывает в безразмерных переменных колебания материальной точки единичной массы, присоединенной к пружине с коэффициентом жёсткости Ω, в среде с коэффициентом сопротивления b. Вид правой части уравнения, где q — параметр, обусловлен тем, что на материальную точку воздействует электростатическая сила притяжения, периодически меняющаяся во времени по закону $\cos^2 t$.

В приложениях уравнение (1) используется как одномерная модель микрорезонатора, в котором недеформируемая платформа на пружине играет роль подвижного электрода, отделенного микрозазором от неподвижного электрода. Как известно, в случае малости зазора между электродами сила электростатического притяжения определяется из теории плоского конденсатора. В безразмерных переменных уравнения (1) сила электростатического притяжения обратно пропорциональна $(1-y)^2$ и прямо пропорциональна квадрату разности потенциалов. Под воздействием периодически меняющейся разности потенциалов возбуждаются колебания платформы в среде с сопротивлением [1, 2] .

Из физической интерпретации модели следует ожидать, что в зависимости от соотношения электростатической силы притяжения с указанной нелинейной зависимостью от y и упругой силы, пропорциональной y, возможны два типа поведения задачи Коши для уравнения (1). А именно, решение задачи Коши существует при всех $t > 0$ в виде нелинейных колебаний, и решение существует на конечном интервале времени, на котором y стремится к единице. В этом случае нарушается работа резонатора из-за соударения электродов.

Учитывая периодичность правой части уравнения (1), будем искать периодическое решение уравнения (1) с периодом π. Пусть $y(t) = y(t+\pi)$ — решение уравнения (1). Тогда функция $y(t)$ на отрезке $[0,\pi]$ является решением краевой задачи для уравнения (1) с условиями периодичности:

$$t \in [0,\pi], \quad \frac{d^2y}{dt^2} + b\frac{dy}{dt} + \Omega y = \frac{q\cos^2 t}{(1-y)^2}, \tag{2}$$
$$y(0) = y(\pi), \quad \frac{dy}{dt}(0) = \frac{dy}{dt}(\pi).$$

Отсюда следует, что задача Коши для уравнения (1)

$$t > 0, \quad \frac{d^2y}{dt^2} + b\frac{dy}{dt} + \Omega y = \frac{q\cos^2 t}{(1-y)^2}, \tag{3}$$
$$y(0) = \tilde{y}(0), \quad \frac{dy}{dt}(0) = \frac{d\tilde{y}}{dt}(0),$$

где начальные данные $\tilde{y}(0)$, $d\tilde{y}/dt(0)$ взяты из решения краевой задачи (2) при $t = 0$, определяет π-периодические колебания при $t > 0$.

Отметим, что применяемый в данной работе метод численного решения краевой задачи (2) никак не связан с устойчивостью по начальным данным решения задачи Коши (3). В случае устойчивости график решения задачи Коши будет совпадать с $y(t)$ на каждом из отрезков $[k\pi,(k+1)\pi]$, $k = 0,1,2,\ldots$. Однако, если решение неустойчиво, то, численное решение задачи Коши будет описывать колебания, график которых отличен от $y(t)$. Более того, возможны случаи, когда численное решение задачи Коши будет стремится к 1 на конечном интервале по времени, свидетельствуя об отсутствии ограниченных колебаний.

Для численного исследовании зависимости решения краевой задачи (2) от параметров модели используются дифференциальные прогонки на заданном разбиении отрезка $[0,\pi]$ в методе множественной стрельбы. При этом сеточные значения решения краевой задачи находится из системы нелинейных уравнений с параметром, определяемой на решениях серии задач Коши в методе множественной стрельбы. Зависимость сеточных значений от параметров изучается методом продолжения решения по параметру, позволяющим учесть возможность появления множественности решений в некоторой области изменения параметров. Из множественности решений краевой задачи (2) при одной и той же совокупности параметров следует существование различных периодических решений уравнения (1).

1 Численное исследование нелинейной краевой задачи методом продолжения решения по параметру

Приведем краткое описание численного метода исследования зависимости от параметра решения нелинейной краевой задачи, имеющей более общую, чем (2), формулировку. Используемый в данной работе метод был разработан в 90-х годах в Институте математики им. академика Сергея Львовича Соболева [3, 4]. Отметим, что на разработку метода оказали непосредственное влияние известные публикаций Сергея Константиновича Годунова, относящиеся к методам решения линейных краевых задач.

Рассмотрим на конечном отрезке $[A,B]$ по t нелинейную краевую задачу для системы из n обыкновенных дифференциальных уравнений с краевыми условиями достаточно общего вида:

$$t \in [A,B], \quad \frac{dw}{dt} = f(t,w,q), \quad g(w(A),w(B),q) = 0, \tag{4}$$

где w, f и g — векторы с компонентами w_k, f_k и g_k, $k = 1,2,\ldots,n$, соответственно, q — скалярный параметр. Вектор-функции $f(t,w,q)$ и $g(w(A),w(B))$ определены как достаточно гладкие по совокупности аргументов. Предполагается, что при некотором значении параметра q краевая задача (4) хорошо обусловлена и имеет непрерывно дифференцируемое решение.

Заметим, что для поиска T-периодических решений уравнения

$$\frac{dw}{dt} = f(t,w,q), \quad f(t,w,q) = f(t+T,w,q),$$

краевые условия задачи (4), называемые условиями периодичности, имеют вид: $w(0) = w(T)$. В частном случае, который следует из (2), с учётом обозначений $w_1 = y$, $w_2 = dy/dt$, имеем:

$$t \in [0, \pi], \quad \frac{dw_1}{dt} = w_2, \quad \frac{dw_2}{dt} = \frac{q\cos^2(t)}{(1-w_1)^2} - \Omega w_1 - b w_2,$$
$$w_1(0) = w_1(\pi), \quad w_2(0) = w_2(\pi).$$

Для организации продолжения решения по параметру краевая задача рассматривается совместно с краевой задачей, определяющей производную решения по параметру. Пусть $w(t, q)$ — решение (4). При этом производная решения по параметру q определяется как решение линейной краевой задачи:

$$t \in [A, B], \quad \nu = \frac{\partial w}{\partial q}, \quad \frac{d\nu}{dt} = f_w(t, w(t,q), q)\nu + f_q(t, w(t,q), q), \tag{5}$$
$$g_{w(A)}\nu(A) + g_{w(B)}\nu(B) + g_q = 0.$$

Метод множественной стрельбы на основе дифференциальных прогонок по существу является способом представления проблемы в виде системы нелинейных уравнений относительно сеточных значений решения краевой задачи (4) на заданной сетке. Далее решение полученной системы нелинейных уравнений изучается в зависимости от параметра q методом продолжения по параметру.

Введём в рассмотрение сетку:

$$A = t_1 < t_2 < \ldots < t_m < t_{m+1} = B, \quad h_i = t_{i+1} - t_i, \tag{6}$$

обозначив через p^k решение краевой задачи в k-ом узле сетки: $p^k = w(t_k, q)$, $k = 1, \ldots, m+1$. Пусть $w(t, p^k, q)$ — решение задачи Коши

$$t \in [t_k, t_{k+1}], \quad \frac{dw}{dt} = f(t, w, q), \quad w(t_k) = p^k, \quad k = 1, 2, \ldots, m. \tag{7}$$

Из непрерывности решения краевой задачи на отрезке $[A, B]$, а также с учётом краевого условия, следует, что формально сеточные значения решения краевой задачи (4) можно рассматривать как решение системы нелинейных уравнений:

$$k = 1, \ldots, m, \quad \psi_k = w(t_{k+1}, p^k, q) - p^{k+1} = 0, \quad \psi_{m+1} = g(p^1, p^{m+1}, q) = 0, \tag{8}$$

векторная запись которой имеет вид:

$$\Psi(P, q) = 0, \tag{9}$$

где P и Ψ — составные векторы, составленные из компонент векторов $p^1, p^2, \ldots, p^{m+1}$ и $\psi_1(P, q)$, $\psi_2(P, q)$, $\ldots$, $\psi_{m+1}(P, q)$ соответственно.

Обозначим через Γ пространственную кривую в пространстве (P, q), определяемую системой (9). Как известно, использование метода продолжения решения по параметру для построения Γ связано с вычислением матрицы $G = [\Psi_P(P, q), \Psi_q(P, q)]$. Приведём описание серии задач Коши для вычисления элементов матрицы G.

Непосредственно из системы (8) и краевых условий задачи (4) следует, что что матрица $\Psi_P(P, q)$ имеет вид:

$$\Psi_P = \begin{bmatrix} W(t_2, p^1, q) & -I & & & & \\ & W(t_3, p^2, q) & -I & & & \\ & & W(t_4, p^3, q) & -I & & \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ & & & & W(t_{m+1}, p^m, q) & -I \\ g_{p^1}(p^1, p^{m+1}, q) & & & & & g_{p^{m+1}}(p^1, p^{m+1}, q) \end{bmatrix}.$$

Здесь $W(t, p^k, q) = dw/dp^k(t, p^k, q)$ — фундаментальная матрица решений, определяемая задачей Коши на отрезке $[t_k, t_{k+1}]$ для однородного матричного уравнения с матричной функцией $f_w(t, w(t, p^k, q), q)$:

$$k = 1, 2, \ldots, m, \quad t \in [t_k, t_{k+1}], \quad \frac{dW}{dt} = f_w(t, w(t, p^k, q), q)W, \quad W(t_k, p^k, q) = I.$$

Для определения столбца $\Psi_q(P,q)$ матрицы G воспользуемся тем же методом множественной стрельбы, применив его к краевой задаче (5). Обозначим через r^k сеточное значение решения краевой задачи (5) в k-ом узле сетки (6): $k=1,2,\ldots,m+1$, $r^k = dp^k/dq$. Рассмотрим на отрезке $[t_k, t_{k+1}]$ задачу Коши для линейного уравнения:

$$t \in [t_k, t_{k+1}], \quad \frac{d\nu}{dt} = f_w(t, w(t,p^k,q),q)\nu + f_q(t, w(t,p^k,q),q), \qquad (10)$$
$$\nu(t_k) = r^k, \quad k=1,2,\ldots,m.$$

Пусть $\nu = \nu(t,p^k,q)$ — решение задачи Коши (10). Воспользуемся представлением решения в виде:

$$\nu(t,p^k,q) = W(t,p^k,q)r^k + \nu_0(t,p^k,q),$$

где $\nu_0(t,p^k,q)$ — решение задачи Коши для уравнения (10) с нулевым начальным условием.

Из непрерывности решения краевой задачи (5) на отрезке $[A,B]$, а также учета краевого условия, следует, что формально сеточные значения решения краевой задачи (5) представляют решение системы линейных алгебраических уравнений:

$$\varphi_k = W(t_{k+1},p^k,q)r^k - r^{k+1} + \nu_0(t_{k+1},p^k,q) = 0, \quad k=1,2,\ldots,m,$$
$$\varphi_{m+1} = g_{p^1}(p^1,p^{m+1},q)r^1 + g_{p^{m+1}}(p^1,p^{m+1},q)r^{m+1} + g_q(p^1,p^{m+1},q) = 0.$$

или, используя векторную запись системы,

$$\Psi_P(P(q),q)P_q + \Psi_q(P(q),q) = 0,$$

где P_q и Ψ_q составные векторы, составленные из компонент векторов r^1, r^2,... r^{m+1} и $\nu_0(t_2,p^1,q)$, $\nu_0(t_3,p^2,q)$, ..., $\nu_0(t_{m+1},p^m,q)$, $g_q(p_1,p_{m+1},q)$ соответственно.

На этом завершается описание численного исследования нелинейной краевой задачи (4) методом продолжения решения по параметру, в котором выражения Ψ, Ψ_P и Ψ_q определяются на итерациях по Ньютону. Отметим, что метод учитывает возможность прохождения пространственной кривой Γ через точки поворота, в которых $\det[\Psi_P(P,q)] = 0$. Для вычисления решения краевой задачи в промежуточных точках сетки используется решение задачи Коши (7). Таким образом, если система уравнений (9) относительно сеточных значений краевой задачи имеет несколько решение в некоторой области изменения параметра q, то тем же свойством обладает и решение краевой задачи.

2 Периодическое решение задачи Коши, определяемое из решения краевой задачи с условиями периодичности

Пусть при некотором значении параметра q известно решение $w(t,q)$ краевой задачи (4) с условиями периодичности на отрезке $[0,T]$:

$$\frac{dw}{dt} = f(t,w,q), \quad f(t,w,q) = f(t+T,w,q), \quad w(0) = w(T). \qquad (11)$$

Тогда $w(t,q)$ описывает T-периодическое решение задачи Коши для уравнения

$$t > 0, \quad \frac{dw}{dt} = f(t,w,q), \quad f(t,w,q) = f(t+T,w,q), \quad w(0) = w_0, \qquad (12)$$

если в качестве w_0 начального условия задачи Коши выбирается решение краевой задачи (11) при $t=0$: $w_0 = w(0,q)$. Кроме того, необходимо, чтобы решение задачи Коши было устойчиво по Ляпунову.

Для определения устойчивости периодического решении используются собственные числа матрицы монодромии — матрицанта однородного уравнения с матрицей $f_w(t,w(t,q),q)$, вычисленного при $t=T$. Согласно теории Флоке–Ляпунова, если все собственные числа матрицы монодромии расположенными в круге единичного радиуса комплексной плоскости, то имеет место устойчивость периодического решения задачи Коши (12). Периодическое решение не устойчиво, если модуль хотя бы одного собственного числа оказался больше единицы. В других случаях устойчивость определяется непосредственным интегрированием задачи Коши (12) [5].

Заметим, что в методе множественной стрельбы, основанном на дифференциальных прогонках, матрица монодромии вычисляется одновременно с прогонкой на последнем шаге.

Пример применения метода продолжения по параметру q приведен на рис. 1. Здесь представлена зависимость решения краевой задачи от параметра в виде графика (диаграммы) $y(0)$ от q, построенного при $\Omega = 1.5$, $b = 0$. Как следует из рисунка, в области положительных значений параметра, расположенной левее точки поворота графика, краевая задача имеет два решения. Решения, относящиеся к верхней части графика (пунктирная кривая серого цвета), определяют неустойчивые периодические решения задачи Коши (3). Кроме того, существует область изменения параметра q, в которой периодические решения, представленные в нижней части графика, также неустойчивы. Точки кривой черного цвета соответствуют устойчивым периодическим решениям. Как показывает численное интегрирование, неустойчивые решения задачи Коши (3) с начальными данными, взятыми из решения краевой задачи (2), могут либо стремится на ограниченном временном отрезке к точке, в которой $y = 1$, либо описывать колебания, отличные от периодических, которые остаются ограниченными при $t > 0$.

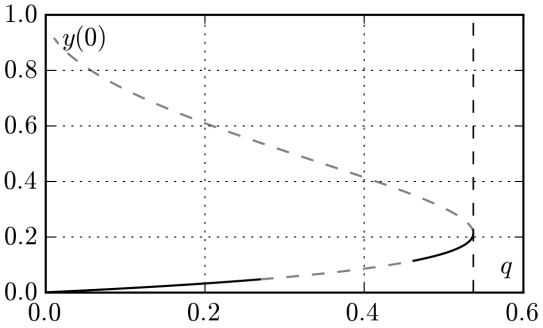


Рис. 1: Пример диаграммы множественности решений краевой задачи (2) при $\Omega = 1.5$, $b = 0$ в виде графика зависимости $y(0)$ от параметра q. Диаграмма сопровождается определением устойчивости периодических решений задачи Коши (3) с начальными условиями, взятыми с решения краевой задачи при $t = 0$. Участки графика чёрного цвета представляют устойчивые периодические решения. Серым цветом отмечены участки графика с неустойчивыми периодическими решениями.

3 Резонансные кривые, удвоение периода и хаос

Пусть $\tilde{y}(t)$ — устойчивое π-периодическое решение задачи Коши (3), совпадающее при $\tilde{y}(0) = \tilde{y}_0$ и $d\tilde{y}/dt(0) = \tilde{y}'_0$ с решением краевой задачи (2) на периоде. Как показывает вычислительный эксперимент, при учете сопротивления решение задачи Коши (3) с начальными данными, взятыми в некоторой окрестности $\tilde{y}_0, \tilde{y}'_0$, стремиться с ростом t к $\tilde{y}(t)$. При этом амплитуда колебаний a может быть найдена из решения краевой задачи (2). Применение метода продолжения решения краевой задачи (2) по параметру Ω позволяет построить зависимость амплитуды a от Ω.

На рис. 2 изображены резонансные кривые задачи Коши при $b = 0.1$ с начальными данными из окрестности решения краевой задачи при $t = 0$: кривая *1* построена при $q = 0.15$, кривые *2* и *3* — при $q = 0.25$. Из графика кривой *1* следует, что решение краевой задачи существует при $\Omega > \Omega_1 = 0.476$. Как показывают вычисления, периодические решения задачи Коши (3), определяемые из решения краевой задачи (2), устойчивы при всех $\Omega > \Omega_1$. Резонансное значение амплитуды колебаний достигается при $\Omega = \Omega_r = 4.25$.

Графики кривых *2* и *3* показывают, что краевая задача имеет решения для Ω, расположенных правее точки поворота при $\Omega_2 = 0.763$. Как оказалось, при $1.22 = \Omega_3 < \Omega < \Omega_4 = 1.42$ и $4.5 = \Omega_5 < \Omega < \Omega_6 = 4.81$ решения краевой задачи (2) определяют только неустойчивые периодические решения (3). Таким образом в точках Ω_3, Ω_4, Ω_5 и Ω_6 происходит бифуркация устойчивости π-периодических решений. Отметим, что на интервале $\Omega \in (\Omega_4, \Omega_5)$ амплитуда устойчивых периодических решений возрастает. Затем при $\Omega > \Omega_5$ периодические решения теряют устойчивость, а решение задачи Коши стремится к значению $y = 1$ на конечном интервале времени. Правее точки поворота при $\Omega = \Omega_6$ краевая задача имеет решение, которое определяет устойчивые колебания при всех $\Omega > \Omega_6$.

Дальнейшее исследование периодических решений, принадлежащих кривой *2*, показывает, что на интервале $\Omega \in (\Omega_3, \Omega_4)$ имеет место каскад бифуркаций удвоения периода. В точке $\Omega = \Omega_3$ рождается устойчивое

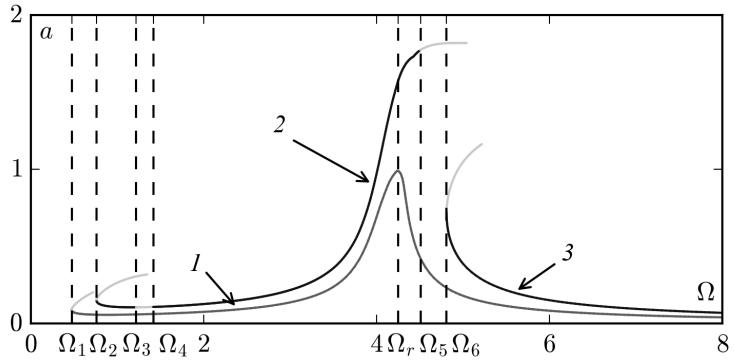


Рис. 2: Примеры резонансных кривых задачи Коши с начальными данными из окрестности решения краевой задачи при $t = 0$, $b = 0.1$. Здесь кривая *1* построена при $q = 0.15$, кривые *2* и *3* — при $q = 0.25$.

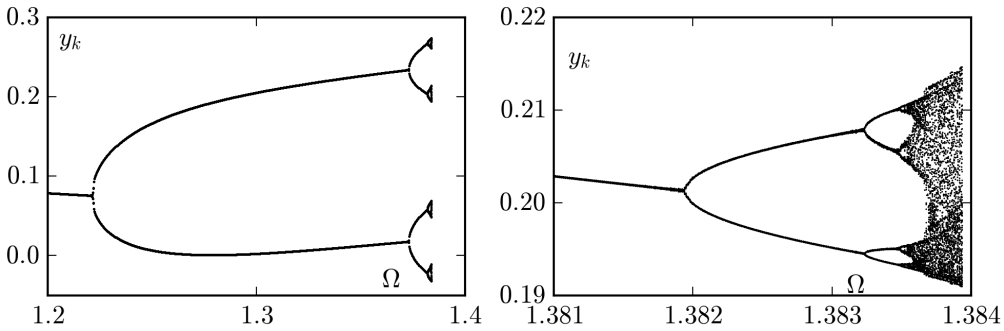


Рис. 3: На левом рисунке — бифуркационная диаграмма уравнения (1) при $q = 0.25$, $b = 0.1$, значениям y_k соответствует выборка $y(t)$ с помощью сечения Пуанкаре: $y_k = y(\pi k), k = 0, 1, \ldots, 256$. На правом рисунке — фрагмент бифуркационной диаграммы в указанной области.

периодическое решение задачи Коши (3) с периодом 2π. При дальнейшем увеличении параметра Ω в точке $\Omega = 1.37293$ возникает решение задачи Коши с периодом 4π. Эту последовательность точек бифуркации можно продолжить.

Полученный в численном эксперименте каскад бифуркаций удвоения периода на диаграмме рис. 3 иллюстрирует переход к хаосу по сценарию Фейгенбаума [6]. В таблице 1 приведены численные оценки для первых шести значений Ω^i последовательности Фейгенбаума и соответствующие значения δ_i,

$$\delta_i = \frac{\Omega^i - \Omega^{i-1}}{\Omega^{i+1} - \Omega^i}, \tag{13}$$

характеризующие скорость стремления Ω^i к предельному значению. Значение δ_i совпадает с постоянной Фейгенбаума $\delta \approx 4.6692016$ с точностью до 10^{-2} уже после шести удвоений периода.

Таблица 1: Точки бифуркации Ω^i при $q = 0.25$, $b = 0.1$, и соответствующие значения δ_i, определяемые по формуле (13)

i	Ω^i	δ_i
1	1.21905	—
2	1.37293	17.098
3	1.38194	7.087
4	1.38321	4.704
5	1.38348	4.655
6	1.383537	—

Таким образом, ограниченные колебания в среде с сопротивлением могут стремиться со временем к пери-

одическим колебаниям с периодом $2^n\pi$, $n = 0, 1, 2, \ldots$, или порождать хаотические колебания. Кроме того, возможно возникновение периодических колебаний с периодом, отличным от $2^n\pi$. В частности, численно подтверждается существование колебаний с периодом $3 \cdot 2^n\pi$, $n = 1, 2, \ldots$.

Заключение

Использование метода продолжения по параметру для численного исследования зависимости решения краевой задачи от параметра позволило выявить множественность периодических решений уравнения (1) с периодами различной кратности и с бифуркацией устойчивости по начальным данным. При этом, возможно возникновение хаотических колебаний по сценарию Фейгенбаума через каскад бифуркаций удвоения периода.

Список литературы

[1] Косцов Э. Г., Фадеев С. И. Новые микроэлектромеханические резонаторы для гигагерцовых частот // Автометрия. 2013. Т. 49, № 2. С. 115–122.

[2] Takamatsu, H., Sugiura, T. Nonlinear vibration of electrostatic MEMS under DC and AC applied voltage // Proc. of the 2005 Intern. Conf. on MEMS, NANO and Smart Systems, ICMENS 2005. Banff, Alberta, Canada, 2005. P. 423–424.

[3] Когай В. В., Фадеев С. И., Применение продолжения по параметру на основе метода множественной стрельбы для численного исследования нелинейных краевых задач // Сиб. журн. индустр. матем. 2001. Т. 4, № 1. С. 83–101.

[4] Фадеев С. И., Когай В. В. Краевые задачи для систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Новосибирск: НГУ, 2012. 278 с.

[5] Демидович Б. П. Лекции по математической теории устойчивости. М.: Наука, 1967. 472 с.

[6] Мун Ф. Хаотические колебания: Вводный курс для научных работников и инженеров. Пер. с англ. М.: Мир, 1990. 312 с.

Даниил Олегович Пиманов — аспирант Новосибирского государственного университета;
e-mail: pimanov-daniil@yandex.ru;
Станислав Иванович Фадеев — д.ф.-м.н., проф., глав. науч. сотр. Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: fadeev@math.nsc.ru;
Косцов Эдуард Геннадьевич — д.ф.-м.н., зав. лаб. Института автоматики и электрометрии СО РАН;
e-mail: kostsov@iae.nsk.su.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

РАСПОЗНАВАНИЕ ИНТЕНЦИЙ ПОКУПАТЕЛЕЙ В СООБЩЕНИЯХ СОЦИАЛЬНЫХ СЕТЕЙ (НА ПРИМЕРЕ СЕТИ “В КОНТАКТЕ”)

И. С. Пименов[1], Н. В. Саломатина[2]

[1] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт математики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 81’322.2

В работе рассматривается задача автоматического обнаружения интенций (выраженных явно или неявно намерений совершить некоторое действие) в сообщениях пользователей сети Интернет. В основе предложенного решения — использование шаблонов интенций, построенных экспертом с применением результатов N-граммного анализа обучающей коллекции текстов (сообщений покупателей сети "В контакте"). Совокупность шаблонов интенций представлена в виде ориентированного ациклического графа, позволяющего группировать схожие маркеры (слова и словосочетания, указывающие на присутствие интенции в тексте) на основании общности грамматических характеристик. Программа поиска интенций реализована на языке Python. Точность и полнота распознавания тестовой коллекции, сформированной по основному и газетному корпусу русского языка, составляет 80% и 74% соответственно.

Ключевые слова: интенция, маркер интенции, N-граммный анализ, ориентированный граф.

Введение

Значительное количество торговых сделок заключается посредством социальных сетей, которые одновременно характеризуются и высоким уровнем активности пользователей, и отсутствием единой системы организованной регуляции экономических отношений. Оптимизация инфраструктуры виртуального рынка возможна, например, за счёт разработки программных средств, позволяющих связать продавца и покупателя, заинтересованных в сделке по одному и тому же товару или услуге и разделенных информационным шумом. Задача автоматического обнаружения намерений (интенций) покупателей относится к проблемам поиска и извлечения фактов из текстов.

Факт, как некоторая структура, представляет собой связанные определенным отношением сущности. Соответственно, поиск факта в тексте предполагает осуществление процедуры опознавания сущностей и определения связей между ними.

Как правило, различают два основных подхода к решению данной задачи:
1) *экспертный*: систему правил (шаблонов) извлечения фактов строит эксперт, опираясь как на собственный опыт, так и на статистики, полученные путем автоматической обработки данных [1, 2],
2) *машинное обучение*: правила строятся автоматически на базе обучающих коллекций, размеченных экспертом [3, 4].
В настоящей работе апробирован первый подход.

Все многообразие реализаций фактов в тексте задается правилами, которые могут быть представлены, к примеру, регулярными выражениями, контекстно-свободными грамматиками [5], специальными конструкциями типа шаблонов, фреймов [6] и др. Конструкции на основе шаблонов являются наиболее распространенными.

Автоматизация построения шаблонов достигается различными средствами, к примеру:
1) итерационным методом: построенные экспертом шаблоны обогащаются именами сущностей и связями между ними путем поочередного поиска в текстовых коллекциях известных сущностей с неизвестными связями и известных связей с неизвестными сущностями [6],

2) методом с применением синтаксического анализа: сущности и связи извлекаются из дерева разбора предложения [7] и пр.

Поиск клиентов (установление наличия в тексте факта покупательской интенции) в русскоязычных социальных сетях в помощь производителям товаров и услуг предлагает, например, группа Лидсканер [9]. Результаты поиска выдаются в виде списков сообщений отнесенных к определенным тематическим классам, таким как „аренда недвижимости“, „бытовой ремонт“, „медицинские услуги“и др. Извлечение объекта интенции и идентификация его свойств не предполагается. Поэтому в один класс попадают, например, сообщения о намерениях получить консультацию у врачей различных профилей, работающих в разных городах. Выявление объекта и конкретизация его свойств позволит существенно уточнить классификацию.

Цели исследования:
1) по обучающей коллекции текстов, содержащих покупательские интенции, построить правила для установления факта интенции, извлечения из сообщения самого объекта и его свойств;
2) в терминах полноты и точности оценить качество полученных правил на тестовой коллекции.

1 Задача распознавания интенций

Неформально интенция определяется как выраженный эксплицитно или имплицитно факт желания совершить какое-либо действие, например:
(1) эксплицитно: „хочу устроить фотосессию девушке на этих выходных в Москве“;
(2) имплицитно: „подскажите пожалуйста хорошего репетитора по русскому языку“.
(Во всех примерах используется оригинальный текст сообщений пользователей социальных сетей, он может содержать ошибки.)

Очевидно, что неформальное определение интенции является малопродуктивным для целей поиска и извлечения информации. Его формализация предполагает выявление структуры интенции, а именно: из каких элементов она состоит, какие элементы являются обязательными, какие — факультативными, каков порядок следования элементов в структуре. Необходимо также установить допустимую вариативность элементов на лексическом и грамматическом уровне и возможные изменения в элементном составе структуры на уровне редакционных операций. На основании полученных результатов требуется построить поисковые шаблоны, осуществить их агрегацию согласно общности структуры и свойств, дать оценку их качества на тестовом материале.

2 Используемые методы

Экспертное заключение о структуре интенции (I) было получено на базе обучающего материала (сообщений пользователей социальных сетей, содержащих интенции). Она состоит из следующих элементов: маркера факта интенции (Mr) — слова или словосочетания, указывающего на наличие интенции в тексте (и, как правило, предваряющего ее), объекта интенции (O), а также ограниченного числа (k) его свойств $p_i, (i = 1, \ldots, k)$ и/или конструкций вежливости (E)). В примере (2) предыдущего раздела маркером интенции является слово „подскажите“, объектом интенции — „репетитора“, свойствами объекта, несущественным — „хорошего“и существенным — „по русскому языку“, формулой вежливости — „пожалуйста“. К свойствам относится и указатель на объект: *телефон* репетитора. Шаблон интенции в обобщенном виде может быть представлен последовательностью элементов:

$$Pattern(I) = Mr[X_j][E][X_j][p_i][X_j]O[X_j][p_i],$$

где в квадратные скобки заключены факультативные (необязательно присутствующие в сообщении) элементы. Символами X_j обозначаются возможные (ограниченные по длине) вставки в структуру интенции не всегда семантически значимых единиц текста сообщения (подскажите *мне*, подскажите *кто-нибудь*). Маркер интенции маловариативен, на лексическом уровне его можно считать константой, поэтому в шаблоне он представлен конкретной леммой и грамматическими характеристиками возможных ее форм в тексте. Объект может быть практически любым на уровне лексики, в шаблоне он фиксируется только на грамматическом уровне, на котором маловариативен. Факультативные элементы, как и основные, задаются на лексическом или грамматическом уровне в зависимости от степени изменчивости. Формулы вежливости перечислимы, имеется список их вариантов.

Совокупность шаблонов интенций удобно представлять в виде ориентированного ациклического графа, позволяющего группировать схожие по структуре шаблоны с разными маркерами на основании общности грамматических характеристик (и, как следствие, синтаксической функции) его элементов, а также оптимизировать процедуру поиска, устраняя проблемы частичной заполненности факультативных позиций в шаблоне.

При построении графов в помощь эксперту был проведен N-граммный анализ обучающей коллекции текстов, содержащих интенции. Под N-граммой понималась цепочка X из N подряд следующих элементов текста (словоформ, лемм, граммем). N-граммный анализ позволил: 1) дополнить словарь маркеров, построенный экспертом, 2) учесть вариативность структуры интенций.

Процедура N-граммного анализа включала следующие действия:

1. Нормализацию и морфологический анализ обучающей коллекции текстов.
2. Формирование цепочек N-грамм с вычислением их абсолютной F_a и тестовой F_t частоты встречаемости в коллекции.
3. Фильтрацию N-грамм по критерию „маркерности“: цепочка является маркером, если выполняется условие: $(C > P_1)\&(F_t > P_2)$, где $C = F_t/F_a$. Пороги P_1 и P_2 были определены экспериментально. На базе N-грамм, удовлетворяющих критерию, формировался словарь потенциальных маркеров интенций.
4. Исследование N-грамм на вариативность, а именно: возможность реализации в любой позиции цепочки замен, ограниченных по длине вставок (см. [10]). Полученные результаты позволили устанавливать для каждой вершины графа вершины, смежные с ней. Кроме того, количественно была охарактеризована степень вариативности элементов цепочки на лексемном и граммемном уровне.

Каждой вершине графа поставлен в соответствие элемент шаблона (информация о лексеме и ее грамматических характеристиках). Процедура распознавания интенции начинается с поиска в нормализованном тексте маркера интенции. Список маркеров зафиксирован в словаре. Обнаружение маркера интенции в тексте определяет выбор графа, его начальную вершину. Дальнейший проход по тексту сопровождается сравнением лексемы и/или грамматической информации о ней с информацией, соответствующей вершине графа. При совпадении осуществляется переход к следующему слову текста и следующей вершине. Иначе — последовательно просматриваются все другие смежные вершины. При отсутствии вершины с подходящей информацией процедура распознавания заканчивается с результатом „интенция отсутствует в тексте“. Считается, что интенция содержится в тексте, если в ходе его анализа найдется хотя бы один граф, из начальной вершины которого может быть достигнута его конечная вершина. Если интенция обнаружена, исходя из информации, соответствующей вершинам графа, легко может быть извлечен объект интенции и его свойства.

3 Апробация подхода

3.1 Построение графов интенций

Текстовая коллекция, участвовавшая в обучении, содержала 1203 сообщения из социальной сети „В контакте“, которые отбирались экспертом с помощью API LeadScaner [9]. Для нормализации и морфологического анализа текста были использованы модули PyMorphy2 версии 3.5.2 [11].

По результатам N-граммного анализа в первую версию словаря попали 17 однословных маркеров. Топ упорядоченных по убыванию С-характеристик N-грамм, претендентов на маркеры, представлен в таблице 1 ($P_1 > 0,9; P_2 > 85$). В первом десятке списка содержится 4 маркера, они выделены курсивом. Остальные слова, хотя и не являются маркерными, но часто им сопутствуют („срочно нужен“, „подскажите, пожалуйста“,...). При продвижении в конец списка число „шумящих“N-грамм возрастает.

Исследование N-грамм на вариативность упростило построение графа в плане установления смежных вершин и инцидентных им ребер. Например, все возможные замены слова, следующего за маркером „подскажите“, позволяют установить потенциальные продолжения: „подсказать *пожалуйста*“(формула вежливости), „подсказать *хороший* (терапевт)“(свойство объекта, эмфатический элемент), „подсказать *мануальный* (терапевт)“(свойство объекта), „подсказать *номер* (терапевта)“(указатель на объект).

Число вершин в построенных графах равно длине интенции в словах, оно может доходить до полутора десятков. Число различных путей достижения конечной вершины из начальной — до 200. Оно характеризует

Таблица 1: Список N-грамм, претендентов на маркеры интенций

Лемма	С-характеристика	F_t
посоветовать	1,00	119
срочно	0,99	107
подсказать	0,98	278
искать	0,97	211
можно	0,97	120
пожалуйста	0,96	225
хороший	0,96	203
нужный	0,95	162
где	0,93	86

разнообразие способов выражения интенции в тексте. Граф с начальной вершиной, которой соответствует информация о маркерах глагольной группы („подсказать“, „посоветовать“, „порекомендовать“), представлен на рисунке 1. Он имеет 15 вершин (15-я конечная не обозначена для сохранения наглядности). Пять вершин являются смежными с конечной: 2, 7, 9, 10, 12.

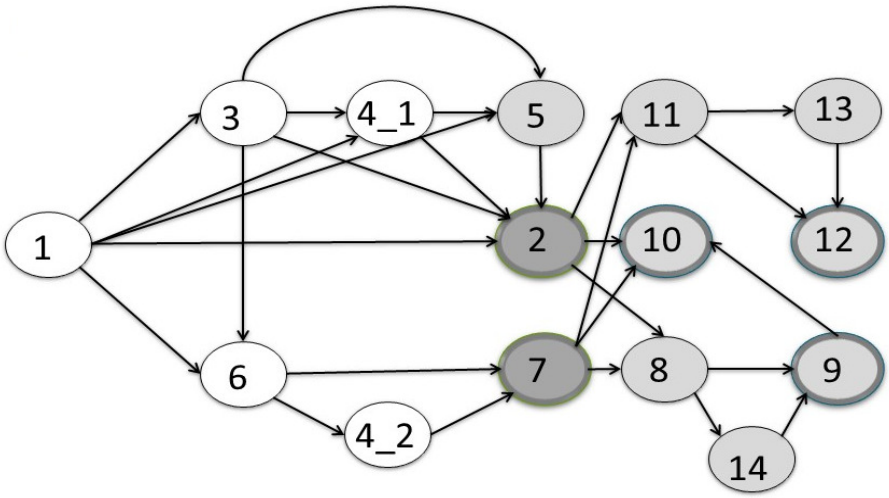


Рис. 1: Пример графа интенций, предваряемых группой глагольных маркеров „подсказать“, „посоветовать“, „порекомендовать“.

Содержание вершин (роли лексем и их грамматические характеристики):
1 — глагол, императив, множественное число (маркер: „подсказать“, „посоветовать“, „порекомендовать“, „предложить“);
2, 7 — существительное, аккузатив (непосредственный объект интенции);
3 — формула вежливости („пожалуйста“и его сленговые варианты);
4_1, 4_2 — прилагательное, аккузатив (эмфатический элемент: „хороший“, „толковый“, „качественный“, и др.);
5 — прилагательное, аккузатив (свойство объекта интенции: „*мануальный* терапевт“);
6 — существительное аккузатив (указатель объекта: „контакты“, „номер“, „телефон“);
8 — предлог (свойство объекта интенции: „репетитора *по* физике“);
9 — существительное, датив (свойство объекта интенции: „репетитора по *физике*“);
10 — существительное, номинатив (указатель места: „репетитора по ивриту *Новосибирск*“);
11 — предлог, лексическая константа „в“(указатель места: „косметолога *в* Сарове“);
12 — существительное, локатив (указатель места: „косметолога в *Сарове*“);
13 — прилагательное, локатив (указатель места: „косметолога в *нашем* городе“);

14 — прилагательное, локатив (свойство объекта интенции: „массажиста в *коминтерновском* р-не“).

3.2 Результаты тестирования графов интенций

Материал для тестовой коллекции был подобран вручную из Национального корпуса русского языка (основного и газетного подкорпусов) [12] с помощью встроенной поисковой системы. Каждый запрос содержал один из маркеров интенции. Тестовую коллекцию составили 110 сообщений. Некоторые из них не включали интенцию. Кроме того, не все интенции относились к категории покупательских (например, „Подскажите пожалуйста длительность курса“).

Для оценки полноты (R) и точности (P) распознавания применялись меры, которые обычно используются при оценивании алгоритмов поиска и извлечения информации: $P = TP/(TP + FP); R = TP/(TP + FN)$, где TP — количество релевантных ответов (решение эксперта и программы совпадают), FN — число ошибок первого рода, FP — число ошибок второго рода. В таблице 2 ппривелены значения полноты и точности на обучающей (L) и тестовой (T) коллекции с макроусреднением результатов.

Таблица 2: Полнота и точность распознавания интенций на обучающей и тестовой коллекции

	L	T
R	0,82	0,74
P	0,99	0,80

Ошибки распознавания, выявленные на обучающей и тестовой коллекции, связаны с проблемами разных уровней сложности. Самые трудноразрешимые относятся к концептуальным проблемам области, они вызываны принципиальной языковой сложностью выражения интенции как психологической категории. В отличие от них недостаточная детализация в конструкции построенных графов может быть легко устранена. Ошибки морфологического анализатора, орфографические и синтаксические ошибки пользователей социальных сетей являются естественным „шумом“, на который есть смысл настраивать содержимое вершин графа (например, указывать варианты лексем и граммем, не предусмотренные орфграфией и синтаксисом корректно написанного сообщения) в силу того, что они носят регулярный характер и не создают трудностей, связанных с омонимией.

Следует отметить, что объект и его свойства извлекались с приемлемым качеством и из интенций, не относящихся к покупательским, что свидетельствует о возможности расширения области применения уже построенных графов.

Заключение

В данной работе предложен и апробирован подход к распознаванию интенций покупателей в сообщениях социальных сетей, основанный на применении построенных экспертом правил в форме лексико-синтаксических шаблонов, агрегированных в графы. Применение N-граммного анализа в качестве средства автоматизации позволило дополнить словарь маркеров интенций, упростить построение графов.

Апробация подхода показала, что использованный подход, дает возможность установливать, содержится ли интенция в тексте, и, если она содержится, то извлекать объект интенции (а также его свойства) с хорошими показателями полноты и точности вне зависимости от того, имеет ли интенция покупательскую специфику.

Список литературы

[1] Киселев С.Л., Ермаков А.Е., Плешко В.В. Поиск фактов в тексте естественного языка на основе сетевых описаний // Труды межд. конф. «Диалог 2004»: Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии. 2004. С. 282–285.

[2] Хорошевский В.Ф. OntosMiner: семейство систем извлечения информации из мультиязычных коллекций документов // Девятая Национальная конференция по искусственному интеллекту с международным участием КИИ–2004. Труды конференции в 3-х томах. М.: Физматлит, 2004. Т. 2. С. 573–581.

[3] Pande V., Khandelwal A.S. Information extraction technique: a review. // National Conference on Recent Threads in Computer Science and Information Technology (NCRTCSIT–2016). IOSR Journal of Computer Engineering (IOSR-JCE).

[4] R.Navigli, P.Velardi. LearningWord-Class Lattices for Definition and Hypernym Extraction [Электронный ресурс]. http://www.aclweb.org/anthology/P10-1134 (дата обращения: 23.03.2017).

[5] Томита-парсер [Электронный ресурс]. https://tech.yandex.ru/tomita (дата обращения: 26.04.2017).

[6] Большакова Е., Баева Н., Бордаченкова Е. и др. Лексико-синтаксические шаблоны в задачах автоматической обработки текстов // Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии: Труды Международной конференции Диалог‘2007. Т. 2. Изд-во РГГУ Москва, 2007. С. 70–75.

[7] Лукашевич Н.В. Итерационное извлечение шаблонов описания событий по новостным кластерам. // Труды конференции RCDL–2012 «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции» (Переславль-Залесский). 2012. С. 353–359.

[8] RCO Fact Extractor SDK [Электронный ресурс]. http://www.rco.ru/?page_id=3554 (дата обращения: 20.04.2017)

[9] Leadscanner [Электронный ресурс]. https://leadscanner.ru (дата обращения: 12.04.2017).

[10] Гусев В.Д., Саломатина Н.В. Уточнение и обогащение индикаторных словарей для автоматического извлечения информации из научных текстов. // Труды межд. конф. "Диалог’2007": Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии, Бекасово, 31 мая–4 июня. 2007. С. 486–491.

[11] Pymorphy2 [Электронный ресурс]. https://pymorphy2.readthedocs.io/en/latest/ (дата обращения: 16.02.2017).

[12] Национальный корпус русского языка [Электронный ресурс]. http://www.ruscorpora.ru/search-main.html (дата обращения: 11.03.2017).

Иван Сергеевич Пименов — студент Новосибирского государственного университета;
e-mail: pimenov@yandex.ru;
Наталья Васильевна Саломатина — к.ф.-м.н., с.н.с., Институт математики СО РАН;
e-mail: nataly@math.nsc.ru.
Дата поступления — 22 мая 2017 г.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГИБЕЛИ КЛЕТОК В ЖИВОМ ОРГАНИЗМЕ

Н. Д. Плотников[1,2], Ч. А. Цгоев[1,2], О. Ф. Воропаева[1]

[1] *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519-6; 51-76

Выполнено математическое моделирование динамики гибели клеток сердечной мышцы и головного мозга при инфарктах, вызванных ишемией. В основе разработанных численных алгоритмов лежит решение прямых и обратных коэффициентных задач для жестких нелинейных систем ОДУ и систем функционально-дифференциальных уравнений с запаздывающими аргументами. Разработаны новые математические модели, адекватность которых подтверждается качественным и количественным согласием с данными лабораторных экспериментов *in vitro* и *in vivo*.

Ключевые слова: математическое моделирование, прямые и обратные задачи, уравнения с запаздывающим аргументом, инфаркт миокарда, ишемический инсульт, апоптоз, некроз, воспаление.

Введение

Инфаркт миокарда и инфаркт мозга (инсульт) — заболевания, которые характеризуются массовой гибелью клеток этих жизненно важных органов — занимают первые места в списке причин смерти человека. Одним из наиболее значимых факторов в зарождении и развитии инфаркта считаются ишемические повреждения клеток [1, 2]. Ишемия — это биологический процесс, который характеризуется дефицитом поступающих в клетку питательных веществ вследствие локального нарушения кровоснабжения и является причиной гибели клеток преимущественно двумя путями — апоптозным и некротическим. Апоптоз представляет собой безболезненную фрагментацию и удаление поврежденной клетки и, до определенной степени, может быть обратимым. Это означает, что клетки, вошедшие в стадию апоптоза, не обязательно его завершают: при незначительном повреждении возможна регенерация клеток и тканей. Некроз сопровождается мощной воспалительной реакцией, которая способствует токсическому отравлению окружающих клеток продуктами распада и, тем самым, усиливает некротическое повреждение. Некротическая гибель клеток, как правило, является следствием более сильного и непоправимого повреждения, сопровождающегося разрывом клеточной мембраны. Известно, что вероятность возникновения инфаркта и размер повреждения зависят, в первую очередь, от степени и длительности снижения кровообращения, а также от множества других факторов. Наиболее чувствительными к ишемии являются сердце и органы центральной нервной системы.

В докладе обсуждаются актуальные математические постановки задач и результаты численного моделирования. Разработана математическая модель ишемического инсульта, учитывающая в достаточно общем виде все основные механизмы развития инфаркта. Выполнено численное моделирование ишемического повреждения клеток головного мозга крысы. При численном исследовании гибели клеток при инфаркте миокарда ставилась задача более тщательного моделирования воспалительного процесса, который в случае острого варианта заболевания играет доминирующую роль. Разработан ряд новых математических моделей, которые достаточно хорошо описывают инфаркт в левом желудочке сердца лабораторной мыши.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта ведущих научных школ НШ-7214.2016.9.

1 Численное моделирование ишемического инсульта

Принятая в настоящей работе биологическая модель гибели клеток головного мозга (нейронов, а также астроцитов и других клеток глии) учитывает оба основных механизма клеточной смерти — апоптоз и некроз [3]. Дефицит питательных веществ способствует запуску программ клеточной смерти, если уровень повреждения достигает некоторого порогового значения D_0. На настоящем этапе исследований предполагаем, что при сильном повреждении апоптотический или некротический варианты гибели клеток могут реализовываться с равной вероятностью.

Погибшие вследствие ишемии и последующей интоксикации клетки инициируют ответ иммунной системы. В первую очередь активируются собственные защитники нервных клеток, дислоцированные в головном мозге — микроглии, которые обладают способностью к заглатыванию (фагоцитозу) продуктов распада, тем самым участвуя в удалении продуктов разрушения и препятствуя росту воспалительной реакции. Активация микроглий приводит их в состояние готовности к фагоцитозу и синтезу цитокинов — специфических белков, с помощью которых координируются действия клеток иммунной системы. Цитокины вызывают накопление в окрестности повреждения молекул адгезии, которые способствуют прикреплению (адгезии) лейкоцитов, курсирующих в кровеносном русле, к эндотелию кровеносного сосуда и их миграции через эндотелий к клеткам мозга. В результате лейкоциты преодолевают характерный для здорового организма гемато-энцефалический барьер — физиологический механизм, который призван регулировать проникновение в мозг различных веществ, вводимых извне или циркулирующих в крови, для сохранения постоянства физиологического и физико-химического состояния мозга. Таким образом, молекулы клеточной адгезии инициируют движение лейкоцитов в зону повреждения. Известно (см., например, [2]), что главную роль в фагоцитозе играют нейтрофилы — наиболее многочисленная группа мелких лейкоцитов, а также моноциты-макрофаги — самые крупные лейкоциты. Клетки микроглии, моноциты-макрофаги и нейтрофилы способствуют удалению из организма умерших апоптозных и некротических клеток мозга путем фагоцитоза. При этом активированные клетки микроглии, провоспалительные цитокины и нейтрофилы сами выделяют токсические вещества, оказывая негативное влияние на неповрежденные клетки и способствуя расширению зоны поражения мозга.

Следует отметить, что в распоряжении исследователей уже имеются достаточно полные математические модели развития ишемического повреждения мозга. Одной из наиболее интересных представляется модель работы [3], однако целый ряд используемых там ключевых аппроксимаций не соответствует требованиям теории размерностей, а проверка адекватности результатов моделирования ограничена лишь хронологией протекания заболевания. Поэтому в рамках настоящего исследования ставилась задача разработки новой более совершенной математической модели, удовлетворяющей этим требованиям.

1.1 Основные уравнения

Математическая модель динамики гибели клеток мозга включает в себя следующие уравнения:

$$\frac{dH}{dt} = -DH, \tag{1}$$

$$\frac{dN}{dt} = (1 - p_A)\, DH - \varepsilon N, \tag{2}$$

$$\frac{dA_s}{dt} = p_A DH - p_A D\,(\cdot - T_A)\, H\,(\cdot - T_A)\,, \tag{3}$$

$$\frac{dA_e}{dt} = p_A D\,(\cdot - T_A)\, H\,(\cdot - T_A) - \varepsilon A_e, \tag{4}$$

$$\frac{dM_a}{dt} = p_{M_a}\,(c_A A_e + c_N N)\, M_i - c_{pro}\frac{M_a}{T_{M,1}}, \tag{5}$$

$$\frac{dM_i}{dt} = -p_{M_a}\,(c_A A_e + c_N N)\, M_i + c_{pro}\frac{M_a}{T_{M,1}} + \left(c_{M_{i,1}} M_i - c_{M_{i,2}} M_i^2\right) \mathbf{1}_{t>T_{M,2}} - \varepsilon M_i. \tag{6}$$

Здесь H — относительная плотность здоровых клеток мозга, N — относительная плотность некротических клеток, A_s и A_e — относительная плотность клеток мозга, начавших и закончивших апоптоз соответственно,

M_i и M_a — относительная плотность неактивированных и активных клеток микроглии; аргумент $(\cdot - T_A)$ символизирует запаздывание на время T_A, соответствующее характерной продолжительности процесса апоптоза клетки; знак $\mathbf{1}_{t>T_{M,2}}$ также указывает на запуск ряда важных процессов с запаздываем, равным $T_{M,2}$.

В уравнениях математической модели (1)–(6) одну из ключевых ролей играют величины удельной скорости фагоцитоза ε и удельной скорости гибели клеток вследствие интоксикации продуктами распада (воспаления) D, причем последняя отлична от нуля, только если интоксикация достигла установленного предельного уровня D_0:

$$D = \left[\left(p_{N,[cy]}C + p_{N,L_n}\frac{L_n}{c_{L_n}+L_n}(N+A_e) + p_{N,N}N\right) - p_0 D_0\right]^+, \tag{7}$$

$$\varepsilon = e_{N,M_a}M_a + e_{N,L_m}L_m + e_{N,L_n}L_n + e_{N,M_i}M_i. \tag{8}$$

Система (1)–(6) дополняется уравнениями, описывающими динамику факторов воспаления:

$$\frac{dL_m}{dt} = c_{L_m}M_{adh}(\cdot - T_{L_{m,in}}) - p_{d_{L_m}}\frac{L_m}{T_{L_m}}, \tag{9}$$

$$\frac{dL_n}{dt} = c_{L_n}M_{adh}(\cdot - T_{L_{n,in}}) - p_{d_{L_n}}\frac{L_n}{T_{L_n}}, \tag{10}$$

$$\frac{dC}{dt} = \left(p_{M_a,c}\frac{M_a}{M_a+c_{M_a}} + p_{L_m,c}\frac{L_m}{L_m+c_{L_m}}\right)(N+A_e) - e_{cy}C, \tag{11}$$

$$\frac{dM_{adh}}{dt} = \left[p_{M_{adh},1}C - p_{M_{adh},2}CM_{adh} - e_{M_{adh}}M_{adh}\right]\mathbf{1}_{vessel}. \tag{12}$$

Здесь L_m и L_n — относительная концентрация лейкоцитов двух видов — моноцитов-макрофагов и нейтрофилов соответственно, C — относительная концентрация цитокинов, M_{adh} — относительная плотность молекул адгезии. Уравнение (12) описывает динамику молекул клеточной адгезии в зависимости от перечисленных в его правой части факторов, только если ядро инсульта располагается в окрестности кровеносного сосуда, а в противном случае плотность молекул адгезии остается постоянной, соответствующей начальному условию.

Особенностью системы (1)–(12) является наличие функций с запаздывающими аргументами в правых частях уравнений, где запаздывание $T_{L_{m,in}}$ и $T_{L_{n,in}}$, так же как и T_A, обусловлено биомедицинскими соображениями. Начальные данные для компонент решения задачи на интервале времени $t \in [-\tau, 0]$ (где $\tau = \max(T_A, T_{L_{m,in}}, T_{L_{n,in}})$), предшествующем началу заболевания, задаются соответствующими здоровому состоянию: относительная плотность здоровых клеток $H(t) = 1$ и неактивных микроглий $M_i(t) = 1$, значения остальных переменных задачи полагаются нулевыми; для моделирования инсульта при $t = 0$ заданная часть здоровых клеток (до 40%) переходит в некротические и/или в клетки, вступившие в апоптоз. Значения параметров модели выбирались согласованными с наблюдаемыми при ишемическом повреждении мозга лабораторных крыс [4], которое имеет достаточно много общих черт с течением заболевания у человека [2]. Большая часть значений оказалась весьма близкой к принятым в [3], где рассматривалась аналогичная модель заболевания, учитывающая, помимо прочего, хемотаксис клеток иммунной системы в зоне некротического повреждения. Следует отметить, что основное отличие математической модели настоящей работы от принятой в [3] состоит в выборе более корректных (как с точки соображений размерности, так и с точки зрения соответствия биомедицинским реалиям) аппроксимаций в уравнениях (5)–(12). В частности, наиболее существенному изменению подверглись не только ключевая для моделируемого процесса аппроксимация величины D, но и правые части уравнений динамики M_{adh}, L_m и L_n. Кроме того, в отличие от [3], на данном этапе исследований была принята гипотеза о том, что пространственные эффекты, обусловленные хемотаксисом факторов воспаления в область ишемического повреждения, вносят менее значимый вклад в сравнении с вышеупомянутыми процессами и поэтому могут не учитываться.

1.2 Численный метод

Численный алгоритм решения начальной задачи для системы функционально-дифференциальных уравнений (1)–(12) основан на методе шагов, в рамках которого временная ось разбивается на достаточно большие временные интервалы, равные τ, и расчет проводится последовательно на каждом из этих интервалов. При этом функции с запаздыванием известны либо из постановки задачи, либо из численного решения, полученного на предыдущем этапе метода шагов. Это позволяет привлекать для вычисления решения широко известные методы решения задачи Коши для ОДУ. Следует отметить, что характерной особенностью решений

уравнений с запаздыванием является нарушение гладкости при $t = 0$ и в каждый момент времени, кратный величине запаздывания. Хотя с ростом времени происходит постепенное сглаживание разрыва, это приводит к потере порядка точности практически для всех численных методов. На каждом шаге по времени для численного интегрирования уравнений (1)–(6), (9)–(12) использовался метод Адамса-Бэшфорта-Моултона, который при решении данной системы уравнений фактически обеспечивает третий порядок точности. Выбор метода основан на численном анализе результатов решения серии модельных задач и методических расчетов для системы уравнений принятой математической модели.

1.3 Результаты

На первом этапе исследований в рамках принятого подхода выполнено численное моделирование состояния здорового мозга. В этом случае при $t = 0$, как и на всем предыдущем интервале времени $t \in [-\tau, 0)$, все клетки остаются здоровыми, т.е. $N = 0$ и $A_s = A_e = 0$. Численный эксперимент показал, что математическая модель адекватно описывает состояние здорового мозга, сохраняя концентрации всех факторов воспаления, плотности клеток иммунной системы, некротизированных и апоптозных клеток мозга нулевыми.

Выполнен численный анализ динамики гибели клеток в ядре инсульта, где наблюдается максимальное повреждение. Рассматривались два варианта развития процесса — при наличии в окрестности ядра кровеносного сосуда и без него. Выше отмечалось, что адгезия лейкоцитов способствует их проникновению из кровеносного русла в зону поражения. Согласно результатам расчетов, близость кровеносного сосуда способствует более интенсивному фагоцитозу поврежденных клеток и, как следствие — делает воспалительный процесс более острым, но скоротечным. Численный анализ показывает, что разработанная математическая модель достаточно хорошо воспроизводит хронологию ишемического инсульта, которая известна из клинических наблюдений (см., например, [2]): пик апоптозного процесса приходится на первые 24 часа после начала инсульта, а период максимальной активации микроглий отмечается на временном интервале от 6 до 72 часов. Напротив, если очаг инсульта находится достаточно далеко от кровеносного сосуда, то, согласно начальному условию, относительная плотность молекул адгезии принимается тождественно равной нулю. Это приводит (в рамках принятой модели) к менее острой, но существенно более длительной воспалительной реакции и даже к повторной активации микроглий после 60–70 часов от начала инсульта.

Выполнено сопоставление результатов расчетов с данными экспериментов *in vitro* [4], в которых при изучении жизнеспособности клеток мозга крысы ишемический стресс создавался лишением клеточных популяций питания в виде глюкозы, кислорода и сыворотки. В ходе численных экспериментов получено согласие с экспериментом по динамике относительных плотностей нейронов, астроцитов и микроглий, что свидетельствует об адекватности биологической и численной моделей ишемического инсульта.

2 Математическое моделирование инфаркта миокарда

Мышечная ткань сердца (myocardium) представлена особыми клетками — кардиомиоцитами. Одна из основных функций кардиомиоцитов состоит в выполнении сократительной работы сердца. При ишемии лишенные кислорода кардиомиоциты погибают, что вызывает ряд клеточных и молекулярных реакций в миокарде. В медико-биологических исследованиях в качестве одного из ведущих механизмов патогенеза, течения и прогноза острого инфаркта миокарда рассматривается некроз клеток сердечной мышцы, сопровождающийся реакцией иммунной системы в виде воспаления. Основные механизмы, задействованные во время воспалительной реакции на ишемическое повреждение клеток миокарда, являются в достаточной мере универсальными, аналогичными изложенным при описании ишемического инсульта. Отличие (в рамках принятой модели) состоит, в частности, в специфичности клеток, из которых состоит подверженный инфаркту орган, а также в том, что сердечная мышца имеет собственные макрофаги-резиденты, число которых весьма невелико в сравнении с мигрирующими моноцитами-макрофагами. Рассматривается классический модельный вариант некротического процесса — при инфаркте миокарда в левом желудочке мыши, который реализуется в значительной части лабораторных исследований этого заболевания.

Принятая в настоящей работе биологическая модель сосредоточена на уточнении механизма активации макрофагов в ответ на повреждение клеток миокарда. Неактивированные макрофаги дифференцируются из моноцитов, прибывающих в зону ишемического поражения из кровотока. Рассматриваются две основные модели активации макрофагов: классические M1 макрофаги способствуют обострению воспаления, а альтернативные M2 макрофаги, напротив, выполняют противовоспалительную функцию, способствуя заживлению раны. Активация макрофагов приводит к увеличению цитокинов уже в первые часы (и сутки)

заболевания. Цитокиновый профиль представлен провоспалительными факторами — интерлейкином IL1 и фактором некроза опухоли TNF-α, а также противовоспалительным интерлейкином IL1.

2.1 Основные уравнения

Математическая модель некротического процесса при инфаркте миокарда представляет собой жесткую нелинейную систему ОДУ, в которой основные взаимодействия описаны на основе подхода Михаэлиса — Ментена:

$$\frac{dM_{un}}{dt} = k_0 M - k_2 M_{un} \frac{{IL_1}^8}{{IL_1}^8 + c_{IL1}} - k_3 M_{un} \frac{T_\alpha^8}{T_\alpha^8 + c_{T\alpha}} - k_4 M_{un} \frac{IL_{10}}{IL_{10} + c_{IL10}} - \mu M_{un}, \tag{13}$$

$$\frac{dM_1}{dt} = k_2 M_{un} \frac{{IL_1}^8}{{IL_1}^8 + c_{IL1}} + k_3 M_{un} \frac{T_\alpha^8}{T_\alpha^8 + c_{T\alpha}} + k_1' M_2 - k_1 M_1 - \mu M_1, \tag{14}$$

$$\frac{dM_2}{dt} = k_4 M_{un} \frac{IL_{10}}{IL_{10} + c_{IL10}} + k_1 M_1 - k_1' M_2 - \mu M_2, \tag{15}$$

$$\frac{dT_\alpha}{dt} = (k_6 M_1 + \lambda M_c) \frac{c}{c + IL_{10}} - d_{T\alpha} T_\alpha, \tag{16}$$

$$\frac{dIL_1}{dt} = (k_7 M_1 + \lambda M_c) \frac{c}{c + IL_{10}} - d_{IL1} IL_1, \tag{17}$$

$$\frac{dIL_{10}}{dt} = k_5 M_2 \frac{c_1}{c_1 + IL_{10}} - d_{IL10} IL_{10}. \tag{18}$$

В системе (13)–(18) приняты следующие обозначения: M_c — плотность кардиомиоцитов; M — плотность моноцитов; M_{un} — плотность неактивированных макрофагов; IL_{10}, T_α, IL_1 — концентрации интерлейкина IL10, фактора некроза опухоли TNF-α и интерлейкина IL1; M_1, M_2 — плотности классически активированных M1 и альтернативно активированных M2 макрофагов соответственно. Начальные условия полагаются согласованными с условиями известных лабораторных экспериментов, представленных в [5].

Следует обратить внимание на то обстоятельство, что ключевую роль в описываемом динамическом процессе играют величины M_c и M. При этом особенность модели (13)–(18) состоит в том, что M_c и M, определяющие уровень повреждения миокарда и уровень реакции иммунной системы, не вычисляются в результате решения ОДУ, а заданы как динамические параметры. Их значения в каждый момент времени определяются лабораторными измерениями, выполненными в ходе экспериментального инфаркта миокарда в левом желудочке мыши [5]. Данный подход реализован впервые в математической модели инфаркта [5], развитием которой является система (13)–(18). Отметим также, что в [6] можно найти результаты решения обратной задачи для модели [5].

2.2 Численный метод

Для идентификации параметров разработанной модели и последующих исследований используется оптимизационный подход, который сводится к поиску минимума функционала, построенного на основе сопоставления решений прямых задач с экспериментальными данными в фиксированные моменты времени. Привлекались методы оптимизации двух типов — генетический и градиентный. Численные эксперименты показали достаточно высокую надежность стохастического генетического алгоритма [7], ранее широко применявшегося при оптимизации сложных гидродинамических систем. Градиентный метод работы [8], нацеленный на поиск локального минимума, показал свою эффективность, в первую очередь, как инструмент для "тонкой" коррекции решения обратной задачи, полученного генетическим алгоритмом. Для решения задачи Коши для нелинейной жесткой системы ОДУ использовался метод Адамса-Бэшфорта-Моултона, выбор которого основывался на результатах методических расчетов.

2.3 Результаты

На первом этапе исследований решалась обратная коэффициентная задача для математической модели (13)–(18) воспалительного процесса в ядре инфаркта миокарда, что позволило аккуратно описать наблюдаемую в лабораторных экспериментах динамику основных факторов воспаления при остром инфаркте миокарда

в левом желудочке сердца мыши. В качестве рабочего инструмента использовался генетический алгоритм, обеспечивший решение задачи минимизации функционала с привлечением не более 700–2000 индивидуумов и 6–10 поколений (на данном классе задач). Часть полученных параметров системы (13)–(18), как и решение прямой задачи, согласуется с экспериментальными данными, что свидетельствует, в первую очередь, об удовлетворительном качестве используемой биологической модели. Следует отметить, что в работе [5] собрана коллекция экспериментальных данных из разных литературных источников и собственных измерений этих авторов. Полнота этого набора измерений позволила посредством решения обратной коэффициентной задачи адекватно воспроизвести динамику практически каждой компоненты вектора решения системы (13)–(18). Исключение составляют величины плотностей классически и альтернативно активированных макрофагов: количественные экспериментальные измерения представлены в [5] лишь для их суммы. При этом динамика каждой группы макрофагов M1 и M2 на качественном уровне описана в целом ряде экспериментальных работ (см., например, [9]). Известно, в частности, что острая фаза инфаркта миокарда характеризуется доминированием провоспалительных (классически активированных) макрофагов M1, однако часть из них постепенно активируются альтернативно, т.е. пополняет ряды противоспалительных макрофагов M2. Численные эксперименты показывают, что существенную роль в установлении необходимого баланса макрофагов играют и провоспалительные TNF-α и IL1, участвующие в активации моноцитов-макрофагов. В результате уже на седьмые сутки инфаркта плотность противовоспалительных макрофагов M2 превышает плотность провоспалительных M1 макрофагов, что способствует выходу заболевания из острой стадии. Именно это обстоятельство послужило основной причиной отказа от математической модели работы [5], в рамках которой не удалось корректно описать взаимную динамику этих двух групп макрофагов. Переход к более совершенной модели (13)–(18) позволил решить эту проблему.

Выше отмечалось, что система (13)–(18) из-за наличия в ней двух динамических параметров представляет собой математическую модель совершенно определенного сценария биологического процесса (конкретного варианта течения заболевания у лабораторных мышей), что существенно ограничивает область ее применения. Для устранения этого недостатка ставилась задача замены экспериментальных данных о динамике кардиомиоцитов и моноцитов численными решениями нелинейных ОДУ. В результате серии численных экспериментов найдена структура уравнений, описывающих наблюдаемую *in vivo* динамику плотности моноцитов и клеток миокарда при инфаркте в левом желудочке мыши [5]. При этом предполагалось, что структура правой части новых уравнений определяется исключительно про- и противоспалительными факторами, которые учтены в модели (13)–(18):

$$\frac{dM_c}{dt} = \left(-q_1\frac{IL_1}{IL_1+q_{10}} - q_2\frac{T_\alpha}{T_\alpha+q_{20}} + q_3\frac{IL_{10}}{IL_{10}+q_{30}} + q_4\frac{M_2^{2.2}}{M_2^{2.2}+q_{40}^{2.2}}\right)M_c - q_5M_c, \tag{19}$$

$$\frac{dM}{dt} = d_1\frac{IL_1^7}{IL_1^7+d_{10}^7}M + d_2\frac{T_\alpha^{0.5}}{T_\alpha^{0.5}+d_{20}^{0.5}}M_c + d_3\frac{IL_{10}^{1.2}}{IL_{10}^{1.2}+d_{30}^{1.2}}M - d_4M. \tag{20}$$

Одновременно ставилась задача параметрической идентификации для каждого из уравнений (19) и (20). При этом решалась серия обратных коэффициентных задач, связывающих решения задачи Коши для уравнений (19) или (20) с экспериментальными динамическими профилями [5], в которых использовалось полученное в расчетах решение задачи Коши для системы (13)–(18). Отметим, что для решения задачи структурно-параметрической идентификации уравнений потребовалась разработка вычислительной технологии, основанной на комбинировании генетического и градиентного методов поиска минимума функционала. В рамках этой технологии после нахождения глобального минимума генетическим алгоритмом выполняется уточнение положения минимума градиентным методом. Более тщательное решение задачи минимизации функционала позволяет достичь, прежде всего, более точного описания экспериментальных данных, в особенности при больших значениях времени (т.е. после острой фазы инфаркта), где компоненты решения должны выходить на стационарный уровень.

На последнем этапе исследований уравнения (19) и (20) встраивались в систему (13)–(18), далее производилось уточнение параметров объединенной системы. Таким образом, на основе модели (13)–(18) и уравнений (19)–(20) разработана новая математическая модель динамики гибели клеток миокарда под влиянием факторов воспаления в ядре некротического повреждения, адекватно описывающая классический вариант заболевания — инфаркт миокарда в левом желудочке сердца мыши. В отличие от исходной модели (13)–(18), новая модель может быть использована как инструмент для изучения влияния дисбаланса про- и противовоспалительных факторов на исход заболевания.

С применением разработанной модели (13)–(20) выполнены численные эксперименты, направленные на решение актуальной для клинической практики задачи поиска оптимального варианта терапевтического

воздействия. Для выяснения условий, способствующих снижению негативных последствий массовой некротической гибели кардиомиоцитов, рассмотрены два варианта противоспалительной цитокиновой терапии — посредством снижения уровня провоспалительного TNF-α, а также через стимулирование противоспалительного цитокина IL10. Результаты расчетов показали, что оба варианта терапии дают выраженный положительный эффект, способствуя "сглаживанию" острой фазы процесса и замедлению гибели кардиомиоцитов. Однако, в рамках принятой модели управление с помощью IL10 представляется более эффективным.

Заключение

В настоящей работе представлены новые математические модели и результаты численного моделирования динамики гибели клеток мозга и миокарда. В ходе исследований на примере ишемического повреждения клеток головного мозга крысы продемонстрирована адекватность математической модели, учитывающей в достаточно общем виде все основные механизмы развития инфаркта — апоптоз и некроз клеток, динамику цитокинов, адгезию лейкоцитов и фагоцитоз продуктов распада в ядре инсульта.

При изучении гибели клеток миокарда ставилась задача более тщательного моделирования некротического процесса, который в случае острого варианта заболевания играет доминирующую роль. Главное внимание уделялось моделированию баланса про- и противоспалительных факторов, влияющих на течение и исход заболевания. Предложены новые математические модели, решен ряд важных для построения математических моделей инфаркта задач, связанных с разработкой вычислительной технологии структурной и параметрической идентификации новых уравнений и их систем на основе качественного и количественного согласия с экспериментальными данными.

Список литературы

[1] Thygesen K. et al. Третье универсальное определение инфаркта миокарда // Российский кардиологический журнал. 2013. Т. 2, № 100, приложение 1, 16с.

[2] Гусев Е.И., Скворцова В.И. Ишемия головного мозга. Москва: Медицина, 2001.

[3] Di Russo C. et al. A mathematical model of inflammation during ischemic stroke // ESAIM. EDP Sciences. 2010. V. 30, P. 15–33.

[4] Lu Y. et al. Molecular mechanisms responsible for microglia-derived protection of Sprague–Dawley rat brain cells during in vitro ischemia // Neuroscience Letters. 2005. V. 373, P. 159–164.

[5] Wang Y. et al. Mathematical modeling and stability analysis of macrophage activation in left ventricular remodeling post-myocardial infarction // BMC Genomics. 2012. V. 13, S. 21. 8p.

[6] Воропаева О.Ф., Плотников Н.Д., Цгоев Ч.А. Численное моделирование гибели клеток вследствие ишемии // Сб. трудов Международной конференции "Актуальные проблемы математики, информатики и механики". Воронеж, 12–15 сентября 2016г. Воронеж: Научно-исследовательские публикации. 2016. С. 221–223.

[7] Черный С.Г. и др. Численное моделирование течений в турбомашинах. Новосибирск: Наука, 2006.

[8] Кабанихин С.И., Ильин А.И., Криворотько О.И. Об определении параметров моделей, описываемых системами нелинейных дифференциальных уравнений // Сиб. электрон. матем. изв. 2014. Т. 11, С. 62–76.

[9] Troidl C. et al. Classically and alternatively activated macrophages contribute to tissue remodelling after myocardial infarction // J. Cell. Mol. Med. 2009. V. 13, iss. 9B, P. 3485–3496.

Плотников Никита Дмитриевич — студент Новосибирского государственного университета;
e-mail: plotnikov-nikita@yandex.ru;
Цгоев Чермен Аланович — студент Новосибирского государственного университета;
e-mail: smotca1595@gmail.com;
Воропаева Ольга Фалалеевна — д.ф.-м.н., ст. науч.сотр.

Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: vorop@ict.nsc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕБИТА СКВАЖИНЫ И ОБВОДНЕННОСТИ ПО ДОПОЛНИТЕЛЬНЫМ ИЗМЕРЕНИЯМ ДАВЛЕНИЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ

А. Ю. Приходько[1], М. А. Шишленин[1,2,3]

[1] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[3] *Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.622

Важной задачей диагностики скважины является оперативное определение изменения количества жидкости, поступающей в скважину (дебит), и отношения количества воды к количеству жидкости (обводненность). В статье проведен сравнительный анализ алгоритмов определения этих параметров на основе решения обратной задачи. Приведены результаты численных расчетов.

Ключевые слова: коэффициентная обратная задача; идентификация параметров; система ОДУ; генетический алгоритм; метод роя частиц; метод имитации отжига; дебит жидкости; обводненность

Введение

Важность решения прямой и обратной задачи для двухфазного потока (жидкость-газ) определяется тем, что на данный момент эксплуатируются более 100000 скважин в России. Нефтяным компаниям необходимо знать производительность каждой скважины для управления нефтедобывающими скважинами и планирования добычи. Мониторинг отдельных скважин также является требованием, предусмотренным различными нормативными актами. Постоянный мониторинг состояния скважин очень сложный и дорогостоящий процесс, требующий установки дополнительного специального оборудования. Мониторинг может быть осуществлен, если использовать стандартный набор телеметрии насоса, например, датчики давления и температуры, которые уже установлены почти на всех скважинах.

Проблема определения параметров скважины изучалась многими исследователями. В работе [6] предложен подход с использованием инфракрасной спектроскопии и физико-химических свойств исследуемой смеси. Некоторые методы опираются на получение измерений обводненности в устье, где условия наиболее подходящие [1, 2]. Одна из старейших технологий определения обводненности измеряет диэлектрические параметры жидкости [3]. Дебит отдельной скважины можно измерять с помощью расходомера. Однако прямое измерение многофазного потока в скважине по-прежнему является сложной задачей [7, 8]. В работе [15] был разработан эффективный метод оценки дебита по термограмме.

В данной работе предложен метод восстановления дебита скважины и обводненности продукции на основе решения обратной задачи с дополнительным измерением давления и температуры в устье скважины. Для решения обратной задачи и оценки искомых параметров применяются методы глобальной оптимизации: генетический алгоритм, метод Роя частиц, имитации отжига. Эти методы сравниваются с методом палеток [11, 12, 14]. Проведен сравнительный анализ алгоритмов определения этих параметров и приведены результаты численных расчетов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 17-51-540004, 16-29-15120, 16-01-00755) и Министерством Образования и Науки Республики Казахстан (проект 1746/GF4).

1 Постановка задачи

Зная давление и температуру в скважине необходимо в разработке систем сбора и транспортировки нефтепродуктов, расчет температурных режимов насосов, проектирование систем и методов оценки наличия парафиновых отложений и гидратообразований, проектировании газолифтных скважин.

Математическая модель основана на решении уравнения тепло- и массопереноса. При расчете теплофизических свойств водно-нефтегазовой смеси и структуры используется информация о стандартных характеристиках и компонентах нефтегазовой смеси [12, 14] . Алгоритм использует аналитические формулы расчета теплофизических свойств нефти, дифференциальных уравнений тепломассопереноса в двухфазной смеси, а также полуэмпирические формулы для расчета структуры потока.

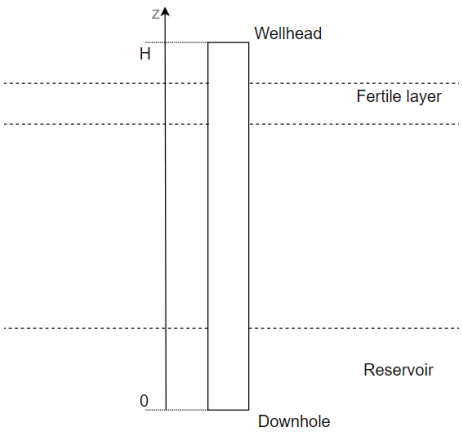


Рис. 1: Модель скважины.

Рассмотрим математическую модель распределения давления и температуры в скважине, описанную нелинейной системой обыкновенных дифференциальных уравнений.

Если давление P меньше давления дегазации (9 МПа), то жидкость состоит из воды и нефти (однофазный поток) $z \in (0, z_d)$:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\,10^{-6}\,\rho_{\rm l}\,g\,\cos\alpha\,-\,i_{\rm fr}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial t}{\partial z} = \frac{10^3}{C_{\rm l}\rho_{\rm l}}\,\alpha_{\rm lt}\,(t+273)\,\frac{\partial P}{\partial z} + 10^3\,\frac{i_{\rm fr}}{C_{\rm l}\,\rho_{\rm l}} - \frac{\pi D_i k_\tau}{G C_l}(t - t_{\rm \Gamma}); \tag{2}$$

Здесь z_d — точка, в которой давление опускается до уровня дегазации $P(z_d) = 9$ МПа (точка дегазации).

Предполагаем, что метановый газ (CH_4) растворяется в жидкости и если давление P превышает давление дегазации, т.е. в жидкости появляются газовые пузыри (двухфазный поток: вода, нефть и газ), то система уравнений принимает следующий вид $z \in (z_d, H)$:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\,10^{-6}\,\rho\,g\,\cos\alpha\,-\,i_{\rm fr}, \tag{3}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial t}{\partial z} = &\left\{\frac{10^3}{C_{\rm gl}\big(\rho_{\rm l}(1-\beta_{\rm g})+\rho_{\rm g}\beta_{\rm g}\big)}\Big[\alpha_{\rm lt}(1-\beta_{\rm g})\,(t+273)+\beta_{\rm g}\Big]\,\frac{\partial P}{\partial z} - \frac{\pi D_{\rm i} K_\tau}{G\,C_{\rm gl}}(t-t_{\rm \Gamma}) - \right.\\ &-\frac{G_{\rm og}L_{\rm p}}{G\,C_{\rm gl}}\,\frac{\partial}{\partial P}\Big(\frac{\rho_{\rm g}\beta_{\rm g}}{\rho_{\rm o}(1-\beta_{\rm g})+\rho_{\rm g}\beta_{\rm g}}\Big)\frac{\partial P}{\partial z} + 10^3\,\frac{i_{\rm fr}(1-\beta_{\rm g})}{C_{\rm gl}(1-\varphi_{\rm g})\big(\rho_{\rm l}(1-\beta_{\rm g})+\rho_{\rm g}\beta_{\rm g}\big)}\left.\right\}\div\\ &\div\left\{1+\frac{G_{\rm og}L_{\rm p}}{G\,C_{\rm gl}}\,\frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{\rho_{\rm g}\beta_{\rm g}}{\rho_{\rm o}(1-\beta_{\rm g})+\rho_{\rm g}\beta_{\rm g}}\Big)\right\}.\end{aligned} \tag{4}$$

Здесь P — давление (Па), t — температура (°C), z — текущая глубина (м). Подробное описание математической модели представлено в работе [11].

Предположим, что мы можем измерить давление и температуру в скважине (см рис. 1). В прямой задаче требуется найти распределение давления и температуры в скважине. Для решения прямой задачи к системе уравнений (1), (2), (3), (4) добавляем данные Коши

$$P(0) = P_0, \qquad t(0) = t_0 \tag{5}$$

и условие непрерывности

$$[P]_{z=z_d} = 0, \qquad [t]_{z=z_d} = 0. \tag{6}$$

Обратная задача заключается в определении дебита Q_{l} (тонн/сутки) и обводненности S_{w} (%) по измерениям температуры и давления в устье скважины:

$$P(H) = P_{data}, \qquad t(H) = t_{data} \tag{7}$$

Мы предполагаем, что все данные измеряются с погрешностью

$$\left|P_{data} - P^{\delta}_{data}\right| < \delta_P, \qquad \left|t_{data} - t^{\delta}_{data}\right| < \delta_t. \tag{8}$$

2 Решение обратной задачи

Сформулируем обратную задачу (1), (2), (3), (4), (5), (6) и (7) в виде нелинейного операторного уравнения:

$$A(q) = f^{\delta}. \tag{9}$$

Здесь $q = (Q_l, S_w)$, $f^{\delta} = (P^{\delta}_{data}, t^{\delta}_{data})$.

Будем решать обратную задачу минимизацией следующего функционала:

$$J(Q_l, S_w) = \left(P(H) - P^{\delta}_{data}\right)^2 + \left(t(H) - t^{\delta}_{data}\right)^2. \tag{10}$$

Для решения задачи минимизации (10) мы применяем генетический алгоритм (GA) [5], метод роя частиц (PSO) [9], метод имитации отжига (SA) [4] и проведем сравнение с методом палеток (BFS) [12, 13, 14].

3 Численные результаты

Проведены численные расчеты для определения двух параметров: дебита и обводненности. Зафиксируем следующие параметры: глубина скважины $H = 2000$ m, количество шагов $N = 2000$, размер шага $h = H/N = 1$ m.

Данные обратной задачи взяты для точного решения $Q_l = 200$ и $S_w = 50\%$. Мы предполагаем, что погрешность измерения данных составляет $\delta_P = 0.025$ и $\delta_t = 0.25$. Более того предполагаем, что давление P_0 и температура t_0 в забое также измеряются с погрешностью.

Система нелинейных дифференциальных уравнений (1), (2), (3), (4) и (5) решается численно от забое до устья скважины методом Адамса четвертого порядка.

Расчеты проводились до тех пор, пока не будет достигнут критерий остановки $J(Q_l, S_w) < 10^{-5}$.

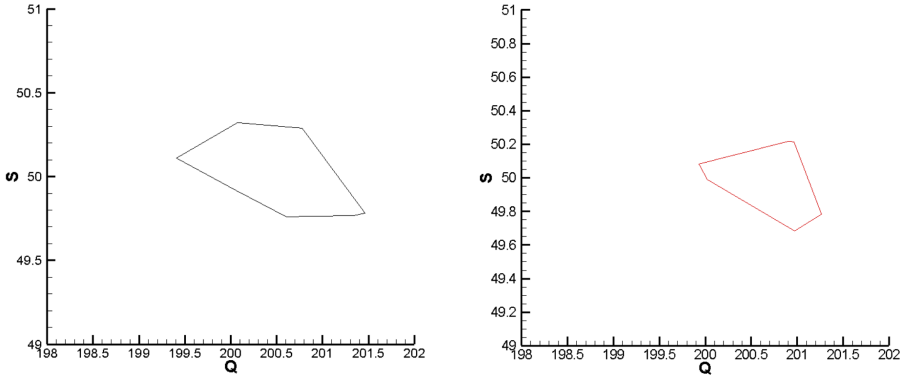
Расчеты проводились на ПК с процессором Intel Core i3-5005U, 2 физических ядра (2.00 GHz) и 4 GB ОЗУ.

Генетический алгоритм (GA). Параметры алгоритма: количество индивидуумов $p_0 = 150$, $p_0 * T_r = 45$, $d = 1.5$, $\mu = 0.3$. Метод достигает критерия остановки за 54 итерации. Численное решение обратной задачи представлено на рисунке рис. 2a.

Метод роя частиц (PSO). Параметры алгоритма: количество частиц — $NoP = 150$, коэффициенты при компонентах скорости: $\alpha = 0.3$, $\beta = 0.3$. Для достижения критерия остановки необходимо 97 итераций. Результат работы алгоритма показан на рис. 2b

Метод имитации отжига (SA). Параметры алгоритма: коэффициент охлаждения $C = 0.9$. SA делает 108 итераций, 12 шагов (изменение позиции). Получено следующее решение обратной задачи $Q_l = 200.342941$, $S_w = 49.975567$.

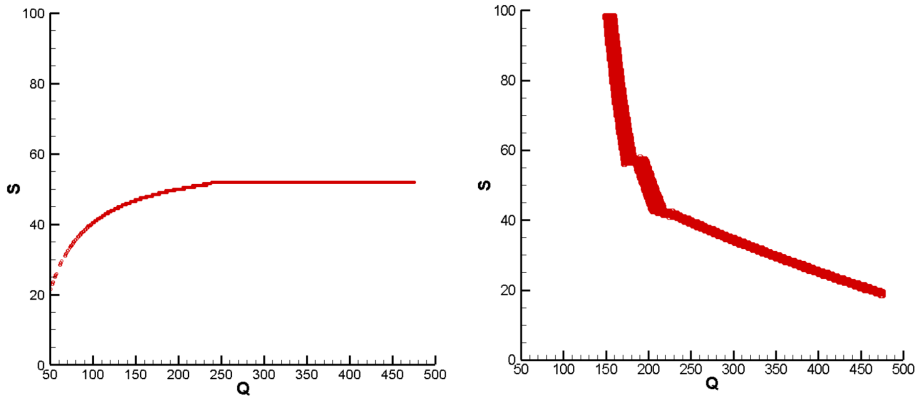
Метод палеток (BFS). При заданном уровне погрешности измерений строятся линии уровня давления и температуры. Решение обратной задачи имеет множество решений, которые сосредоточены в секторе пересечения соответствующих линий уровня. Результат работы алгоритма представлен на рис. 3a и рис. 3b. Множество решений, полученное методом палеток, представлено на рис. 4



(a) GA. Множество решений.

(b) PSO. Множество решений.

Рис. 2: Результаты работы оптимизационных алгоритмов



(a) Набор значений параметров, удовлетворяющих условию на давление

(b) Набор значений параметров, удовлетворяющих условию на температуру

Рис. 3: BFS

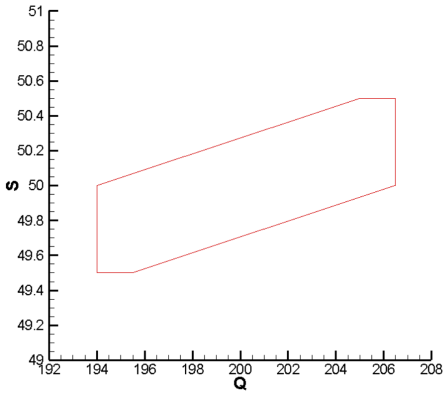


Рис. 4: BFS. Пересечение линий уровня. Множество решений задачи

4 Заключение

Все алгоритмы имеют достаточно высокую скорость решения обратной задачи, что позволяет оценивать необходимые параметры практически в режиме реального времени на ноутбуке (кроме метода палеток), что очень важно для инженеров для контроля скважины. Если необходимо получить одно решение, сле-

дует использовать метод имитации отжига, если нас интересует область параметров, нужно использовать метод роя частиц, генетический алгоритм и метод палеток. Отметим, что можно существенно уменьшить число итераций, учитывая априорную информацию об искомом решении [10, 13]. В дальнейшем планируется добавить восстановление газового фактора и других параметров действующего месторождения.

	GA	PSO	QMA	BFS
$J(Q_l, S_w) < 10^{-5}$	12.5 сек	37.7 сек	9.7 сек	21 мин
$J(Q_l, S_w) < 10^{-7}$	16.7 сек	49.5 сек	13.9 сек	21 мин

Таблица 1: Время вычислений для разных критериев остановки

Список литературы

[1] Liu K. T. et al. Application of a mass flowmeter for allocation measurement of crude oil production //SPE production engineering. – 1988. – Т. 3. – №. 04. – С. 633–636.

[2] Flahive R. M. et al. Production well testing utilizing a mass flow meter //SPE Annual Technical Conference and Exhibition. – Society of Petroleum Engineers, 1987.

[3] Hohn P. P. et al. Capacitance water-cut probe utilization in the Kern river field //SPE California Regional Meeting. – Society of Petroleum Engineers, 1989.

[4] Dueck G. W., Butler J. T. A heat quench algorithm for the minimization of multiple-valued programmable logic arrays //Computers & electrical engineering. – 1996. – Т. 22. – №. 2. – С. 103–107.

[5] Deb K. et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II //IEEE transactions on evolutionary computation. – 2002. – Т. 6. – №. 2. – С. 182–197.

[6] Mohamed A. M. O., El Gamal M., Zekri A. Y. Effect of salinity and temperature on water cut determination in oil reservoirs //Journal of Petroleum Science and Engineering. – 2003. – Т. 40. – №. 3. – С. 177–188.

[7] Webster M. J. et al. Well surveillance with a permanent downhole multiphase flowmeter //SPE Production & Operations. – 2006. – Т. 21. – №. 03. – С. 388–393.

[8] Pinguet B. G. et al. Field Experience in Multiphase Gas-Well Testing: The Benefit of the Combination of Venturi and Multienergy Gamma Ray //SPE Annual Technical Conference and Exhibition. – Society of Petroleum Engineers, 2006.

[9] Poli, Riccardo, James Kennedy, and Tim Blackwell. Particle swarm optimization. Swarm intelligence, 1(1) (2007): 33–57.

[10] Kabanikhin S.I., Shishlenin M.A. Quasi-solution in inverse coefficient problems // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. 2008. V. 16, iss. 7. P. 705–713.

[11] С. И. Кабанихин, А. Н. Черемисин, М. А. Шишленин. Задача определения обводненности и дебита в вертикальной скважине // Сибирские электронные математические известия. 2010. Т. 7. С. 362–379.

[12] С. И. Кабанихин, А. Н. Черемисин, М. А. Шишленин. Обратная задача определения обводненности и дебита в вертикальной фонтанной скважине // Сибирский журнал индустриальной математики. 2011. Т. 14, № 3. С. 31–36.

[13] Кабанихин С.И., Шишленин М.А. Об использовании априорной информации в коэффициентных обратных задачах для гиперболических уравнений // Тр. ИММ УрО РАН. 2012. Т. 18, № 1. с. 147–164.

[14] А.Э. Рязанцев, С.И. Кабанихин, М.А. Шишленин. Математическое обоснование использования систем телеметрии погружных насосов для непрерывного мониторинга работы добывающих скважин // Вестник ЦКР Роснедра. 2013. Т. 5. С. 32–36.

[15] Nian Y. L. et al. A novel method for predicting gas/oil flow rate from temperature log data //Journal of Petroleum Science and Engineering. – 2015. – Т. 133. – С. 801–809.

Алексей Юрьевич Приходько — студент ММФ,
Новосибирский государственный университет;
e-mail: prikhodko1997@gmail.com;
Максим Александрович Шишленин — д.ф.-м.н.,
с.н.с. Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН,
с.н.с. Института вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: mshishlenin@ngs.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ВОЗДУШНОГО БАССЕЙНА ГОРОДСКОГО ПОСЕЛЕНИЯ, РАСПОЛОЖЕННОГО В ГОРНОЙ КОТЛОВИНЕ (НА ПРИМЕРЕ Г. ЧИТЫ)

Э. А. Пьянова[1], Л. М. Фалейчик[2,3], А. А. Фалейчик[3]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН, 672014, Чита*

[3] *Забайкальский государственный университет, 672039, Чита*

УДК 502.3+519.6

Данная работа является частью исследований, направленных на изучение процессов загрязнения воздушных бассейнов городских агломераций, расположенных в горных котловинах, выявление городских территорий с высоким риском загрязнения атмосферного воздуха. На основе разрабатываемой в ИВМиМГ СО РАН мезомасштабной модели динамики атмосферы и переноса примеси в областях со сложным рельефом, адаптированной к условиям Читино-Ингодинской котловины в Забайкалье, выполнен численный эксперимент, описывающий один из вариантов развития метеорологической ситуации в регионе. Сценарное моделирование проводится с целью изучения влияния рельефа котловины на формирование локальных циркуляций, мощность и локализацию температурных инверсий в зимний период. На основе тестовых расчетов исследуется влияние различных проявлений зимнего мезоклимата в котловине на распространение загрязняющих примесей, поступающих с атмосферными выбросами предприятий теплоэнергетики г. Читы. Пространственный анализ результатов сценарных расчетов выполнен с использованием геоинформационных технологий. Результаты исследований могут быть использованы для оценок последствий процессов реиндустриализации экономики Забайкалья.

Ключевые слова: динамика атмосферы, качество воздуха, математическое моделирование атмосферных процессов, антропогенное воздействие, геоинформационные системы (ГИС).

Введение

Процессы реиндустриализации экономики России носят крайне неоднородный характер. Забайкалье не относится к числу лидеров экономического развития среди сибирских регионов. Поэтому так актуальны и важны количественные оценки последствий хозяйственной деятельности человека во всех сферах, в частности, при оценке качества атмосферного воздуха в крупных городах. На основе таких исследований появляется возможность более аргументированно с экономической точки зрения обосновывать решения по внедрению новых технологий, по переходу энергетических предприятий города на новые виды топлива.

Основной причиной низкого качества городского воздуха являются большие объемы загрязняющих выбросов от промышленных предприятий, автотранспорта и других источников-загрязнителей. Важно отметить, что качество воздуха также существенно зависит от погодных условий: формирование неблагоприятных метеоусловий способствует накоплению вредных примесей, даже когда промышленные предприятия снижают мощность выбросов. Примерами таких неблагоприятных метеорологических факторов являются безветренная погода, приземные и приподнятые температурные инверсии, формирующиеся в городских агломерациях и их окрестностях. Для изучения взаимосвязей между погодными процессами и качеством

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке проекта РФФИ № 17-01-00137, Программы фундаментальных исследований Президиума РАН I.33П, проекта II.2П/I.3-3 фундаментальных исследований СО РАН. Адаптация авторской модели для условий Забайкальского края выполнена в рамках гранта РГНФ, проект № 16-02-00102а. Расчеты выполнены с использованием ресурсов ЦКП Сибирский Суперкомпьютерный Центр ИВМиМГ СО РАН

атмосферы в городских агломерациях широко применяются методы численного моделирования [1–4 и др.], позволяющие на основе численного эксперимента провести анализ различных сценариев развития метеоситуаций, спрогнозировать и оценить на его основе риски превышений предельно допустимых концентраций загрязнений при различных метеорологических условиях.

Настоящая работа является продолжением цикла работ авторов, посвященных проблемам загрязнения воздушного бассейна сибирских городов [5, 6]. Важная, общая черта мезоклимата городов сибирского региона, особенно Забайкалья, — формирование температурных инверсий (приземных, приподнятых) в зимний период, когда территория Сибири подвержена воздействию Азиатского антициклона. Инверсионное распределение температуры затрудняет вертикальное перемешивание слоев воздуха, что приводит к застойным явлениям в атмосфере. При этом многие населенные пункты располагаются в горных долинах, в то время как низкие формы рельефа дополнительно способствуют формированию инверсионных условий. Ярким примером населенных пунктов, где сочетаются все перечисленные неблагоприятные факторы, обусловливающие низкое качество атмосферного воздуха в городе, особенно в зимний период, является город Чита.

1 Методология

Для моделирования развития атмосферных циркуляций и процессов распространения примесей в Читино-Ингодинской впадине мы использовали мезомасштабную негидростатическую модель динамики атмосферы и переноса примеси в областях со сложным рельефом, разрабатываемую в ИВМиМГ СО РАН с непосредственным участием авторов. Основными уравнениями модели являются три уравнения движения для нахождения компонент вектора скорости ветра, уравнения переноса тепла и влаги, уравнение неразрывности. Уравнения модели записаны в отклонениях, а значения полей метеоэлементов представляются в виде суммы фоновых крупномасштабных значений и отклонений от фона. Это связано с тем, что циркуляцию земной атмосферы в большей мере формируют два периодических процесса — годичное обращение планеты вокруг Солнца и суточное вращение Земли. В связи с этим мы можем выделить крупномасштабные атмосферные процессы и циркуляции локального характера, связанные с суточным ходом. Отклонения отражают эволюцию метеорологических полей, вызванную факторами локального характера, прежде всего рельефом местности и неоднородностями температуры подстилающей поверхности. В наших исследованиях предполагалось, что крупномасштабные поля метеоэлементов известны и заданы.

В модели также рассчитывается температура подстилающей поверхности, при этом учитывается неоднородность потоков прямой солнечной радиации, поступающих на участки поверхности различного уклона и экспозиции. Для задания граничных условий на нижней расчетной границе используется параметризационная модель приземного слоя [7]. Горизонтальные коэффициенты турбулентной диффузии рассчитываются по модели Смагоринского, а вертикальный коэффициент по k-e модели, где k — кинетическая энергия турбулентности, e — энергия диссипации. Для описания переноса пассивной примеси используется конвективно-диффузионное уравнение с начальными и граничными условиями.

Численные схемы для реализации модели построены на базе вариационных принципов с использованием сопряженных задач [2]. Вариационный подход обеспечивает энергетическую сбалансированность разностных схем, а также точный учет естественных краевых условий на границах области моделирования. Это особенно важно на нижней границе воздушных масс в условиях сложной орографии подстилающей поверхности. Для учета рельефа территории используются идеи метода "фиктивных"областей [8]. При численной реализации модели применялись методы расщепления. Конвективно-диффузионные операторы аппроксимированы монотонными транспортивными разностными схемами [9]. Описание модели динамики атмосферы и переноса примеси и используемых методов численной реализации можно найти в работах [2, 10, 11].

При изучении процессов формирования неблагоприятных метеорологических ситуаций в районе г. Читы мы использовали сценарный подход, суть которого заключается в том, чтобы описать мезоклимат исследуемой территории набором сценариев. Результаты расчетов по этим сценариям будут отражать особенности развития метеорологических ситуаций, типичных для исследуемых регионов. На основе сценарного моделирования можно рассчитать и экстремальные ситуации состояния атмосферы и процессов рассеяния загрязняющих примесей.

Для проведения численных исследований модель адаптировалась к орографии и другим характеристикам подстилающей поверхности выбранной территории. В нашей работе данные о высотах рельефа в узлах расчетной сетки получены с использованием ГИС-технологий [12] из находящихся в свободном доступе данных интерферометрической съемки земного шара — Shuttle Radar Topography Mission (SRTM). В работе были использованы данные SRTM 4 с разрешением 3 угловых секунды (≈ 90 м) [13].

Для настройки модели к климатическим условиям региона необходимо задать распределение крупномасштабных полей метеоэлементов. При прогнозных расчетах значения крупномасштабных фоновых полей обычно получают по глобальным моделям циркуляции атмосферы. В наших исследованиях для расчета сценариев мы предлагаем задавать различные варианты распределения метеополей, опирающиеся на значения климатических норм для соответствующих полей метеоэлементов в каждом из периодов года. И уже с таким набором параметров и распределений фоновых полей решать задачу на установление квазипериодического режима, отражающего суточное поведение полей метеоэлеметов над выбранной территорией. Практически проверено, что для выхода на квазипериодический режим достаточно 2–3 суток модельного времени.

Таким образом, проводя серии сценарных расчетов для каждого времени года, мы получаем и накапливаем данные о характере распределения полей метеоэлементов, описывающие особенности развития атмосферных циркуляций для региона. В дальнейшем эти данные можно использовать в качестве начальных условий при реализации более сложных сценариев развития метеоситуаций.

2 Результаты

По мезомасштабной модели динамики атмосферы и переноса примеси, адаптированной к условиям Забайкальского края, был проведен численный расчет для зимних условий, описывающий один из вариантов формирования локальных циркуляций и рассеивания загрязняющих примесей в районе г. Читы.

Для моделирования атмосферных циркуляций была выбрана область 100×100 км^2 (рис. 1). По вертикали расчеты велись до высоты 4.2 км. В центре области выделен город. Он находится в котловине — Читино-Ингодинской впадине, которая расположена между Яблоновым хребтом и хребтом Черского.

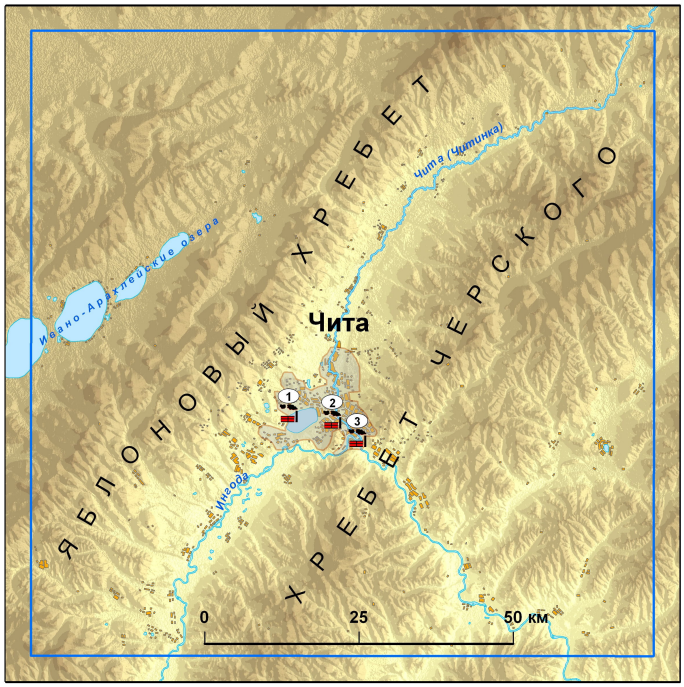


Рис. 1: Область моделирования

Численные расчеты проводились на сетке $200\times200\times50$ узлов с шагами $\Delta x=\Delta y=500$ м по горизонтали, по вертикали шаг был неравномерный:

$$\Delta z_k=\begin{cases}30, & k=1,\ldots,20,\\ 50, & k=21,\ldots,30,\\ 100, & k=31,\ldots,35,\\ 150, & k=36,\ldots,40,\\ 200, & k=41,\ldots,50.\end{cases}$$

Фоновое распределение температуры по вертикали задавалось по формуле $T(z) = T_0 - \gamma z$, где T_0 — температура атмосферы на уровне нижней точки поверхности, γ — вертикальный градиент температуры (^{o}C/м). Температура поверхности в начальный момент времени полагалась равной $T_0 = -25$ ^{o}C. Стратификация атмосферы задавалась устойчивой, до высоты 800 м параметр $\gamma = 0.0028$ ^{o}C/м, выше $\gamma = 0.0045$ ^{o}C/м.

Для городской застройки, замерзших водоемов и остальной территории учитывались различия соответствующих значений альбедо поверхностей и других параметров модели. В эксперименте предполагалось, что развитие циркуляций происходит только под действием температурной неоднородности подстилающей поверхности. Фоновый набегающий поток отсутствует.

На рисунках 2, 3 представлены вертикальные разрезы поля температуры через середину области моделирования. Видно, что и в дневное, и в ночное время подстилающая поверхность холоднее, чем слой воздуха, располагающийся над ней, то есть в долине формируется приземная инверсия. При таких условиях вертикальное перемешивание в нижнем слое затруднено. Это способствует накоплению загрязняющих примесей от источников выбросов, располагающихся внутри инверсионного слоя. Выше инверсионного слоя рассеивание происходит активнее. На рис. 3 можно видеть, что в ночное время в численном эксперименте наблюдалось формирование и приподнятой инверсии. В этом случае негативное влияние на атмосферу города оказывают источники выбросов, расположенные под нижней кромкой инверсии, поскольку рассеивание примесей будет происходить в атмосфере ниже приподнятого инверсионного слоя. Формирование таких неблагоприятных метеорологических условий в зимнее время характерно практически для всей территории Сибири [14]. Исследование влияния инверсионных условий на качество атмосферы в городах России можно найти в работах [15, 16] и др.

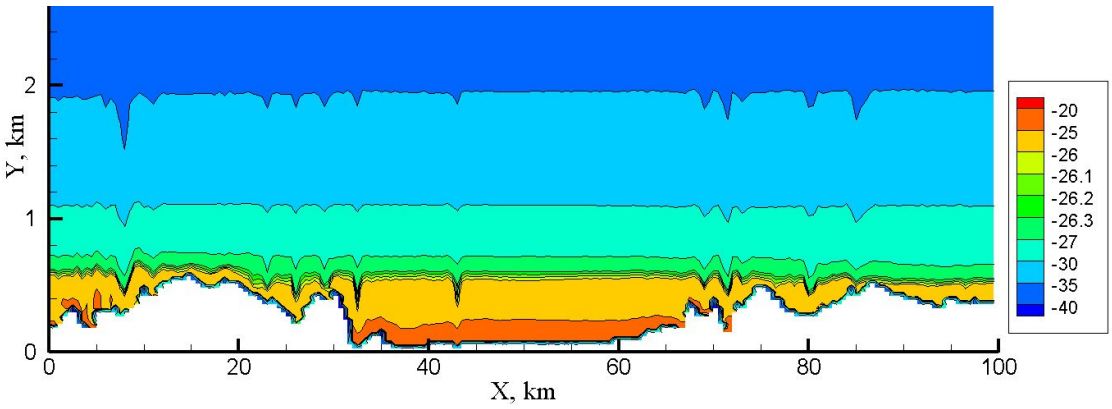


Рис. 2: Вертикальный разрез поля температуры (^{o}C), 14 ч местного времени

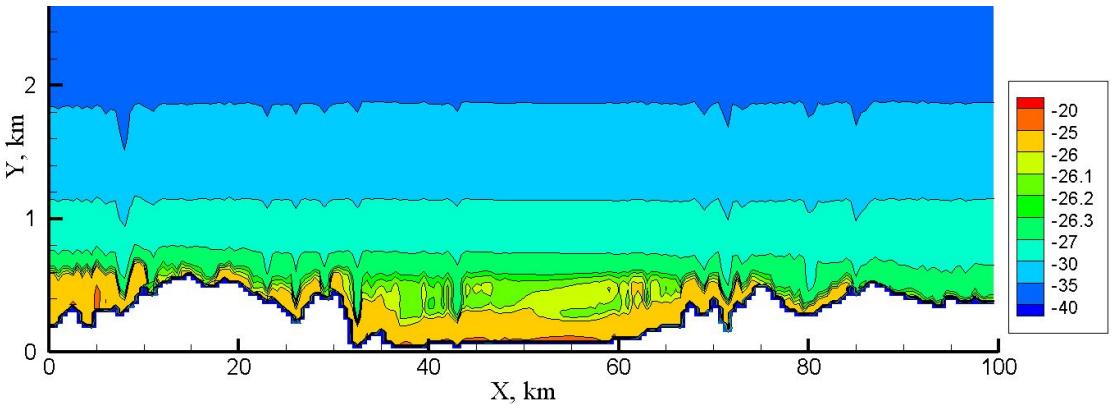
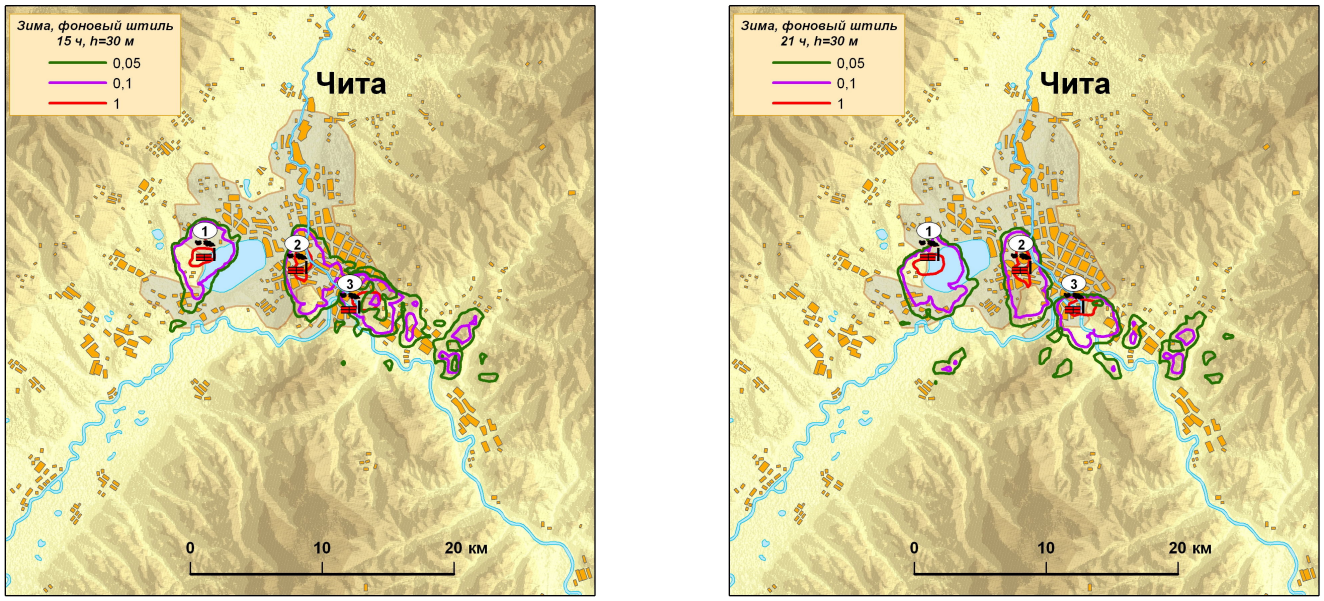


Рис. 3: Вертикальный разрез поля температуры (^{o}C), 24 ч местного времени

В рамках описанного зимнего сценария на фоне смоделированной метеорологической ситуации мы рассмотрели процесс переноса пассивных невесомых примесей от трех точечных источников. Местоположение модельних источников на расчетной сетке было задано максимально близко к локализации промышленных

труб двух ТЭЦ и котельной города Читы. Источник № 1 имитирует трубу высотой 120 м над поверхностью земли, источники № 2 и № 3 соответствуют трубам высотой 90 м. В численном эксперименте мощность каждого источника задавалась равной 1 условной единице в секунду. Предполагалось, что в начальный момент во всей области концентрации примесей нулевые.

На рисунке 4 представлены изолинии концентраций пассивных примесей на высоте 30 м над поверхностью в дневное (рис. 4, а) и в ночное (рис. 4, б) время. Видно, что от источника № 1 загрязнение преимущественно переносится на юг и юго-запад по долине, а от двух других источников примеси рассеиваются в юго-восточном направлении.



а) б)

Рис. 4: Изолинии концентраций пассивных примесей (усл. ед.) на высоте 30 м над поверхностью: а) 15 ч и б) 21 ч местного времени

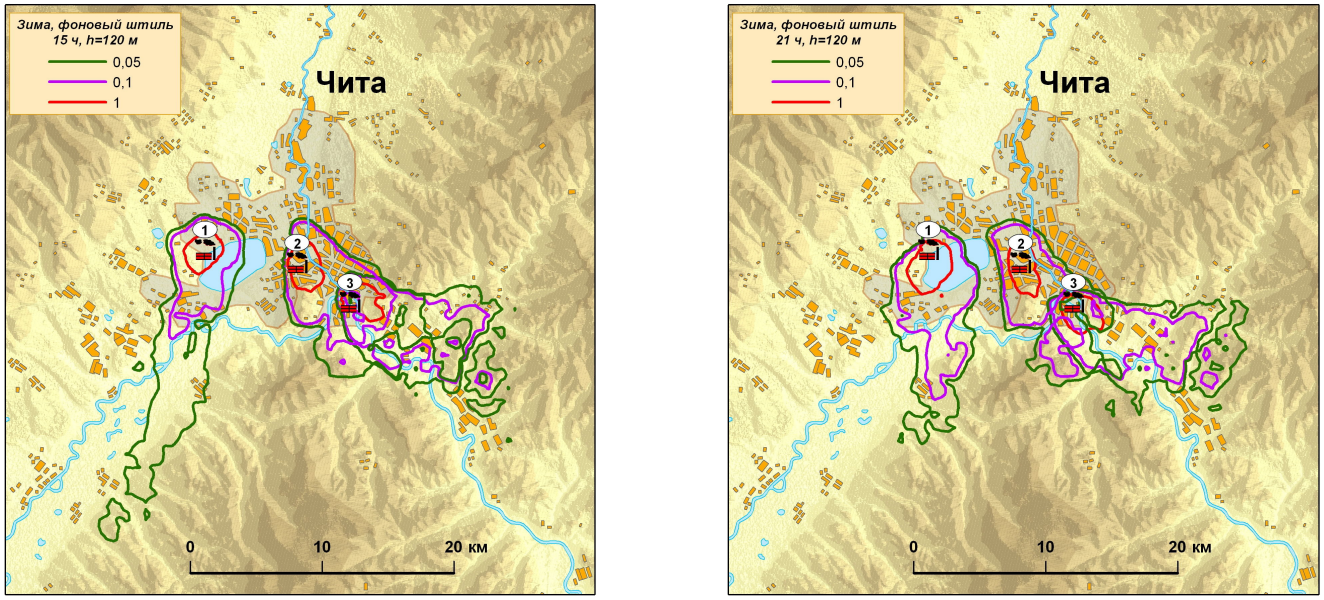
На высоте 120 м над поверхностью направление переноса сохраняется (рис. 5). На этой высоте концентрации выше, поскольку источники высокие, и рассеивание происходит в основном выше слоя приземной инверсии.

Можно отметить, что в условиях рассмотренного зимнего сценария менее всего на качество атмосферы города Читы влияют выбросы от источника № 1. В то время как выбросы от источников № 2 и № 3 рассеиваются в атмосфере юго-восточной части города.

Заключение

На основе численной модели динамики атмосферы и комплекса программ выполнен сценарный расчет, описывающий один из вариантов развития атмосферных циркуляций и распространения пассивных примесей в районе г. Читы в зимний период. Модель адекватно описывает процессы формирования приземных и приподнятых инверсий в Читино-Ингодинской впадине. Несмотря на отсутствие фонового набегающего потока, изолинии концентраций имеют достаточно сложных характер, обусловленный влиянием рельефа и температурных неоднородностей подстилающей поверхности. Таким образом, можно констатировать, что местные локальные атмосферные циркуляции оказывают существенное влияние на перераспределение примесей над территорией города.

Используемая модель и сценарный подход позволяют изучать закономерности формирования полей концентрации примесей как от действующих, так и от потенциально возможных источников в регионе. При этом отметим, что модельные сценарии распространения пассивных примесей подходят для описания рассеивания химически неактивных веществ. Для моделирования атмосферного переноса химически активных веществ необходимо использовать более сложные уравнения, учитывающие химическую трансформацию примесей. Использование условных единиц в расчетах концентраций загрязнений позволяет, зная мощности



а) б)

Рис. 5: Изолинии концентраций пассивных примесей (усл. ед.) на высоте 120 м над поверхностью: а) 15 ч и б) 21 ч местного времени

выбросов каждого вида примесей для каждого из источников, достаточно просто получить оценочные значения концентраций и в натуральных единицах. Для представленного численного эксперимента чем ближе реальные узучаемые примеси по своим характеристикам будут соответствовать невесомой пассивной примеси, тем точнее будут эти оценки. Более того, это позволит, не прибегая к повторному проведению расчетов с новыми данными о мощности выбросов, получить предварительные оценки изменения качества воздушной среды территории в результате перехода предприятий на новые технологии и новые виды топлива.

Дальнейшие исследования предполагают моделирование сценариев развития локальных атмосферных циркуляций при других вариантах задания фоновых климатических полей, учет фоновых набегающих потоков различного наравления, проведение численных расчетов для изучения распространения как невесомых, так и “тяжелых” примесей.

Список литературы

[1] Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 320 с.

[2] Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. Новосибирск: Наука, 1985. 256 с.

[3] Integrated Systems of Meso-Meteorological and Chemical Transport Models / Editors Baklanov A., Makhura A., Sokhi R. Springer, 2011.

[4] Барт А.А., Старченко А.В., Фазлиев А.З. Информационно-вычислительная система для краткосрочного прогноза качества воздуха над территорией г. Томска // Оптика атмосферы и океана. 2012. Т. 25. № 7. С. 594–601.

[5] Pyanova E.A., Penenko V.V. and Faleychik L.M. Scenario studies of local atmospheric circulations in the Krasnoyarsk region // Proc. SPIE 10035, 22nd International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics, 100356D (November 29, 2016); doi:10.1117/12.2249043.

[6] Pyanova E.A., Penenko V.V. and Faleychik L.M. Численное исследование процессов атмосферного переноса примеси над территорией городской агломерации в условиях сложной орографии// ИНТЕРЭКСПО ГЕО-СИБИРЬ. 2017. Т. 4. № 1. С. 82–87.

[7] Казаков А.Л., Лыкосов В.Н. О параметризации взаимодействия атмосферы с подстилающей поверхностью при численном моделировании атмосферных процессов // Труды ЗапСибНИИ. 1982. Вып. 55. С. 3–20.

[8] Алоян А.Е., Фалейчик А.А., Фалейчик Л.М. Алгоритм численного решения метеорологических задач в случае криволинейной области // Математические модели рационального природопользования. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-е, 1989. С. 14–35.

[9] Penenko V., Tsvetova E. Discrete-analytical methods for the implementation of variational principles in environmental applications // J. of Computation and Applied Mathematics. 2009. V. 226, iss. 1. P. 319–330.

[10] Пьянова Э.А., Фалейчик Л.М. Информационно-вычислительная технология для сценарных оценок динамики и качества атмосферы // Вычислительные технологии. 2012. Т. 17. № 1. С. 109–119.

[11] Пьянова Э.А. Исследование трансформации воздушного потока над термически и орографически неоднородной подстилающей поверхностью // Вычислительные технологии. 2005. Т. 10. № S3. С. 106–111.

[12] Фалейчик Л.М. Геоинформационное обеспечение численного моделирования локальных атмосферных процессов // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Информационные технологии. 2012. Т. 10. № 2. С. 14–24.

[13] Jarvis A., Reuter H.I., Nelson A., Guevara E. Hole-filled seamless SRTM data V4, International Centre for Tropical Agriculture (CIAT). 2008, available from http://srtm.csi.cgiar.org

[14] Климатические характеристики условий распространения примесей в атмосфере. Справочное пособие / Под ред. Э.Ю. Безуглой, М.Е. Берлянда. Ленинград: Гидрометеоиздат, 1983. 328 с.

[15] Битехтина М.А., Михайлюта С.В., Леженин А.А., Тасейко О.В. Эволюция пограничного слоя и особенности загрязнения атмосферы города // Вестник Кемеровского государственного университета. 2012. Т. 4. № 2. С. 143–148.

[16] Ячмёнева Н.В., Гольвей А.Ю. Повторяемость инверсий и их влияние на уровень загрязнения атмосферного воздуха в г. Челябинске // Вестник Челябинского государственного университета. 2011. № 5. С. 84–89.

Эльза Андреевна Пьянова — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: pyanova@ommgp.sscc.ru;
Лариса Михайловна Фалейчик — к.т.н., ст.науч.сотр. Института природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН;
доцент Забайкальского государственного университета;
e-mail: lfaleychik@bk.ru;
Андрей Анатольевич Фалейчик — к.ф.-м.н., доцент Забайкальского государственного университета;
e-mail: faa55@bk.ru.
Дата поступления — 13 июля 2017 г.

АНАЛИЗ РАДИОАКТИВНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ И ОНКОЗАБОЛЕВАЕМОСТИ НАСЕЛЕНИЯ ПОСЁЛКОВ ТОМСКОЙ ОБЛАСТИ В ЗОНЕ ВЛИЯНИЯ ВЫБРОСОВ СИБИРСКОГО ХИМИЧЕСКОГО КОМБИНАТА

В. Ф. Рапута[1], Т. В. Ярославцева[2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский НИИ гигиены Роспотребнадзора, 630108, Новосибирск*

551.511.42.001.572(571.14)

Предложена модель реконструкции региональных пылеаэрозольных выпадений ^{137}Cs и ^{90}Sr от стационарных источников Сибирского химического комбината. Выполнен совместный численный анализ данных наблюдений, реконструкции радиоактивного загрязнения и онкозаболеваемости населения ряда посёлков Томской области. В зависимости от расстояния от источников и направления выноса выполнены оценки вклада радиационного фактора на развитие заболеваемости.

Ключевые слова: радионуклид, загрязнение, модель, реконструкция, заболеваемость.

Введение

Объективная оценка рисков онкологических заболеваний при воздействии ионизирующей радиации является актуальной проблемой радиационной эпидемиологии. При отсутствии радиационных техногенных загрязнений, основную часть облучения население получает от естественных источников радиации, при этом около 50 % годовой дозы — за счет продуктов распада радона. Опасность для населения представляют дочерние продукты его распада — изотопы висмута, свинца и полония, атомы которых, оседая на мельчайших частях пыли, образуют радиоактивные аэрозоли. Попадание таких аэрозолей в организм приводит к увеличению вероятности онкологических заболеваний органов дыхания [1].

Значительный вклад в радиоактивное загрязнение Томской области внёс Сибирский химический комбинат (СХК), находящийся в 10–12 км от г. Томска и функционирующий с 1953 г. Только в 30 километровой зоне влияния его газоаэрозольных выбросов расположено несколько десятков населенных пунктов с населением около 650 тыс. человек, включая города Северск и Томск [2]. Производственная деятельность СХК сопровождалась образованием большого количества радиоактивных выбросов примесей в атмосферу. Весьма значительные загрязнения территорий различными радионуклидами фиксировалось на расстояниях 30–40 км от промышленной зоны комбината [1].

1 Восстановление полей региональных выпадений радионуклидов от СХК

Численное описание полей концентраций примесей в атмосфере на значительных удалениях от источника допускает значительные упрощения. Установлено, что, начиная с расстояний порядка 7-10 км от источника, распределение концентрации примеси практически выравнивается по высоте слоя перемешивания. На таких расстояниях влияние ряда параметров становиться не существенным. К ним следует отнести высоту источника, скорость оседания аэрозольных частиц, коэффициент вертикального турбулентного обмена и т.д. В

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН, проект 18.

этом случае поле осредненной за длительный промежуток времени концентрации от точечного источника описывается соотношением [3]

$$\bar{q}(r,\varphi) = \frac{M \cdot g(\varphi)}{2\pi \cdot u \cdot h \cdot r} \tag{1}$$

где r, φ — полярные координаты расчетной точки с началом в месте расположения источника, $g(\varphi)$ — вероятность противоположного φ направления ветра на высотах пограничного слоя атмосферы, M — мощность источника, u, h — средняя скорость ветра и толщина слоя перемешивания.

Полагая плотность аэрозольных выпадений пропорциональной концентрации примеси в воздухе, получим, что для каждого фиксированного направления выноса имеет место соотношение

$$\Phi(r) = \frac{\theta}{r} \tag{2}$$

Здесь $\theta = \frac{\lambda \cdot M}{2\pi \cdot u \cdot h}$, λ — коэффициент взаимодействия примеси с подстилающей поверхностью.

С использованием модели оценивания (2) и данных измерений пылеаэрозольных отложений ^{137}Cs и ^{90}Sr в чердачных помещениях жилых и производственных зданий 24 населённых пунктов Томской обл. [4] проведена численная реконструкция полей радиоактивного загрязнения территорий выбросами ядерно-энергетического комплекса СХК в 100-километровой зоне. Схема размещения обследованных населённых пунктов представлена на рис. 1.

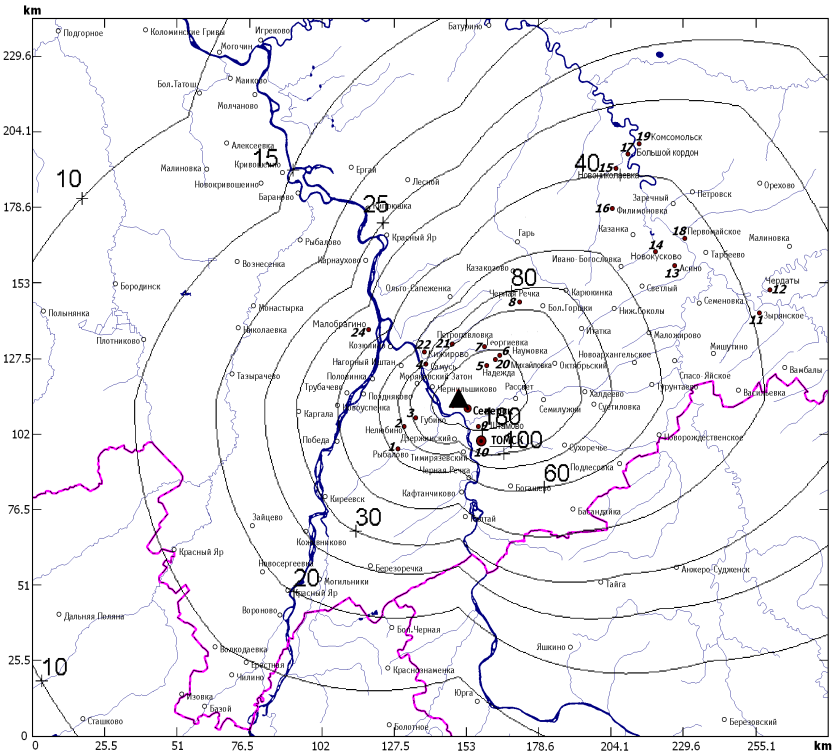


Рис. 1: Схема отбора проб в населённых пунктах Томской области. Численная реконструкция поля выпадений ^{137}Cs (Бк/м^2). • — обследованные населённые пункты, ▲ — основной источник выбросов радионуклидов

Для восстановления плотности выпадений радионуклидов для конкретного створа выноса использовались измерения в одном из посёлков, находящемся в этом створе. В частности, для северо-восточного сектора в качестве опорного населённого пункта были выбраны п.п. Георгиевка, Михайловка (рис. 2), в направлении на северо-запад — п. Самусь, в южном направлении — п. Штамово.

Согласие численно восстановленных и измеренных плотностей выпадений радионуклидов по направлениям выноса оказалось вполне удовлетворительным [2]. Проведённое оценивание показало, что максимальный вынос радионуклидов происходил в северо-восточном направлении и превышает вынос в северо-западном

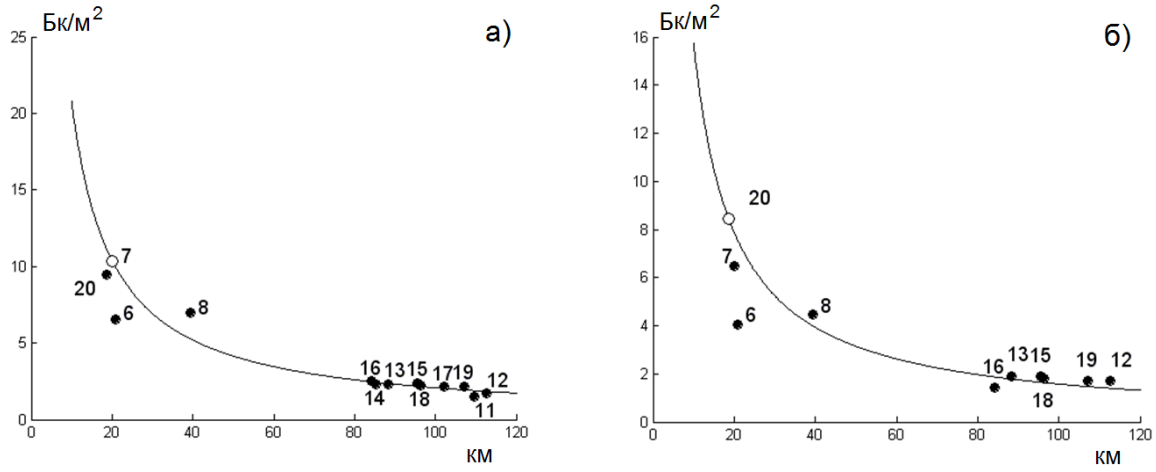


Рис. 2: Восстановленная по модели (2) нормированная на повторяемость направлений ветра плотность выпадений ^{137}Cs (а) и ^{90}Sr (б) в посёлках к северо-востоку от СХК. ∘ — опорные, • — контрольные точки наблюдений

направлении примерно в 7-8 раз [5]. Однако, для получения более точной пространственной картины распределения радионуклида, кроме розы ветров, необходим более детальный учёт климатических характеристик распределения скоростей ветра и высот слоя перемешивания по направлениям выноса.

2 Совместный анализ данных пылеаэрозольных выпадений радионуклидов и онкозаболеваемости населения.

На основе разработанной модели реконструкции регионального загрязнения стационарными источниками СХК и данных наблюдений была проведена оценка вклада радиационного фактора в онкозаболеваемость населения посёлков Томской обл., находящихся в зоне влияния газоаэрозольных выбросов этого комбината. Интенсивность онкозаболеваемости населения посёлков представлялась в виде следующей суммы слагаемых

$$S = R + F, \qquad R = C \cdot P \tag{3}$$

где R — заболеваемость, обусловленная радиационным фактором, F — фоновая составляющая, P — измеренная в населённом пункте плотность пылеаэрозольных выпадений радионуклида (Бк/м^2), C — коэффициент пропорциональности.

По данным измерений плотности выпадений и результатов обследований онкозаболеваемости не менее чем в двух посёлках, неизвестные параметры C, F могут быть найдены из решения системы двух линейных уравнений, составленных на основе соотношений (3). С учётом определённых требований в качестве опорных населённых пунктов могут быть выбраны п.п. Асино и Малобрагино, находящиеся на северо-восточном и северо-западном направлениях выноса соответственно. Население п. Асино составляет около 30 тыс. человек, измеренная плотность пылеаэрозольных выпадений ^{137}Cs на чердаках жилых зданий этого посёлка составила 47.4 Бк/м^2, интенсивность общей онкозаболеваемости составила 296.9 $^0/_{0000}$. Население п. Малобрагино около 400 человек, измеренная плотность пелеаэрозольных выпадений ^{137}Cs — 19.3 Бк/м^2, интенсивность общей онкозаболеваемости — 228.8 $^0/_{0000}$.

Выбор п. Асино в качестве опорного был обусловлен следующими причинами: посёлок находится на направлении преобладающего сноса радиоактивных примесей от СХК и в нём проживает существенно большее по численности население (по сравнению с другими посёлками), что обеспечивает более высокую степень оценивания онкозаболеваемости по данным диспансеризации. Согласно розе ветров, п. Малобрагино наоборот находится на направлении невысокого сноса радионуклидов со стороны СХК. В нём был экспериментально зафиксирован один из наиболее низких уровней пылеаэрозольных выпадений ^{137}Cs и ^{90}Sr.

Заболеваемость и смертность от злокачественных новообразований изучалась на основании официальной учетно-отчетной документации Томского областного онкологического диспансера и базы данных лаборатории эпидемиологии ГУ НИИ онкологии СО РАМН за 1993–2006 гг. [6]. Адекватность модели (3) проверялась

Таблица 1: Результаты оценивания по модели (3) интенсивных показателей общей заболеваемости злокачественными новообразованиями в посёлках Томской обл. (на 100 тыс. населения) в зависимости от плотности выпадений ^{137}Cs (Бк/м^2) в зоне влияния СХК

Населенный пункт	Прогнозная оценка заболеваемости	Результаты обследований	Плотность выпадений ^{137}Cs (Бк/м^2)
1. Самусь	264.1	193.6	34
2. Новокусково	294.3	284.5	46.6
3. Новониколаевка	285.2	253.1	42.8
4. Филимоновка	297.7	243.9	48
5. Наумовка	494.5	398.9	130
6. Рыбалово	357.7	364.3	73
7. Нелюбино	271.3	312.5	37
8. Губино	254.5	326	30

на данных измерений ^{137}Cs и результатов обследований онкозаболеваемости населения для 8 населённых пунктов Томской области с численностью населения более 400 человек в каждом. В этих поселках отмечалась корреляционная связь между плотностью пыле-аэрозольных выпадений ^{137}Cs и общей онкозаболеваемостью населения [7]. Результаты оценивания представлены на рис. 3 и табл. 1.

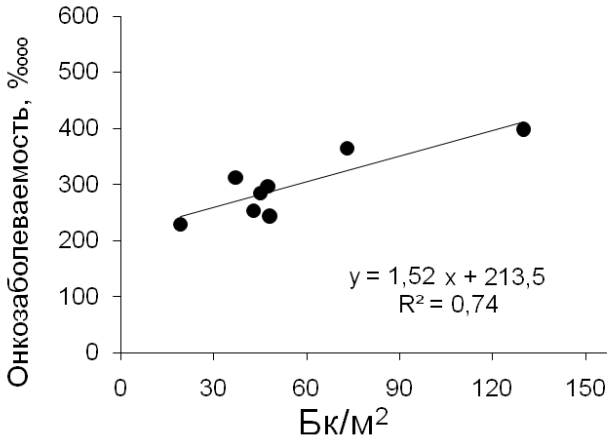


Рис. 3: Корреляционная зависимость между плотностью пыле-аэрозольных выпадений ^{137}Cs в поселках Томской области и общей онкозаболеваемостью их населения в зоне влияния выбросов СХК

Анализ результатов моделирования показывает удовлетворительное согласие прогнозных оценок данным обследования заболеваемости населения контрольных посёлков. Довольно высокий уровень соответствия имеет место для поселков 2–5, находящихся северо-восточнее СХК и на преобладающем направлении выноса радионуклидов от стационарных источников. Для п. Самусь, находящегося северо-западнее СХК, оценка заболеваемости получилась несколько выше результатов обследования. Для п.п. 6-8 имеет место немонотонный характер изменения плотности пылеаэрозольных выпадений ^{137}Cs в зависимости от расстояния до источников СХК. Возможно, в этом случае имели также место дополнительные факторы радиационного воздействия, связанные с аварийными выбросами радионуклидов от производств СХК.

3 Заключение

Проведённое теоретическое исследование и анализ на его основе данных натурных наблюдений показывает возможность вполне адекватной реконструкции картины радиоактивного загрязнения территорий в рамках достаточно простых регрессионных зависимостей, базирующихся на асимптотических свойствах решений

полуэмпирического уравнения турбулентной диффузии. Необходимо отметить, что в данном исследовании ^{137}Cs и ^{90}Sr следует рассматривать скорее всего как трассерные радионуклиды, так как эксплуатация производств комбината была связана с существенными выбросами в атмосферу радиоактивных газов, изотопов йода, а также аэрозольных примесей, содержащих уран-234, 235, 238, плутоний-239, америций-241.

При интерпретации полученного материала необходимо учитывать, что злокачественные образования являются полиэтиологичными заболеваниями, факторами риска развития которых является не только радиационное воздействие, но достаточно сложная совокупность таких факторов, как химическое воздействие, демографические показатели, образ жизни, конституциональные особенности организма и др. При воздействии на человека "малых" доз ионизирующего излучения радиационный фактор не доминирует, а конкурирует с другими факторами. Существенным вкладом в решение этой задачи может явиться генетический анализ, который позволит уточнить наличие биологических последствий влияния радиации на состояния здоровья населения, проживающего в зоне влияния СХК.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 18.

Список литературы

[1] Рихванов Л.П. Общие и региональные проблемы радиоэкологии. Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 1997. 383 с.

[2] Экологический мониторинг. Состояние окружающей среды Томской области в 1998 г. Томск, 1999. 231 с.

[3] Рапута В.Ф., Королёва Г.П., Горшков А.Г., Ходжер Т.В. Исследование процессов длительного загрязнения окрестностей Иркутска тяжелыми металлами // Оптика атмосферы и океана. 2001. Т. 14, № 6–7. С. 623–626.

[4] Меркулов В.Г., Глухов Г.Г., Резчиков В.И. Использование пылеаэрозольных выпадений для радиационного мониторинга окружающей среды // Труды междунар. конф. "Радиоактивность и радиоактивные элементы в среде обитания человека Томск, Изд-во Томского политехнического университета, 1996, С. 464–467.

[5] Климат Томска. Л.: Гидрометеоиздат, 1982. 176 с.

[6] Писарева Л.Ф., Одинцова И.Н., Бояркина А.П., Чердынцева Н.В., Воевода М.И., Белявская В.А., Рапута В.Ф., Чойнзонов Е.Л. Заболеваемость и смертность от злокачественных новообразований населения, проживающего в зоне влияния Сибирского химического комбината // Сибирский онкологический журнал. 2009. № 6. С. 28–37.

[7] Писарева Л.Ф., Одинцова И.Н., Рапута В.Ф., Воробьёв В.А., Ананина О.А. Анализ состояния длительного радиоактивного загрязнения и онкозаболеваемости населения посёлков Томской области в зоне регионального влияния выбросов Сибирского химического комбината / Материалы IV международ. конф. "Радиоактивность и радиоактивные элементы в среде обитания человека". Томск: Изд-во ТПУ. 2013. С. 408–411.

Владимир Федотович Рапута — д.ф.-м.н., гл. науч. сотр.
Института вычислительной математики и
математической геофизики СО РАН;
e-mail: raputa@sscc.ru;
Татьяна Владимировна Ярославцева — к.т.н., ст. науч. сотр.
Новосибирского НИИ гигиены Роспотребнадзора;
e-mail: tani-ta@list.ru.
Дата поступления — 30 апреля 2017 г.

МОДЕЛИ РЕКОНСТРУКЦИИ ПОЛЕЙ ВЫПАДЕНИЙ РАДИОНУКЛИДОВ ОТ ЯДЕРНЫХ ВЗРЫВОВ И АВАРИЙ

В. Ф. Рапута[1], Т. В. Ярославцева[2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский НИИ гигиены Роспотребнадзора, 630108, Новосибирск*

551.511.42.001.572(571.14)

Предложены модели оценивания полей атмосферных выпадений разнородных аэрозольных примесей от точечных и вертикально распределённых источников по данным наблюдений осевых концентраций. На данных натурных наблюдений радиоактивного загрязнения территорий проведена апробация предложенных моделей применительно к ряду испытательных ядерных взрывов на Семипалатинском полигоне. Применительно к Восточно-Уральскому радиоактивному следу численно восстановлена осевая концентрация выпадений радионуклидов.

Ключевые слова: аэрозоль, модель, параметр, оценка, радиоактивное загрязнение.

Введение

Численное оценивание полей радиоактивного загрязнения территорий является весьма актуальной задачей. В ряде случаев, связанных с аварийным выбросом радионуклидов, использование методов прямого моделирования переноса загрязняющих примесей сталкивается со значительными затруднениями. В первую очередь это обусловлено разносторонним обеспечением моделей переноса необходимой входной информацией. Она включает в себя задание в начальный момент времени вертикального распределения радиоактивности в облаке взрыва, описание функций распределения по размерам радиоактивных частиц, определение поля ветра в значительном диапазоне высот и т.д. Ситуация может быть существенно улучшена при наличие дополнительной экспериментальной информации о полях радиоактивных выпадениях. В этом случае существует возможность создания различных моделей реконструкции полей загрязнения [1], [2]. Основу этих моделей составляют модельные описания процессов атмосферного переноса газовых и аэрозольных примесей от точечных и распределённых источников [3], [4]. Предлагаемый подход представляет дополнительные возможности в решении многих теоретических и практических задач динамики атмосферы и численной интерпретации данных мониторинговых исследований загрязнения территорий.

1 Модели реконструкции

Использование свойств решений уравнения переноса и диффузии примеси и дополнительной априорной информации о дисперсном составе примесей в источнике, вертикальной структуре источников, метеорологических условиях позволяют создавать модели оценивания полей загрязнения, базирующиеся на сравнительно небольших объёмах данных наблюдений.

а) Крупнодисперная примесь.

Анализ данных экспериментальных исследований загрязнения территорий от наземных ядерных взрывов и аварийных выбросов на предприятиях ядерно-энергетического комплекса показывает довольно быстрое убывание уровня радиоактивности по оси следа [4]–[7], что указывает на возможность использования полукинематической схемы распространения частиц в атмосфере. В этом случае движение частиц одного размера

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН, проект 16.

от источника представляет собой падение с постоянной стоксовой скоростью и перенос аэрозольной примеси можно описать следующим уравнением

$$u(z)\frac{\partial Q}{\partial x} - w\frac{\partial Q}{\partial z} = \mu\frac{\partial^2 Q}{\partial y^2} \tag{1}$$

с граничными условиями

$$u(z)Q\,|_{x=0} = M\delta(z-H)\delta(y), \quad Q \to 0 \quad \text{при} \quad y \to \pm\infty \quad . \tag{2}$$

Здесь ось x находится в горизонтальной плоскости и ориентирована в направлении среднего ветра, ось y ориентирована в поперечном направлении, ось z направлена вертикально вверх, $Q(x,y,z) = \int\limits_0^\infty q(t,x,y,z)dt$, $q(t,x,y,z)$ — концентрация монодисперсной примеси в момент времени t в точке (x,y,z), $u(z)$ — горизонтальная скорость ветра в направлении оси x, w — скорость оседания частиц по оси z, M, H — мощность и эффективная высота источника, δ — дельта-функция Дирака.

Плотность выпадений монодисперсной примеси по оси следа ($y = 0$) оценивается с помощью соотношения [8]

$$P(x) = \int\limits_0^\infty wQ(x,y,z)|_{y=0,z=0}N(w)dw, \tag{3}$$

где $N(w)$ — распределение размеров частиц полидисперсной примеси в источнике по скоростям оседания

$$N(w) = \frac{n^{n+1}}{w_k\Gamma(n+1)}\left[\frac{w}{w_k}exp\left(-\frac{w}{w_k}\right)\right]^n.$$

Из свойств уравнения (1) вытекает, что перенос частиц в плоскости (x,z) происходит вдоль линий, описываемых решениями уравнения

$$\frac{dz}{dx} = \frac{w}{u(z)}. \tag{4}$$

С учётом (4) плотность выпадений примеси по оси следа представляется в виде [9]

$$p(x,\bar{S}) = S_1 x^{-S_2}\exp\left(-\frac{S_3}{x}\right), \tag{5}$$

где функция $S_1 = \frac{Mu}{\Gamma(n+1)}\left(\frac{nHu}{w_k}\right)^{n+1}$, $S_2 = n+2$, $S_3 = \frac{nH\overline{U}}{w_k}$, $\overline{U} = \frac{1}{H}\int\limits_0^H u(z)dz$. Оценка вектора неизвестных параметров $\bar{S}$ в регрессии (5) проводится методом наименьших квадратов по данным измерений плотности выпадений примеси по оси следа.

Замечание. Для учёта вертикального распределения радиоактивности в облаке взрыва необходимо выражение (5) проинтегрировать по H, после чего проводить оценивание.

б) Реконструкция мелкодисперсных фракций.

Анализ крупных радиационных аварий показывает, что высота подъёма примеси обычно находится в пределах пограничного слоя атмосферы. Спектр же размеров частиц варьируется в широких пределах и для повышения точности оценивания поля выпадений частиц в дальней зоне необходимо более детальное описание процессов распространения мелких фракций частиц. В этом случае целесообразно использовать следующую модель реконструкции выпадений [4]

$$p(x,\bar{\theta}) = \frac{\theta_1}{x^{1.5}}\exp -\frac{2x_{max}}{x}\int\limits_0^\infty \frac{\lambda^{\theta_2}\exp(\theta_3\lambda)}{\Gamma(1+\lambda)}\left(\frac{2x_{max}}{x}\right)^\lambda d\lambda. \tag{6}$$

Здесь параметры θ_1, θ_2, θ_3 предполагаются неизвестными и их оценивание проводится по данным наблюдений. Величина x_{max} описывает расстояние от источника, на котором достигается максимум приземной концентрации невесомой примеси.

2 Численная реконструкция следов наземных ядерных взрывов

а) Ядерный взрыв 29.08.1949 г.

Для численного восстановления радиоактивного загрязнения по оси следа использовалась информация, приведённая в [5], [6]. Взрывное устройство былорасположено на высоте 30 м. Мощность взрыва составила 22 кт. Верхняя кромка облака взрыва находилась на высоте около 9 км. Изменение мощности дозы гамма-излучения вдоль оси следа представлено на рис. 1а. Анализ рис. 1а показывает высокий уровень загрязнения ближней зоны выпадений частиц. Максимум радиоактивного загрязнения местности образовался в 4-5 км от места испытания. Следует также отметить, что дальнейшее снижение мощности дозы в зоне до 100 км происходило не монотонно.

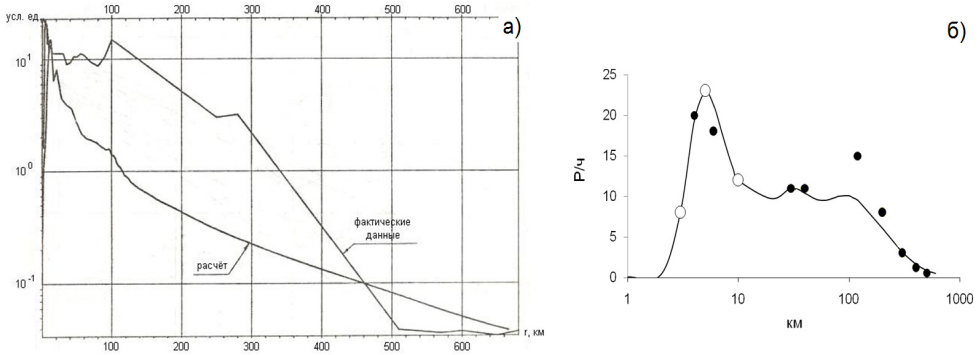


Рис. 1: Доза гамма-излучения (усл. ед., на 3 часа) вдоль оси следа взрыва 29.08.1949 г. (а). Реконструкция поля доз по оси следа (б). ∘ — опорные, • — контрольные точки наблюдений, – — результат численного моделирования

На основе модели (5) по трём опорным точкам измерений, расположенным в пределах 10 км от источника, была выполнена численная реконструкция осевой концентрации, которая представлена на рис. 1б. Из результатов моделирования вытекает вполне удовлетворительное согласие в контрольных точках измеренных и вычисленных значений активности. Отклонение, наблюдаемоена расстоянии 120 км (с. Долонь), может быть связано с вымыванием осадками продуктов ядерного взрыва [6]. Другой возможной причиной возникшего отклонения является не вполне адекватное описание распределения начальной активности по высоте.

б) Термоядерный взрыв 12.08.1953 г.

На рис. 2а представлена одна из заключительных стадий развития облака от этого взрыва. Из анализа рис. 2а вытекает, что вертикальный размер облака является достаточно ограниченным. Данное заключение подтверждается и результатами авиационной радиационной разведки уровней активности на различных высотах [7]. Формирование следа радиоактивных выпадений происходило в юго-восточном направлении от опытного поля. Примерно в 400 км по оси следа суммарная доза находилась на уровне одного рентгена [7].

Результаты численной реконструкции по модели (5) уровней радиоактивного загрязнения по оси следа представлены на рис. 2б. Для восстановления поля концентрации были также использованы наблюдения в трёх опорных точках. Следует отметить, что в данном случае максимум загрязнения образовался довольно далеко от места взрыва. Поле концентрации в окрестностях максимума резко меняется, что указывает на достаточно однородный спектр размеров выпавших частиц.

3 Реконструкция Восточно-Уральского радиоактивного следа

Аварийный выброс радиоактивных веществ в атмосферу произошёл на ПО “Маяк” 29 сентября 1957 года. В окружающей среде оказалось 20 млн Ки, из которых большая часть — 18 млн Ки в составе крупных фракций частиц выпали в ближней зоне. Остальная часть — 2 млн Ки, поднявшись на значительную высоту, образовала радиоактивное облако. Оно распространялось в северо-восточном направлении и образовало

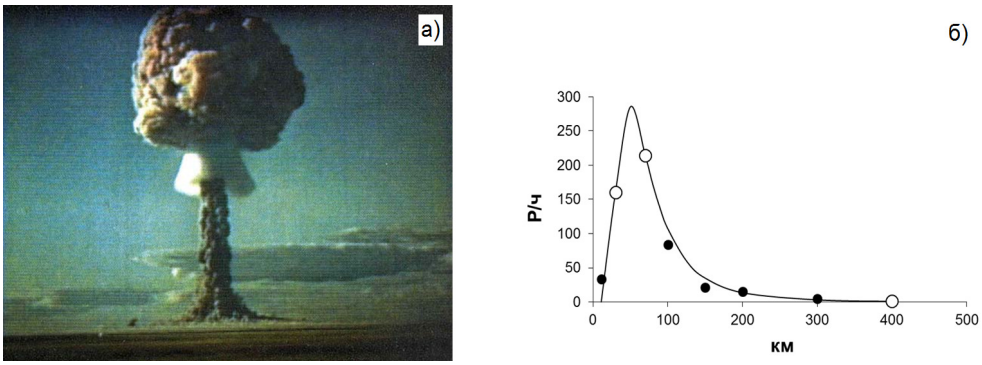


Рис. 2: Одна из стадий наземного взрыва термоядерного устройства на Семипалатинском полигоне 12.08.1953 г. (а). Численная реконструкция радиоактивного загрязнения на оси следа (б)

Восточно-Уральский радиоактивный след (ВУРС), который прошёл по территориям Челябинской, Свердловской и Тюменской областей (рис. 3а) [10]. Протяжённость следа составила несколько сот километров. На рис. 3б представлены результаты численного восстановления по модели (6) поля выпадений радионуклидов на осевой части ВУРС. Согласие расчётов наблюдениям в контрольных точках является вполне удовлетворительным. Учитывая, что на рис. 3б значения плотности радиоактивных выпадений (вертикальная ось) представлены в логарифмическом масштабе, можно сделать вывод о чрезвычайно разнородном составе выпавших из облака аэрозольных частиц, несущих на себе радионуклиды.

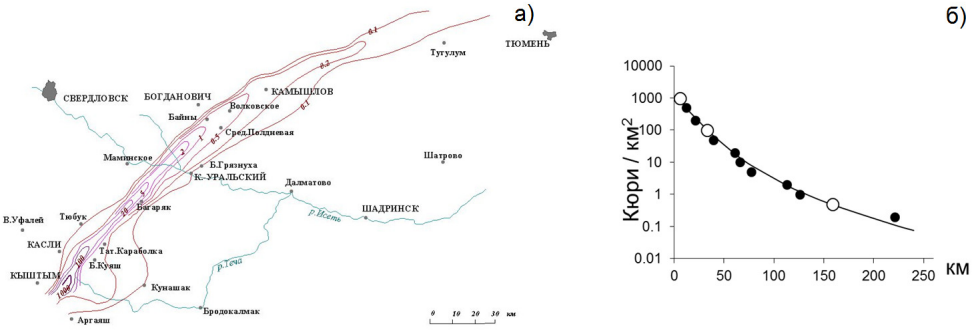


Рис. 3: Поле радиоактивного загрязнения почвы (Ки/км^2) в районе Восточно-Уральского радиоактивного следана 1959 г. (а). Численная реконструкция по оси ВУРС (б)

При наличии информации о радионуклидном составе выброса проведённая реконструкция начального поля позволяет прогнозировать уровни загрязнения. В данном случае основным компонентом выброса являлся ^{90}Sr. Делая поправку на закон его радиоактивного распада можно рассчитать состояние загрязнения ВУРС на любой момент времени.

Заключение

На основе полукинематического уравнения атмосферного переноса грубодисперсной примеси разработаны малопараметрические модели реконструкции осевой части следа выпадений частиц. Проведена апробация модели для ряда наземных ядерных взрывов, которая показала вполне удовлетворительное согласие с данными наземного и авиционного радиационного мониторинга. Показано, что при проведении оценивания учёт вертикального распределения активности в облаке взрыва может оказаться весьма существенным и в связи с этим необходимо использование дополнительных сведений о характере и мощности ядерного взрыва.

Предложена модель реконструкции поля аэрозольных выпадений с учётом полного спектра размеров частиц. Она позволяет проводить восстановление поля концентрации по всей оси следа. Проведена апробация модели применительно к Восточно-Уральскому радиоактивному следу. Работа выполнена при финансовой

поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН, проект 16.

Список литературы

[1] Израэль Ю.А., Цатуров Ю.С., Назаров И.М. и др. Реконструкция фактической картины радиоактивного загрязнения местности в результате аварий и ядерных испытаний // Метеорология и гидрология. 1994. № 8. С. 5–18.

[2] Израэль Ю.А., Стукин Е.Д., Цатуров Ю.С. О возможности идентификации радиоактивных следов ядерных взрывов и реконструкции доз облучения населения с использованием анализа долгоживущих радионуклидов // Метеорология и гидрология. 1994. № 12. С. 5–14.

[3] Седунов Ю.С., Борзилов В.А., Клепикова Н.В., Чернокожин Е.В., Троянова Н.И.Физико-математическое моделирование регионального переноса в атмосфере радиоактивных веществ в результате аварии на Чернобыльской АЭС // Метеорология и гидрология. 1989. № 9. С. 5–10.

[4] Рапута В.Ф. Модели реконструкции загрязнения осевой части Восточно-Уральского радиоактивного следа // Вычислительные технологии. 2006. Т. 11, Ч. 2. Спецвыпуск. С. 10–16.

[5] Прессман А.Я. О распространении в атмосфере тяжёлой неоднородной примеси из мгновенного точечного источника // Инженерно-физический журнал. 1959. Т. 2. № 3. С. 78–87.

[6] Андрюшин И.А., Чернышев А.К., Логачёв В.А. и др. Современная интерпретация данных воздушной и наземной радиационных разведок следа первого ядерного испытания в СССР в 1949 г. // Вестник научной программы "Семипалатинский полигон — Алтай". 1995. № 2. С. 102–108.

[7] Лоборев В.М., Замышляев Б.В., Судаков В.В. и др. Оценка уровней радиоактивного загрязнения территории Алтая и эффективных доз облучения населения от ядерных взрывов, проведённых на Семипалатинском полигоне / Ядерные испытания, окружающая среда и здоровье населения Алтайского края. Барнаул, 1993. Т. 1. Кн. 2. С. 5–125.

[8] Ядерные испытания СССР: современное радиоэкологическое состояние полигонов. / Кол. авторов под рук. проф. В.А. Логачева. М.: Изд.АТ, 2002. 639 с.

[9] Рапута В.Ф., Шлычков В.А., Леженин А.А. и др. Численный анализ данных аэрозольных выпадений примесей от высотного источника // Оптика атмосферы и океана. 2014. Т. 27. № 08. С. 713–718.

[10] Восточно-Уральский радиоактивный след / Под ред. В.Н. Чуканова. Екатеринбург: УрО РАН, 1996. 230 с.

Владимир Федотович Рапута — д.ф.-м.н., гл. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: raputa@sscc.ru;
Татьяна Владимировна Ярославцева — к.т.н., ст. науч. сотр. Новосибирского НИИ гигиены Роспотребнадзора;
e-mail: tani-ta@list.ru.
Дата поступления — 30 апреля 2017 г.

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ ПРОЕКЦИОННОГО МЕТОДА ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

С. В. Рогазинский[1,2]

[1] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[2] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.676

Построен алгоритм статистического моделирования для решения нелинейного кинетического уравнения Больцмана на основе проекционного метода. В качестве ортонормированного базиса использовались функции Эрмита. Алгоритм верифицировался на решении задачи однородной релаксации газа с известным решением.

Ключевые слова: ансамбль взаимодействующих частиц, цепь Маркова, прямое моделирование, оценка по столкновениям.

1 Вводная информация

В работе рассматривается решение задачи Коши для нелинейного кинетического уравнения Больцмана в пространственно однородном случае. Хорошо известно, что приближенное решение данной задачи можно оценивать методом Монте — Карло, моделируя марковский процесс эволюции соответствующего N-частичного ансамбля, фазовые состояния которого меняются вследствие парных взаимодействий частиц (см., например, [2, 5, 6]).

Пространственно однородная релаксация простого газа, описывается следующей задачей Коши для нелинейного уравнения Больцмана(в безразмерном виде) [3]:

$$\frac{\partial f(\mathbf{v},t)}{\partial t} = \int [f(\mathbf{v}',t)f(\mathbf{v}_1',t) - f(\mathbf{v},t)f(\mathbf{v}_1,t)]w(\mathbf{v}',\mathbf{v}_1' \to \mathbf{v},\mathbf{v}_1)d\mathbf{v}'d\mathbf{v}_1'd\mathbf{v}_1,$$

$$f(\mathbf{v},t)\Big|_{t=0} = f_0(\mathbf{v}),$$

где

$$w(\mathbf{v}',\mathbf{v}_1' \to \mathbf{v},\mathbf{v}_1) = 4\sigma(g,\cos\vartheta)\delta^{(3)}(\mathbf{v}'+\mathbf{v}_1'-\mathbf{v}-\mathbf{v}_1)\delta\Big(\frac{\mathbf{v}'^2+\mathbf{v}_1'^2}{2} - \frac{\mathbf{v}^2+\mathbf{v}_1^2}{2}\Big),$$

и $g = |\mathbf{v}' - \mathbf{v}_1'|$, $\sigma(g,\cos\vartheta)$ — дифференциальное сечение рассеяния двух частиц, ϑ — угол поворота относительной скорости в системе центра инерции рассеивающихся частиц.

Здесь $f(\mathbf{v},t)$ — плотность распределения частиц газа по скоростям $\mathbf{v} \in \mathbf{R}^3$ в момент времени $t \geq 0$, причем $\int f(\mathbf{v},t)d\mathbf{v} = 1$.

Поставим задачу нахождения плотности распределения частиц по модулю скорости :

$$\varphi(|\mathbf{v}|,t) = |\mathbf{v}|^2 \int f(\mathbf{v},t)d\omega, \quad \mathbf{v} = |\mathbf{v}| \cdot \omega.$$

В целях удобства введем обозначение $x = |\mathbf{v}|$.

Настоящая статья посвящена нахождению решения методом Монте — Карло сформулированной выше задачи Коши на основе проекционного метода.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 15-01-00894 а, 15-01-08988 а, 16-01-00530 а), программы фундаментальных исследований Президиума РАН I.33II.

2 Алгоритм метода Монте — Карло и оценка функционалов от решения нелинейного уравнения Больцмана

Алгоритм статистического моделирования для решения нелинейного уравнения Больцмана использует ансамбль взаимодействующих частиц [5]. Эволюция модельного ансамбля связана с N-частичным уравнением Каца [2]. В интегральном виде это уравнение для плотности столкновений в системе $\Phi(V,t)$, где $V=(\mathbf{v}_1,\cdots,\mathbf{v}_N)$, $\mathbf{v}_i$ — скорость i-й частицы, имеет вид [8]:

$$\Phi(V,t)=\int_0^t\int_V \Phi(V',t')K(V',t'\to V,t)dV'dt'+\Phi_0(V,t), \tag{2.1}$$

где

$K(V',t'\to V,t)=\sum\limits_{\pi} a(\mathbf{v}_i',\mathbf{v}_j')A^{-1}(V')K_1(V'\to V|\pi)k(t'\to t|V)$,

$K_1(V'\to V|\pi)=k(\mathbf{v}_i',\mathbf{v}_j'\to\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j)\prod\limits_{m=1,m\neq i,j}^{N}\delta(\mathbf{v}_m-\mathbf{v}_m')$,

$k(\mathbf{v}_i',\mathbf{v}_j'\to\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j)=w(\mathbf{v}_i',\mathbf{v}_j'|\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j)a(\mathbf{v}_i',\mathbf{v}_j')^{-1}$,

$$A(V)=\sum_{i=1}^{N-1}\sum_{j=i+1}^{N}a(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j),\quad a(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j)=\int w(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j|\mathbf{v}_i',\mathbf{v}_j')d\mathbf{v}_i'd\mathbf{v}_j'.$$

$k(t'\to t|V')=A(V')E(V',t-t')$, $\quad E(V,t)=exp\{-tA(V)\}$,

$\Phi_0(V,t)=\int f_0(V)\delta(t')k(t'\to t|V)dt'$, $\quad f_0(V)=\prod\limits_{i=1}^{N}f_0(\mathbf{v}_i)$.

Известно, что при $N\to\infty$ одночастичная плотность $f^{(1)}(\mathbf{v},t)$, соответствующая решению уравнения Каца, при условии "молекулярного"хаоса удовлетворяет нелинейному уравнению Больцмана [2].

Обычно при решении уравнения (2.1) методом Монте — Карло вычисляют не само решение $\Phi(V,t)$, а следующие функционалы от $f^{(N)}(V,t)=A^{-1}(V)\Phi(V,t)$ — решения уравнения Каца в заданные моменты времени:

$$J_H(t)=\int H(V)f^{(N)}(V,t)dV=\int h(\mathbf{v})f^{(1)}(\mathbf{v},t)d\mathbf{v}=\int H(V)A^{-1}(V)\Phi(V,t)dV,$$

где $H(V)=\frac{1}{N}\sum\limits_{i=1}^{N}h(\mathbf{v}_i)$.

Более удобным является интегральное уравнение, получающееся из (2.1), с использованием “расслоения” распределения взаимодействий в ансамбле по номеру пары взаимодействующих частиц $\pi=(i,j)$ [5], которое имеет вид:

$$F(Z,t)=\int_0^t\int_{\mathbf{Z}}F(Z',t')K(Z',t'\to Z,t)dZ'dt'+F_0(Z)\delta(t), \tag{2.2}$$

где $Z=(V,\pi)$, $dZ=dVd\mu_0(\pi)$, причем интегрирование по мере μ_0 означает суммирование по всем различным парам $\pi=(i,j)$.

Ядро уравнения (2.2) имеет вид [5,6]:

$$K(Z',t'\to Z,t)=k(t'\to t|V')\frac{a(\pi)}{A(V')}K_1(V'\to V|\pi).$$

Условная переходная плотность $K_1(V'\to V|\pi)$ определяет преобразование ансамбля частиц в результате взаимодействия пары с номером $\pi=(i,j)$, которое соответствует замене $(\mathbf{v}_i',\mathbf{v}_j')\to(\mathbf{v}_i,\mathbf{v}_j)$ соответственно заданной индикатрисе.

Функционал $J_H(t)$ преобразуется к виду[5]:

$$J_H(t)=\int H(V)A^{-1}(V)\Phi(V,t)dV=\int_0^t\int_Z\tilde{H}(V,t-t')F(Z,t')dZdt', \tag{2.3}$$

где $H(V) \in L_\infty, \quad \widetilde{H}(V,t) = H(V)E(V,t)$.

Рассмотрим цепь Маркова $(Z_n, t_n), \quad n \in 0,1,\ldots$ с нормированной плотностью перехода

$$P(Z',t' \to Z,t) = p(t' \to t|V')P_1(\pi|V')P_2(V' \to V|\pi)$$

и нормированной плотностью начального состояния $P_0(Z,t) = P_0(Z)\delta(t)$. Случайные веса вводятся по формулам

$$Q_0 = F_0(Z_0)/P_0(Z_0), \quad Q_n = Q_{n-1}Q(Z_{n-1},t_{n-1};Z_n,t_n) \quad \text{при } n \geq 1,$$
$$Q(Z',t';Z,t) = K(Z',t' \to Z,t)/P(Z',t' \to Z,t).$$

Величина Q очевидным образом факторизуется. Для оценки функционала $J_H(t)$ (2.3) можно использовать весовой вариант оценки "по столкновениям" (в начале пробегов):

$$\xi = \sum_{i=0}^{\nu} Q_n \tilde{H}(V_n, T - t_n), \quad \nu = \max\{n : t_n < T,\ n = 0,1,\ldots\},$$

$\mathrm{E}\xi = J_H(T)$, где T — момент времени, в который оценивается рассматриваемый функционал. Весовая оценка, в частности, полезна для исследования зависимости функционалов от параметров модели.

Для среднего квадрата оценки ξ, как следует из теории весовых методов Монте — Карло (см., например [7]), выполняется соотношение

$$\mathbf{E}\xi^2 = (\chi, \tilde{H}[2F^* - \tilde{H}]),$$

где χ — ряд Неймана для уравнения

$$\chi = \mathbf{K}_p\chi + \{F_0^2/P_0\}\delta(t),$$

а $\mathbf{K}_p$ — интегральный оператор с ядром $Q(Z',t';Z,t)K(Z',t' \to Z,t)$. Здесь $F^* = \mathbf{K}F^* + \tilde{H}$, причём

$$F^*(Z,t) = \mathbf{E}\xi_Z,$$

где ξ_Z — оценка по столкновениям для $Z_0 = Z$ и $Q_0 = 1$ при $t_0 = 0$. В случае прямого моделирования, то есть $Q_n \equiv 1, \quad n \geq 0$, величина $\mathbf{D}\xi$ конечна для любого конечного временного интервала.

3 Проекционная оценка плотности

Из кинетической теории газов, известно разложение плотности распределения частиц по скоростям в виде ряда по функциям Эрмита[9] в трехмерном случае. В данном случае искомая плотность $\varphi(x,t)$ является одномерной. Положив $\varphi(x,t) = 0$ при $x < 0$, представим полученную таким образом функцию в виде ряда по функциям Эрмита[10]:

$$\varphi(x,t) = \sum_{i=0}^{\infty} C_i(t)\psi_i(x), \tag{3.1}$$

где $\psi_i(x)$ — ортонормированные функции Эрмита в $L_2(-\infty,\infty)$:

$$\psi_i(x) = \alpha_i P_i(x)\exp(-x^2/2). \tag{3.2}$$

причем $P_i(x)$ — полиномы Эрмита. Напомним, что скалярное произведение в $L_2(-\infty,\infty)$ определяется следующей формулой:

$$(\varphi,\psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x)\psi(x)dx, \quad \varphi(x),\psi(x) \in L_2(-\infty,\infty).$$

Функции Эрмита (3.2) удовлетворяют условиям:

$$(\psi_i,\psi_j) = \delta_{ij}, \quad (\psi_i,\psi_i) = \alpha_i^2 \cdot 2^i i!\sqrt{\pi} = 1.$$

Используя условие ортонормированности функций Эрмита, из (3.1) находим:

$$C_i(t) = \int \psi_i(x)\varphi(x,t)dx.$$

Коэффициенты разложения в ряд (3.1) по функциям Эрмита имеют вид функционалов (2.3). Данное обстоятельство позволяет использовать метод Монте — Карло (см. п. 2) для приближенного нахождения $\varphi(x,t)$.

4 Решение тестовой задачи

Сформулированная в п. 1 задача Коши в случае максвелловских молекул $\sigma(g, \cos\vartheta) = q(\cos\vartheta)/g$ и специальных начальных данных имеет точное решение, которое было найдено в [1]:

$$f(\mathbf{v}, t) = (2\pi\tau)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2\tau}\right)\left[\frac{1-\tau}{\tau}\left(\frac{\mathbf{v}^2}{2\tau} - \frac{3}{2}\right) + 1\right],$$

где $\tau = \tau(t) = 1 - \theta e^{-\lambda t}$; $\lambda = \frac{\pi}{2}\int\limits_0^\pi q(\cos\vartheta)\sin^3\vartheta d\vartheta$, $t \geq 0$, $0 \leq \theta \leq 2/5$. В качестве начальных данных полагают

$$f_0(\mathbf{v}) = f(\mathbf{v}, t) \Big|_{t=0}.$$

В качестве тестовой задачи была решена задача со следующими параметрами: $q(\cos\vartheta) = 1.0$, $\theta = 0.4$. Результаты расчетов приведены в таблице 1 при $t = 0$ и в таблице 2 при $t = 5$. В расчетах использовались: $N = 50$, число траекторий равно 10^6. Символом σ в таблицах 1, 2 обозначены среднеквадратические статистические погрешности оценок. В предварительных расчетах были проведены исследования по влиянию объема модельного ансамбля на значения искомых функционалов (коэффициентов $C_i(t)$), которые показали, что при $N \geq 50$ изменения этих функционалов становятся незначимыми. Необходимо заметить, что все коэффициенты $C_i(t), i = 0, \ldots 10$, при $t = 0.0, 5.0$ вычислялись на одной траектории. Это обстоятельство позволяет понизить трудоемкость вычислений и тем самым повысить эффективность проекционного метода. На рис. 1 и рис. 2 приведены графики функции $\varphi_n(x, t)$ в моменты времени $t = 0$ и $t = 5$ при $n = 6$ и $n = 10$. Приведенные в этих таблицах и на рисунках 1, 2 результаты показывают, что при решении задач рассматриваемого типа с числом траекторий 10^6 целесообразно использовать разложение с $n = 10$.

Таблица 1: Оценка коэффициентов $C_i(t)$ $N = 50$, число траекторий 10^6, $t = 0$

	$\mathrm{E}(\xi_i)$	$\mathrm{D}(\xi_i)$	σ_i
C_0	0.231973	0.00049	0.000022
C_1	0.427434	0.00063	0.000025
C_2	0.451066	0.00061	0.000025
C_3	0.261731	0.00208	0.000046
C_4	0.008850	0.00271	0.000052
C_5	−0.117091	0.00203	0.000045
C_6	−0.074989	0.00192	0.000044
C_7	0.018070	0.00184	0.000043
C_8	0.045990	0.00167	0.000041
C_9	0.009595	0.00159	0.000040
C_{10}	−0.020357	0.00150	0.000039

Таблица 2: Оценка коэффициентов $C_i(t)$ $N = 50$, число траекторий 10^6, $t = 5$

	$\mathrm{E}(\xi_i)$	$\mathrm{D}(\xi_i)$	σ_i
C_0	0.246115	0.03109	0.000176
C_1	0.422896	0.09030	0.000301
C_2	0.414891	0.08731	0.000295
C_3	0.224770	0.02837	0.000168
C_4	0.012830	0.00369	0.000061
C_5	−0.075834	0.00612	0.000078
C_6	−0.043625	0.00393	0.000063
C_7	0.009787	0.00276	0.000052
C_8	0.019991	0.00275	0.000052
C_9	0.002395	0.00238	0.000049
C_{10}	−0.006676	0.00226	0.000047

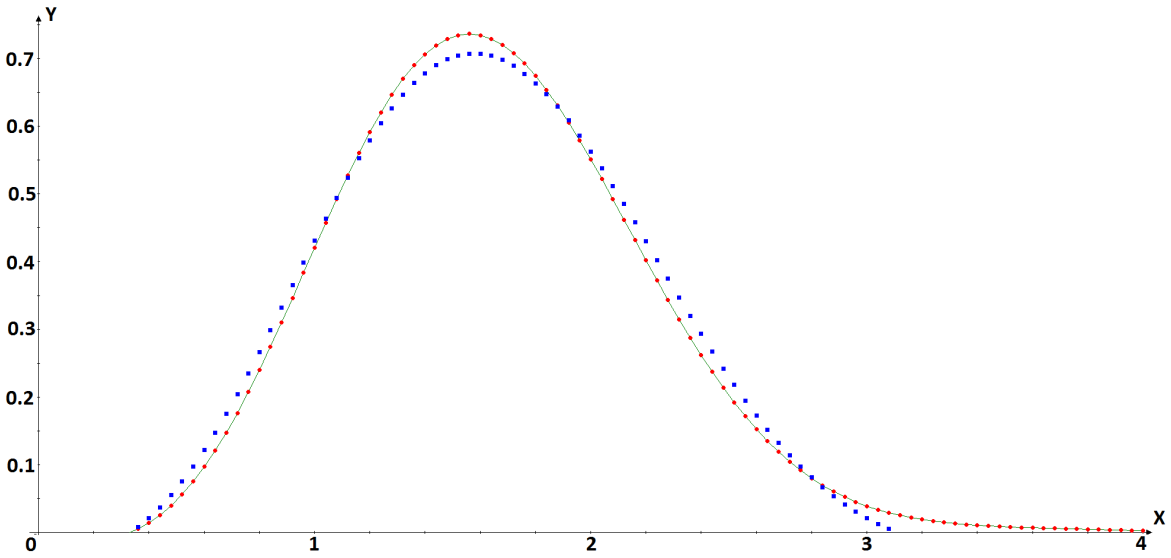


Рис. 1: График функции $\varphi_n(x,t)$ при $n=6$ (синие квадраты), при $n=10$(жирные красные точки), сплошная черная линия — точное решение. Момент времени $t=0$.

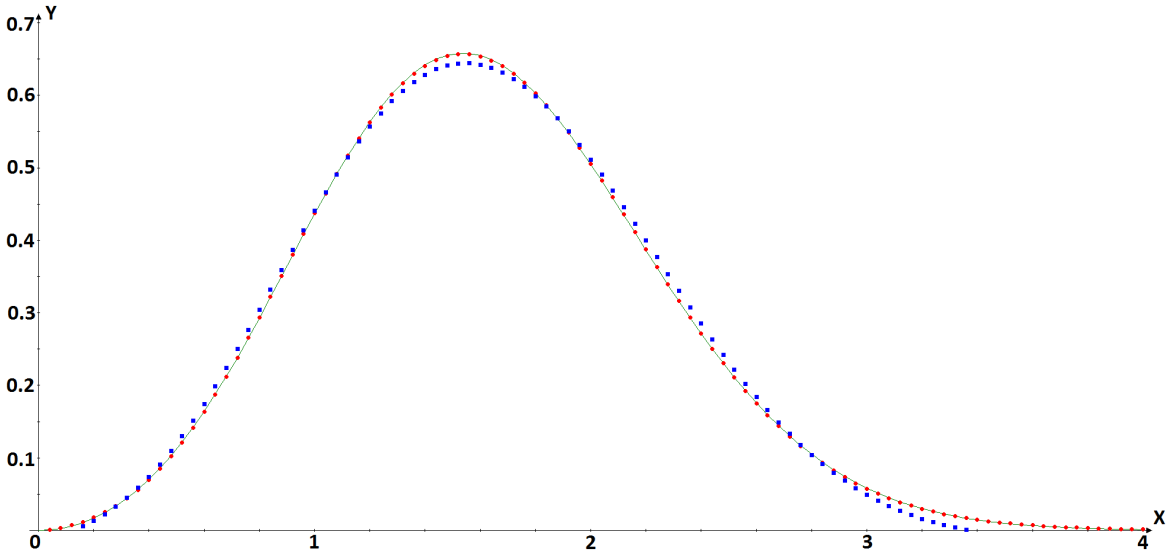


Рис. 2: График функции $\varphi_n(x,t)$ при $n=6$ (синие квадраты), при $n=10$(жирные красные точки), сплошная черная линия — точное решение. Момент времени $t=5$.

Вычисления проводились методом прямого моделирования для уравнения (2.2). В качестве функции $h_i(\mathbf{v})$, определяющей функционал (2.3) и соответствующий коэффициент $C_i(t)$ в разложении (3.1), использовались функции Эрмита в виде (3.2). Ряд (3.1) обрывался после $n=10$.

Первые одинадцать полиномов Эрмита записываются следующим образом:

$P_0(x) = 1$
$P_1(x) = 2x$
$P_2(x) = 4x^2 - 2$
$P_3(x) = 8x^3 - 12x$
$P_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$

$P_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$
$P_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$
$P_7(x) = 128x^7 - 1344x^5 + 3360x^3 - 1680x$
$P_8(x) = 256x^8 - 3584x^6 + 13440x^4 - 13440x^2 + 1680$
$P_9(x) = 512x^9 - 9216x^7 + 48384x^5 - 80640x^3 + 30240x$
$P_{10}(x) = 1024x^{10} - 23040x^8 + 161280x^6 - 403200x^4 + 302400x^2 - 30240$

Моделирование цепи Маркова и вычисление случайных оценок ξ_i для величин $C_i(t)$ производилось по следующей схеме.

1. Полагаем $\xi_i = 0$, $(i = 0, 1, ...n)$, $t_0 = 0$, $k = 0$. Моделируются начальное состояние V_0 соответственно плотности $f_0(V)$, номер взаимодействующей пары согласно вероятности $p(\pi) = \frac{a(\pi)}{A(V_0)}$; состояние цепи $Z_0 = (V_0, \pi)$, полагаем $\xi_i = \xi_i' + \tilde{H}_i(V_0, T)$, $(i = 0, 1, ...n)$.

2. Согласно $k(t_k \to t_{k+1}|V_k)$, т.е. согласно экспоненциальной плотности $A(V_k)E(V_k, t_{k+1} - t_k)$, выбирается t_{k+1}, а также согласно вероятности $p(\pi) = \frac{a(\pi)}{A(V_k)}$ номер взаимодействующей пары; моделируется изменение скоростей выбранной пары согласно $K_1(V_k \to V_{k+1}|\pi)$, далее полагаем $Z_{k+1} = (V_{k+1}, \pi)$.

3. Если $t_{k+1} < T$, то вычисляется вклад в оценку $\xi_i = \xi_i' + \tilde{H}_i(V_{k+1}, T - t_{k+1})$, $(i = 0, 1, ...n)$, и осуществляется переход к п.2 с $k = k' + 1$; иначе цепь обрывается.

Автор выражает благодарность члену-корреспонденту РАН Г.А. Михайлову за полезные советы и замечания, и д.ф.-м.н. С.А. Ухинову за сделанные замечания.

Список литературы

[1] Бобылев А.В. О точных решениях уравнения Больцмана// Доклады Академии наук СССР, 1975, Т. 225, No. 6, С. 1296–1299

[2] Кас М. Probability and related topics in physical sciences [Russian translation],Mir,Moscow(1965).

[3] Коган М.Н. Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967.

[4] Михайлов Г.А., Медведев И.Н. Оптимизация весовых алгоритмов статистического моделирования.- Новосибирск: Омега Принт, 2011. — 304с.

[5] Mikhailov G.A., Rogasinsky S.V. Weghted Monte Carlo methods for approximate solution of a nonlinear Boltzmann equation// Siberian Mathematical Journal, 2002, Vol. 43, No. 2, pp. 71–78.

[6] Mikhailov, G. A., Rogazinskii, S. V. Probabilistic model of many-particle evolution and estimation of solutions to a nonlinear kinetic eqution // Russian journal of numerical analysis and mathematical modelling, 2012, Vol. 27, No. 3, P. 229–242

[7] Михайлов Г.А, Войтишек А.В. Численное статистическое моделирование. Методы Монте—Карло. М.: Издательский центр "Академия", 2006.

[8] Иванов М.С., Рогазинский С.В. Экономичные схемы статистического моделирования течений разреженного газа.// Математическое моделирование. 1989, т.1, стр. 130–145

[9] Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases // Comm. Pure and Appl. Math. 1949, v. 2, p. 331–407.

[10] Колмогоров А. Н., Фомин С. В. Элементы теории функций и функционального анализа — М.: Наука, 2004

Сергей Валентинович Рогазинский — д.ф.-м.н., зав. лабораторией Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет; e-mail: svr@osmf.sscc.ru.

Дата поступления — 26 мая 2017 г.

ГРАНИЦЫ ОБЛАСТЕЙ РЕШЕНИЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ВОЗМУЩАЮЩИМИ ВОЗДЕЙСТВИЯМИ

А. Н. Рогалев

Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск

УДК 517.968

В статье решается задача построения границ множеств решений систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), учитывающих самые наихудшие возмущения. Используемые для этого методы основаны на символьном представлении формул, приближающих оператор сдвига вдоль траектории решения этой системы. Построение символьных формул решений учитывает геометрические свойства решений дифференциальных уравнений. На основе этих формул вычисляются границы множеств решений ОДУ (области допустимых отклонений). Области допустимых отклонений применяются для проверки условий безопасности функционирования сложных систем, описываемых этими ОДУ. Приводятся примеры расчетов.

Ключевые слова: символьные формулы решений, априорная неопределенность, возмущающие воздействия, включения решений.

Введение

Во многих практических задачах изменение вектора состояния происходит в условиях возмущающих воздействий. Как правило возмущающее воздействие влияет на динамику системы (процесса или иного объекта) и на качество изменения системы в выбранном направлении. Возмущающее воздействие разделяется на две категории: целенаправленное (управляющее) воздействие и возмущение (воздействие под влиянием фактора неопределенности), которое может быть регулярным (систематическим) или случайным (вероятностным). Если влияние управляющих воздействий и возмущения учитываются одновременно, то большинство исследователей к решению задач привлекают теорию игр [1], [2]. Исходное управление представляет игрока-союзника и подлежит определению, воздействия трактуют как управление игрока-противника, которые строятся на основе любой допустимой информации. Будем полагать, что известны лишь некоторые характеристики возмущений и погрешностей, а реализации их неизвестны. В данной работе вопросы игровой подход не рассматриваются.

Полагаем в дальнейшем, что возмущающее воздействие допускает двойное разделение [2]: либо это фактическое управляющее воздействие, либо это вектор возмущающих воздействий. К классу этих задач относятся задачи включения множеств достижимости [1], [2], задачи накопления возмущений (задача Булгакова о максимальном отклонении [3], которая получает свое дальнейшее развитие и приложения в наше время. В технических устройствах часто встречаются случаи, когда информация о поведении возмущений заключается лишь в знании ограничений на эти возмущения [4]. Такие задачи приходится, например, решать при отыскании максимального отклонения управляемой системы от желаемого состояния [5], [6], что характерно также в задачах наблюдения за накопившимися боковыми отклонениями движения самолета, или вычисления включения области достижимости при движении самолета на горизонтальной плоскости [7].

В статье рассматривается вопросы применения гарантированных методов, основанных на символьном представлении формул решений [8], [9], [10], [11], [12] в типичных задачах, где требуется оценка множеств решений, при решении этих задач необходимо учитывать влияние многих реально существующих возмущений на движение системы. Под гарантированным (минимаксным) методом решения таких задач понимается метод, для которого целью является оптимизация влияния самых “худших” (максимальных) реализаций возмущений. Если реализация возмущающих воздействий окажется не самая максимальная (“наихудшая”), это чаще всего происходит, то показатель неблагоприятности динамики системы не превышает показатель, характерный для “наихудшего” случая. Гарантированный метод обеспечивает определенный результат при

любых допустимых реализациях возмущающего фактора. Описываемые в статье методы для этого используют символьные формулы решений и контролируют сохранение геометрических свойств решений (а также множеств решений) дифференциальных уравнений, что не только улучшает качественное поведение численных решений, но позволяет более точно определять поведение численных решений для более длительного интервала времени. Это способствует более точному вычислению границ множеств решений обыкновенных дифференциальных уравнений.

1 Вычисление гарантированных границ допустимых отклонений

Решается система обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), описывающая динамику состояний реального объекта (системы) с изменением времени

$$\frac{dz}{dt} = g(t, z(t), u(t)), \tag{1}$$

где $z = (z_i(t))$ — вектор состояния объекта (системы), $u(t) = (u_j)$ — воздействия, определяемые нашим выбором, либо факторы, на выбор которых мы повлиять не можем — возмущения системы.

Метод строящий оценки множеств решений (гарантированный метод) выполняет приближение оператора сдвига вдоль траектории, и реализуется в два этапа.

На первом этапе выполняется конструирование (запись на хранение и преобразование) символьных формул $\mathcal{S}(t, h, \mathcal{Y}^0) = \mathcal{S}_h(t, \mathcal{Y}^0)$ приближенных решений

$$\mathcal{S}_h(t^n, \mathcal{Y}^0) \circ \mathcal{S}_h(t^{n-1}, \mathcal{Y}^0) \circ \ldots \mathcal{S}_h(t^0, \mathcal{Y}^0),$$

где вектор начальных значений $\mathcal{Y}^0(t) = (\mathcal{Y}_1^0, \mathcal{Y}_2^0, \ldots, \mathcal{Y}_n^0)$ является вектором символьных величин, представляющих вектор состояния системы (1).

Второй этап реализует две операции. Сначала определяются границы множества приближенных решений. Границы строятся по вычисленным максимальным значениям функций, представленных символьными формулами приближенных решений $\mathcal{S}_h(t, \mathbf{Y}^0) = (\mathcal{S}_i(t, h, \mathcal{Y}^0)_{i=1,n})$. Приблизить формулу $\mathcal{F}$ метода сдвига вдоль траектории возможно, выбрав приближенный метод решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений и преобразовав зависимости между символьными переменными, входящими в форму этого метода. Разумно применять экономичные символьные формулы (последовательности имен переменных и действий над ними), эти формулы хранятся в памяти машины и преобразуются за наименьшее время и затраты памяти. Это означает, что выполнение методов, основанных на преобразовании символьных формул с последующим вычислением областей значений этих формул, принципиально отличается от реализации численных методов решения систем ОДУ. Хорошие результаты для методов преобразований символьных формул возможно получить, если моделируя процессы на больших промежутках промежутках времени, сохранять физические инварианты. Наиболее простой пример очень точное сохранение полной энергии системы (гамильтониана) даже для больших шагов сетки. Это свойство помогает определить характер динамического процесса, используя достаточно грубые вычисления (с большим шагом сетки).

Методы включения решений, применяющих символьные формулы решений, реализуются с контролем за производительностью вычислительного процесса: отслеживание за скоростью вычислений, экономией памяти и т.д. Так как для большинства задач оценки множеств решений появлялся рост границ множеств решений, это вызвало необходимость сохранять физические инварианты и геометрические структуры. Для этого использовались методы, сохраняющие геометрические структуры [13], начавшиеся развиваться в 90-е годы прошлого века. Если решаются задачи гамильтоновой механики, то такие методы называются симплектическими численными методами.

На втором этапе вычисляются границы областей глобальной ошибки приближенного решения. Численно решается уравнение для глобальной ошибки, полученное в некоторой промежуточной точке интервала $[y(t^i), y(t^{i+1})]$. Строится область точных решений (“коридор” точных решений), после этого определяются границы областей значений глобальной ошибки. Важно, что ни на одном шаге по времени не складываются значения оценок приближенных решений и оценок глобальной ошибки (в методе отсутствует накопление вычисленных значений).

Для получения результирующих границ множеств решений выполняется объединение двух множеств значений: множества значений приближенных решений и множества всех возможных глобальных ошибок, заданных своими границами. Границы объединения будут гарантированными границами множества точных

решений $\mathcal{Y}(t) \subseteq \mathbf{Y}(t)$. Эти границы применяются для получения математически точных результатов в оценках областей допустимых отклонений (контроль за безопасностью функционирования систем) в широком классе задач.

В начальный момент времени t_0 и в момент времени t_k на заданном интервале времени для всех представленных методов строятся функциональные связи между областями всех решений системы ОДУ.

Приведем задачу оценки фазовых состояний в задаче наблюдений на основе методов, применяющих приближения операторов сдвига вдоль траектории.

1. Строим оценки для следующей систему управления

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= x_2, \\ \frac{dx_2}{dt} &= u, \end{aligned} \tag{2}$$

в которой $|u| \leq 1$, а $x(0) = 0$.

Граница области достижимости $Q(t)$ этой системы при любом T содержит две угловые точки с центральной симметрией. Координаты этих точек можно вычислить, если подставить в в формулу Коши решения этой системы выражения $x(t) = \int_0^t e^{A(t-\tau)} bu(\tau)d\tau$. Необходимо определить наихудшее возмущение, на котором достигается максимум квадратичного функционала

$$J = x^T(T)x(T) = \int_0^T b^T e^{A^T(T-t)} u(t) \int_0^T e^{A(T-\tau)} bu(\tau)d\tau.$$

Построение границ множества достижимости в фазовом пространстве, поможет вычислить самую удаленную от начала координат точку и возмущение, под действием которого достигается эта точка.

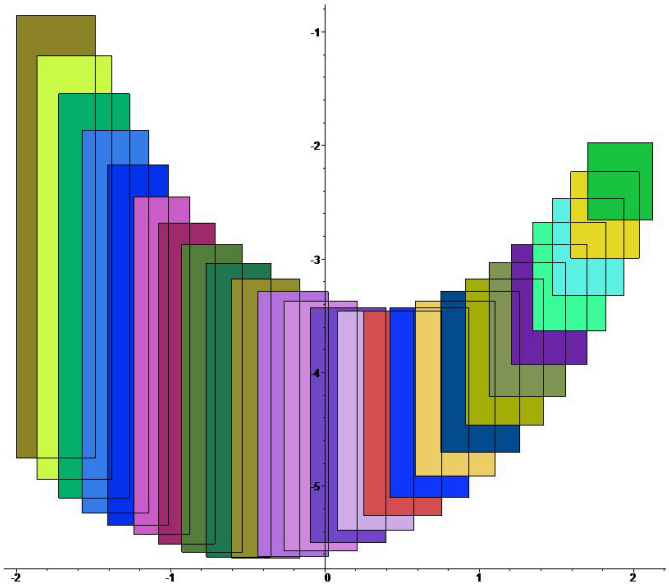


Рис. 1: Границы множеств достижимости системы (2)

2. Для обеспечения безопасности полетов применяются несколько систем управления самолетом, выполняющих контроль посадки самолета и захода на посадку в различных метеорологических условиях. Для различных значениях дальности видимости на взлетно-посадочной полосе (ВПП) и значениях высоты принятия решения (ВПР) вводятся различные категории эксплуатации (посадочные метеоминимумы). Автоматическое управление отключается при достижении визуального контакта с ориентирами на Земле на высоте принятия решений, дальнейший этап захода и посадка осуществляется при ручном управлении по земным ориентирам. Если визуальный контакт с землей не установлен, то самолет уходит на второй круг. Длина участка траектории захода на посадку, оставшаяся после перехода на ручное управление, очень коротка, сам полет на ней выполняется на малой высоте. Это значит, что для исправления накопившихся отклонений может не хватить времени.

Поэтому необходимо решить задачу — вывести систему в некоторую область пространства состояний на момент принятия решений. Ее можно свести к двум следующим зависящим одна от другой задачам [14].

1. В первой задаче необходимо вычислить границы области D допустимых отклонений на ВПР, начиная из любой точки этой области самолет может совершить посадку на участок ВПП, отведенный для посадки, используя ручное управление за ограниченное время.

2. Во второй задаче необходимо определить границы области W возможных состояний системы на ВПР, в эту область самолет может попасть при любых допустимых, в том числе экстремальных возмущениях, используя автоматическое управление. Определив решения этих задач, можно проверить выполнение условия $D \subset W$.

Управление самолетом реализуется системой с необходимой точностью, если справедливо вложение, записанное выше. Если вложение не выполняется, то появляются так называемые непосадочные заходы, при управлении самолетом принимаются решения об уходе на второй круг.

Чтобы облегчить задачу будем изучать предпосадочную прямую — последний участок траектории захода на посадку. Координаты центра масс определяют положение самолета, для этого используется система координат xOz, связанная с землей, углом рыскания ψ и углом крена γ. Скорости изменения этих величин $\dot{z}, \dot{\psi}, \dot{\gamma}$ также включены в фазовые координаты. Пусть ось Ox направлена вдоль продольной оси ВПП. Боковое уклонение центра масс самолета от оси ВПП определяет величина z. Отклонения элеронов (угол δ_M) и руля направления (угол δ) считаются управляющими воздействиями.

При записи уравнений бокового движения самолета, полагаем, что значения отклонений самолета от заданной траектории по величине принимают очень маленькие значения [14]. В уравнения использовались стандартные размеры ВВП и характерные значения предельных отклонений вероятностей их превышения [14].

На рис. 2 изображены границы включений областей допустимых отклонений под влиянием быстрых изменений скорости бокового ветра. Управляющее воздействие назначается так, чтобы расширить размеры этой области, а возмущение направлено на то, чтобы сделать эти размеры меньше.

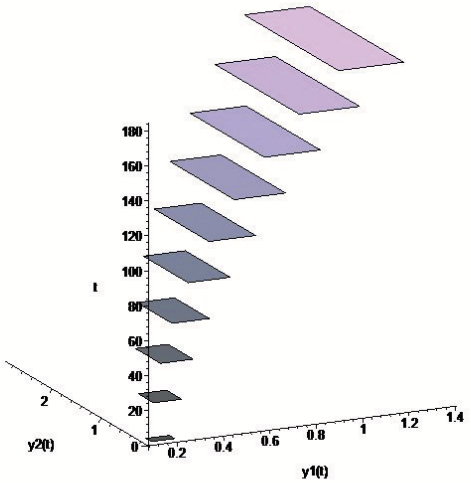


Рис. 2: Границы включений областей допустимых отклонений под влиянием быстрых изменений скорости

Заключение

В реальных физических, химических, технических задачах часто возникают случаи, когда информация о поведении возмущений состоит лишь в знании ограничений на возмущения. Например, при отыскании максимального отклонения управляемой системы от желаемого состояния приходится решать такие задачи. Используемый показатель качества — максимум модуля выходной величины в заданный конечный момент времени — полезен для этих задач, так как требуется гарантия, что выходная величина или некоторая ее функция под действием возмущений не превзойдет заданных пределов. В этой статье показаны результаты применения метода вычисления границ областей решений с возмущающими воздействиями, применяющего для этого символьные формулы решений с учетом сохранения физических инвариантов и геометрических структур.

Список литературы

[1] Куржанский А.Б., Управление и наблюдение в условиях неопределенности: моногр. М.: Наука, 1977.

[2] Черноусько Ф.Л., Оценивание фазового состояния динамических систем: моногр. М.: Наука, 1988.

[3] Булгаков Б.В., Накопление возмущений линейных осциллирующих систем// Доклады Академии Наук, 1946. 51. — с. 339–342.

[4] Овсеевич А.И., Шматков А.М., Сравнение вероятностного и гарантированного подходов прогноза фазовых состояний динамических систем// Известия РАН. Теория и системы управления. 1997. № 4 — с. 11–16

[5] Гноенский Л.С. О точности некоторых нестационарных следящих систем // Автоматика и телемеханика, 1986. вып. 9. — с. 5–19.

[6] Жермоленко В.Л. О максимальном отклонении линейной системы // Автоматика и телемеханика, 2012. вып. 7. — с. 3–14.

[7] Кумков С.И.,Пацко В.С., Пятко С.Г., Решетов В.М., Федотов А.А. Информационные множества в задаче наблюдения за движением самолета в горизонтальной плоскости // Известия РАН. Теория и системы управления. 2003. № 4 — с. 51–61.

[8] Рогалев А. Н. Гарантированные методы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений на основе преобразования символьных формул // Вычислительные технологии. 2003. Т. 8, № 5. С. 102–116.

[9] Рогалев, А.Н. Вопросы устойчивости ансамблей дифференциальных уравнений/А.Н. Рогалев //Вычислительные технологии. 2008. 13(3) — с. 111–117.

[10] Rogalyov, A.N. Computation of reachable sets guaranteed bounds/A.N. Rogalyov// Proceedings of the IASTED International Conferences on Automation, Control, and Information Technology — Control, Diagnostics, and Automation (ACIT — CDA 2010). — ACTA Press, B6, Calgary, Canada. 2010 — p. 132–139.

[11] Рогалев А.Н. Вычисление гарантированных границ множеств достижимости управляемых систем // Автометрия. 2011. т. 47, № 3 — с. 100–112.

[12] Рогалев А. Н. Безопасность сложных систем и оценки областей допустимых отклонений // Современные технологии, системный анализ, моделирование. 2014. № 4(44). С. 84–91.

[13] Hairer E., Lubich C., Wanner G. Geometric Numerical Integration. Second ed. Springer, 2006.

[14] Федоров С.М., Драбкин В.В., Кейн В.М., Михайлов О.И. Автоматизированное управление самолетами и вертолетами: моногр. М.: Транспорт, 1977.

Алексей Николаевич Рогалев — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск;
e-mail: rogalyov@icm.krasn.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ОЦЕНКИ ОШИБКИ ЧИСЛЕННЫХ РЕШЕНИЙ

А. Н. Рогалев

Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск

УДК 517.968

В статье исследуется обратный анализ ошибок численных решений, опираясь на аналогии с обратными задачами, когда значения параметров решений могут быть получены из наблюдаемых (вычисляемых) данных. Найти или оценить прямую ошибку непосредственно практически невозможно, так как в целом о точном решение известно очень мало или вообще ничего не известно. Вместо этого исследуется величина возмущения данных, такая, что при этих возмущениях численное решение будет точным решением задачи с возмущенными входными данными. Поскольку фактически решается обратная задача, то большое влияние оказывает нарушение устойчивости подобных задач. Предложено использовать при оценке погрешности решения некоторое ограниченное множество, которому принадлежит точное решение. Приводятся результаты расчетов ошибок численных решений систем линейных алгебраических уравнений большой размерности.

Ключевые слова: обратный анализ, ошибки численных методов

Введение

Обратный анализ ошибок численных решений основан на том, что точность приближенного решения оценивается, рассматривая его в качестве точного решения задачи, близкой к исходной задаче [1], [2]. Такой метод анализа ошибок был разработан Уилкинсоном при численном решении задач линейной алгебры, и широко применен также в других областях численного анализа [2]. Предметом данной работы является рассмотрение обратного анализа ошибок совместно с обратными задачами — типом задач, часто возникающий во многих разделах науки, когда значения параметров модели должны быть получены из наблюдаемых данных. В целом обратный анализ ошибок показал свою эффективность при оценке ошибок решений как для систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), так и для непрерывных задач. Например, для обратного анализа ошибок дифференциальных уравнений (ДУ), выполняется управление дефектом (невязкой) численного решений, построение теневых решений (решений задач с возмущенной правой частью) и применение метода модифицированных уравнений, обобщены алгоритмы для реализации этих методов. Изучена также асимптотическая связь между локальной погрешностью, которая обычно используется для подбора величины шага численных методов решения задач с начальными данным и дефектом (невязкой), а также разность между точным решением возмущенной дефектом задачи и ее численным решением. Так как физические ошибки и ошибки моделей присутствуют для очень многих задач, выделяются условия, при которых численное решение можно рассматривать как точное решение возмущенной задачи.

При всех несомненных достоинствах обратного анализа ошибок возможен слишком большой рост границ оценок. Приводятся обоснования, что обратный анализ во многом напоминает обратные задачи, которые являются некорректно поставленными задачами. Для таких задач из трёх условий корректности постановки задачи (существование решения, единственность решения и его устойчивость) нарушается одно из них, чаще всего устойчивость. Для устранения всех нежелательных эффектов от неустойчивости этой задачи предлагается применять дополнительную (априорную) информацию о том, что точное решение принадлежит некоторому компактному множеству [3], [4].

1 Обратный анализ ошибок

Определение 1. Пусть y — точное решение задачи и $\hat{y}$ — приближенное решение. Разность этих решений называется прямой ошибкой.

Вместо того, чтобы вычислять прямую ошибку, в обратном анализе ошибки рассматривается вопрос, какова величина возмущения данных δx, чтобы численное решение $\hat{y}$ было точным решением задачи с возмущенными входными данными $x + \delta x$.

Определение 2. Пусть $\hat{y}$ — приближенное решение задачи f с заданными данными x. Тогда обратной ошибкой называется величина δx, такая, что данные x должны быть изменены именно на эту величину, чтобы $\hat{y}$ было точным решением задачи с данными $x + \delta x$.

Обратную ошибку в большинстве случаев возможно рассчитать или оценить. Таким образом, стратегия состоит в том, чтобы отобразить назад (построить обратное отображение) прямую ошибку, превратив ее в рассмотрение обратной ошибки. Общую идею обратного анализа ошибок можно описать, рассматривая поставленную задачу как отображение f из пространства данных D в пространство решений S Принимая во внимание, что в заданной задаче f указанные данные D, задача f отображает их в точное решение $y = f(x)$. Итак обратный анализ ошибок основан на том, что, при малой величине обратной ошибки, численное решение будет точным решением близкой к исходной задаче.

В некоторых случаях, включая представленный случай системы ЛАУ, уместно рассмотреть пространство данных как пространство задач (или уравнений); в таком случае под возмущением входа $\hat{x}$ понимается видоизмененная задача (или система уравнений), которая решается точно численным методом. В контексте задачи ЛАУ отображению f соответствует задача “решить СЛАУ” и диагональное отображение означает задачу “решить возмущенную СЛАУ”.

2 Сравнение вариантов обратного анализа ошибок численных решений систем линейных алгебраических уравнений

Для конечно-элементного анализа силовых конструкций в данной статье предложены методы апостериорного обратного анализа ошибок, контролирующие влияние на результат ошибок округления. Силовыми конструкциями называют конструкции (технические устройства, составленные из различных частей), под воздействием комплекса эксплуатационных нагрузок в штатных и аварийных режимах нагружения. Решая прикладные задачи для напряженно-деформированных состояний силовых конструкций необходимо оценить степень близости между точным и приближенными решениями, полученными на сетке конечных элементов с конечной величиной шага сетки. Сходимость метода конечных элементов контролировать сложно: при большом числе конечных элементов решение может расходиться из-за накапливающихся ошибок округления, даже при выполнении условий сходимости. Оценки, полученные при применении методов обратного анализа ошибок позволяет достаточно точно контролировать сходимость численных решений, что подтверждают расчеты, выполненные для практических задач.

Пусть решается система линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b \tag{1}$$

Без потери общности будем полагать, что все расчеты ведутся на одном компьютере в рамках реализации одной арифметики с плавающей точкой и ошибки матрицы коэффициентов системы возникают при представлении этой матрицы в компьютере, то есть на ошибки матрицы коэффициентов налагается условие $\left\|A^{-1}\right\| \cdot \|\Delta A\| < 1$. Поскольку накопление погрешности при численном решении алгебраических уравнений — суммарное влияние округлений, сделанных на отдельных шагах вычислительного процесса, то логично для априорной оценки суммарного влияния ошибок округления в численных методах линейной алгебры использовать схему так называемого обратного анализа.

В применении к решению СЛАУ схема обратного анализа заключается в следующем. Вычисленное прямым методом M решение u^h СЛАУ не удовлетворяет исходной системе (1), но может быть представлено как точное решение возмущенной системы

$$(A + \Delta A)\, u = b + \Delta b \tag{2}$$

Качество прямого метода оценивается по наилучшей априорной оценке [1], которую можно дать для норм матрицы ΔA и вектора Δb. Такие “наилучшие” ΔA и Δb называются соответственно матрицей и вектором эквивалентного возмущения для метода M.

Если оценки для ΔA и Δb были получены, то теоретически ошибка приближенного решения u^h может быть оценена неравенством

$$\frac{\|u-u^h\|}{\|u\|} \le \frac{cond(A)}{1-\|A^{-1}\|\,\|\Delta A\|}\left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}+\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}\right).$$

В этом неравенстве $cond(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ — число обусловленности матрицы A, а матричная норма предполагается подчиненной векторной норме. Как уже отмечалось, оценка нормы обратной матрицы $\|A^{-1}\|$ редко бывает известна, и основной смысл этого неравенства состоит в возможности сравнения качества различных методов. Ниже приводится вид некоторых типичных оценок для матрицы ΔA. Для методов, использующих ортогональные преобразования и арифметику с плавающей запятой (коэффициенты системы A, b считаются действительными числами)

$$\|\Delta A\|_E \le f(n) \cdot \|A\|_E \cdot \varepsilon. \tag{3}$$

В оценке (3) ε — относительная точность арифметических операций в ЭВМ, $\|A\|_E = \left(\sum_{i,j} a_{ij}^2\right)^{\frac{1}{2}}$ — евклидова матричная норма, $f(n)$ — функция вида Cn^k , где n — порядок системы. Точные значения константы C и показателя k определяются такими деталями вычислительного процесса, как используемые способ округления, и вид операции накопления скалярных произведений и т. д. В случае методов типа Гаусса в правую часть оценки (3) входит еще множитель $g(A)$, отражающий возможность роста элементов матрицы A на промежуточных шагах метода по сравнению с первоначальным уровнем (такой рост отсутствует в ортогональных методах). Чтобы уменьшить значение $g(A)$, применяют различные способы выбора ведущего элемента, препятствующие возрастанию элементов матрицы.

Опишем методы апостериорного анализа ошибок СЛАУ, основанных на обратном анализе ошибок. Пусть заданы две СЛАУ, имеющие одну матрицу коэффициентов A (матрицы жесткости), первая система

$$Au = b_{init} \tag{4}$$

имеет вектор b_{init} правых частей, для второй системы

$$Az = b_{new} \tag{5}$$

сформируем вектор правых частей b_{new} таким образом, чтобы полученная система имела известное решение.

Выделим два варианта формирования систем, для которых применим обратный анализ ошибок [13, 14].

В первом варианте, решив систему (4) численным методом K, мы находим решение u_{num}, затем, подставив это вектор решений в левую часть системы (4), вычисляем вектор $b_{new} = Au_{num}$. Таким образом, мы строим систему линейных алгебраических уравнений вида (5), точным решением которой является вектор численного решения системы (4) u_{num}, в чем можно убедиться простой подстановкой. Далее решим систему вида (5), используя тот же численный метод K на том же компьютере во время одного сеанса работы с программой, реализующей МКЭ.

В итоге мы вычислим вектор численного решения z_{num} системы вида (5) $Az_{num} = b_{new}$, где $b_{new} = Au_{num}$. Норма вектора разности $\|u_{num} - z_{num}\| \approx \|u_{num} - u\|$, то есть вектор разности $u_{num} - z_{num} \approx u - u_{num}$ (вектору ошибки численного метода K).

Далее второй вариант обратного анализа ошибки изменяет способ построения правой части СЛАУ. Сформулируем основы этого способа построения. Используя оценки нормы вектора решений СЛАУ, легко получить неравенство $\|u\| \ge \dfrac{\|b\|}{\|A\|}$. Будем сконструировать решение $z = (z_k)_{k=1,n}$, компоненты которого $z_k = \dfrac{\|b\|\, r_k(A)}{\|A\|}$, либо $z_k = \dfrac{\|\phi(b)\|\, r_k(A)}{\|\psi(A)\|}$. Вид функций ϕ, ψ, r_k выбирается так, чтобы после подстановки этих функций в СЛАУ норма правой части была либо равна норме правой части, либо мажорировала ее. Например, если компоненты вектора решений положить равными

$$z_k = \left(\frac{\max\limits_i |b_i|}{\max\limits_i \sum_{j=1}^n a_{ij}}\right),$$

то после подстановки в систему (5) компоненты вектора правой части этой системы примут вид

$$b_{new,k} = \max_i |b_{init,i}| \left(\frac{\sum_{j=1}^n a_{ij}}{\max_i \sum_{j=1}^n a_{ij}} \right). \tag{6}$$

Тогда для систем (4), (5) совпадут матрицы коэффициентов и будут равны нормы правых частей. Все тестовые примеры подтвердили оценки для ошибок численных решений этих систем

$$\|u - u_{num}\| \le \|z - z_{num}\|. \tag{7}$$

Обратный анализ по Уилкинсону	Численное решение u_{num} системы $(A + \Delta A)\, u = b_{init}$ представлено как решение возмущенной системы $(A + \Delta A)\, u = b + \Delta b = b_{new}$	Оценка ошибки численного решения $\frac{\|u - u_{num}\|}{\|x\|} \le$ $\le \frac{cond(A)}{1 - \|A^{-1}\|\,\|\Delta A\|} \cdot \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right)$
Обратный анализ ошибки — метод I	Численное решение u_{num} системы $Au = b$ представлено как точное решение возмущенной системы $Az = b_{new}$, где $b_{new} = Au_{num}$	Решаются численно методом K системы уравнений $Au = b$ и $Az = b_{new}$. Оценка ошибки численного решения исходной системы $\|u - u_{num}\| \approx \|u_{num} - z_{num}\|$.
Обратный анализ ошибки — метод II	Строится система линейных уравнений $Az = b_{new}$ с известным решением, $z_k = \left(\frac{\max_l \lvert b_l \rvert}{\max_i \sum_{j=1}^n a_{ij}} \right)_k$, $b_{new,k} = \max_l \lvert b_{init,l} \rvert \left(\frac{\sum_{j=1}^n a_{ij}}{\max_i \sum_{j=1}^n a_{ij}} \right)_k =$ $= \left[\max_l \lvert b_{init,l} \rvert \cdot \alpha_i \right]_{i=1,..,n}$, нормы правых частей этих систем равны	Решаются численно методом K системы уравнений $Au = b$ и $Az = b_{new}$. Оценка ошибки численного решения исходной системы $\|u - u_{num}\|_\infty \le \|z - z_{num}\|_\infty$.

В таблицах 1–2 показаны оценки ошибок узловых перемещений (мм), обусловленных влиянием ошибок округления в задачах, полученных тремя методами для рефлектора наземной зеркальной антенны спутниковой связи (Задача 1), блока механического устройства регулировки положения рефлектора зеркальной антенны космического базирования (Задача 2) [5], [6].

Таблица 1: Ошибки при численном анализе рефлектора наземной антенны, мм

esize, мм	n	Ошибка по методу		
		Уилкинсона	I	II
200	108540	$2,235 \cdot 10^6$	$3,761 \cdot 10^{-11}$	$9,212 \cdot 10^{-10}$
150	169560	$5,436 \cdot 10^6$	$1,117 \cdot 10^{-10}$	$1,185 \cdot 10^{-9}$
100	339804	$1,993 \cdot 10^7$	$1,322 \cdot 10^{-10}$	$3,289 \cdot 10^{-9}$
80	513576	$6,453 \cdot 10^7$	$1,532 \cdot 10^{-10}$	$5,358 \cdot 10^{-9}$
60	869328	$2,708 \cdot 10^8$	$4,429 \cdot 10^{-10}$	$9,829 \cdot 10^{-9}$
40	1909548	$8,938 \cdot 10^8$	$1,238 \cdot 10^{-9}$	$2,321 \cdot 10^{-8}$

Из приведенных таблиц с результатами расчетов видно, что вычисления оценки ошибок численных решений, полученные по методам 1 и 2 существенно точнее, чем оценки по классической формуле Уилкинсона. Отличие этих методов, которое обеспечило такой результат, состоит в том, что в этих методах мы более точно оцениваем отклонение точного решения, что соответствует результатам [3].

Таблица 2: Ошибки при численном анализе блока механического устройства регулировки, мм

esize, мм	n	Ошибка по методу		
		Уилкинсона	I	II
20	180875	$1,925 \cdot 10^{10}$	$6,342 \cdot 10^{-5}$	$1,031 \cdot 10^{-2}$
10	4221 456	$4,439 \cdot 10^{11}$	$8,345 \cdot 10^{-5}$	$1,500 \cdot 10^{-2}$
5	312212	$1,051 \cdot 10^{11}$	$1,144 \cdot 10^{-4}$	$2,504 \cdot 10^{-2}$
3	472130	$9,568 \cdot 10^{11}$	$4,821 \cdot 10^{-4}$	$3,071 \cdot 10^{-2}$

Заключение

Обычно считается, что главное преимущество обратного анализа ошибок в том, что, применение его к хорошо обусловленной задаче с небольшой по величине обратной ошибкой приводит к малой величине прямой ошибки (глобальная ошибка в данном контексте). Нахождение некоторого множества конечного диаметра, которому принадлежит точное решение (хотя бы при достаточно малых погрешностях) и оценка расстояния от приближенного решения до его границы [3] позволяет уменьшить влияние некорректности обратного анализ ошибок, проявляющуюся в отсутствии устойчивости. Это подтверждает тот факт, что обратный анализ ошибок принадлежит к классу обратных задач, и может быть охарактеризован как некорректно поставленная задача.

Список литературы

[1] Wilkinson J. Rounding errors in algebraic processes. London. Her Majesty's Stationary Office. 1963. 161 p.

[2] Reich, S. 1999. Backward error analysis for numerical integrators // SIAM Journal on Numerical Analysis, P. 1549–1570

[3] Дорофеев К.Ю., Титаренко В.Н.. Ягола А.Л. Алгоритмы построения апостериорных погрешностей решений для некорректных задач //ЖВММФ. 2003. Т. 43, № 1. С. 12–25.

[4] Ю.М. Королев, А. Г. Ягола. Оценка погрешности в линейных обратных задачах при наличии априорной информации// Вычислительные методы и программирование. 2012. Т. 13. С. 14–18.

[5] Doronin S. V., Rogalev A. N. Error in Calculating the Extension of a Plate with a Circular Notch // Russian Engineering Research, 2015, Vol. 35, No. 4, P. 235–238.

[6] Рогалев А.Н., Доронин С.В., Рейзмунт Е.М. Опыт решения и постановки обратных задач конструкционной прочности // Сборник «Международная конференция «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики — 2015». Новосибирск: Академиздат: 2015. с. 96.

Алексей Николаевич Рогалев — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск;
e-mail: rogalyov@icm.krasn.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ОБОБЩЕННАЯ ОНТОЛОГИЯ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ИМИТАЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЕСТЕСТВЕННОГО ЯЗЫКА

С. В. Рудометов, В. В. Окольнишников

Институт вычислителых технологий СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.685.1

Современный уровень развития технологий искусственного интеллекта позволяет применить их для решения таких проблем, как максимальное упрощение взаимодействия человека и компьютера, сведение его к присущим человеку типам когнитивного взаимодействия. Пример — постановка задачи для компьютера в виде фраз на естественном языке.

В докладе приводится возможный пример организации такого взаимодействия для задач имитационного моделирования. Обсуждаются ограничения этого подхода, обнаруженные в процессе его реализации в системе MTSS. Вводится понятие "дистанции программирования" как длины своеобразного "моста" между постановкой задачи и современными возможностями вычислительной техники (включая библиотеки прикладного программирования для искусственного интеллекта), которую должен "пройти" программист для того, чтобы задача в своей начальной постановке заработала на компьютере. Показано, как максимально сократить эту "дистанцию", а в идеале — свести ее к нулю, исключив тем самым программиста из цепочки человек–постановка задачи–имитационный эксперимент–вычислительная система.

Для сокращения дистанции программирования предложена техника создания онтологии предметной области, основанная на возможностях библиотек элементарных моделей среды MTSS. Показан способ анализа фраз на естественном языке, который позволяет "собирать" имитационную модель из экземпляров элементарных моделей, связывая их друг с другом и задавая значения их атрибутов, если требуется.

Ключевые слова: имитационное моделирование, семантический анализ, онтология.

Введение

В последнее время активно развивается использование технологий искусственного интеллекта, таких как семантический анализ текстов на естественных языках.

Семантический анализ текста на естественном языке имеет смысл только в контексте какой-то задачи, сам по себе он не может существовать. Примеры задач семантического анализа: машинный перевод, поиск смысловой информации в тексте (semantic web, определение эмоционального окраса текста и т.д.), управление роботами или технологическим оборудованием.

Ранее авторами было проведено исследование [1], в котором фразы естественного языка используются для конфигурирования имитационной модели, созданной в системе MTSS [2] для специализированной библиотеки имитации технологического оборудования (в нашем случае — угледобыче в пологом пласте).

Однако, при создании элементов самой библиотеки библиотечные элементы — элементарные модели (ЭМ) в терминологии MTSS, как правило, приходится конструировать из вполне определенных базовых компонентов. Задача статьи — описать эти базовые по отношению к ЭМ компоненты в виде онтологии и представить вариант ее использования в виде описания элементов библиотеки имитационных моделей технологических объектов фразами на естественном (русском, английском) языке.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-07-01179, 16-47-420490).

1 Использование естественного языка

Правильно ли вообще использовать естественный язык для описания имитационной модели как компьютерной программы? С одной стороны, естественный язык, являясь продуктом эволюции человека и человеческого общества, в своей высшей точке развития приспособлен как для обмена абстрактными понятиями, так и для создания новых абстрактных понятий, возникновение которых невозможно (прежде всего из-за ограниченности мышления) в отдельно взятом мозге индивида [3]. И именно на основе естественного языка, с его развитием, возникло современное общество, которое, в свою очередь, потребовало дальнейшего развития самого языка. Усложнение общества ставило перед его частями все более сложные задачи (прежде всего различные вычисления, от элементарных площадей до сложнейших архитектурных сооружений, от простейшей навигации до сложнейших астрономических вычислений). Развитие таких задач послужило толчком к возникновению научного мировоззрения, а также к возникновению различных наук.

Имитационные модели, как программы, исполняемые на компьютерах, создаются с использованием языков программирования. Эти языки, в свою очередь, являются продуктом именно научного мировоззрения, наследуя его основные черты и задачи. А именно, языки программирования:

- формальные. Это первое с чем сталкивается любой студент: для написания программы ему недостаточно использовать всего одну фразу (например, “Смеркалось”). Ему требуется описать весь процесс, с использованием строгих знаний, опираясь на существующие (в системе программирования или моделирования) классы и объекты, и если их нет — сначала создать и их. Например, так: “Сумерки — часть суток после заката и перед восходом Солнца, в течение которого Солнце находится за горизонтом и невидимо, но видны признаки заката, обусловленные рассеянием солнечного света в верхних слоях атмосферы Земли”. Другими словами, формализованное описание никогда не опирается на некоторое промежуточное субъективное знание, например, на личный опыт индивида. Оно уже, как правило, содержит в себе достаточно полную информацию. Именно поэтому формализованное знание может быть транслировано в компьютерный код. Причем все сказанное относится не только к описательной формализации, но и к попыткам управления компьютерной программой (в нашем случае — имитационной моделью) с помощью языковых команд: команды управления также должны быть формальными.

- используются для написания компьютерных программ, каждая из которых предназначена для решения какой-то конкретной задачи. Основные проблемы, которые решаются с применением программ, в точности совпадают с проблемами науки, в частности предсказания (“что будет если”, задачи типа what-if). Невозможно представить программу, написанную ряди программы.

Система программирования MTSS позволяет строить большие имитационные модели из малых, библиотечных, элементарных имитационных моделей (ЭМ), созданных, верифицированных и валидированных заранее. Способ построения и исполнения такой модели — визуальный. Пользователь соединяет на экране компьютера экземпляры ЭМ, подобно частям конструктора, затем задает значения свойств каждого экземпляра ЭМ, визуально контролируя процесс построения и затем исполнения имитационной модели.

Таким образом, в системе имитационного моделирования MTSS естественный язык может использоваться только:

1. В формальном виде, опираясь на сущности, определенные ранее в самой системе имитационного моделирования и в ее библиотечных элементах, как это было сделано ранее для “пологого пласта”
2. Для описания связей и взаимодействия между объектами модели (экземплярами ЭМ)
3. Для описания алгоритма работы ЭМ
4. Для управления исполнением модели (командный язык)

2 Базовая онтология

Попробуем оттолкнуться от иерархии в живой природе, а именно от того, как устроена нервная система живого организма. С точки зрения кибернетики и нейронных сетей, нам потребуются:

- рецепторы (входные сигналы)

- эффекторы (выходные сигналы)
- обработчик информации от рецепторов, с возможностью выдачи сигналов в эффекторы. Иногда он называется мозгом, но это не всегда так. Иногда обработчика информации от рецепторов (мозга) нет как такового, а есть только прямые связи между рецепторами и эффекторами, определенные эволюцией (пример — гидра).

Каждый субъект в формализме DEVS [4] (на котором построен MTSS) имеет входные и выходные порты. При построении имитационной модели субъекты (в MTSS — экземпляры ЭМ) соединяются своими выходами с входами других субъектов. Этим они сильно напоминают нейроны в мозгу живых существ [5], в широком смысле этого понятия (то есть, включая сюда рецепторы и эффекторы в виде входных и выходных портов). Но использование просто абстрактного субъекта, в виде его "нейросетевого" наполнения, затруднительно по причине сложности получаемой модели и необходимости "обучения" такой модели. Хотелось бы все-таки наполнить такой субъект каким-то конкретным, достаточно сложным содержанием, совершив тем самым "эволюционный скачок" на требуемый уровень. Такой скачок, если исходить из кибернетического подхода, должен сопровождаться выработкой специализированных компонент (зон в мозге или нейронной сети).

DEVS-формализм позволяет создавать модели элементов исходной моделируемой системы, которые получаются после декомпозиции (важного и необходимого шага при построении имитационной модели). В MTSS после декомпозиции выделяются, как правило:

- классы элементов исходной системы (ЭМ в MTSS). Классы определяют, прежде всего, алгоритм функционирования, а также наборы входных сигналов, выходных сигналов, и свойств (параметров) класса. Свойство класса имеет признак типа, имени, набора (интервала) значений. Классы в MTSS можно объединить в библиотеку(и).
- объекты этих классов (субъекты в DEVS), с конкретными значениями параметров класса, и конкретными соединениями с другими объектами этого или других классов. Таким образом определяется топология конкретной имитационной модели. В MTSS объекты (экземпляры ЭМ) создаются и настраиваются визуально, специалистом в предметной области, при проведении моделирования.

Целью работы является показать, что для создания классов, моделирующих элементы исходной системы, можно использовать некоторые базовые, "протоклассы", путем их соответствующей настройки.

3 Устройство субъекта

DEVS-формализм является развитием дискретно-событийного подхода. DEVS описывает поведение системы на двух уровнях. В своей основе (первый уровень) система в нотации DEVS-формализма является дискретно-событийной имитационной моделью. Система входных и выходных портов, а также способ соединения простых субъектов для образования имитационной модели является DEVS-формализмом (второй уровень).

Более формально, имитационная модель представляется в виде набора

$$M = \{s_j^i, i \in Class, j \in Inst^i\} \tag{1}$$

экземпляров субъектов разных классов. ($Class$ — множество классов объектов, $Inst^i$ — множество экземпляров объектов класса i. Другими словами, множество M является набором экземпляров субъектов разных классов. Верхний индекс — номер класса, нижний индекс — номер экземпляра). Классы определяются на основе декомпозиции имитируемой системы. s_j^i могут соединяться друг с другом.

Каждый субъект в нотации DEVS представляется в виде набора своих важных свойств:

$$s_j^i = \{S, ta, \delta_{int}, X, \delta_{ext}, Y, \lambda\} \tag{2}$$

Здесь S — фиксированный набор состояний (как определено в Discrete Event Simulation, или сокращенно DES), ta (или time advance) — время следующего исполнения субъекта, δ_{int} — набор входных портов, X — функция переключения состояний, как это определено для DES, δ_{ext} — набор выходных портов, Y- функция реакции на события во входных портах, λ — функция отображения внутреннего состояния из множества S в набор выходных сигналов.

4 Онтологическое представление

Из представления (1) прямо следует, что это же определение является и онтологией имитационной модели. А именно, как следует из определения онтологии [6]

"Онтология — концептуальная схема, состоящая из

1. структуры данных, содержащей все релевантные классы объектов,
2. связи между классами
3. отношений (теорем, ограничений), принятых в данной предметной области"

Ограничивая область знаний результатами декомпозиции исходной системы, мы можем заключить, что (1) определяет искомую онтологию.

Таким образом, для формального описания имитационной модели на естественном языке нужно пройти следующие этапы:

Этап 1. Описать каждый класс, определенный после декомпозиции исходной системы. Для этого определить элементы этого класса:

$$s^i = \{S, X, Y, \delta_{int}, \delta_{ext}, \lambda, P, R\}, i \in Class, \tag{3}$$

здесь множества S, X, Y, δ_{int}, δ_{ext}, λ те же, что и в (2).

Множество P — это множество переменных, которые может определить сам создатель модели (очевидно, что это может быть не только программист, но и специалист в предметной области) для того, чтобы увеличить базу элементов онтологии, на которую могут опираться фразы на естественном языке. Другими словами, P — это множество определений.

Множество R называется множеством правил. Проще всего представить элементы данного множества как глаголы. Правила могут оперировать со всеми доступными данными состояния модели, включая множество P. Все описанные классы объединяются в библиотеку.

Этап 2. Используя библиотеку, порожденную на этапе 1, создать имитационную модель, как это уже делается в MTSS.

5 Дистанция программирования

Введем понятие **дистанции программирования** как некоторую несистемную характеристику, которая может показать количество или уровень трудозатрат, которые должен приложить программист (как посредник между компьютером и человеком) для реализации какой-либо идеи в виде компьютерной программы.

Эта характеристика оценивалась по-разному. Когда-то это было количество строк, затем — количество часов. На данный момент наиболее полной характеристикой является понятие **story point**, или **sp** [7], или т.н. единица производства. Story point позволяет создать наиболее точный план производства. То есть это как раз та самая характеристика, которая может показать искомый уровень трудозатрат.

Интересно, от чего зависит величина story point, и из чего состоит эта единица. Story point это:

1. Количество работы,
2. Сложность работы,
3. Любые риски и неочевидности, которые могут возникнуть в процессе работы.

Не вдаваясь в более глубокие детали, можно заметить, что, снижая значения во всех трех пунктах, можно добиться того, что программист вообще окажется не нужен.

То есть, требуется снизить не только количество работы, но и минимизировать сложность работы, а также убрать или "управлять" рисками. Все это может быть достигнуто автоматизацией.

На самом деле, такой подход не является новым. Как раз именно таким способом программист исключается из цепочки пользователь–компьютер в различных специализированных системах. Но такие системы (как например оригинальная MTSS) основаны на покрытии предметной области. Чем больше такое покрытие, тем большие возможности для имитационных экспериментов получает конечный пользователь. Такой подход имеет только одно ограничение — если пользователю все-таки чего-то не хватает, опять нужен программист.

Ниже показан пример онтологии, которая позволяет задавать имитационные эксперименты на естественном языке.

6 Пример описания библиотеки на естественном языке

Наиболее очевидным и как следствие — популярным способом синтаксического анализа фраз на естественном языке является т.н. “грамматика составляющих”. Эта грамматика пытается разбить предложение на более мелкие структуры, затем их — на еще более мелкие структуры, пока не дойдет до отдельных слов или минимальных синтаксических структур. Каждая такая структура отмечается своим признаком, обозначающим ее роль в предложении (POS-tagging). Из такого определения следует, что результат синтаксического разбора исходного предложения в частности зависит от порядка слов в предложении. Этот подход успешно применяется для языков, в которых правилами жестко задан порядок слов (например — английский язык).

Другой возможный подход — грамматика зависимостей. В отличие от грамматики составляющих, результатом синтаксического разбора предложения в данной грамматике будет набор зависимостей между частями предложения (в частности, это подразумевает, что для предложения уже выполнен синтаксический разбор с использованием грамматики составляющих). Грамматика зависимостей выделяет в предложении значимые части (субъект, объект), и зависимости между ними. В данном случае порядок слов не так важен, например, как в русском языке.

В системе MTSS мы попытались использовать грамматику зависимостей, потому что ее результат (зависимости) наиболее естественно может быть отображен на вызовы алгоритмических функций с определенными наборами параметров. Покажем это на примере.

Для предложения “Проходческо-очистной комбайн фронтального действия движется от точки врезки под углом А к горизонту вверх, а после достижения кровли пласта — под углом залегания пласта В — вглубь” после последовательного анализа обоими грамматиками выделяются следующие сущности:

- субъект: “Проходческо-очистной комбайн фронтального действия” (далее просто “комбайн”)
- объекты: непосредственно из фразы: “точка врезки”, “пласт”, “кровля пласта”, “угол залегания пласта”, “горизонт”.
- алгоритмы: ***движется1*** (<субъект>**комбайн**, <точка>**от** (точка врезки, скорость, угол(уголА, горизонт)), <точка>**до**(не определено), <направление>**направление**(вперед, угол(А к горизонту))), ***движется2*** (<субъект>**комбайн**, <точка>**от**(не определено), <точка>**до**(не определено, <направление>**направление**(вперед, угол(В залегания пласта))). Здесь значения, заключенные в угловые скобки < и >, обозначают стереотипы данных и служат для описания типов параметров
- как следствие из предыдущего пункта: требуется определить набор вычисляемых свойств на основании значений переменных, представленных объектами.
- условия: начало(алгоритмы:движется1), достижение кровли пласта (алгоритмы: движется2).

Исполнение модели заключается в задании набора начальных алгоритмов, последовательном, пошаговом исполнении текущего набора алгоритмов и затем — проверке условий. Условия могут переключить набор активных алгоритмов.

Как видно их этого примера, мы можем определить сложное движение субъекта имитационного моделирования, основываясь на простых алгоритмах. В данном примере это только один алгоритм — а именно функция **“движется”**

В базовой онтологии, реализованной в MTSS, записано, что для того чтобы использовать этот алгоритм, ему, как функции, требуется задать, кроме субъекта, параметры “точка начала движения”, “точка окончания движения” или “направление движения” (если не определена “точка окончания движения”). Как именно вычислять нужные для онтологической функции параметры?

К сожалению, это и есть та самая “дистанция программирования”, которую еще требуется преодолеть для реализации полностью автоматического построения модели с использованием естественного языка. Но можно заметить, насколько она сократилась по сравнению с созданием полной модели, с самого начала.

7 Что дальше?

Идеальным было бы в обозримом будущем перейти в создании имитационных моделей от формального языка к неформальному, который, как указано в [3], требует субъективного фильтра для правильной трактовки информации. Другими словами, "поговорить" с компьютером о создании какой-нибудь имитационной модели. Для этого в подходе, используемом MTSS, есть только некоторые части из списка:

- базовые элементы (как определено в данной статье)
- механизм накопления знаний (использование формализованных внешних источников)
- механизм создания абстракций
- механизм управления абстракциями

Ведь целью введения языков программирования было не создать отдельный мир вычислительных машин, в котором все взаимодействия формализованы. Сначала была необходимость хоть как-то "заставить" работать механический (а затем — электрический и наконец электронный) аппарат чтобы производить все более сложные вычисления. Затем, после того как компьютеры стали эффективно решать вычислительные задачи, их приспособили как инструмент в информационной эре, для сбора, поиска и обмена информацией (что мы сегодня и наблюдаем). И теперь, как представляется авторам, настала наконец пора сделать следующий "метасистемный" переход — перейти к неформальному общению с компьютерами, для которого у них есть очень большой массив накопленной информации. Вопрос в том — а кому и зачем нужен компьютер, который может поговорить на отвлеченные темы? Наша система предлагает использовать такое общение для создания имитационных моделей.

Список литературы

[1] Рудометов С. В., Окольнишников В.В. Использование онтологии технологических систем добычи угля для задания имитационных моделей на естественном языке. "Распределенные информационно — вычислительные ресурсы" (DICR-2014). 2–5 декабря 2014, Новосибирск.

[2] Рудометов С. В. Визуально — интерактивная система имитационного моделирования технологических систем. Вестник СибГУТИ. 2011. No 3. С. 14–27.

[3] Турчин В.Ф. Феномен науки: Кибернетический подход к эволюции. Изд. 2-е — М.: ЭТС. — 2000. — 368 с.

[4] Bernard Zeigler (1987). "Hierarchical, modular discrete-event modelling in an object-oriented environment". Simulation. 49 (5): pp 219–230.

[5] Саймон Хайкин. Нейронные сети. Полный курс. 2-е изд. Пер. с англ. — М.: Издательский дом "Вильямс", 2006. — 1104 с.: ил. — Парал. тит. англ.

[6] Лапшин В. А. Онтологии в компьютерных системах. — М.: Научный мир, 2010.

[7] Кеннет С. Рубин. Основы Scrum. Практическое руководство по гибкой разработке ПО. Пер. с англ. — М.: Издательский дом "Вильямс", 2016.— 537 с.

Виктор Васильевич Окольнишников — д.т.н., ведущий науч.сотр.
Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: okoln@mail.ru;
Сергей Валерьевич Рудометов — к.т.н., н.с.
Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: rsw@inbox.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ С ВЫРОЖДЕНИЕМ НА ВСЕЙ ГРАНИЦЕ ОБЛАСТИ

В. А. Рукавишников, А. С. Рябоконь, Е. И. Рукавишникова

Вычислительный центр ДВО РАН, 680000, Хабаровск

УДК 519.6

Для решения задачи Дирихле с вырождением на всей границе двумерной области построен метод конечных элементов со специальным сгущением сеток и проведен сравнительный численный анализ предложенного метода с классическим методом конечных элементов на квазиравномерных сетках. Получено экспериментальное подтверждение теоретических оценок точности, сделаны выводы.

Ключевые слова: краевые задачи с вырождением на всей границе области, метод конечных элементов, сетка со сгущением.

Введение

Методы конечных элементов и конечных разностей на квазиравномерных сетках для краевых задач с вырождением на границе области имеют недостаточную скорость сходимости приближенного решения к точному, что обусловлено наличием сингулярности. Обычно, для задач с сильной сингулярностью, когда нельзя определить обобщенное решение, и оно не принадлежит пространству Соболева H^1, определяют R-обобщенное решение (см., напр., [1, 2, 3, 4, 5]) и используют весовой метод конечных элементов [6, 7, 8, 9]. Главной особенностью этого метода является скорость сходимости $O(h)$ не зависимо от размеров или величины сингулярности. Основная сложность реализации данного метода состоит в подборе оптимальных параметров, при которых скорость сходимости приближенного решения к точному близка к теоретической.

Здесь рассматрена задача Дирихле для эллиптического уравнения второго порядка с вырождением решения на всей границе двумерной области. Для данной задачи построена схема метода конечных элементов на сетках со сгущением к границе области, которая задается параметрами, зависящими от построенного подпространства [10]. Проводится сравнительный численный анализ классического МКЭ и метода со сгущением сеток.

1 Постановка задачи

Через R^2 обозначим двумерное евклидово пространство; $x = (x_1, x_2)$ — произвольная точка в нем, $dx = dx_1 dx_2$. Пусть $\Omega \subset R^2$ — ограниченная область с границей $\partial\Omega$ такой, что можно определить функцию $\rho(x)$, положительную, дважды непрерывно дифференцируемую в Ω и в некоторой приграничной полосе совпадающую с расстоянием до границы.

Далее положим, что $s \in \{1; 2\}$, γ — действительное число, удовлетворяющее условию $\frac{1}{2} - s < \gamma < \frac{1}{2}$. Через $W^s_{2,\gamma}(\Omega)$ обозначим весовое пространство Соболева функций f, заданных на Ω, с конечной нормой

$$\|f\|_{W^s_{2,\gamma}(\Omega)} = \|f\|_{L_2(\Omega)} + |f|_{W^s_{2,\gamma}(\Omega)},$$

где $\|f\|_{L_2(\Omega)} = \left(\int\limits_\Omega |f|^2 dx \right)^{1/2}$, $|f|_{W^s_{2,\gamma}(\Omega)} = \sum\limits_{\substack{r_1, r_2 = 0 \\ |r| = s}}^{s} \left\| \rho^{-\gamma} \dfrac{\partial^{|r|} f}{\partial x_1^{r_1} \partial x_2^{r_2}} \right\|_{L_2(\Omega)}$, $r = (r_1, r_2)$ и $|r| = r_1 + r_2$, r_1, r_2 — целые неотрицательные числа.

Определим пространство функций f

$$\overset{\circ}{W}{}^{s}_{2,\gamma}(\Omega) = \left\{ f : f \in W^{s}_{2,\gamma}(\Omega), \quad f|_{\partial\Omega} = 0 \right\}$$

и пространство $L_{2,-1-\gamma}$ функций $F(x)$, $x \in \Omega$, с конечной нормой

$$\|F\|_{L_{2,-1-\gamma}(\Omega)} = \left(\int\limits_{\Omega} \left| \rho^{1+\gamma} F \right|^2 dx \right)^{1/2}.$$

В области Ω рассмотрим дифференциальное уравнение

$$-\sum_{k=1}^{2} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(a_{kk}(x) \frac{\partial u}{\partial x_k} \right) + a(x)u = F(x), \quad x \in \Omega, \tag{1}$$

с краевым условием

$$u|_{\partial\Omega} = 0, \quad \partial\Omega \in C^{(2)}. \tag{2}$$

Правая часть уравнения (1) удовлетворяет включению

$$F \in L_{2,-1-\alpha}(\Omega), \tag{3}$$

т.е. $\rho^{1+\alpha} F \in L_2(\Omega)$, $-\frac{1}{2} < \alpha < \frac{1}{2}$.

Коэффициенты уравнения $a_{kk}(x)$ $(k = 1, 2)$ — дифференцируемые на Ω функции, удовлетворяют неравенствам

$$|a_{kk}(x)| \le C_1 \rho^{-2\alpha}(x), \quad \left| \frac{\partial a_{kk}(x)}{\partial x_1} \right|, \left| \frac{\partial a_{kk}(x)}{\partial x_2} \right| \le C_2 \rho^{-2\alpha-1}(x), \tag{4}$$

функция $a(x)$ — положительная и подчинена неравенству

$$a(x) \le C_3 \rho^{-2\alpha-2}(x). \tag{5}$$

Предполагается выполненным условие ультраэллиптичности

$$\sum_{k=1}^{2} a_{kk}(x) \zeta_k^2 \ge C_4 \rho^{-2\alpha}(x) \sum_{k=1}^{2} \zeta_k^2, \quad x \in \Omega, \quad C_4 > 0, \tag{6}$$

ζ_1, ζ_2 — любые действительные параметры, C_1—C_4 — константы, не зависящие от x.

Обозначим через

$$E(u, v) = \int\limits_{\Omega} \left(\sum_{k=1}^{2} a_{kk}(x) \frac{\partial u}{\partial x_k} \frac{\partial v}{\partial x_k} + a(x)uv \right) dx, \quad (F, v) = \int\limits_{\Omega} Fv \, dx$$

соответственно билинейную и линейную формы.

Наряду с задачей (1), (2) сформулируем следующую вариационную задачу: найти функцию $u \in \overset{\circ}{W}{}^{1}_{2,\alpha}(\Omega)$, для которой равенство

$$E(u, v) = (F, v) \tag{7}$$

имеет место для всех $v \in \overset{\circ}{W}{}^{1}_{2,\alpha}(\Omega)$.

Функцию $u \in \overset{\circ}{W}{}^{1}_{2,\alpha}(\Omega)$, обладающую свойством (7), назовем обобщенным решением уравнения (1) в пространстве $\overset{\circ}{W}{}^{1}_{2,\alpha}(\Omega)$.

В [11, 12] при сделанных предположениях (3) — (6) доказаны существование и единственность обобщенного решения задачи (1), (2) в пространстве $\overset{\circ}{W}{}^{2}_{2,\alpha-1}(\Omega) \subset \overset{\circ}{W}{}^{1}_{2,\alpha}(\Omega)$. В случае, если функция F принадлежит $L_{2,-1-\alpha+\lambda}(\Omega) \subset L_{2,-1-\alpha}(\Omega)$, обобщенное решение u, как следует из [10], принадлежит более узкому пространству $\overset{\circ}{W}{}^{2}_{2,\alpha+\lambda-1}(\Omega) \subset \overset{\circ}{W}{}^{2}_{2,\alpha-1}(\Omega)$ при дополнительном условии на параметр λ.

2 Схема метода конечных элементов. Численный эксперимент

Схема метода конечных элементов для задачи (1), (2) на произвольной выпуклой области была описана в [13], а автоматизированное построение сеток со сгущением к границе предложено в [14]. Здесь для данной задачи строится схема МКЭ на сетках со сгущением к границе области Ω, представляющей собой круг единичного радиуса с центром в точке $(2;2)$, при этом коэффициенты и правая часть уравнения (1) задаются следующим образом: $a_{11}(x) = a_{22}(x) = \rho^{-2\alpha}(x)$, $a(x) = 1$,

$$F(x) = -4(1+\beta-l)\left((\beta-2\alpha-l)\rho^{\beta-2\alpha-l-1}(x)(1-\rho(x)) - \rho^{\beta-2\alpha-l}(x)\right) + \rho^{1+\beta-l}(x),$$

где $\rho(x) = 1-(x_1-2)^2-(x_2-2)^2$, $\alpha \in \left(-\frac{1}{2};\frac{1}{2}\right)$, $\beta \in \left(\alpha;\frac{1}{2}\right)$, $l < \frac{1}{2}$. Точное решение задачи — функция $u(x) = \rho^{1+\beta-l}(x)$.

Произведем триангуляцию T_h данной области Ω. Разделим область Ω на подобласти Ω_1 и Ω_2, где Ω_1 — приграничная полоса ширины b, в которой осуществим сгущение треугольных элементов к границе $\partial\Omega$. Зададим степень сжатия сетки $r = 1/\lambda$ ($\lambda = \beta - \alpha$), n — число линий уровня $\Gamma_j = b\left(\frac{j}{n}\right)^r$ и шаг h_j на каждом слое Q_j, ограниченном кривыми Γ_{j-1} и Γ_j, j $0,\ldots,n$. В области Ω_2 построим квазиравномерную сетку с шагом, равным h_n.

Каждому узлу P_i, $i = 0,\ldots,N_h$, где N_h — число внутренних узлов произведенной триангуляции T_h, поставим в соответствие функцию $\phi_i(x)$, равную единице в точке P_i, а в остальных узлах — нулю и линейную на каждом треугольнике из T_h. Множество V^h определим как линейную оболочку, натянутую на систему базисных функций $\{\varphi_i\}_{i=0}^{N_h}$.

Построенному конечномерному пространству $V^h \subset W^1_{2,\alpha}(\Omega)$ сопоставим следующую дискретную задачу: найти функцию $u_h(x)$ из V^h, удовлетворяющую равенству $E(u_h, v_h) = (F, v_h)$ для любой функции $v_h(x)$ из V^h.

Приближенное решение будем искать в виде $u_h(x) = \sum\limits_{i=0}^{N_h} u(P_i)\varphi_i(x)$.

Для проведенной триангуляции T_h области Ω с параметром сжатия $r = 1/\lambda$ имеют место следующие оценки сходимости:

$$\|u-u_h\|_{W^1_{2,\alpha}(\Omega)} \le C_5 h \left\|F\rho^{1+\alpha-\lambda}\right\|_{L_2(\Omega)};$$

$$\|u-u_h\|_{L_2(\Omega)} \le C_6 h^2 \left\|F\rho^{1+\alpha-\lambda}\right\|_{L_2(\Omega)},$$

где h — наибольшая из длин сторон треугольников в T_h.

Для набора модельных задач была проведена серия численных экспериментов, подтверждающая справедливость данных оценок. Все вычисления и анализ результатов проводились с помощью комплекса программ, разработанного на основе МКЭ, описанного выше. Для компактного размещения в памяти глобальной матрицы жесткости использован формат CSR (Compressed Sparse Row). Решение системы линейных алгебраических уравнений получено с помощью решателя PARDISO (Parallel Direct Solver) из пакета IntelMKL. Расчеты проводились на вычислительном кластере ВЦ ДВО РАН.

Зададим параметры, с помощью которых определяются коэффициенты, правые части уравнения (1) двух модельных задач, их точные решения и степень сжатия сетки r (см. табл. 1).

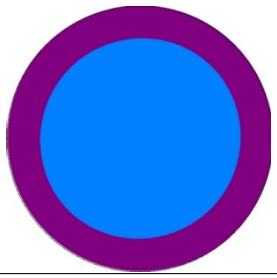
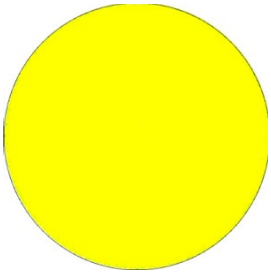
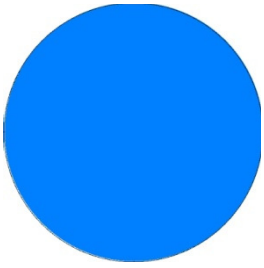
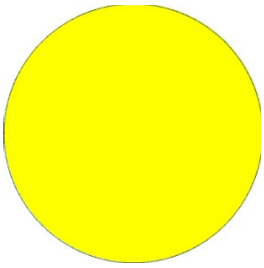
Таблица 1:

	α	β	l	Показатель степени точного решения	r
Модельная задача 1	-0.1	0.38	0.49	0.89	2.08(3)
Модельная задача 2	-0.4805	-0.011	0.499	0.49	2.13

В табл. 2 приведено число узлов, их процентное отношение к общему числу узлов сетки N, в которых абсолютное значение погрешности не меньше заданных предельных величин. Также здесь представлены рисунки распределения абсолютной погрешности в узлах для обобщенного решения на квазиравномерной сетке (R_q) и на сетке со сгущением к границе области (R_c). Данные для обобщенного решения на R_c приведены при N, совпадающим с числом узлов сетки R_q.

Введем для норм разности точного и приближенного решения обозначения: $\|e\|_{L_2(\Omega)} = \|u-u_h\|_{L_2(\Omega)}$, $\|e\|_{W^1_{2,\alpha}(\Omega)} = \|u-u_h\|_{W^1_{2,\alpha}(\Omega)}$ В табл. 3 представлены значения норм $\|e\|_{L_2(\Omega)}$, $\|e\|_{W^1_{2,\alpha}(\Omega)}$ для первой задачи

Таблица 2:

				Распределение абсолютной погрешности	Предельное значение	Проценты	Число узлов
Модельная задача 1	Обобщенное решение на квазиравномерной сетке	N	5427739		$\geq 7e-5$	46.48%	2522647
					$\geq 5e-5$	53.51%	2904858
					$\geq 7e-6$	0.00%	234
		h	0.00078		$\geq 5e-6$	0.00%	0
					$\geq 1e-6$	0.00%	0
	Обобщенное решение на сетках со сгущением	N	4974486		$\geq 7e-5$	0.00%	0
		N в области Ω_2	4241164		$\geq 5e-5$	0.00%	0
		h в области Ω_2	0.00087		$\geq 7e-6$	0.53%	26331
		n	18		$\geq 5e-6$	88.48%	4401539
		b	1/128		$\geq$ 1e-6	10.99%	546616
Модельная задача 2	Обобщенное решение на квазиравномерной сетке	N	2713152		$\geq 2e-2$	0.00%	0
					$\geq 5e-3$	100.00%	2713152
					$\geq 2e-3$	0.00%	0
		h	0.0011		$\geq 5e-4$	0.00%	0
					≥ 0	0.00%	0
	Обобщенное решение на сетках со сгущением	N	2739424		$\geq 2e-2$	0.00%	0
		N в области Ω_2	1894704		$\geq 5e-3$	0.00%	0
		h в области Ω_2	0.0013		$\geq 2e-3$	9.38%	257082
		n	25		$\geq 5e-4$	90.62%	2482342
		b	1/64		≥ 0	0.00%	0

и $\|e\|_{W^1_{2,\alpha}(\Omega)}$ для второй задачи соответственно для сеток R_q и R_c, их отношения δ при измельчении шага сетки в два раза. (Эта величина для R_c варьируется изменением числа линий уровня, в таблице приводится для области Ω_2).

По результатам численного эксперимента можно сделать следующие выводы:

- приближенное обобщенное решение задачи (1), (2) на сетках со сгущением к границе области сходится к точному решению со скоростью $O(h^2)$ в норме пространства $L_2(\Omega)$ и $O(h)$ в норме $W^1_{2,\alpha}(\Omega)$;
- при расчете на сетках со сгущением можно получить при меньшем числе узлов абсолютную погреш-

Таблица 3:

	Обобщенное решение на квазиравномерной сетке					Обобщенное решение на сетках со сгущением $b = 1/64$				
Модельная задача 1	h	$\|e\|_{L_2(\Omega)}$	δ	$\|e\|_{W^1_{2,\alpha}(\Omega)}$	δ	h в области Ω_2	$\|e\|_{L_2(\Omega)}$	δ	$\|e\|_{W^1_{2,\alpha}(\Omega)}$	δ
	0.003125	0.000435		0.025902		0.00889	0.000417		0.030584	
			1.88		1.42			3.97		2.03
	0.001563	0.000231		0.018179		0.00428	0.000105		0.015038	
			1.86		1.42			4.04		2.07
	0.000781	0.000124		0.012832		0.00196	0.000026		0.007259	
Модельная задача 2	h		$\|e\|_{W^1_{2,\alpha}(\Omega)}$		δ	n	h в области Ω_2		$\|e\|_{W^1_{2,\alpha}(\Omega)}$	δ
	0.003125		0.088201			3	0.01802		0.130585	
					1.41					2.06
	0.001563		0.062446			7	0.00873		0.063428	
					1.41					2.10
	0.000781		0.044274			16	0.00401		0.030266	

ность на порядок меньше, чем при расчете на квазиравномерных сетках, причем как в узлах приграничной полосы, так и в узлах области Ω_2, при условии оптимального подбора параметров b и n;

- для уменьшения величины абсолютной погрешности целесообразнее увеличивать количество линий уровня, чем уменьшать ширину приграничной полосы, поскольку в этом случае погрешность убывает быстрее.

Список литературы

[1] Рукавишников В.А. О весовых оценках скорости сходимости разностных схем // Докл. АН СССР. 1986. Т. 288, № 5, С. 1058–1062.

[2] Rukavishnikov V.A. On differentiability properties of an R_ν-generalized solution of the Dirichlet problem // Doklady Mathematics. 1990. V. 40, №. 3, P. 653–655.

[3] Рукавишников В.А., Кузнецова Е.В. Коэрцитивная оценка для краевой задачи с несогласованным вырождением исходных данных // Дифференциальные уравнения. 2007. Т. 43, № 4, С. 533–543.

[4] Рукавишников В.А., Кузнецова Е.В. О принадлежности R_ν-обобщенного решения краевой задачи с сингулярностью пространству $W^{k+2}_{2,\nu+\beta/2+k+1}(\Omega,\delta)$ // Дифференциальные уравнения. 2009. Т. 45, № 6, С. 894–898.

[5] Рукавишников В.А. О существовании и единственности R_ν-обобщенного решения для краевой задачи с несогласованным вырождением исходных данных // Докл. РАН. 2014. Т. 458, № 3, С. 261–263.

[6] Рукавишников В.А., Кузнецова Е.В. Схема метода конечных элементов для краевой задачи с несогласованным вырождением исходных данных // Сибирский журнал вычислительной математики. 2009. Т. 12, № 3, С. 313–324.

[7] Беспалов А.Ю., Рукавишников В.А. Экспоненциальная скорость сходимости метода конечных элементов для задачи Дирихле с сингулярностью решения // Докл. РАН. 2000. Т. 374, № 6, С. 727–731.

[8] 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, iss. 9, P. 2870–2882.

[9] Rukavishnikov V.A., Rukavishnikova H.I. 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. V. 34, №. 12, P. 1328–1347.

[10] Рукавишников В.А., Рукавишникова Е.И. Об изоморфном отображении весовых пространств эллиптическим оператором с вырождением на границе области // Дифференциальные уравнения. 2014. Т. 50, № 3, С. 349–355.

[11] Лизоркин П.И., Никольский С.М. Эллиптические уравнения с вырождением. Вариационный метод // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257, № 1, С. 42–45.

[12] Лизоркин П.И., Никольский С.М. Эллиптические уравнения с вырождением. Дифференциальные свойства решений // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257, № 2, С. 278–282.

[13] Рукавишникова Е.И. Численный метод для первой краевой задачи с вырождением // Материалы междунар. конф. “Вычислительная математика, дифференциальные уравнения, информационные технологии” / Изд-во ВСГТУ. Улан-Удэ, 2009, С. 295–301.

[14] Рукавишникова Е.И. Автоматизированное построение сетки со сгущением к границе области // Информатика и системы управления. 2011. № 4(30), С. 57–64.

Виктор Анатольевич Рукавишников — д.ф.-м.н., профессор, зав. лабораторией
Вычислительного центра ДВО РАН
e-mail: vark0102@mail.ru;
Анна Сергеевна Рябоконь — младший научный сотрудник Вычислительного центра ДВО РАН
e-mail: anyuta.riabokon@yandex.ru;
Елена Ивановна Рукавишникова — к.ф.- м.н., доцент, старший научный сотрудник
Вычислительного центра ДВО РАН
e-mail: rukavishnikova-55@mail.ru
Дата поступления — 28 апреля 2017 г.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА НАНОВИСКЕРОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ С УЧЕТОМ КОАЛЕСЦЕНЦИИ

К. К. Сабельфельд, Е. Г. Каблукова

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.676, 519.245, 539.2

В работе представлена стохастическая модель роста нановискеров методом молекулярно-лучевой эпитаксии на основе механизма поверхностной диффузии, перерассеяния и вероятности выживания адатомов, кроме того моделируется явление коалесценции нановискеров. Представлены результаты для двух режимов коалесценции, в первом конгломераты нановискеров состоят в основном из двух одиночных нанокристаллов, во втором — в один объединяются 4–6 одиночных нановискеров. Изучается влияние скорости зарождения новых нановискеров и распределения их радиусов на эволюцию распределения высот.

Ключевые слова: нановискеры, адатомы, диффузия по поверхности, вероятность выживания, многократное рассеяние, устойчивое распределение по высотам

Введение

Современная технология выращивания нановискеров (или нанопроволок, nanowires, [7]) методами лучевой эпитаксии привлекает в настоящее время все большее внимание в связи с применениями в электронике и оптоэлектронике [1], [4]. Литература по данной тематике чрезвычайно обширна, в основном она посвящена экспериментальным работам. Также ведутся теоретические работы в рамках различных гипотез о механизмах роста. В работе [2] был предложен механизм устойчивого формирования нановискера заданного радиуса, который получил экспериментальное подтверждение. Различные диффузионные механизмы описаны в серии работ Дубровского с соавторами (см., например, [9]). В данной работе численно исследуется процесс формирования ансамбля нановискеров методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Стохастическая модель роста нановискеров на основе механизма поверхностной диффузии, перерассеяния и вероятности выживания адатомов, а также описание алгоритма прямого моделирования движения атомов Ga предложена в [6]. В данной работе изучается эволюция высот ансамбля нановискеров при дополнительных предположениях. В частности, моделируется явление коалесценции нановискеров, описанное в [3]. Изучается влияние скорости зарождения и среднеквадратических отклонений распеределения начальных радиусов нановискеров на изменение распределения их высот.

1 Алгоритм моделирования роста нановискеров с учетом перерассеяния и диффузии по поверхности

Вначале опишем численную модель роста нановискеров, предложенную нами в [6], [7]. Модель строится для описания результатов экспериментов по выращиванию нанопроволок из нитрида галлия (GaN), при температуре 800^o C. Потоки атомов галлия и азота подбираются так, что в реакторе всегда имеется азотонасыщенная среда, и рост определяется регулируемым потоком галлия.

Отдельный i-ый нановискер рассматривается как прямой круговой цилиндр фиксированного радиуса $r_i(t)$ и высоты $h_i(t)$, с основанием на подложке. В начальный момент времени на круглой подложке задается распределение нановискеров следующим образом. Радиусы и высоты цилиндров случайны и имеют

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант N 14-11-000-83).

логнормальное распределение с заданным математическим ожиданием $\mathbf{E}r$ ($\mathbf{E}h$) и дисперсией $\mathbf{V}r$ ($\mathbf{V}h$). Начальная конфигурация может выбираться из реального эксперимента, как это было сделано в [7], [6]. Характерное время, за которое формируется начальное распределение нановискеров в экспериментах [7] — 30 минут. На боковых границах подложки заданы периодические условия. В соответствии с методом эпитаксиального выращивания подложка непрерывно вращается. Задана плотность заполнения подложки ΔS, то есть отношение суммарной площади оснований нановискеров к общей площади подложки. При фиксированном числе нановискеров на подложке N радиус подложки R_{sb} выражается через плотность заполнения ΔS и математическое ожидание радиусов $\mathbf{E}r$ следующим образом: $R_{sb} = \mathbf{E}r\sqrt{N/\Delta S}$. Чтобы определить положение центров основания цилиндров, равномерно распределенных по площади подложки, используется следующий алгоритм. Вводится детерминированная сетка, узлами которой являются центры одинаковых плотноупакованных кругов. Координаты центров таких окружностей в единичном круге для различных N имеются в [8]. Масштабированием в R_{sb} раз получаем необходимую сетку. При моделирование случайного положения нановискера сначала случайно выбирается номер свободного узла сетки k_{nd} как дискретная случайная величина с конечным числом равновероятных событий. Далее, в круге с номером k_{nd} случайно по равномерной плотности выбираются координаты центра нановискера при условии, что расстояния между нановискерами не меньше некоторого заданного предела ε:

$$\sqrt{(x_k - x_i)^2 + (y_k - y_i)^2} > R_k + R_i + \varepsilon, \tag{1}$$

для всех $i < k$. Если для узла сетки k_{nd} не существует такого случайного положения (x_k, y_k) и случайного радиуса R_k, при котором выполнено неравенство (1), то полагаем, что в узле сетки k_{nd} отсутствует нановискер. Величина ε пропорциональна длине диффузии атомов на подложке.

Задана длина диффузии атомов на боковой поверхности нанопроволоки $\text{Ł} = \sqrt{D\tau}$, т. е. среднее расстояние, на которое перемещается атом за среднее время своей диффузии τ до его десорбции с поверхности и дальнейшего перерассеяния на соседних нановискерах. Для уменьшения числа параметров примем, что среднее время жизни атома на поверхности нановискера равно $\tau = 1$. Задан угол θ между нормалью к подложке и направлением на источник атомов.

Алгоритм моделирования роста нановискеров основан на статистическом моделировании: строятся траектории движения атомов Ga от источника, до пересечения с ближайшим нановискером с последующими перерассеяниями. При столкновении атома с нановискером моделируется диффузия атома на поверхности цилиндра, на основе вероятностной модели, предложенной в [5], где вычислены вероятности перехода на основания цилиндра с учётом вероятности десорбции. Таким образом, не моделируя траектории диффундирующего атома на поверхности цилиндра малыми шагами, сразу моделируются события: (1) выхода атома на верхнюю поверхность цилиндра, (2) выхода на основание цилиндра, или (3) десорбции атома. Это кардинально повышает эффективность алгоритма моделирования.

В случае выхода атома на верхнюю поверхность цилиндра происходит рост нановискера на высоту, обратно пропорциональную квадрату радиуса его основания. При десорбции атома с поверхности нановискера горизонтальные координаты положения десорбции определяются полярным углом, который в силу осевой симметрии равномерно распределен на $[0, 2\pi]$. Новое направление движения атома при десорбции с поверхности моделируется согласно закону Ламберта о диффузном отражении от поверхности. Далее повторяется поиск ближайшего цилиндра, с которым происходит пересечение траектории атома.

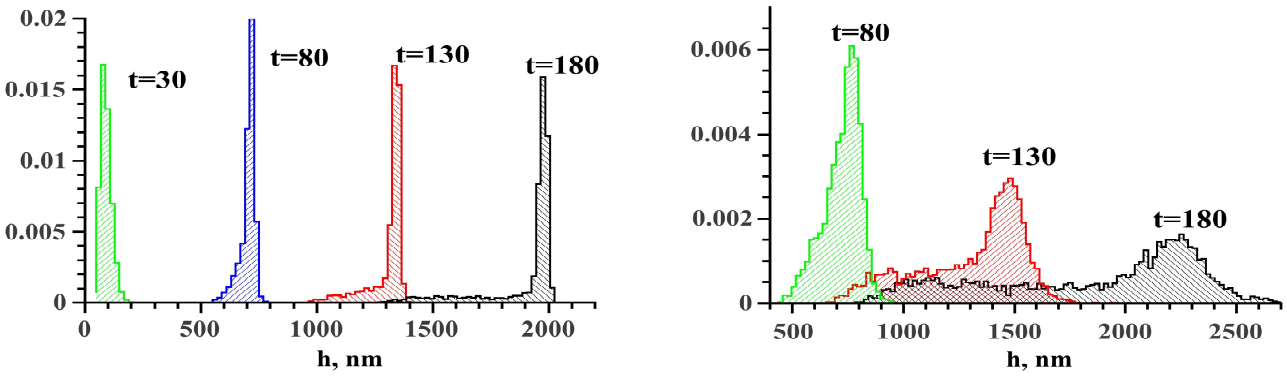
Траектория движения атома обрывается в случае адсорбции на верхнем основании нановискера или в случае вылета атома за верхнюю границу моделируемого объема. Для различных моментов времени определяются распределения высот ансамбля нановискеров.

В [6], [7] нам удалось обнаружить следующее замечательное свойство распределения по высотам: для определенных параметров задачи (длина диффузии, угол наклона источника, плотность заполнения подложки) с течением времени устанавливается самосохраняющееся распределение по высотам, имеющее два пика. Первый пик — для небольших высот, порядка 100–200 нанометров, второй пик находится на правом конце (большие высоты) и движется с течением времени в сторону еще больших высот, при этом ширина второго пика практически не меняется. Отметим, что первый пик остаётся неподвижным, отражая факт того, что часть небольших нановискеров, оказавшаяся в тени, с ростом основной группы нановискеров ещё более затеняется. К тому же диффузионный поток на боковые поверхности нановискеров уже практически не достигает низких высот, что также снижает вклад в рост малых нановискеров за счёт перерассеяния. Однако данное свойство не всегда имеет место. При определённых условиях наступает уширение распределения по высотам нановискеров.

Как показано в [6], основными параметрами, влияющими на эволюцию распределений высот нановискеров во времени, являются длина диффузии, угол наклона источника атомов θ, плотность заполнения под-

ложки. Этими параметрами определяются средние расстояния между нановискерами и степень затенения верхней части отдельного нановискера, способной адсорбировать атомы. Показано, что увеличение длины диффузии и угла θ приводят к увеличению числа низких нановискеров, которые образуют первую моду распределения по высотам, и к увеличению полуширины второй моды. Уменьшение плотности заполнения подложки снижает влияние затенения нановискеров соседями и спектр высот остается одномодальным.

Кроме того, изменение поведения распределения высот с течением времени зависит от дисперсии распределения радиусов нановискеров. В [6] было показано, что для низких значений покрытия $\Delta S = 0.1$ и одинаковых радиусов нановискеров распределения по высотам за счет перерассеяния даже сужаются с течением времени. Это свойство пропадает начиная с некоторого "предельного" значения $\mathbf{V}r$. "Предельное" значение $\mathbf{V}r$ зависит и от длины диффузии L, и от угла θ.



а) б)

Рис. 1: Эволюция распределения высот нановискеров при Ł = 30 нм а) $\mathbf{V}r = 0.1$ б) $\mathbf{V}r = 8$

Например, это видно на рис.1, где сравниваются результаты моделирования роста нановискеров для различных дисперсий распределения по радиусам. Начальные параметры задачи: $\Delta S = 0.3$, длина диффузии Ł = 30 нм, $\mathbf{E}h = 100$ нм и $\mathbf{V}h = 600$, здесь и далее $\theta = 45^0$, параметры распределения нановискеров по радиусам $\mathbf{E}r = 18$ нм, на левом рисунке $\mathbf{V}r = 0.1$, на правом — $\mathbf{V}r = 8$. На горизонтальной оси отложены высоты нановискеров в нм, на вертикальной оси — плотности распределения высот нановискеров в различные моменты времени роста. Предполагалось, что начальный момент моделирования соответствовал времени роста нановискеров в эксперименте $t = 30$ мин. Видно, что на рис. 1а к моменту времени $t = 80$ мин дисперсия распределения по высотом уменьшилась, с течением времени в распределении появляется малочисленный шлейф нановискеров относительно малых высот. В случае широкого распределения по радиусам распределение по высотам значительно модифицируется: большой процент нановискеров имеют относительно низкие высоты, правая мода распределения со временем медленно расширяется. Для длины диффузии $\Lambda = 50$ даже для малых значений $\mathbf{V}r = 0.1$ сужения распределения по высотам не происходит. Все численные эксперименты проведены с использованием вычислительных мощностей Сибирского суперкомпьютерного вычислительного центра ИВМиМГ СО РАН [10].

2 Модель коалесценции нановискеров

Исходя из экспериментальных данных и выводов работы [3] необходимо учитывать в рассматриваемой модели явление коалесценции нанопроволок. Оно обусловлено увеличением поверхностной энергии нановискеров за счет упругой энергии изгиба при слиянии двух нановискеров в один и становится энергетически выгодным, когда нанопроволоки превышают некоторую критическую длину.

При численном моделировании коалесценции используется следующий алгоритм:

0. Предварительно для каждого нановискера $k = 1, \ldots, N$ и его ближайшего соседа оценивается наименьшая высота $h_{min}^{(k)}$, при которой возможна их коалесценция [3]:

$$h_{min}^{(k)} = 4\left(\frac{l_k^2}{9\gamma R_{min}^{(k)}}\frac{I_1^{(k)} I_2^{(k)}}{I_1^{(k)} + I_2^{(k)}}\right)^{1/4}, \qquad (2)$$

где $\gamma = 0.53 * 10^{-2}$ nm, $I_i^{(k)} = \pi \left(R_i^{(k)}\right)^4 /4, i = 1, 2$, $R_{min}^{(k)} = \min(R_1^{(k)}, R_2^{(k)})$, l_k — расстояние между нановискерами.

1. Для цилиндра с номером $k = 1$ проверяется выполнение неравенства

$$h_{min}^{(k)} < \min(h_1^{(k)}, h_2^{(k)}), \tag{3}$$

где $h_1^{(k)}$ и $h_2^{(k)}$ — высота k-ого нановискера и его ближайшего соседа.

2. Если выполнено неравенство (3), то с вероятностью $p_{coal}^{(s)}$ моделируется их объединение (s равно числу единичных нановискеров во вновь образующемся кластере). В этом случае предполагается, что образовавшийся конгломерат вновь является цилиндром с радиусом $R^{(k)}$ и высотой $h^{(k)}$:

$$R^{(k)} = \sqrt{\left(R_1^{(k)}\right)^2 + \left(R_2^{(k)}\right)^2},\ h^{(k)} = \frac{h_1^{(k)} \left(R_1^{(k)}\right)^2 + h_2^{(k)} \left(R_2^{(k)}\right)^2}{\left(R^{(k)}\right)^2}. \tag{4}$$

Центр нового нановискера $(X^{(k)}, Y^{(k)})$ помещается в общий центр масс

$$X^{(k)} = x_1^{(k)} + P^{(k)} \left(x_2^{(k)} - x_1^{(k)}\right),\ Y^{(k)} = y_1^{(k)} + P^{(k)} \left(y_2^{(k)} - y_1^{(k)}\right), \tag{5}$$

где

$$P^{(k)} = M_2^{(k)}/(M_1^{(k)} + M_2^{(k)}),\ \ M_i^{(k)} = h_i^{(k)} \left(R_i^{(k)}\right)^2, i = 1, 2,$$

$\left(x_1^{(k)}, y_1^{(k)}\right)$ и $\left(x_2^{(k)}, y_2^{(k)}\right)$ — координаты центров объединившихся нанокристаллов.

Если образовавщийся цилиндр имеет пересечение с соседними, то они также присоединяются к первому, образуя новый конгломерат, для которого высота, радиус и положение центра вновь пересчитываются по формулам (4), (5).

3. Для вновь образованного нановискера и нановискеров из его окрестности повторяется процедура из пункта 0.

4. Если $k < N$, полагаем $k = k + 1$ и повторяем пункты 1–3.

Введем вероятность объединения нановискеров в кластер из N элементов

$$p_{coal}^{(N)} = A^{N-1},$$

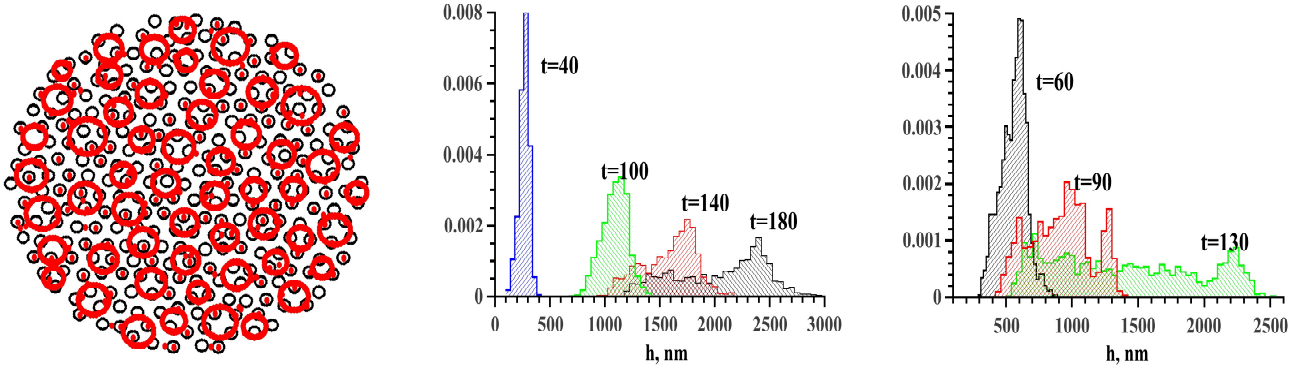
где A — параметр, характеризующий среднее число одиночных нановискеров в одном конгломерате.

Повторение процедуры коалесценции происходит при увеличении средней высоты нановискеров на некоторую величину (порядка 50 нм). Следует отметить, что проверять возможность коалесценции следует не для единственного ближайшего соседа, а для всех из его ближайшей окрестности. В нашем случае — для 5–6 ближайших соседей. В этом случае пропадают искусственные ограничения на возможность коалесценции.

На рис. 2а изображена одна из реализаций случайного расположения нановискеров перед началом коалесценции и в момент, когда коалесценция нановискеров закончена, для $\Delta S = 0.3$, $A = 0.5$, среднее число нановискеров в одном кластере равно 5–6. На рисунках 2б, 2в представлены результаты моделирования роста нановискеров с учетом коалесценции. Начальные параметры моделирования $\theta = 45^0$, $\Delta S = 0.3$, длина диффузии $L = 50$ нм, $\mathbf{E}h(0) = 100$ нм, $\mathbf{V}h(0) = 600$, $\mathbf{E}r(0) = 12$ нм, $\mathbf{V}r(0) = 3$, на центральном рисунке – $A = 0.5$, на правом – $A = 0.01$, в этом случае в один кластер объединяются 2 или 3 одиночных нановискера.

Видно, что в случае $A = 0.01$ высоты нановискеров практически равномерно распределены на широком интервале. Что плохо согласуется с экспериментом. В расчетах с параметром $A = 0.01$ средний радиус нановискеров увеличился с 12 до 17 нм, незначительно увеличились средние расстояния между соседями. Для $A = 0.5$ значительно возросли не только радиусы нановискеров (от 12 до 27 нм в среднем), но и расстояния между ближайшими нановискерами, что сократило эффект затенения. Этим можно объяснить различия в поведении распределения высот для различных значений параметра A. Численно полученная эволюция распределения высот нановискеров для $A = 0.5$ качественно согласуется с экспериментальными данными, в частности, часть нановискеров замедляет свой рост из-за затенения соседними элементами ансамбля, и полуширина пика распределения высот практически не увеличивается с течением времени.

В предыдуших расчетах начальные высоты нановискеров выбирались из распределения, соответствующего некоторому экспериментально полученному распределению в момент времени роста $t = 30$ мин [2]. Так



а) б) в)

Рис. 2: а)Реализация случайного расположения нановискеров для $\Delta S = 0.3$, $A = 0.5$ черные мелкие окружности — начальное положение нановискеров, крупные окружности — положение в конечный момент времени моделирования б) Эволюция распределения высот нановискеров с учетом коалесценции $\Delta S = 0.3$, $\mathbf{E}r(0) = 12$, $\mathbf{V}r(0) = 3$, $A = 0.5$, $L = 50$ нм, в) то же, что на рисунке б) для $A = 0.01$

как экспериментальное определение наноскопических величин сопряжено со значительными техническими трудностями и приводит к недостаточной точности определения параметров начального распределения высот и радиусов нановискеров, введем в нашу модель этап образования стабильных нановискеров. Будем считать, что вновь образованный элемент ансамбля нановискеров также является цилиндром, но его высота равна радиусу. Моменты появления новых элементов рапределены в некотором временном промежутке. Такая модель позволит проанализировать влияние скорости нуклиации на эволюцию высот нановискеров.

3 Алгоритм “зарождения” нановискеров и тестовые расчеты

Изменим начальные условия численного эксперимента. Будем считать, что время появления нового отдельного нанокристалла — это момент времени, когда рост островка GaN от трехмерного переходит к одномерному. Моделью нановискера остается прямой круговой цилиндр, но его начальная высота совпадает с радиусом. “Зарождение” нанокристаллов будем моделировать поэтапно с заданными временными промежутками между появлением новых.

Алгоритм моделирования:

Шаг 1. В момент времени $t = 0$ моделируется “зарождение” заданного числа нановискеров $K_i < N$, $i = 0$ в случайных точках согласно алгоритму из раздела 1. Здесь N — максимально возможное число цилиндров на подложке, i — номер временного шага.

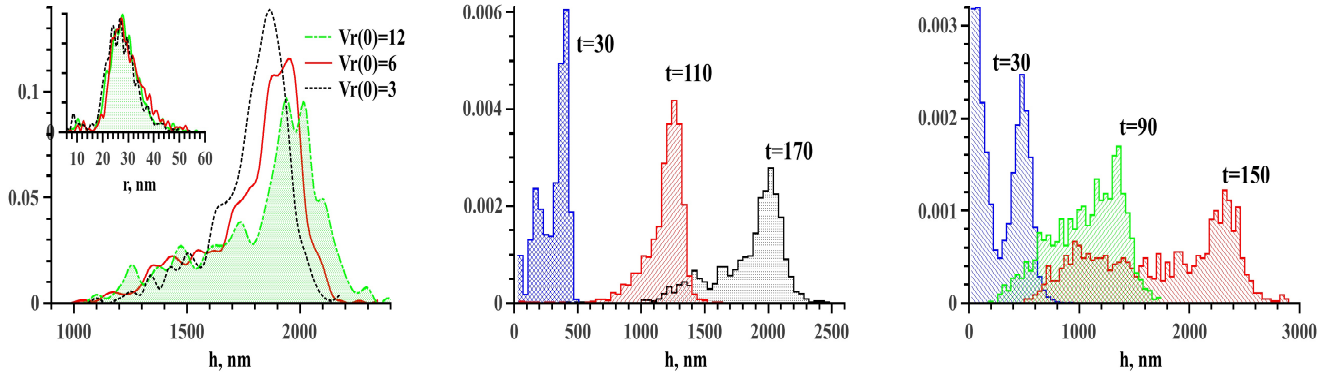
Шаг 2. Производится рост K_i нановискеров за счет моделирования N_{atom} траекторий движения атомов Ga. Полагаем, что атом, достигший поверхности подложки адсорбируется на ней с вероятностью P_{ad}.

Шаг 3. Полагаем $i = i + 1$. Вычисляем объем атомов V_{i-1}, адсорбировавшихся на поверхности подложки на шаге 2. Производим "зарождение"новых нановискеров. Их число $K_i^{(n)}$ выбирается таким образом, чтобы объем вновь образовавшихся нановискеров был не больше V_{i-1}: $\sum_{j=1}^{K_i^{(n)}} \pi R_j^3 \le V_{i-1}$. Вероятность адсорбции атомов на подложке P_{ad} является параметром, ограничивающим число образующихся нанокристаллов $K_i^{(n)}$ в единицу времени, то есть характеризует скорость зарождения нанокристаллов. Общее число нановискеров на подложке $K_i = K_{i-1} + K_i^{(n)}$ после i-ого этапа зарождения.

Шаг 4. Для каждого нановискера $k = 1, \dots, K_i$ и его ближайшего соседа вычисляется наименьшая высота по формуле (2), при которой возможна коалесценция. Повторяются последовательно шаги 2–4, пока $K_i < N$.

Так как при увеличении высоты нанокристаллов и плотности заполнения подложки ΔS уменьшается объем атомов, адсорбирующихся на подложке, то $K_i^{(n)}$ в среднем уменьшается с течением времени. Согласно экспериментальным данным [3], когда плотность нановискеров на подложке достигает наибольших значений $\Delta S \approx 0.2 - 0.3$, средняя высота ансамбля нановискеров равна примерно $Eh \approx 100 - 150$. Это соответствует вероятности адсорбции в рассматриваемой численной модели $P_{ad} \approx 0.05 - 0.15$. На рис. 3 даны распределения высот нановискеров при моделировании “зарождения” и роста нановискеров с учетом

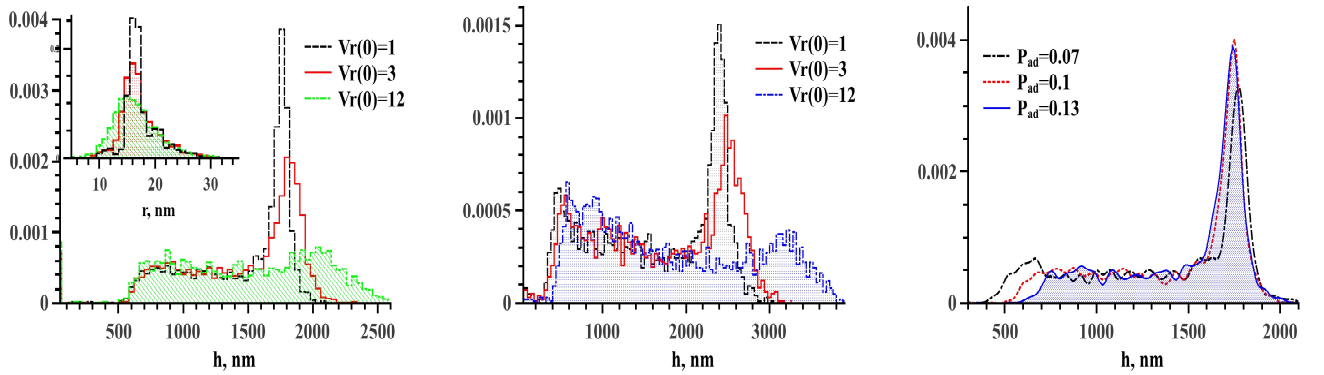
коалесценции. Вероятность адсорбции атомов на подложке равна $P_{ad} = 0.1$, $\mathbf{E}r(0) = 12$ нм. На рисунке а) представлена плотность распределения высот в момент времени $t = 130$ мин для $L = 30$ нм, $A = 0.5$, и различных дисперсий начального распределения радиусов-высот нанопроволок. На вставке представлена плотность распределения радиусов в момент $t = 130$ мин — она практически одинакова для всех представленных численных экспериментов. На рисунках б) и в) представлена эволюция распределения высот нановискеров для тех же начальных данных, кроме $\mathbf{V}r(0) = 3$, $A = 0.3$. На центральном рисунке длина диффузии $L = 30$ нм, на правом — $L = 50$ нм.



а) б) в)

Рис. 3: а) Распределение высот и радиусов нановискеров в момент времени $t = 130$ мин, $A = 0.5$, $L = 30$ нм. б) Эволюция распределения высот нановискеров с момента "зарождения" с учетом коалесценции $A = 0.3$, $\mathbf{V}r(0) = 3$, $P_{ad} = 0.1$ длина диффузии $L = 30$ нм, в) то же, что на рис. б, но $L = 50$ нм

Для малых значений параметра A величина дисперсии распределения по радиусам значительно влияет на характер эволюции распределения высот. Это видно из рис. 4а и б, на котором представлено распределение высот нановискеров к моменту времени моделирования $t = 130$ минут для различных значений дисперсии начального распределения радиусов $\mathbf{V}r(0)$ и длин диффузии $L = 30$ нм (левый) и $L = 50$ нм (средний). Остальные параметры задачи — $\Delta S = 0.3$, $A = 0.01$, $P_{ad} = 0.1$, $\mathbf{E}r(0) = 12$ нм. На вставке левого рисунка представлена плотность распределения радиусов в момент $t = 130$ мин. Как видно из рис.3а для $A = 0.5$ различия в $\mathbf{V}r(0)$ оказывают более слабое влияние на эволюцию распределения высот, чем для $A = 0.01$.



а) б) в)

Рис. 4: Плотность распределения высот и радиусов нановискеров к моменту времени $t = 130$ мин для параметров задачи $\Delta S = 0.3$, $A = 0.01$, а) $P_{ad} = 0.1$, $L = 30$ нм, различны дисперсии начального распределения радиусов $\mathbf{V}r(0)$. б) то же, что на рисунке а, но $L = 50$ нм. в) $\mathbf{V}r(0) = 1$, $L = 30$ нм, различны вероятности адсорбции подложкой P_{ad}.

Кроме того, длительность временного промежутка, в течении которого появляются новые нановискеры, оказывает влияние на поведение распределения высот во времени. Эта особенность представлена на рис. 4в. В данном эксперименте менялось значение вероятности адсорбции атомов Ga на подложке с $P_{ad} = 0.07$ до $P_{ad} = 0.13$, $\Delta S = 0.3$, $A = 0.01$, $L = 30$ нм, $\mathbf{V}r(0) = 1$.

Заключение

В работе представлена стохастическая модель роста нановискеров методом молекулярно - лучевой эпитаксии на основе механизма поверхностной диффузии, перерассеяния и вероятности выживания адатомов, в которой учитывается явление коалесценции нановискеров.

Представлены результаты численного моделирования для двух режимов коалесценции: в первом большая часть конгломератов состоит из двух одиночных нанокристаллов, во втором в один объединяются 5 - 6 одиночных нановискеров. В первом случае численные результаты не согласуются с экспериментом, во втором имеют качественное согласие.

Предложена модификация алгоритма, в которой начальным этапом моделирования является момент образования первого стабильного нановискера. Показано, что при определенных параметрах такой модели численные результаты качественно согласуются с экспериментальными данными для обоих режимов коалесценции. Показано, что на поведение высот нановискеров для $A = 0.01$ значительно влияет величина среднеквадратических отклонений начального распределения радиусов, в отличии от случая $A = 0.5$. От длительности времени "зарождения" зависят высоты наиболее низких нановискеров.

Список литературы

[1] S. Barth, F. Hernandez-Ramirez, D. D. Holmes, A. Romano-Rodriguez, Synthesis and applications of one-dimensional semiconductors, Prog. Mater. Sci., v. 55 (2010), p. 563.

[2] Sergio Fernandez-Garrido, Vladimir M. Kaganer, Karl K. Sabelfeld, Tobias Gotschke, Javier Grandal, Enrique Calleja, Lutz Geelhaar, and Oliver Brandt. Self-regulated radius of spontaneously formed GaN nanowires in molecular beam epitaxy. Nano Letters, 2013, 13 (7), pp 3274–3280.

[3] Vladimir M. Kaganer, Sergio Fernandez-Garrido, Pinar Dogan, Karl K. Sabelfeld, and Oliver Brandt. Nucleation, growth and bundling of GaN nanowires in molecular beam epitaxy: Disentangling the origin of nanowire coalescence. Nano Letters, 16 (2016), N6, 3717–3725.

[4] J. Ristić, E. Calleja, S. Fernández-Garrido, L. Cerutti, A. Trampert, U. Jahn, K. H. Ploog. On the mechanisms of spontaneous growth of III-nitride nanocolumns by plasma-assisted molecular beam epitaxy, J. Cryst. Growth, v.310 (2008), p.4035.

[5] Karl K. Sabelfeld. Splitting and survival probabilities in stochastic random walk methods and applications, Monte Carlo Methods Appl. 2016; 22 (1):55–72.

[6] K.K. Sabelfeld, E.G. Kablukova. Stochastic simulation of nanowire growth in plasma-assisted molecular beam epitaxy. Computational Materials Science, 125 (2016), 284–296.

[7] K.K. Sabelfeld,V. M. Kaganer, F. Limbach, P. Dogan, O. Brandt, L. Geelhaar, H. Riechert. Height self-equilibration during the growth of dense nanowire ensembles: Order emerging from disorder. Appl. Phys. Lett. 103, 133105 (2013)

[8] The best known packings of equal circles in a circle http://www.packomania.com/cci/cci.html

[9] Назаренко М.В., Сибирев Н.В., Дубровский В.Г. Самосогласованная модель роста и кристаллической структуры нитевидных нанокристаллов с учетом диффузии адатомов. Журнал технической физики 81.2 (2011): 153–156.

[10] Сибирский суперкомпьютерный центр института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, http://www2.sscc.ru/

Карл Карлович Сабельфельд — д.ф.-м.н., гл. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: karl@osmf.sscc.ru;
Евгения Геннадьевна Каблукова — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
e-mail: kablukovae@sscc.ru.
Дата поступления — 17 мая 2017 г.

СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕКОМБИНАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК ПРИ НАЛИЧИИ ДИФФУЗИИ И ДРЕЙФОВОЙ СКОРОСТИ, ОБУСЛОВЛЕННОЙ ВНЕШНИМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ

К. К. Сабельфельд[1,2], А. Е. Киреева[1]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*
[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 51.73, 519.245

В работе реализована стохастическая модель рекомбинации электронов и дырок при наличии диффузии и дрейфовой скорости частиц. Описана математическая модель изучаемого процесса, основанная на разработанной ранее К.К. Сабельфельдом модели рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике. Приведены алгоритмы метода Монте — Карло для моделирования диффузии и дрейфа частиц. Представлены результаты вычислительных экспериментов. С помощью построенной модели рекомбинации изучено влияние модуля и направления вектора скорости дрейфа электронов и дырок на интенсивность аннигиляции частиц.
Ключевые слова: рекомбинация, полупроводник, диффузия, дрейф, стохастическое моделирование, метод Монте — Карло, алгоритм блуждания по сферам.

Введение

Широкозонный полупроводник нитрид галлия (GaN) представляет большой интерес в области разработок полевых транзисторов и современной оптоэлектроники [1]. Исследование процессов, протекающих в неоднородных полупроводниках, способствует расширению области их применения и созданию новых полупроводниковых материалов с улучшенными характеристиками. В полупроводниковом материале всегда имеются различные дефекты и дислокации в атомной решетке. Пространственная вариация неоднородностей порождает упругие напряжения, что создает электрический потенциал и дрейфовую скорость электронов и дырок в этом потенциале. Временная зависимость фотолюминесценции от дрейфа и диффузии численно исследуется в [2] для одномерного случая.

В [3, 4, 5] разработана стохастическая модель рекомбинации электронов и дырок в неоднородном полупроводнике GaN. В этих работах рассматривается двумерный полупроводник, в котором присутствуют дефекты — центры нерадиационной рекомбинации. В начальный момент времени с помощью фемтосекундного лазера в полупроводнике создаётся избыток электронов и дырок, которые аннигилируют друг с другом путём туннелирования, при непосредственном столкновении вследствие диффузии и при взаимодействии в рекомбинационных центрах. Все эти процессы включены в интегро-дифференциальную стохастическую модель, предложенную в [3, 4, 5].

На основе модели рекомбинации [3, 4, 5] в данной работе моделируется рекомбинация электронов и дырок вследствие диффузии и дрейфа в трёхмерном полупроводнике. Диффузия и дрейф частиц описываются с помощью уравнения “drift-diffusion-reaction”, алгоритм решения которого представлен в [6]. С помощью реализованной модели рекомбинации частиц при наличии их диффузии и дрейфа изучается влияние модуля и направления вектора дрейфа на скорость аннигиляции.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 14-11-00083

1 Математическая модель рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике

Пространственные неоднородности в объёме полупроводника порождают упругие напряжения, создающие электрический потенциал φ и дрейфовую скорость электронов и дырок в этом потенциале, которая записывается в виде $\mathbf{V} = \mu \cdot \nabla\varphi$, где μ — мобильность, связанная с коэффициентом диффузии соотношением Эйнштейна $D = \mu \cdot k \cdot T$, здесь k — постоянная Больцмана, T — температура. При малых напряжениях потенциал линейно пропорционален напряжению, и мы имеем постоянный профиль дрейфовой скорости. Результирующая средняя дрейфовая скорость также может иметь ненулевое постоянное значение. Постоянная дрейфовая скорость может порождаться и внешним электрическим полем. Относительный эффект от дрейфового и диффузионного движения характеризуется числом Пекле, которое можно записать в следующем виде $Pe = L \cdot \mathbf{V}/D$, где $L = \sqrt{D\tau}$ — длина диффузии, τ — среднее время жизни мобильной частицы.

В соответствие с алгоритмом рекомбинации электронов и дырок, предложенным в [3, 4, 5], в начальный момент времени $t = 0$ электроны (n) и дырки (p) случайно распределяются в объёме G с равномерной плотностью распределения: $d(\mathbf{r}) = \{1/|G|,\ \text{если } \mathbf{r} \in G;\ 0,\ \text{если } \mathbf{r} \notin G\}$, где $\mathbf{r}$ обозначает пространственную координату. Электроны и дырки могут диффундировать в объёме G с константами диффузии D_n и D_p и перемещаться с векторами скорости $\mathbf{V_n}$ и $\mathbf{V_p}$. В данной работе предполагается, что модули векторов скорости электронов и дырок одинаковые: $|V_n| = |V_p| = |V|$. Встретившиеся при перемещении электроны и дырки аннигилируют друг с другом с коэффициентом β. В чисто диффузионном случае β получен Смолуховским, и имеет вид $\beta = (r_n + r_p)(D_n + D_p)$, где r_n (нм) и r_p (нм) — радиусы электронов и дырок. В том случае, когда вклад во взаимодействие дают также и регулярные скорости частиц, задача оценки β существенно усложняется. Однако в алгоритме стохастического моделирования рекомбинации электронов и дырок явные выражения для коэффициента β не нужны, что является замечательным свойством этого метода. Более того, на основе стохастического моделирования коэффициент β может быть вычислен.

Изменение плотности электронов $\rho_n(\mathbf{r};t)$ и дырок $\rho_p(\mathbf{r};t)$ описывается следующим уравнением Смолуховского:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho_n(\mathbf{r};t)}{\partial t} &= D_n \cdot \Delta\rho_n(\mathbf{r};t) + \mathbf{V_n} \cdot \nabla\rho_n(\mathbf{r};t) - \beta \cdot \rho_n(\mathbf{r};t)\rho_p(\mathbf{r};t)\ , \\ \frac{\partial\rho_p(\mathbf{r};t)}{\partial t} &= D_p \cdot \Delta\rho_p(\mathbf{r};t) + \mathbf{V_p} \cdot \nabla\rho_p(\mathbf{r};t) - \beta \cdot \rho_p(\mathbf{r};t)\rho_n(\mathbf{r};t)\ . \end{aligned} \tag{1}$$

Аннигиляция электрона и дырки сопровождается выделением энергии в виде фотона. В модели поток фотонов вычисляется по формуле: $\phi(t) = \left\langle \int \frac{1}{|G|} d\mathbf{r} \int \beta\rho_n(\mathbf{r};t)\rho_p(\mathbf{r}+\mathbf{x};t)d\mathbf{x} \right\rangle$, где угловые скобки обозначают математическое ожидание по начальным распределениям частиц, $|G|$ — объём области G.

2 Моделирование диффузии и дрейфа частиц с помощью метода Монте — Карло

Процессы, описывающиеся уравнением (1): диффузия, дрейф и рекомбинация электронов и дырок, в данной работе моделируются с помощью метода Монте — Карло на основе алгоритма диффузионно-дрейфового блуждания по сферам, предложенного в [6].

Процесс диффузионно-дрейфового блуждания по сферам для частицы с координатой $\mathbf{x_0}$ в начальный момент времени t_0 определяется цепью Маркова $\{\mathbf{x_k}, \tau_k\}$, $k = 0, 1, 2, \ldots$, где $\mathbf{x_{k+1}} = \mathbf{x_k} + \mathbf{w_k} R_k$ — случайная точка выхода частицы на сферу $S_k(\mathbf{x_k}, R_k)$ с центром в точке $\mathbf{x_k}$ и радиусом R_k, $\{\mathbf{w_0}, \mathbf{w_1}, \ldots, \mathbf{w_k}, \ldots\}$ — это последовательность независимых изотропных векторов единичной длины, τ_k — случайное время выхода частицы на сферу S_k. Таким образом, чтобы построить очередную точку $\{\mathbf{x_{k+1}}, \tau_{k+1}\}$ вокруг частицы строится сфера $S_k(\mathbf{x_k}, R_k)$, радиус R_k которой выбирается таким образом, чтобы внутри сферы не было частиц других типов, с которыми данная частица может вступить во взаимодействие. Например, внутри сферы, построенной вокруг электрона, не должно быть дырок. Для выбранного радиуса R_k моделируются случайная точка $\mathbf{x_{k+1}}$ на сфере и случайное время τ_{k+1} выхода частицы из сферы. Частица перемещается в точку $\mathbf{x_{k+1}}$, а время моделирования увеличивается: $t = t + \tau_{k+1}$.

Рассмотрим сферическую систему координат, центр которой совпадает с центром сферы $S(0, R)$, а ось Z сонаправлена с вектором скорости дрейфа $\mathbf{V}$. Плотность распределения точек на поверхности сферы при

диффузионно-дрейфовом смещении частиц получена в [6] и для выбранной системы координат имеет вид:

$$p_\kappa(\theta,\varphi)=\frac{\kappa\cdot\sin\theta\cdot\exp\{\kappa\cos\theta\}}{4\pi\sinh\kappa}\ ,\ \ 0\le\theta\le\pi,\ 0\le\varphi\le2\pi\ ,\qquad \kappa=\frac{|\mathbf{V}|\cdot R}{2D}\ . \tag{2}$$

где θ и φ — это зенитный и азимутальный углы случайно выбранного направления.

В [6] также приведен алгоритм моделирования случайной точки выхода частицы на сферу. Координаты случайной точки на сфере вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned} x&=R\cdot\sin\theta\cos\varphi\ ,\\ y&=R\cdot\sin\theta\sin\varphi\ ,\\ z&=R\cdot\cos\theta\ , \end{aligned} \tag{3}$$

где смещение в направлении скорости дрейфа $\cos\theta$ определяется выражением:

$$\cos\theta=1+\frac{1}{\kappa}\cdot\log[1-(1-e^{-2\kappa})\cdot rand]\ , \tag{4}$$

здесь $rand$ — случайное число, равномерно распределенное на интервале $[0;1]$. Значение $\sin\theta=\sqrt{1-\cos^2\theta}$. Азимутальный угол φ распределен равномерно на интервале $[0;2\pi]$.

Время, которое понадобится частице, чтобы достичь сферы $S(0,R)$, имеет плотность распределения, представленную в виде бесконечного знакопеременного ряда, [6]:

$$p_t(\tau)=\frac{2}{Q}\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\frac{\pi^2n^2D}{R^2}\exp\left\{-\left(\frac{\pi^2n^2D}{R^2}+\frac{|\mathbf{V}|^2}{4D}\right)\cdot\tau\right\}\ ,\qquad Q=\frac{(\mathbf{V}R)/(2D)}{\sinh((\mathbf{V}R)/(2D))}\ . \tag{5}$$

Эффективным методом для моделирования случайных величин с плотностью распределения такого вида является алгоритм Девроя, представляющий собой метод исключения для знакопеременных рядов [7]. Суть этого метода заключается в следующем.

Плотность распределения представляется в виде произведения мажорирующей функции $h(\tau)$ и знакопеременного ряда:

$$\begin{aligned} p_t(\tau)&=h(\tau)\cdot[1-a_1(\tau)+a_2(\tau)-a_3(\tau)+\ldots]=\\ &=\frac{2}{Q}\frac{\pi^2D}{R^2}\exp\left\{-\left(\frac{\pi^2D}{R^2}+\frac{|\mathbf{V}|^2}{4D}\right)\cdot\tau\right\}\cdot\left[1+\sum_{n=2}^{\infty}(-1)^{n+1}n^2\exp\left\{\frac{\pi^2D}{R^2}(1-n^2)\cdot\tau\right\}\right]\ . \end{aligned} \tag{6}$$

Случайная величина τ моделируется с помощью Алгоритма 1:

1. Сгенерировать τ с плотностью распределения $c\cdot h$, где c — нормализующая константа. Для плотности распределения $p_t(\tau)$ (5) плотность $c\cdot h$ имеет следующий вид:

$$c\cdot h=\left(\frac{\pi^2D}{R^2}+\frac{|\mathbf{V}|^2}{4D}\right)\exp\left\{-\left(\frac{\pi^2D}{R^2}+\frac{|\mathbf{V}|^2}{4D}\right)\cdot\tau\right\}\ ; \tag{7}$$

   Сгенерировать случайное число U, равномерно распределенное на интервале $[0;1]$;

   Присвоить $n=0,\ S=0$.

2. $n=n+1,\ S=S+a_n(\tau)$. Если $U\ge S$, выйти с текущим значением τ.

3. $n=n+1,\ S=S-a_n(\tau)$. Если $U<S$, перейти на шаг 1.

4. Перейти на шаг 2.

Зная точку и время выхода частицы на сферу, можно сформулировать Алгоритм 2 моделирования диффузии, дрейфа и рекомбинации электронов и дырок:

1. В начальный момент времени t_0 генерируются координаты n_i для $C_n(t_0)$ электронов и координаты p_i для $C_p(t_0)$ дырок. Координаты частиц распределяются в объёме G случайно, равномерно и независимо.

2. Для каждого электрона $n_i,\ i = 1, \ldots, C_n(t_k)$ (дырки $p_i,\ i = 1, \ldots, C_p(t_k)$), здесь $C_n(t_k),\ C_p(t_k)$ — это количество электронов и дырок на текущем временном шаге t_k:

   - вычисляется расстояние до ближайшей дырки (электрона) — r_i^{np};
   - запоминается порядковый номер m ближайшей дырки (электрона);
   - строится сфера с радиусом $R_i = r_i^{np}$;
   - в соответствии с Алгоритмом 1 разыгрывается случайное время τ_i выхода электрона (дырки) из построенной сферы $S(n_i, R_i)$ $(S(p_i, R_i))$.

3. Вычисляются вероятности случайных событий: перемещения электрона $P_n = C_n(t_k) \cdot D_n$ и перемещения дырки $P_p = C_p(t_k) \cdot D_p$.

4. С вероятностями $P_n,\ P_p$ выбирается одно из событий: перемещение электрона или дырки.

5. Для выбранного события, например, для перемещения электрона:

   - выбирается электрон с минимальным временем выхода из сферы $\tau_{min} = min(\tau_i),\ i = 1, \ldots, C_n(t_k)$, и запоминается порядковый номер l выбранного электрона;
   - по формуле (3) генерируется случайная точка на сфере $S(n_l, R_l)$, построенной для выбранного электрона, и электрон перемещается в эту точку;
   - вычисляется расстояние r от электрона n_l до ближайшей дырки p_m. Если $r < \epsilon$, где ϵ — достаточно малое число, то частицы аннигилируют: $C_n(t_{k+1}) = C_n(t_k) - 1,\ C_p(t_{k+1}) = C_p(t_k) - 1$, и образуется фотон $C_{photon}(t_{k+1}) = C_{photon}(t_k) + 1$;
   - время моделирования увеличивается $t_{k+1} = t_k + \tau_{min}/C_n(t_k),\ k = k + 1$.

6. Если $C_n(t_k) > 0,\ C_p(t_k) > 0$, и время моделирования меньше заданного $t_k < T_{fin}$, то переход на шаг 2.

На каждом временном шаге t_k вычисляются плотности электронов $\rho_n(t_k) = C_n(t_k)/|G|$ и дырок $\rho_p(t_k) = C_p(t_k)/|G|$, где $|G|$ — это объём области G. Поток фотонов вычисляется как число фотонов, образовавшихся за промежуток времени $[t_{k-1}; t_k]$: $\phi(t_k) = C_{photon}(t_k)/(t_k - t_{k-1})$.

В соответствии с законом больших чисел [8] значения характеристик $\rho_n(t_k),\ \rho_p(t_k),\ \phi(t_k)$ оцениваются на основе их математических ожиданий, для этого Алгоритм 2 выполняется для различных начальных распределений координат электронов и дырок M раз, и вычисленные значения характеристик усредняются.

3 Результаты моделирования рекомбинации электронов и дырок в полупроводнике

С помощью Алгоритма 2, описанного выше, выполнено моделирование рекомбинации электронов и дырок вследствие диффузии и дрейфа. Вычисления проводились на ресурсах ЦКП Сибирский Суперкомпьютерный Центр СО РАН*. В качестве модельных параметров выбраны значения начального количества частиц $C_n(t_0),\ C_p(t_0)$, размер области $|G|$, коэффициенты диффузии $D_n,\ D_p$, модули векторов скорости $|V_n|,\ |V_p|$ и их направления $V_n^{dir},\ V_p^{dir}$. Число экспериментов M с различными начальными распределениями координат частиц, выполняемых для вычисления значений характеристик, равно 100. Для сопоставления результатов моделирования рекомбинации с данными физических экспериментов в качестве единиц измерения используются нанометры (нм) и наносекунды (нс). При моделировании используются периодические граничные условия.

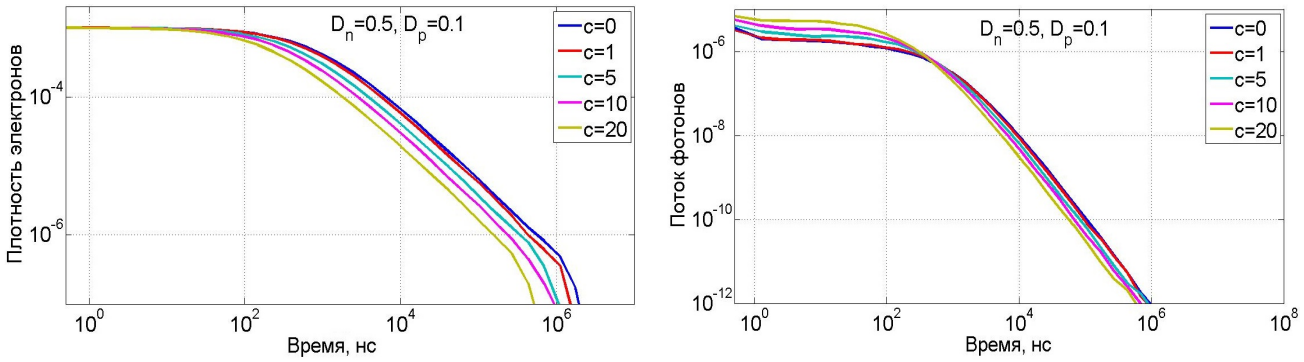
Зависимость скорости рекомбинации частиц от значений коэффициентов диффузии $D_n,\ D_p$ изучена в [9], поэтому в данной работе основной задачей является исследование влияния скорости дрейфа на процесс аннигиляции электронов и дырок. Рассмотрим рекомбинацию частиц вследствие диффузии и дрейфа для следующих значений модельных параметров: $C_n(0) = C_p(0) = 1000$, $|G| = 100 \times 100 \times 100$ нм,

*http://www2.sscc.ru/

$D_n = 0.5,\ D_p = 0.1$ нм$^2 \cdot$ нс$^{-1}$. Вектор скорости дрейфа электронов направлен вдоль оси абсцисс O_x, а вектор скорости дрейфа дырок направлен в противоположном направлении, против оси O_x. Модули векторов скорости дрейфа электронов и дырок вычисляются как функции от коэффициентов диффузии и общего коэффициента скорости c : $|V_n| = c \cdot D_n$, $|V_p| = c \cdot D_p$. Значение ϵ-окрестности, определяющее радиус сферы, внутри которой происходит аннигиляция электрона и дырки, выбрано равным 0.5.

В соответствии с алгоритмом кинетического метода Монте — Карло, на каждом шаге случайно выбранная частица перемещается в случайную точку. При этом расстояние, на которое она переместилась, не должно быть очень большим, чтобы обеспечить равномерное движение всех частиц. Для выполнения этого условия максимальный размер радиуса сферы, на которую частица может перейти за один шаг, органичен значением $R_{max} = 0.5$ нм.

Значения плотности электронов $\rho_n(t)$ и потока фотонов $\phi(t)$ для различных значений коэффициента скорости c представлены на рис. 1.



а) б)

Рис. 1: Изменение плотности электронов (а) и потока фотонов (б) при увеличении коэффициента скорости дрейфа c

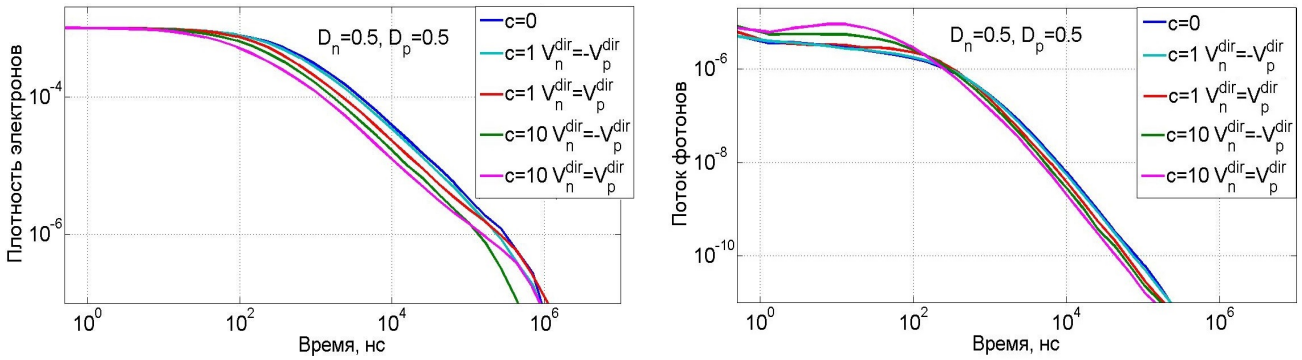
Как показано на рис. 1 при малых значениях коэффициента скорости $c < 1$ графики плотности электронов и потока фотонов практически совпадают с графиками для случая чистой диффузии. Увеличение коэффициента скорости дрейфа до $c = 5$ оказывает заметное влияние на интенсивность рекомбинации электронов и дырок. При дальнейшем росте c скорость рекомбинации также возрастает. Такое поведение объясняется тем, что сечение взаимодействия электронов и дырок определяется двумя составляющими: диффузионной $D_n + D_p$ и дрейфовой $V_n - V_p = c \cdot (D_n - D_p)$. При малых значениях модуля скорости дрейфа режим аннигиляции частиц остаётся преимущественно диффузионным. Тогда как для бóльших значений скорости дрейфа $c \geq 5$ рекомбинация частиц ускоряется за счёт совместного диффузионно-дрейфового режима.

Как определено в разделе 1, число Пекле характеризует отношение диффузионной и дрейфовой составляющей движения $Pe = L \cdot \mathbf{V}/D$. Длина диффузии $L = \sqrt{D\tau}$ определяется с помощью вычислительного эксперимента. Для этого в процессе моделирования для каждой частицы вычисляется время жизни, т.е. время до её аннигиляции. Затем определяется среднее время жизни всех частиц τ, длины диффузии L_n, L_p и число Пекле Pe_n, Pe_p для электронов и дырок. Значения характеристик, полученные для графиков $\rho_n(t)$ и $\phi(t)$, представленных на рис. 1, приведены в таблице 1. При увеличении скорости дрейфа время жизни частиц и длина диффузии уменьшаются, а число Пекле возрастает. Таким образом, бóльшие значения числа Пекле соответствуют преобладанию дрейфовой составляющей в движении частиц.

Влияние направления скорости дрейфа электронов и дырок изучалось для одинаковых значений коэффициентов диффузии $D_n = D_p = 0.5$ нм$^2 \cdot$ нс$^{-1}$ и модулей скорости $|V_n| = |V_p| = c \cdot 0.5$ нм/нс. На рис. 2 представлены графики плотности электронов $\rho_n(t)$ и потока фотонов $\phi(t)$ для сонаправленных ($V_n^{dir} = V_p^{dir}$) и противоположно направленных ($V_n^{dir} = -V_p^{dir}$) векторов дрейфа электронов и дырок V_n и V_p для двух значений коэффициента скорости: $c = 1$ и $c = 10$. Значения характеристик $\rho_n(t)$ и $\phi(t)$ заметно различаются при сонаправленном и противоположно направленном движении частиц как для малых, так и для больших значений коэффициента скорости c. Скорость рекомбинации частиц получилась выше при одинаковом направлении векторов дрейфа электронов и дырок, однако этот результат требует дополнительной проверки.

Таблица 1: Значения характеристик, вычисленные для $D_n = 0.5,\ D_p = 0.1$ и различных значений коэффициента скорости c

c	τ	L_n	L_p	Pe_n	Pe_p
0	2481,84	35,23	15,75	0	0
1	2160,86	32,87	14,70	32,87	14,70
5	1484,33	27,24	12,18	136,21	60,92
10	1096,88	23,42	10,47	234,19	104,73
20	697,28	18,67	8,35	373,44	167,01



а) б)

Рис. 2: Изменение плотности электронов (а) и потока фотонов (б) для одинаковых $V_n^{dir} = V_p^{dir}$ и противоположных $V_n^{dir} = -V_p^{dir}$ направлений векторов скорости электронов и дырок

Заключение

В работе реализована стохастическая модель рекомбинации электронов и дырок при наличии диффузии и дрейфовой скорости в неоднородном полупроводнике. В рамках построенной модели изучено влияние модуля и направления вектора скорости дрейфа электронов и дырок на интенсивность аннигиляции частиц. Обнаружено, что при увеличении модуля вектора скорости процесс рекомбинации частиц ускоряется. Направление векторов скорости дрейфа электронов и дырок относительно друг друга оказывает заметное влияние на интенсивность аннигиляции частиц. В данной модели рекомбинации при сонаправленном дрейфе электронов и дырок скорость рекомбинации выше, чем при противоположно направленном дрейфе частиц, однако этот результат требует более тщательной проверки и проведения дополнительных численных экспериментов. Кроме того, в процессе моделирования вычислялись среднее время жизни частиц, длина диффузии и число Пекле. При увеличении скорости дрейфа время жизни частиц и длина диффузии уменьшаются, а число Пекле возрастает. Полученный результат соответствует физическому определению числа Пекле, характеризующему относительный эффект от дрейфового и диффузионного движения частиц.

Список литературы

[1] Gorgis A., Flissikowski T., Brandt O., Cheze C., Geelhaar L., Riechert H., and Grahn H.T. Time-resolved photoluminescence spectroscopy of individual GaN nanowires // Physical review B. 2012. V. 86, 041302(R).

[2] Kanevce A., Levi D.H. and Kuciauskas D. The role of drift, diffusion, and recombination in time-resolved photoluminescence of CdTe solar cells determined through numerical simulation // Prog. Photovolt: Res. Appl. 2014. V. 22, P. 1138–1146.

[3] Sabelfeld K. K., Brandt O., Kaganer V. M. Stochastic model for the fluctuation-limited reaction-diffusion kinetics in inhomogeneous media based on the nonlinear Smoluchowski equations // J. Math. Chem. 2015. V. 53, iss. 2. P. 651–669.

[4] Kolodko A. A. and Sabelfeld K. K. Stochastic Lagrangian model for spatially inhomogeneous Smoluchowski equation governing coagulating and diffusing particles // Monte Carlo Methods and Applications. 2001. V. 7, iss. 3–4. P. 223–228.

[5] Kolodko A., Sabelfeld K. and Wagner W. A stochastic method for solving Smoluchowski's coagulation equation // Mathematics and Computers in Simulation. 1999. V. 49, iss. 1–2. P. 57–79.

[6] Sabelfeld K. K. Random walk on spheres algorithm for solving transient drift-diffusion-reaction problems // Submitted to Journal of Computational Physics, 2017.

[7] Devroye L. The Series Method for Random Variate Generation and Its Application to the Kolmogorov-Smirnov Distribution // American Journal of Mathematical and Management Sciences. 1981. V. 1. P. 359–379.

[8] Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Статистическое моделирование. Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2-е изд., дополн., 1982. 296 С.

[9] Сабельфельд К.К., Киреева А.Е. Стохастическое моделирование рекомбинации электронов и дырок в 2D и 3D неоднородных полупроводниках, часть 2: результаты моделирования // Автометрия. 2017. Т. 53, № 2, С. 117–124.

Сабельфельд Карл Карлович — д.ф.-м.н., гл. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: karl@osmf.sscc.ru;
Киреева Анастасия Евгеньевна — к.ф.-м.н., науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: kireeva@ssd.sscc.ru.
Дата поступления — 10 июля 2017 г.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ДЕКОМПОЗИЦИИ С ПЕРЕСЕЧЕНИЕМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ВНЕШНЕЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА

А. О. Савченко

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.63

Рассматривается применимость альтернирующего метода Шварца и его модификации для решения внешней краевой задачи для уравнения Гельмгольца. Для решения задачи производится декомпозиция расчётной области на две пересекающиеся подобласти, ограниченную и неограниченную, на смежных границах которых ставятся итерируемые интерфейсные условия. Решение задачи во внешней подобласти производится с использованием формулы Грина, что позволяет получить достаточные условия сходимости метода в случае отрицательного коэффициента в уравнении Гельмгольца. Проведено исследование сходимости частного случая проблемы, позволяющее сделать вывод о применимости предложенного подхода для решения задачи с произвольным волновым числом.

Ключевые слова: Внешняя краевая задача, уравнение Гельмгольца, метод декомпозиции.

Введение

Методы декомпозиции для решения внешних краевых задач стали активно внедряться ещё в конце прошлого века (см., например, [1] и ссылки). Основная идея их использования состоит в том, чтобы разбить всю бесконечную область, где необходимо найти решение задачи, на подобласти. Одна из них также является бесконечной, но ограниченной снизу поверхностью простой формы, удобной для решения внешней задачи. Другая подобласть ограничена сверху также поверхностью простой формы, а снизу — исходной поверхностью, на которой заданы граничные условия. Решение исходной задачи сводится к последовательному решению задач в этих подобластях и к нахождению граничных значений на поверхности, принадлежащей области пересечения двух подобластей. Область пересечения может состоять только из поверхности ∂S (рис. 1a, декомпозиция без пересечения), или из области, ограниченной поверхностями $\partial\Omega$ и ∂S (рис. 1b, декомпозиция с пересечением).

Необходимо отметить, что применение итерационного подхода, являющегося альтернирующим методом Шварца, в котором последовательно пересчитываются граничные условия на вспомогательных поверхностях, для решения задачи не всегда может приводить к её решению, ввиду необходимости удовлетворения условию сходимости этого итерационного процесса.

Предлагаемый в настоящей работе подход к решению внешней краевой задачи Дирихле для уравнения Гельмгольца состоит в нахождении приближённых значений искомой функции и её нормальной производной на поверхности вспомогательной сферы, заключающей в себя исходную внутреннюю границу, поскольку тогда можно найти значения функции в любой точке области, используя формулу Грина. Введение вспомогательной сферы обусловлено тем обстоятельством, что исходная поверхность может иметь достаточно произвольную форму, и нахождение на ней значений нормальной производной, являющейся в общем случае разрывной функцией, является сложной вычислительной проблемой. Для решения задачи применяется альтернирующий метод Шварца, в котором последовательно пересчитываются граничные условия на сфере ∂S и внешней вспомогательной поверхности $\partial\Omega$. На каждой итерации метода решается внутренняя и внешняя краевые задачи. Решение внутренней краевой задачи производится в области, ограниченной внешней

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 14-11-00485).

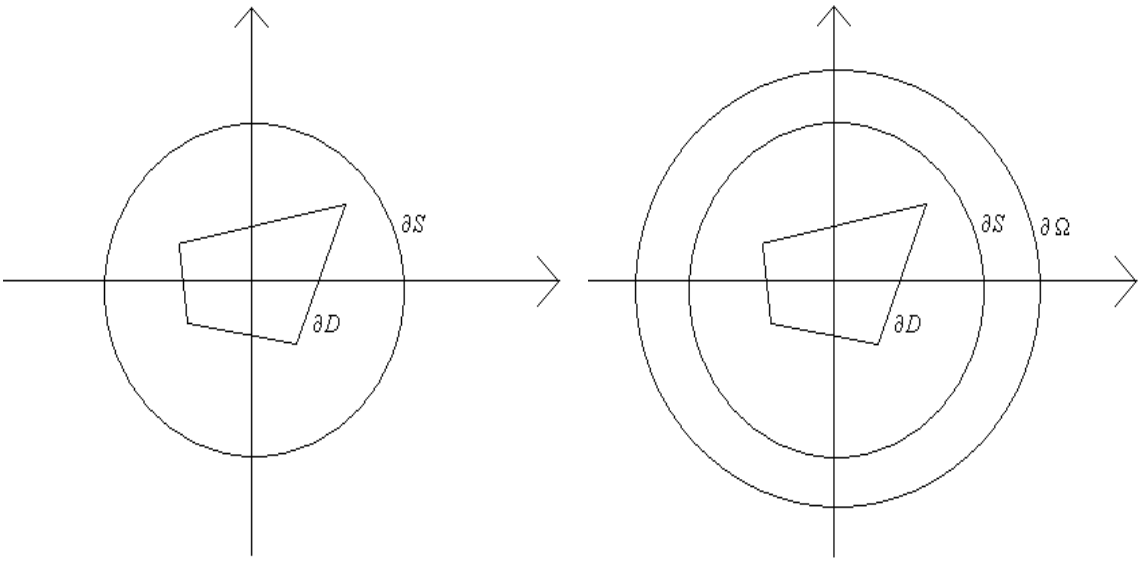


Рис. 1: a, b

вспомогательной поверхностью $\partial\Omega$ и исходной границей ∂D, и находятся приближённые значения искомой функции и её нормальной производной на поверхности сферы ∂S. Для решения внешней задачи в области, ограниченной снизу сферой, в отличие от известных методов решения, предлагается использовать формулу Грина. Такой подход имеет следующие преимущества. Во-первых, формула Грина является более универсальной, и позволяет находить решения уравнения Гельмгольца не только при положительном коэффициенте в уравнении, но и при произвольном, в том числе комплексном. Во-вторых, эта формула не представлена в виде ряда, и поэтому нет необходимости аппроксимировать этот ряд частичной суммой, внося тем самым дополнительную погрешность в численный метод. Отметим, что в предлагаемом итерационном алгоритме искомыми значениями при решении внутренней краевой задачи будут значения функции и её нормальной производной только на сфере ∂S, а при решении внешней краевой задачи — только значения функции на поверхности $\partial\Omega$. Получены достаточные условия сходимости предложенного итерационного метода и оценка для производной решения уравнения Гельмгольца при отрицательном коэффициенте в этом уравнении. Проведено исследование сходимости метода для частного случая рассмотренной проблемы, которое позволило сделать выводы об ограничении применимости предложенного подхода для решения общей проблемы с произвольным волновым числом.

1 Постановка задачи и метод решения

Рассмотрим открытую область D в пространстве $\mathbb{R}^3$, ограниченную поверхностью ∂D. Внешняя краевая задача для уравнения Гельмгольца состоит в нахождении функции $u \in C^1\left(\mathbb{R}^3\backslash D\right) \cap C^2\left(\mathbb{R}^3\backslash \bar{D}\right)$, удовлетворяющей решению уравнения

$$\Delta u\left(\mathbf{r}\right) + k^2 u\left(\mathbf{r}\right) = 0, \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3\backslash \bar{D}, \tag{1}$$

краевому условию

$$u\left(\mathbf{r}\right) = f\left(\mathbf{r}\right), \quad \mathbf{r} \in \partial D, \tag{2}$$

и условию излучения на бесконечности

$$\lim_{r\to\infty} r\left(\frac{\partial u}{\partial r} - iku\right) = 0. \tag{3}$$

Задача (1)–(2) предполагается решённой, если удастся найти значения искомой функции u_S и её нормальной производной u_n на сфере ∂S, ограничивающей шар $\bar{S} = S \cup \partial S$, $\bar{D} \subset S$. Действительно, в этом случае можно

найти значения функции в произвольной точке пространства $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \backslash \bar{D}$ по формуле Грина

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int\limits_{\partial S} \left[u_n \frac{e^{ikR}}{R} - u_S \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{e^{ikR}}{R} \right) \right] ds, \tag{4}$$

где r_0 — радиус сферы ∂S, $\mathbf{r}_0 \in \partial S$, $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| = \sqrt{r^2 - 2r_0 r \cos\gamma + r_0^2}$, γ — угол между векторами $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_0$, $\cos\gamma = \cos\theta\cos\theta_0 + \sin\theta\sin\theta_0\cos(\varphi - \varphi_0)$, $\frac{\partial}{\partial n}$ — производная по нормали к поверхности в точке $\mathbf{r}_0$.

Формула (4) является основой для предлагаемого итерационного метода решения задачи (1)–(2), который заключается в последовательном решении вспомогательных краевых задач в ограниченной и неограниченной области.

Введём дополнительную ограниченную область Ω с границей $\partial\Omega$ такую, что $\bar{S} \subset \Omega$. Будем решать внутреннюю краевую задачу в области $\Omega \backslash \bar{D}$, при заданных граничных условиях на ∂D и пересчитываемых на каждой итерации краевых условиях на $\partial\Omega$. На первой итерации метода задаём нулевые граничные условия на поверхности $\partial\Omega$ и решаем внутреннюю краевую задачу для области $\Omega \backslash \bar{D}$. При этом нас будет интересовать полученные значения для функции и её нормальной производной только на поверхности ∂S. По этим значениям определим новые граничные условия на внешней границе расчётной области $\partial\Omega$ по формуле (4), и проведём аналогично вторую и последующие итерации. Количество итераций J определяется по условию сходимости метода с заданной точностью $\varepsilon \ll 1$.

2 Сходимость итерационного метода

Докажем сходимость предложенного метода для решения уравнения

$$\Delta u(\mathbf{r}) - k^2 u(\mathbf{r}) = 0 \tag{5}$$

с граничными условиями (2), (3), где k — вещественное число.

2.1 Итерационные формулы для искомого приближённого решения и его погрешности

Запишем формулу (4) в виде

$$u(\mathbf{r}) = \int\limits_{\partial S} \left[G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{r}_0) - u(\mathbf{r}_0) \frac{\partial}{\partial n}(G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)) \right] ds,$$

где $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \dfrac{1}{4\pi} \dfrac{e^{-kR}}{R}$. Тогда итерационный процесс определяется следующим образом:

$$\begin{cases} \Delta u^{j+1}(\mathbf{r}) - k^2 u^{j+1}(\mathbf{r}) = 0, & \mathbf{r} \in \Omega \backslash \bar{D}, \\ u^{j+1}(\mathbf{r}) = \Phi^j(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in \partial\Omega, \\ u^{j+1}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in \partial D, \quad j = 0, 1, \ldots, \end{cases} \tag{6}$$

где

$$\Phi^0(\mathbf{r}) = 0 \quad , \quad \Phi^j(\mathbf{r}) = \int\limits_{\partial S} \left[G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \frac{\partial u^j}{\partial n}(\mathbf{r}_0) - u^j(\mathbf{r}_0) \frac{\partial}{\partial n}(G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)) \right] ds, \tag{7}$$
$$\mathbf{r} \in \partial\Omega, \quad \mathbf{r}_0 \in \partial S, \quad k = 1, 2, \ldots .$$

Определим погрешность метода как

$$\omega^j(\mathbf{r}) = u^j(\mathbf{r}) - u(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega \backslash \bar{D}, \tag{8}$$

$$\omega_n^j(\mathbf{r}_0) = \frac{\partial u^j}{\partial n}(\mathbf{r}_0) - \frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{r}_0), \quad \mathbf{r}_0 \in \partial S.$$

Тогда

$$\omega^{j+1}(\mathbf{r}) = \int\limits_{\partial S} \left[G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \omega_n^j(\mathbf{r}_0) - \omega^j(\mathbf{r}_0) \frac{\partial}{\partial n}(G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)) \right] ds \equiv \varphi^j(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega, \tag{9}$$

и погрешность будет удовлетворять уравнениям

$$\begin{cases} \Delta\omega^{j+1}(\mathbf{r}) - k^2\omega^{j+1}(\mathbf{r}) = 0, & \mathbf{r} \in \Omega\backslash\bar{D}, \\ \omega^{j+1}(\mathbf{r}) = \varphi^j(\mathbf{r}), & \mathbf{r} \in \partial\Omega, \\ \omega^{j+1}(\mathbf{r}) = 0, & \mathbf{r} \in \partial D. \end{cases} \tag{10}$$

2.2 Оценка производной по нормали

Для определения условия сходимости метода необходимо найти оценку для производной по нормали от решения уравнения Гельмгольца на поверхности ∂S. Обозначим за ρ_0 расстояние между сферой и границей расчётной области, $\rho_0 = \min\limits_{\mathbf{r},\,\mathbf{r}_0} |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$, $\mathbf{r} \in \partial\Omega \cup \partial D$, $\mathbf{r}_0 \in \partial S$; а за u_l производную от функции u по направлению l, $u_l = \dfrac{\partial u}{\partial l}$. Если функция u удовлетворяет уравнению Гельмгольца, то и функция u_l будет удовлетворять такому же уравнению, и для любых δ, $\delta \le \rho_0$ справедлива теорема о среднем для решения уравнения Гельмгольца [2]

$$\int\limits_{\partial S_\delta} u_l \, ds_\delta = u_l(\mathbf{r}_0) \frac{4\pi\delta}{k} \sin(k\delta), \tag{11}$$

где ∂S_δ сфера радиуса δ с центром в точке $\mathbf{r}_0$. Проинтегрируем уравнение (11) от 0 до ρ по переменной δ, $0 \le \delta \le \rho \le \rho_0$. Тогда получим

$$I_\rho = \int\limits_{S_\rho} u_l \, dv_\rho = 4\pi u_l(\mathbf{r}_0)\, \alpha(k, \rho), \tag{12}$$

где S_ρ — шар радиуса ρ, и

$$\alpha(k, \rho) = \frac{\sin(k\rho)}{k^3} - \frac{\rho\cos(k\rho)}{k^2}. \tag{13}$$

Интегрируя равенство (12) по частям, получим

$$I_\rho = \int\limits_{\partial S_\rho} u \frac{\partial l}{\partial n_S} \, ds_\rho,$$

где n_S — нормаль в текущей точке на сфере ∂S_ρ.

Произведём оценку интеграла I_ρ, что позволит не только получить искомую оценку производной в точке $\mathbf{r}_0$, но и уточнить оценку для производной гармонической функции, полученной в [2]. Выберем ось Z в декартовой системе координат, совпадающей с направлением l. Тогда

$$I_\rho = \rho^2 \int\limits_0^{2\pi} \int\limits_0^{\pi} u(\theta, \varphi) \sin\theta \cos\varphi \, d\theta d\varphi.$$

Для оценки $|I_\rho|$ разобьем промежуток интегрирования по переменной φ на интервалы $\Phi_1 = [\pi/2, 3\pi/2]$ и $\Phi_2 = [0, 2\pi]\backslash\Phi_1$, на которых $\cos\varphi$ знакопостоянная функция. Тогда

$$|I_\rho| \le \rho^2 \max_{\mathbf{r}\in\partial S_\rho} |u(\mathbf{r})| \int\limits_0^{\pi} \sin\theta \, d\theta \left\{ \int\limits_{\Phi_1} |\cos\varphi| \, d\varphi + \int\limits_{\Phi_2} \cos\varphi d\varphi \right\} = 8\rho^2 \max_{\mathbf{r}\in\partial S_\rho} |u(\mathbf{r})| \ .$$

Отсюда, с учётом (12), следует оценка

$$|u_l(\mathbf{r}_0)| \le \frac{2\rho^2}{\pi\alpha(k, \rho)} \max_{\mathbf{r}\in\partial S_\rho} |u(\mathbf{r})|, \tag{14}$$

где $\alpha(k, \rho)$ определено формулой (13).

Заметим, что правая часть неравенства (14) является функцией, зависящей от произвольного радиуса шара ρ, $\rho \le \rho_0$, и поэтому естественно выбрать этот радиус таким образом, чтобы правая часть в (14)

принимала минимальное значение. При относительно больших значениях k это можно сделать достаточно просто. Обозначим $x = k\rho$. Тогда, с учётом (13),

$$\frac{\rho^2}{\alpha(k,\rho)} = \frac{k\,x^2}{\sin(x) - x\cos(x)}. \tag{15}$$

Функция в правой части формулы (15) имеет минимум при $x_* \approx 2.08$ и принимает в точке x_* значение $\rho_*^2/\alpha(k,\rho_*) \approx 2.3k$, где $\rho_* = x_*/k$. Тогда неравенство (14) примет вид

$$|u_l(\mathbf{r}_0)| \le 1.465k \max_{\mathbf{r}\in\partial S_{\rho_*}} |u(\mathbf{r})|. \tag{16}$$

Если $\rho_* > \rho_0$, то в силу убывания функции в правой части формулы (15) на промежутке $(0, x_*]$, выбираем $\rho = \rho_0$ и неравенство (14) примет вид

$$|u_l(\mathbf{r}_0)| \le \frac{2\rho_0^2}{\pi\alpha(k,\rho_0)} \max_{\mathbf{r}\in\partial S_{\rho_0}} |u(\mathbf{r})| = \frac{2kx_0^2}{\pi(\sin(x_0) - x_0\cos(x_0))} \max_{\mathbf{r}\in\partial S_{\rho_0}} |u(\mathbf{r})|, \tag{17}$$

где $x_0 = k\rho_0$.

Нетрудно показать, что $\lim\limits_{k\to 0} \dfrac{\rho_0^2}{\alpha(k,\rho_0)} = \dfrac{3}{\rho_0}$. Отсюда следует, что при $k = 0$ оценка производной для уравнения Лапласа в (17) в $\pi/2$ раз лучше оценки $|u_x(\mathbf{r}_0)| \le \dfrac{3M}{\rho_0}$, приведённой в [2], где M максимальное по модулю значение функции $u(\mathbf{r})$ в заданной области.

2.3 Сходимость метода

Найдём явный вид производной по нормали от фундаментального решения, и интегралы от фундаментального решения и от его нормальной производной по поверхности сферы.

$$\frac{\partial G}{\partial n} = -\frac{\partial G}{\partial R}\frac{\partial R}{\partial n} = e^{-kR}\frac{1+kR}{R^2}\cos\left(\widehat{R,n}\right) = e^{-kR}\frac{(1+kR)}{R^3}\frac{\left(r_0^2 + R^2 - r^2\right)}{2r_0},$$

$$I_0(\mathbf{r}) = \int\limits_{\partial S} G(\mathbf{r},\mathbf{r}_0)\,ds = \frac{r_0}{2kr}e^{-kr}\left[e^{kr_0} - e^{-kr_0}\right], \tag{18}$$

$$I_1(\mathbf{r}) = \int\limits_{\partial S} \frac{\partial}{\partial n}\left(G(\mathbf{r},\mathbf{r}_0)\right)\,ds = \frac{1}{2kr}\,e^{-kr}\left[(1-kr_0)\,e^{kr_0} - (1+kr_0)\,e^{-kr_0}\right], \tag{19}$$

где $r = |\mathbf{r}|$. Нетрудно заметить, что $I_0(\mathbf{r}) > 0$, $I_1(\mathbf{r}) < 0$, и обе функции убывают по модулю с возрастанием аргумента r.

Оценим норму погрешности метода на $j+1$-ой итерации через норму погрешности на j-ой итерации. Ввиду того, что для уравнения Гельмгольца вида (5) применим принцип максимума, из (9) следует неравенство

$$\max_{\mathbf{r}\in\Omega\setminus D}\left|\omega^{j+1}(\mathbf{r})\right| \le \max_{\mathbf{r}\in\partial S}\left|\omega_n^j(\mathbf{r})\right| \max_{\mathbf{r}\in\partial\Omega} I_0(\mathbf{r}) + \max_{\mathbf{r}\in\partial S}\left|\omega^j(\mathbf{r})\right| \max_{\mathbf{r}\in\partial\Omega}|I_1(\mathbf{r})|,$$

где интегралы $I_0(\mathbf{r})$ и $I_1(\mathbf{r})$ определены формулами (18), (19). Отсюда, принимая во внимание формулы (16) и (17), получаем окончательную оценку

$$\max_{\mathbf{r}\in\Omega\setminus D}\left|\omega^{j+1}(\mathbf{r})\right| \le \mathrm{M}(k,d,r_0,x_0) \max_{\mathbf{r}\in\Omega\setminus D}\left|\omega^{j}(\mathbf{r})\right|,$$

где

$$\mathrm{M}(k,d,r_0,x_0) = \frac{e^{-kd}}{2kd}\left[e^{kr_0}(kr_0 + r_0\beta - 1) + e^{-kr_0}(kr_0 - r_0\beta + 1)\right], \tag{20}$$

$$d = \min_{\mathbf{r}\in\partial\Omega}|\mathbf{r}|, \quad x_0 = k\rho_0,$$

$$\beta = \beta(k,x_0) = \begin{cases} \dfrac{2kx_0^2}{\pi(\sin(x_0) - x_0\cos(x_0))}, & x_0 < 2.08 \\ 1.465k, & x_0 \ge 2.08 \end{cases}.$$

Таким образом, достаточным условием сходимости итерационного процесса для решения уравнения (5) будет

$$\mathrm{M}(k,d,r_0,x_0) < 1. \tag{21}$$

3 Анализ сходимости частного решения с произвольным волновым числом

Проведём анализ сходимости альтернирующего метода Шварца для решения задачи (1)–(3) для частного случая, когда поверхность ∂D является сферой радиуса r_D, функция f в формуле (2) — константа, а решением задачи (1)–(3) является функция $u(r) = \dfrac{e^{ikr}}{r}$.

Пусть на сфере ∂S задано некоторое начальное значение искомой функции, являющейся константой: $u^0(r_0) = V_R^0 + iV_I^0 = const$. Выберем в качестве области Ω шар, ограниченный сферой радиуса r_Ω, $r_D < r_0 < r_\Omega$. Исследование сходимости сведётся к следующим шагам:

1. По заданному начальному значению искомой функции на сфере ∂S решим внешнюю задачу и найдём значение функции на сфере $\partial\Omega$.

2. Решим внутреннюю задачу в области $\Omega\backslash\bar{D}$ с учётом полученного значения на $\partial\Omega$ и заданного на ∂D, и найдём новое значение для искомой функции на сфере ∂S.

3. Сравним новые и начальные значения на сфере ∂S с точным значением и определим условия для убывания погрешности решения.

1. Решением внешней задачи для уравнения Гельмгольца вне сферы ∂S является функция $(C_R + i\,C_I)\,\dfrac{e^{ikr}}{r}$, где

$$C_R = r_0\left(V_R^0\cos(kr_0) + V_I^0\sin(kr_0)\right), \quad C_I = r_0\left(-V_R^0\sin(kr_0) + V_I^0\cos(kr_0)\right),$$

поэтому

$$u^1(r_\Omega) = \frac{r_0}{r_\Omega}\{V_R^0\cos\phi - V_I^0\sin\phi + i\left[V_R^0\sin\phi + V_I^0\cos\phi\right]\}, \tag{22}$$

где $\phi = k(r_\Omega - r_0)$.

2. Решением внутренней задачи для уравнения Гельмгольца в области $\Omega\backslash\bar{D}$ с граничными условиями $u^1(r_\Omega) = U_R + iU_I$ и $u^1(r_D) = u_R + iu_I$ является функция

$$u^1(r) = \left[a\cos(kr) + b\sin(kr) + i\left\{c\cos(kr) + d\sin(kr)\right\}\right]\,\frac{1}{r\sin(k(r_\Omega - r_D))}, \tag{23}$$

где

$$a = r_D u_R\sin(kr_\Omega) - r_\Omega U_R\sin(kr_D), \quad b = r_\Omega U_R\cos(kr_D) - r_D u_R\cos(kr_\Omega),$$
$$c = r_D u_I\sin(kr_\Omega) - r_\Omega U_I\sin(kr_D), \quad d = r_\Omega U_I\cos(kr_D) - r_D u_I\cos(kr_\Omega).$$

Если значения U_R и U_I определены формулой (22), а значения функции на сфере ∂D равны $u_R = \dfrac{\cos(kr_D)}{r_D}$, $u_I = \dfrac{\sin(kr_D)}{r_D}$, то функция $u^1(r)$ из формулы (23) примет на сфере ∂S значение

$$u^1(r_0) = \frac{V_R^1 + iV_I^1}{\sin(k(r_\Omega - r_D))},$$

где

$$V_R^1 = a_R V_R^0 + b_R V_I^0 + c_R, \quad V_I^1 = a_I V_R^0 + b_I V_I^0 + c_I,$$
$$a_R = \sin(k(r_0 - r_D))\cos\phi, \quad b_R = -\sin(k(r_0 - r_D))\sin\phi,$$
$$a_I = \sin(k(r_0 - r_D))\sin\phi, \quad b_I = \sin(k(r_0 - r_D))\cos\phi,$$
$$c_R = \sin\phi\,\cos(kr_D)/r_0, \quad c_I = \sin\phi\,\sin(kr_D)/r_0.$$

3. Перейдём к уравнениям для погрешностей решения. Обозначим

$$\varepsilon_R^i = V_R^i - \cos(kr_0)/r_0, \quad \varepsilon_I^i = V_I^i - \sin(kr_0)/r_0, \quad i = 0, 1.$$

Тогда $\varepsilon_R^1 = a_R\varepsilon_R^0 + b_R\varepsilon_I^0$, $\varepsilon_I^1 = a_I\varepsilon_R^0 + b_I\varepsilon_I^0$, или

$$\begin{cases} \varepsilon_R^1 = \chi\left[\varepsilon_R^0\cos\phi - \varepsilon_I^0\sin\phi\right] \\ \varepsilon_I^1 = \chi\left[\varepsilon_R^0\sin\phi + \varepsilon_I^0\cos\phi\right] \end{cases} \tag{24}$$

где

$$\chi = \frac{\sin\left(k\left(r_0 - r_D\right)\right)}{\sin\left(k\left(r_\Omega - r_D\right)\right)}.$$

Формула (24) задаёт преобразование вращения, помноженное на постоянный множитель χ, который и определяет сходимость метода для рассмотренного частного случая.

Условие сходимости $|\chi| < 1$ для рассмотренной простейшей задачи имеет непростую структуру ввиду наличия бесконечного количества интервалов расходимости. Для более общего случая, скорее всего, сходимость метода (6)–(7) для решения задачи (1)–(3) имеет место только на интервалах, где выполняются определённые соотношения между входными параметрами, характеризующими поверхности ∂D и $\partial\Omega$, волновым числом k, и радиусом вспомогательной сферы r_0. Выбор соотношений для исходных параметров, необходимых для сходимости в общем случае, является пока открытой проблемой. По этой причине автор не рекомендует решать уравнение Гельмгольца с произвольным волновым числом, отличное от вида (5), предложенным методом.

Список литературы

[1] V. Dolean, P. Jolivet, F. Nataf. An Introduction to Domain Decomposition Methods: algorithms, theory and parallel implementation.// Master, France, https://hal.archives-ouvertes.fr/cel-01100932v3, 2015.

[2] Р. Курант, Д. Гилберт. Методы математической физики. Том 2. //М., Мир, 1964, 830 стр.

Александр Оливерович Савченко — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: savch@ommfao1.sscc.ru.
Дата поступления — 5 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СЕЙСМИКИ С МГНОВЕННЫМ И ШНУРОВЫМ ИСТОЧНИКАМИ

А. Дж. Сатыбаев, А. А. Алимканов

Ошский технологический университет имени академика М. М. Адышева, 723503, г.Ош, Кыргызстан

УДК 517.876.2

В данной статье рассмотрено численное конечно-разностное решение одномерной обратной задачи сейсмики. Здесь определяется один из параметров упругости – коэффициент Ламэ. Доказана теорема о сходимости приближенного решения к точному решению обратной задачи.

Ключевые слова: Уравнение сейсмики, одномерная, обратная задача, коэффициент Ламэ, численное решение, сходимость решения.

Введение

Волны землетрясения проходят внутри и на поверхности Земли и они изучаются теорией упругости [1, 2], используя классические методы математического анализа. Процесс распространения волн землетрясения, начиная от классических исследований, исследуется на основе дифференциальных уравнений идеальной теории упругости с переменными параметрами. Процесс распространения сейсмических волн в линейной изотропной упругой среде описывается сложной системой дифференциальных уравнений. Дифференциальные системы уравнений теории упругости при существенных предположениях и ограничениях приводятся к дифференциальным уравнениям сейсмики.

Коэффициенты уравнений сейсмики состоят из суперпозиции параметров, которые зависят от нескольких переменных. Методом линеаризации можно привести суперпозиции одномерного уравнения к многомерному уравнению сейсмики [3, 4, 5]. В практических приложениях возникают проблемы отыскания переменных коэффициентов дифференциальных уравнений, а эти коэффициенты описывают физические характеристики среды. Такие проблемы называют обратными задачами. В задачах сейсмики определяют скорость распространения волн, плотность среды, упругие параметры Ламэ.

1 Постановка задачи

При линеаризации двумерных задач можно получить одномерную и двумерную линеаризованную задачу сейсмики [1, 3, 4, 6]. Рассмотрим одномерную задачу сейсмики полученную при линеаризации:

$$\left.\begin{aligned} \rho_0(x_3)\frac{\partial^2 u_0(x_3,t)}{\partial t^2} = \mu_0(x_3)\frac{\partial^2 u_0}{\partial x_3^2} + \mu'_{0x_3}(x_3)\frac{\partial u_0(x_3,t)}{\partial x_3}, \qquad x_3 \in R_+, t \in R_+, \\ u_0(x_3,t)|_{t<0} \equiv 0,\ \mu_0(x_3)\frac{\partial u_0(x_3,t)}{\partial x_3}\bigg|_{x_3=0} = \frac{1}{2}r_0\delta(t) + \frac{1}{2}h_0\theta(t), t \in R_+, \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

Здесь $\mu_0(x_3)$, $\rho_0(x_3)$ — коэффициент Ламе и плотность среды соответственно, $u_0(x_3,t)$ — смещение почвы,$\delta(t)$ — дельта-функция Дирака.

Первое условие задачи (1) означает, что среда до некоторого времени $t = 0$ находится в покое, а в момент времени $t = 0$ в силу действия второго условия на поверхность среды действуют мгновенные и шнуровые источники с силой r_0, h_0 и в среде начинаются сейсмические волны.

Задача (1) ***является прямой задачей*** и требуется определить смещение почвы среды, при известных значениях параметров среды и значений r_0, h_0.

Обратная задача заключается в определении $\mu_0(x_3)$ — коэффициента Ламе при известной плотности $\rho_0(x_3), r_0, h_0$ и дополнительной информации вида

$$u_0(x_3,t)|_{x_3=0} = f(t), \qquad t \in [0,T]\ . \tag{2}$$

Пусть относительно коэффициентов уравнения выполнено условие

$$\mu_0(x_3), \qquad \rho_0(x_3) \in\ \Lambda_0, \tag{3}$$

где $\Lambda_0 = \left\{\rho_0(x) \in C^6(R_+), \rho_0(+0) = 0, 0 < M_1 \le \rho_0(x) \le M_2, \|\rho_0\|_{C^2} \le M_3\right\}$. Здесь M_1, M_2, M_3 — положительные постоянные.

Если выполнено условие (3), то существует решение прямой задачи.

Задача (1) является задачей с криволинейной характеристикой и для выпрямления характеристики введем новую переменную [1, 3, 4]

$x = \int\limits_0^{x_3} \frac{\sqrt{\rho_0(x_3)}dx}{\sqrt{\mu_0(x)}}$ и новые функции

$$u(x,t) = u_0(x_3,t),$$

$$C(x) = \sqrt{\mu_0(x_3)/\rho_0(x_3)}, \qquad \mu(x) = \mu_0(x_3), \rho(x) = \rho_0(x_3).$$

Проводим вычисления $u_{0tt}(x_3,t) = u_{tt}(x,t), u_{x_3}(x_3,t) = u_x(x,t)\cdot\sqrt{\rho(x)/\mu(x)}$,

$u_{x_3x_3}(x_3,t) = u_{xx}\cdot\frac{\rho(x)}{\mu(x)} + u_x\cdot\left[\sqrt{\frac{\rho_0(x_3)}{\mu_0(x_3)}}\right)'_{x_3} = u_{xx}\cdot\frac{\rho(x)}{\mu(x)} + u_x\cdot\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\mu_0(x_3)}{\rho_0(x_3)}}\cdot\left(\frac{\rho_0(x_3)}{\mu_0(x_3)}\right)'_{x_3}\right] =$

$= u_{xx}\cdot\frac{\rho(x)}{\mu(x)} + u_x\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\mu(x)}{\rho(x)}}\cdot\left(\frac{\rho(x)}{\mu(x)}\right)'_x\right] = \left|C(x) = \sqrt{\frac{\rho(x)}{\mu(x)}}\right| = C^2(x)u_{xx} + \frac{1}{2}\frac{C'(x)}{C(x)}u_x.$

Замечание. Случай $\rho(x) = 1$ исследован в работе [6].

Тогда из (1)–(2) имеем следующую обратную задачу:

$$\left.\begin{aligned} u_{tt}(x,t) = u_{xx}(x,t) + \frac{C'_x(x)}{2C(x)}u_x(x,t), \qquad x \in R_+, t \in R_+,\\ u(x,t)|_{t<0} \equiv 0, \qquad C(x)u'_x(x,t)|_{x=0} = \frac{1}{2}r_0\delta(t) + \frac{1}{2}h_0\theta(t), \qquad t \in R_+ \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

$$u(x,t)|_{x=0} = f(t), \qquad t \in [0,T]. \tag{5}$$

Продолжим решать функции $C(x)$ и $u(x,t)$ четным образом по переменной x на полупространстве $x \in R_-$. Для выделения особенностей решение прямой задачи (4) будем искать в виде:

$$u(x,t) = \tilde{u}(x,t) + S(x)\theta(t-|x|) + R(x)\theta_1(t-|x|), \qquad x \in R, \qquad t \in R_+,$$

где $\tilde{u}(x,t)$ — гладкая непрерывная функция.

Подставляя последнее в (4)–(5), относительно функции S(x) получим обратную задачу:

$$u_{tt}(x,t) = u_{xx}(x,t) + \frac{2S'_x(x)}{S(x)}u_x(x,t), \qquad (x,t) \in \Delta(T), \tag{6}$$

$$u(x,t)|_{t=|x|} = S(x), \qquad x \in \left[0, \frac{T}{2}\right], \tag{7}$$

$$u(x,t)|_{x=0} = f(t), \qquad t \in [0,T], \tag{8}$$

где $\Delta(T) = \left\{x,t) \in (R_+ \times R_+) : x \in (0, \frac{T}{2}), |x| < t < T - |x|\right\}$.

Функции $S(x)$ и $C(x)$ связаны соотношением

$$S(x) = \frac{r_0}{2}\sqrt[4]{\frac{C(x)}{C(0)}}. \tag{9}$$

Для $R(x)$ решается задача дифференциального уравнения первого порядка

$2R'_x(x) - \frac{C'_x(x)}{2C(x)} * R(x) - S''_{xx} - \frac{C'_x(x)}{2C(x)}S'_x(x) = 0, \qquad R(0) = \frac{1}{2}h_0.$

2 Конечно-разностное решение

Для этого введем сеточную область

$$\Delta_h(T) = \{(x_i, t_i) : x_i = ih, \quad h = \frac{T}{N}, \quad x_i < t_i < T - x_i, \quad i = 0, N\}, \tag{10}$$

где h — шаг сетки.

Построим конечно-разностный аналог дифференциальной задачи (6)-(8):

$$\left.\begin{aligned} u_{t\bar{t}} = u_{x\bar{x}} - \frac{2(S_i - S_{i-1})}{hS_i} \cdot \frac{u_i^i - u_{i-1}^i}{h}, \qquad (x_i, t_i) \in \Delta_h(T), \\ u_i^i = S_i, \qquad x_i \in [0, T/2], \qquad i = 0, N/2, \end{aligned}\right\} \tag{11}$$

$$u_0^i = f_i, \qquad i = 0, N. \tag{12}$$

Теорема. Пусть для $f(t) \in C^4[0,T]$ существует решение обратной задачи (6)–(8), удовлетворяющее условию (3) и пусть решение прямой задачи (4) $u(x,t) \in C^4(\Delta(t))$. Тогда, при малом T, S_i — приближенное решение обратной задачи (11)–(12), построенной конечно-разностным методом, сходится к точному решению обратной задачи (6)–(8) в классе C со скоростью порядка $O(h)$.

Доказательство. Доказательство проведем по методике [4]. Исследуем сходимости решения обратной задачи (11)–(12) к точному решению обратной задачи (6)–(8). Для этого распишем разностное уравнение

$$u_{i+1}^k = u_i^{k+1} + u_i^{k-1} - u_{i-1}^k + h^2 B_i^k, \tag{13}$$

где $B_i^k = \frac{S_i - S_i - 2}{h^2} \cdot \frac{4}{S_i + S_{i-2}} \cdot (u_i^k - u_{i-2}^k)$.

Подставляя в правую часть последнего уравнения выражения $u_i^{k+1}, u_i^{k-1}, u_{i-1}^{k-2}, \ldots$ последовательно, получим:

$$u_{i+1}^k = \frac{1}{2}\left[f^{k+i+1} + f^{k-i-1}\right] + h^2 \sum_{p=1}^{i} \sum_{\mu=1}^{p} B_\mu^{k-i-\mu+2p}. \tag{14}$$

Полагая в последнем $k = i+1$ и учитывая вторую формулу (11) имеем

$$S_{i+1} = \frac{1}{2}\left[f^{2i+2} + f^0\right] + h^2 \sum_{p=1}^{i} \sum_{\mu=1}^{p} B_\mu^{1-\mu+2p}. \tag{15}$$

Из (14) следуют

$$u_i^k = \frac{1}{2}\left[f^{k+i} + f^{k-i}\right] + h^2 \sum_{p=1}^{i-1} \sum_{\mu=1}^{p} B_k^{k-i-\mu+2p+1}. \tag{16}$$

$$u_{i-2}^k = \frac{1}{2}\left[f^{k+i-2} + f^{k-i+2}\right] + h^2 \sum_{p=1}^{i-3} \sum_{\mu=1}^{p} B_\mu^{k-i-\mu+2p+3}. \tag{17}$$

Откуда

$$\frac{u_i^k - u_{i-2}^k}{h} = \frac{1}{2}\left(f^{k+i} - f^{k+i-2} + f^{k-i} - f^{k-i+2}\right) + h \sum_{\mu=1}^{i-1} B_\mu^{k-i+\mu+1} + h \sum_{\mu=1}^{i-1} B_\mu^{k+i-\mu-1}, \tag{18}$$

а из (16) и (17) следуют

$$S_i = \frac{1}{2}\left[f^{2i} + f^0\right] + h^2 \sum_{p=1}^{i-1} \sum_{\mu=1}^{p} B_\mu^{1-\mu+2p}, \tag{19}$$

$$S_{i-2} = \frac{1}{2}\left[f^{2i-4} + f^0\right] + h^2 \sum_{p=1}^{i-3} \sum_{\mu=1}^{p} B_\mu^{1-\mu+2p}. \tag{20}$$

Следовательно,

$$\frac{S_i - S_{i-2}}{h} = \frac{1}{2h}\left(f^{2i} - f^{2i-4}\right) + h \sum_{\mu=1}^{i-1} B_\mu^{2i-\mu-1} + h \sum_{\mu=1}^{i-3} B_\mu^{2i-\mu-3}. \tag{21}$$

Введем следующие обозначения

$$F_i^k = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} f^{k+1} + f^{k-1} \\ \frac{1}{h}(f^{k+1} - f^{k+i-2} + f^{k-1} - f^{k-i+2}) \\ f^{2i} + f^0 \\ \frac{1}{h}(f^{2i} - f^{2i-4}) \end{pmatrix}, \tag{22}$$

$$\Phi_i^k = COLON\left(u_i^k, \frac{u_i^k - u_{i-2}^k}{h}, S_i, \frac{S_i - S_{i-2}}{h}\right), \tag{23}$$

и введем операторное выражение:

$$A[\Phi_p^k] = \begin{pmatrix} h\sum\limits_{\mu=1}^{p} B_\mu^{k-i-\mu+2p+1} \\ B_p^{k-i+p+1} + B_p^{k+i-\mu-1} \\ h\sum\limits_{\mu=1}^{p} B_\mu^{1-\mu+2p} \\ B_p^{2i-p-1} + B_{p-1}^{2i-p-2} \end{pmatrix} \tag{24}$$

Тогда из (16), (18), (19), (21), (24) следует система замкнутых разностных уравнений

$$\Phi_i^k = F_i^k + h\sum_{p=1}^{i-1} A[\Phi_p^k]. \tag{25}$$

Точно такое же можно получить и для $\tilde{\Phi}_i^k$: $\tilde{\Phi}_i^k = \tilde{F}_i^k + h\sum_{p=1}^{i-1} A[\tilde{\Phi}_p^k]$, где вместо u_i^k, S_i записываются $\tilde{u}_i^k, \tilde{S}_i$ с малой частью $O(h)$.

Из последней формулы и (25) имеем $|\Phi_i^k - \tilde{\Phi}_i^k|_C \le |F_i^k - \tilde{F}_i^k|_C + h|\sum_{p=1}^{i-1} A[\Phi_p^k - \tilde{\Phi}_p^k]|_C + O(h)$.

Введем обозначения $\Delta_i = max_(\Phi_i^k - \tilde{\Phi}_i^k)$, $\delta_i = max(\Phi_i^k - \tilde{\Phi}_i^k)$, $k = i \dots 2N - i$.

Используя дискретный аналог Гронуолла — Беллмана, имеем

$$\max_{0\le i\le N} \quad |\Delta_i|_C \le |\delta_i + O(h)|_C * exp\{h|A[\Delta_i]|_C\}.$$

Доказано утверждение теоремы.

Если S_i известна, то по формуле (9) находим C_i — решение обратной задачи (4)–(5), т.е. $C_i = 16S_i^4 C_0/r_0^4$. Переходя от новой переменной x к старой переменной x_3, по формуле $C(x) = \sqrt{\mu_0(x_3)/\rho_0(x_3)}$, находим и $\mu_i = C_i^2 \cdot \rho_i$, неизвестный коэффициент Ламэ обратной задачи (1)–(2).

Результаты. Доказана теорема о сходимости приближенного численного решения обратной задачи к точному решению обратной задачи. Методику решения задач можно провести для определения других коэффициентов обратной задачи.

Заключение.

Разработано конечно-разностное решение обратной задачи сейсмики с мгновенным и шнуровым источниками. Показана сходимость решения и получена оценка сходимости, построен алгоритм решения неизвестного коэффициента Ламэ.

Список литературы

[1] Кабанихин С.И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сибирское научное издательство. 2009г. — 457с.

[2] Партон В.З., Перлин П.И. Методы математической теории упругости. — М.: Наука, 1981г. — 688 с.

[3] Романов В.Г. Обратные задачи математической физики. — М.: Наука, 1984г. — 264 с.

[4] Сатыбаев А.Дж. Численное определение коэффициента Ламэ в уравнении сейсмики //История, культура и экономика, наука юга Кыргызстана. — Ош: КУУ, 2000. — С. 148–152.

[5] Тимошенко С.П., Гудьер Дж. Теории упругости. —М.: Наука, 1979г.

[6] Яхно В.Г. Обратные задачи для дифференциальных уравнений упругости. Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1990г. — 304 с.

Абдуганы Джунусович Сатыбаев — д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедры "ИТиУ"
Ошского технологического университета имени академика М.М. Адышева;
e-mail: abdu-satybaev@mail.ru;
Амангельди Арапбаевич Алимканов — аспирант, ст. преподаватель
Ошского технологического университета имени академика М.М. Адышева;
e-mail: dr.amangeldy78@mail.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА МИНИМИЗИРУЕМОГО ФУНКЦИОНАЛА НА ТОЧНОСТЬ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ИЗМЕРЕНИЙ

С. Н. Свиташева

Институт физики полупроводников СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 535.51;39

Создание современных наноструктур в физике полупроводников невозможно без целого ряда методов контроля. Одним из мощных оптических методов является эллипсометрия. Интерпретация результатов измерений состоит, в решении обратной задачи эллипсометрии, которая, как правило, является плохо обусловленной. Выбор минимизируемого функционала — ключевой фактор при ее численном решении. Знание точных значений толщины пленки и комплексного показателя преломления очень важно, потому что они определяют надежность работы устройства. В этой статье предлагается анализ влияния формы функционала, как критерия точности, на решение обратной задачи эллипсометрии, и рассматриваются трудности получения точных результатов.

Ключевые слова: обратная задача, эллипсометрия, оптические свойства, нано размерные пленки.

Введение

Эллипсометрические измерения являются косвенными, то есть, измеренные величины (эллипсометрические углы Ψ и Δ) не характеризуют непосредственно интересующие исследователя параметры объекта (показатели преломления, толщины слоев, наличие шероховатости и т. д.). Преимущество метода эллипсометрии перед другими оптическими методами состоит в том, что одновременно измеряются амплитуда и фаза электромагнитных волн, которые отражаются от поверхности пленок. Практические трудности появляются в случае сильно поглощающих пленок, например, металлов и некоторых полупроводников. Автор неоднократно обращал свои усилия на разработку новых подходов решения ОЗЭ — обратной задачи эллипсометрии [1, 2, 3, 4].

1 Этапы вычисления

Интерпретация результатов измерений начинается, прежде всего, с поиска аналитического решения, что возможно только в редких случаях. Численное решение состоит, как правило, из трех этапов. Сначала выбирается **физическая** модель объекта, описываемая некоторым набором $\mathbf{P} = P_1, P_2, ..., P_m$ параметров, часть которых может быть известна. На втором этапе выбирается **математическая** модель представления свойств исследуемой системы (диэлектрической проницаемости, например). На третьем этапе находится **набор** значений **параметров**, наилучшим образом соответствующий набору экспериментальных данных. Для реализации третьего этапа необходимо задать критерий (меру) точности описания экспериментальных величин данным набором параметров. Этим критерием является функция ошибок χ^2 или «целевая функция» (merit function, objective function or error function) выраженная, как правило, суммой квадратичных невязок (отклонений) между экспериментальными данными и рассчитанными согласно выбранным моделям. Таким образом, функция ошибок устанавливает точность соответствия между точкой (или набором точек) экспериментальных данных и точкой (или набором точек) в многомерном пространстве параметров. В идеальном случае для идеальной исследуемой системы ***функция ошибок*** χ^2 должна равняться нулю, что может быть реализовано только в машинном эксперименте и то, если не заданы «шумы измеренных» величин. С точки зрения математики в качестве функции ошибки может использоваться любая функция имеющая глобальный минимум только при точном совпадении модельных значений и экспериментальных данных.

2 Влияние выбора критерия точности

На практике выбор χ^2 влияет на результаты решения ОЭЭ. Это влияние оказывается двумя способами. *Во первых*, на скорость сходимости выбранной χ^2 и, следовательно, при одном и том же количестве итераций критерий останова будет соответствовать различным величинам χ^2, то есть различным значениям найденных параметров. *Второй способ* влияния выбора χ^2 состоит в следующем: кроме глобального минимума почти все функции ошибок могут иметь различное количество ***локальных минимумов***. Если критерий останова сработает при достижении локального минимума, то решение ОЭЭ будет не только неверным, но и весьма далеким от истины. До сих пор остается нерешенным вопрос: "Какую функцию ошибки следует использовать? И какая функция ошибок "лучше"?" На основе какого критерия следует выбирать (сравнивать) функцию ошибки? В случае ОЭЭ измеряемые углы Ψ и Δ характеризуют комплексную величину ρ — относительного коэффициента отражения. Для комплексных величин адекватным топологическим представлением является сфера Пуанкаре [Poincare H.], представляющая различные состояния поляризаций отражённого света: *лево-, право циркулярно поляризованный свет; и линейно поляризованный свет.* Кроме того на сфере Пуанкаре наглядно отображаются параметры эллипса (*азимут и эллиптичность*) *эллиптически поляризованного света; и связь параметров эллипса с параметрами Стокса, определяющими интенсивности различных компонент отраженного света и степень его деполяризации.* Полностью или частично поляризованный свет можно описать с помощью ***4-вектора Стокса S***, имеющего компоненты: S_0, S_1, S_2, S_3, и определяемого в Декартовых координатах для электромагнитной волны с компонентами $E_x e^{i\delta x}$ и $E_y e^{i\delta y}$, следующим образом [5]:

$$S = \begin{bmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{bmatrix}, \quad \begin{array}{c} S_0 = \langle E_x^2 \rangle + \langle E_y^2 \rangle = I_0, \\ S_1 = \langle E_x^2 \rangle - \langle E_y^2 \rangle = I_x - I_y, \\ S_2 = 2\langle E_x E_y \rangle \cos(\delta_x - \delta_y) = I_{\pi/4} - I_{-\pi/4}, \\ S_3 = 2\langle E_x E_y \rangle \sin(\delta_x - \delta_y) = I_r - I_l, \end{array} \quad \begin{array}{c} S_0^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2, \\ P = \sqrt{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2} \Big/ S_0, \\ \xi = \frac{1}{2}\arcsin S_3 \Big/ \sqrt{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2}, \\ \theta = \frac{1}{2} arctg \frac{S_2}{S_1}, \end{array} \tag{1}$$

где I — интенсивности световой волны, P — степень поляризации, ξ и θ — эллиптичность и азимут поляризованного света. Кроме того, с помощью 4×4 матрицы Мюллера можно определить степень *деполяризации* света. Если перейти к нормированному вектору Стокса $\mathbf{s}$, то любой поляризующий элемент изменит состояние поляризации, которое описывается новым вектором Стокса $\mathbf{s}'$, преобразованным умножением на матрицу Мюллера, состоящей из 16 элементов.

На вход измерительного прибора падает свет с круговой поляризацией (или циркулярно поляризованный), чтобы интенсивность прошедшего света не зависела от азимута собственной плоскости поляризатора. В нуль-эллипсометрах задается комбинация азимутов P и C чтобы получить такую эллиптическую поляризацию света, которая дает линейно поляризованный свет при отражении от *объекта*, и тогда может быть найден ортогональный азимут гашения анализатора. Следовательно, интенсивность на выходе нуль-эллипсометра равна нулю (в идеальном случае) или близка к нулю (для большинства измеряемых отражающих систем).

В ненулевых (фотометрических) эллипсометрических методах измерения интенсивность светового пучка на выходе эллипсометра определяется при нескольких комбинациях азимутов оптических элементов *поляризатора P, модулятора-компенсатора M, анализатора A*. Ненулевые методы широко используются при автоматизации измерений и мониторинге (с обратной связью) процессов изготовления стратифицированных структур для современных приборов и устройств. Уравнения (2–3) определяют *амплитудную* и *фазовую* передаточные функции (ATF и PhTF) измеряемой системы и содержат тригонометрические функции и функции Бесселя, что затрудняет аналитическое решение системы уравнений.

$$\begin{gathered} I(\lambda, t) = I\left[I_0 + I_s \sin\delta(t) + I_c \cos\delta(t)\right], \\ \begin{cases} I_0 = 1 - 2\cos 2\Psi \cos 2A + \cos 2(P-M)\cos 2M\,(\cos 2A - \cos 2\Psi) + \\ \qquad + \sin 2A \cos\Delta \cos 2(P-M)\sin 2\Psi \sin 2M, \\ I_s = \sin 2(P-M)\sin 2A \sin 2\Psi \sin\Delta, \\ I_c = \sin 2(P-M)\left[\sin 2M(\cos 2\Psi - \cos 2A) + \sin 2A \cos 2M \sin 2\Psi \cos\Delta\right]. \end{cases} \\ \delta(t) \simeq A\sin\omega t, \quad \begin{cases} \sin\delta(t) = 2J_1(A)\sin\omega t + 2J_3(A)\sin 3\omega t + ..., \\ \cos\delta(t) = J_0(A) + 2J_2(A)\cos 2\omega t + 2J_4(A)\cos 4\omega t + ... \end{cases} \end{gathered} \tag{2}$$

$\delta(t)$ — фазовый сдвиг, вносимый пьезоэлектрическим модулятором, а $J_n(A)$ — функции Бесселя n — порядка от A. Из уравнений, приведенных выше видно, что уравнения для интенсивности на выходе эллипсометра

сильно упрощаются, если $I_0 = 1$, $(P - M) = 45°$, $A = 45°$ и $M = 45°$(или $0°$).

$$\left\{\begin{array}{l} I_0 = 1,\ M = 0°, \\ I_s = \sin 2\Psi \sin\Delta, \\ I_c = \sin 2\Psi \cos\Delta. \end{array}\right. \qquad \left\{\begin{array}{l} I_0 = 1, M = 45°, \\ I_s = \sin 2\Psi \sin\Delta, \\ I_c = \cos 2\Psi. \end{array}\right. \tag{3}$$

Паре углов Ψ и Δ соответствует комплексное число $\rho = \tan(\Psi)\times\exp(j\Delta)$, которое отображается на сфере Пуанкаре точкой с координатами $(R, \theta, \varphi) = (1/2, \pi - 2\Psi, \Delta)$, что соответствует декартовым координатам, отсчитываемым от центра сферы: $(x, y, z) = R(\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta) = 1/2(\sin 2\Psi\sin\Delta,\ \sin 2\Psi\cos\Delta,\ -\cos 2\Psi)$. Расстояние на сфере Пуанкаре между двумя точками, соответствующим эллипсометрическим углам (Ψ_C, Δ_C) и (Ψ_E, Δ_E) $(x, y, z) = 1/2(\sin 2\Psi\sin\Delta,\ \sin 2\Psi\cos\Delta,\ -\cos 2\Psi)$.
Длина хорды r, соединяющая эти точки, равна:

$$\begin{array}{l} r^2 = (x_c - x_e)^2 + (y_c - y_e)^2 + (z_c - z_e)^2 = \\ = \dfrac{1}{4}\left\{\begin{array}{l} \sin 2\Psi_c^2 + \sin 2\Psi_e^2 + \cos 2\Psi_c^2 + \cos 2\Psi_e^2 - 2\cos 2\Psi_c \cos 2\Psi_e \\ -2\sin 2\Psi_c \sin 2\Psi_e \left[\cos\Delta_c\cos\Delta_e + \sin\Delta_c\sin\Delta_e\right] \end{array}\right\} = \\ = 1/2\left\{1 - \cos 2\Psi_c\cos 2\Psi_e - \sin 2\Psi_c\sin 2\Psi_e\cos(\Delta_c - \Delta_e)\right\}. \end{array} \tag{4}$$

Длина дуги R, соединяющая эти же точки, равна:

$$R = \frac{1}{2}\sqrt{4\left(\Psi_c - \Psi_e\right)^2 + 4\left(\Delta_c - \Delta_e\right)^2} = \sqrt{\left(\delta\Psi\right)^2 + \left(\delta\Delta\right)^2}. \tag{5}$$

Очевидно, что чем меньше длина дуги R, тем точнее найденное решение, отсюда и получаем наиболее распространенную форму χ^2 в виде суммы квадратичных отклонений.

И, наконец, третий подход заключается в выборе функция ошибки из *принципа максимального правдоподобия*. Суть его состоит в том, что в качестве искомого набора параметров следует выбрать такой, при котором полученные экспериментальные данные наиболее вероятны. Если ошибки измерений a_i независимы и подчиняются нормальному закону распределения со стандартными отклонениями σ_i, то

$$\chi^2 = \sum\left(\frac{a_{ei} - a_{ci}}{\sigma_i}\right)^2. \tag{6}$$

Таким образом, в случае нормального закона распределения ошибок измерений наиболее правдоподобным оказывается набор параметров, соответствующий минимальной сумме квадратов отклонений, нормированных на величину соответствующих дисперсий — σ_i^2. Очевидно, что значения дисперсий (точность измерений) и, следовательно, вероятность получения данного набора экспериментальных данных зависит, при прочих равных условиях, от метода измерения.

Отсюда следует форма фотометрической функция ошибки χ^2, выраженная через сумму среднеквадратичных отклонений I_s и I_c или их выражений через эллипсометрические углы Ψ и Δ ($\sin 2\Psi\sin\Delta$ и $\sin 2\Psi\cos\Delta$). Напомним, что все известные эллипсометрические методы измерений, так или иначе, основаны на измерении интенсивности света.

3 Используемые в эллипсометрии функции ошибки

Результаты анализа трудов международной конференций по спектральной эллипсометрии [6] приведены в Таблице, где даны примеры функционалов (функции ошибки), используемых различными авторами, и даны ссылки на работы, где они опубликованы. К сожалению, не существует универсальной формы функционала, пригодной для любого типа задач или хотя бы, определенного класса обратных задач эллипсометрии, поэтому в каждом конкретном случае форма функционала выбирается по усмотрению исследователя. Например, в ***Таблице*** приведены функционалы в виде квадрата ненормированного модуля разности комплексных относительных коэффициентов отражения ρ (1) и в виде нормированной разности комплексных относительных коэффициентов отражения ρ, где весовые коэффициенты определены экспериментально (2).

Таблица

	Функция ошибки	источник
1	$Error = 2\langle\lvert\Psi_M \exp(i\Delta_M) - \Psi_C \exp(i\Delta_C)\rvert\rangle$	Tomuo Yamaguchi et al.., p. 264–269
2	$\chi^2 = \frac{1}{N-M-1}\sum_i \left(\left[\frac{(\Psi_{mi}-\Psi_{ci})}{\sigma_{\Psi i}}\right]^2 + \left[\frac{(\Delta_{mi}-\Delta_{ci})}{\sigma_{\Delta i}}\right]^2\right)$	F. K. Urban III, David Barton, p. 119–123.
3	$MSE = \sqrt{\frac{1}{2N-M}\sum_{i-1}^{N}\left\{\begin{array}{l}\left[\tan(\psi_i^{mod}) - \tan(\psi_i^{\exp})\right]^2 \\ +\left[\cos\left(\Delta_i^{mod}\right) - \cos\left(\Delta_i^{\exp}\right)\right]^2\end{array}\right\}}$	Samuel A. Alterovitz, Blaine Johs., p. 124–127; P. Petric, et al., p. 259–263.
4	$MSE = \frac{1}{N}\sqrt{\sum_E\left(\left(\varepsilon_1^{meas} - \varepsilon_1^{fit}\right)^2 + \left(\varepsilon_2^{meas} - \varepsilon_2^{fit}\right)^2\right)}$	L. I. Kamlet, F. L. Terry Jr., p. 177–182.
5	$\xi_0^2 = \frac{1}{2N}\sum_{j=1}^{N}\left[\left(\frac{\Psi_j^{mod} - \Psi_j^{\exp}}{\sigma_{\psi,j}^{\exp}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta_j^{mod} - \Delta_j^{\exp}}{\sigma_{\Delta,j}^{\exp}}\right)^2\right]$	C. M. Herzingern et al., p. 281–285.
6	Err=$\langle\lvert\ \Psi_m \exp(i\Delta_m) - \Psi_c \exp(i\Delta_c)\ \rvert\rangle$	Z.-T. Jiang, et al., and L. Asinovsky, p. 298–302 .
7	$\delta = \sqrt{\frac{1}{N}\sum\left(\Delta_{cal} - \Delta_{\exp}\right)^2 + \left(\Psi_{cal} - \Psi_{\exp}\right)^2}$	Y. Z. Hu, C. Y. Zhao, W. X. Gao, E. A. Irene, p.416–419.

В строке 3 ***Таблицы*** представлена функция ошибок, для которой суммируются квадраты разностей tgΨ и cosΔ, что вообще говоря, соответствует суммированию квадратов разности сомножителей действительных и мнимых частей ρ: $\rho = \mathrm{tg}\,\Psi\cos\Delta + i\,\mathrm{tg}\,\Psi\sin\Delta$. В строке 4 ***Таблицы*** приведен функционал в виде суммы N квадратичных невязок комплексных частей диэлектрических функций, который наиболее часто и успешно используется при решении спектральных обратных задач эллипсометрии (ОЗЭ).

Как показала практика, чаще всего в качестве минимизируемого функционала используется сумма квадратичных невязок эллипсометрических углов Ψ и Δ. Как правило, используются нормированные невязки, с учетом точности регистрации эллипсометрических углов, и с разной формой усреднения (2, 5, 7), но иногда выбирается ненормированная сумма невязок (1, 6). Поэтому сравнивая величину минимума функционала как критерия успешности найденного решения, необходимо учитывать саму форму целевой функции. Основным недостатком χ^2, использующих угол Δ, является скачок функции невязок при переходе $0 \to 2\pi$, который был устранён автором в специальной программе. Рассмотрим несколько типов функционалов, полученных из уравнения интенсивности на выходе (2):

$$
\begin{array}{ll}
1.\ \chi^2 = \frac{1}{2k}\sum_1^{2k}\left|R_p\cos\Psi_e - R_s\sin\Psi_e\exp(j\Delta_e)\right|^2; & 5.\ \chi^2 = \frac{1}{2k}\sum_1^{2k}\left(\frac{\delta tg\Psi}{\sigma_{tg\Psi}}\right)^2 + \left(\frac{\delta\cos\Delta}{\sigma_{\cos\Delta}}\right)^2, \\
2.\ \chi^2 = \frac{1}{2k}\sum_1^{2k}\left(\frac{\delta Re\rho}{\sigma_{Re\rho}}\right)^2 + \left(\frac{\delta Im\rho}{\sigma_{Im\rho}}\right)^2; & \quad \sigma_{tg\Psi} = \sigma_{\cos\Delta} = 0.1; \\
\quad \sigma_{Re\rho} = \sigma_{Im\rho} = 0.1 & 6.\ \chi^2 = \frac{1}{2k}\sum_1^{2k}\left(\frac{\delta Re\varepsilon}{\sigma_{Re\varepsilon}}\right)^2 + \left(\frac{\delta Im\varepsilon}{\sigma_{Im\varepsilon}}\right)^2, \\
3.\ \chi^2 = \frac{1}{2k}\sum_1^{2k}\left(\frac{\delta I_s}{\sigma_{I_s}}\right)^2 + \left(\frac{\delta I_c}{\sigma_{I_c}}\right)^2, \sigma_{I_s} = \sigma_{I_c} = 0.03, & \quad \sigma_{Re\varepsilon} = \sigma_{Im\varepsilon} = 0.7; \\
\quad I_s = \sin 2\Psi\sin\Delta, I_c = \sin 2\Psi\cos\Delta; & 7.\ \chi^2 = \frac{1}{2k}\sum_1^{2k}\left(\frac{\delta\left(\Psi\cos\Delta\right)}{\sigma_{\Psi\cos\Delta}}\right)^2 + \left(\frac{\delta\left(\Psi\sin\Delta\right)}{\sigma_{\Psi\sin\Delta}}\right)^2, \\
4.\ \chi^2 = \frac{1}{2k}\sum_1^{2k}\left(\frac{\delta\Psi}{\sigma_\Psi}\right)^2 + \left(\frac{\delta\Delta}{\sigma_\Delta}\right)^2, 2\sigma_\Psi = \sigma_\Delta = 0.1; & \quad \sigma_{\Psi\cos\Delta} = \sigma_{\Psi\sin\Delta} = 1.
\end{array}
\qquad (7)
$$

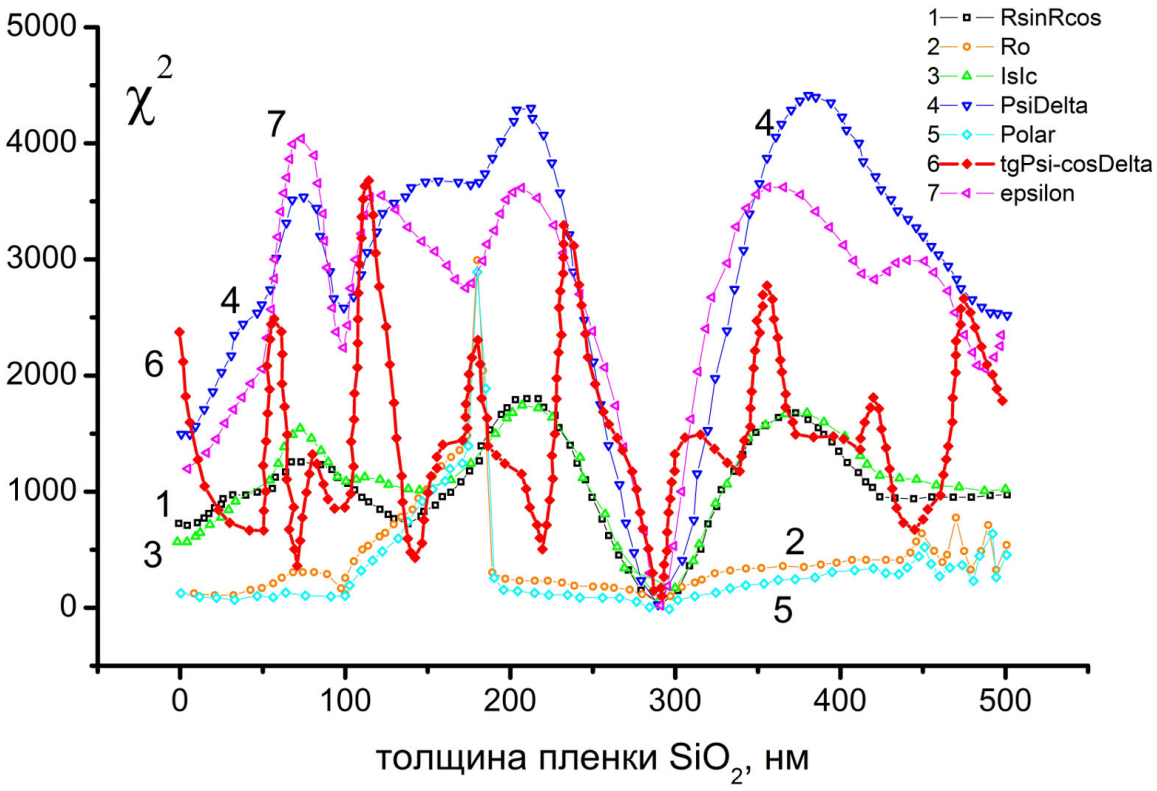


Рис. 1: Количество локальных минимумов для каждого из приведенных выше функционалов при решении простейшей задачи поиска двух параметров.

4 Обзор методов решения обратной задачи эллипсометрии (ОЗЭ)

4.1 Метод номограмм

Номограммный метод был предложен Арчером [9] в 1962 году и улучшен Саксеной [10] через три года и на протяжении многих лет он был единственным методом решения ОЗЭ для интерпретации эллипсометрических измерений и состоял в отображении на комплексной плоскости эллипсометрических углов (Ψ и Δ) двух семейств линий - линий равной толщины пленки вместе с линиями равных комплексных коэффициентов преломления.

4.2 Компьютерные методы решения ОЗЭ

Прежде всего, это очень полезно прочесть §4.5 под названием "Numerical inversion of the exact equation of reflection ellipsometry" в книге R.M.A. Azzam and N.M. Bashara [5], где авторами были рассмотрены некоторые аспекты решения ОЗЭ. Например, анализируются случаи аналитического решения, выбор функции ошибки (Er), скорость сходимости при минимизации Er, выбор углов падения и в дополнение, влияние экспериментальной ошибки. Совершенно ясно, что не существует единого способа решения, и каждая задача требует конкретных подходов.

4.3 Поиск двух параметров

Решение для поиска двух параметров (для прозрачных пленок) является простейшим случаем, однако, надо помнить, что существует возможность решений, сильно зависящих от объёма симплекса и стартовой точки поиска в нём. Например, при анализе нано структур, содержащих двойной диэлектрик, в ОНО-структурах для флэш-памяти, т.е. переход к задаче поиска четырех параметров [4, 7]. В этом случае точность может

быть увеличена в несколько раз с помощью статистической обработки результатов ОЭЭ, полученных заданием стартовых точек генератором случайных чисел и последовательным уменьшением объёма симплекса [8]. Более того, необходим анализ чисто математических проблем, связанных с обусловленностью, однозначностью и взаимной зависимостью найденных решений ОЭЭ [2, 7].

4.4 Поиск трех параметров

Ранее в [1] был разработан метод поиска множества точных решений с использованием одной пары эллипсометрических углов, где для устранения неоднозначности дополнительные измерения должны быть выполнены. Решение можно получить в виде пространственной (трёхмерной: n-k-d) спирали, каждая точка которой соответствует точному решению эллипсометрического уравнения. Точка пересечения двух трехмерных спиралей дает единственное решение. Таким образом, карта параметров пленки (толщина, коэффициенты преломления и поглощения) была создана для пленки теллурида ртути HgTe. Кроме того, был проведен анализ общей неоднозначности ОЭЭ и выявлено существование нескольких семейств решений ОЭЭ [3]. Все выше упомянутые рассуждения касаются измерений на одной длины волны.

4.5 ОЭЭ спектральной эллипсометрии

Спектральная эллипсометрия требует моделирования и иногда разделения задачи на две или несколько подзадач, так что две части спектра -области прозрачности и области сильного поглощения - могут быть использованы для успешного решения ОЭЭ, например, как работах [8, 11]. Задание адекватной модели структуры пленки обеспечивает надежность результата ОЭЭ-решения. Модель должна принимать во внимание, что свойства пленки отличается от объемных свойств материала. Полезно использовать осцилляторную модель Лоренца для описания диэлектрической проницаемости каждой пленки, чтобы получить однозначное соответствие по всему спектру экспериментальных данных и вычисленных согласно математической модели, с помощью метода наименьших квадратов (например, Левенберга — Марквардта алгоритм). Минимизация функционала в этом случае выполняется только для нескольких коэффициентов формулы Лоренца, при подгонке спектра, содержащего более трех сот комплексных чисел.

Выводы

Математическое моделирование полупроводниковых структур, решение обратных задач численными методами и изучение проблем, связанных с точностью полученных характеристик нано размерных пленок, являются важными вопросами прикладной математики. Измерения оптических констант, их дисперсии и толщины металлических пленок являются жизненно важными, наряду с вопросами технологии и математического описания и моделирования. Для требуемой функциональности устройства требуется точное знание всех свойств пленок.

Список литературы

[1] S.N. Svitasheva, The exact solution of inverse equation of reflection ellipsometry problem for the absorbing films, DAN SSSR, vol. 318, No. 5 (1991) 1154–1158.

[2] S.N. Svitasheva, Some Aspects of Solution the Inverse Ellipsometric Problem for Strongly Absorbing Films, Optoelect., Instrum. &Data Process., No. 4 (1996) 108–114.

[3] V.G. Polovinkin, S.N. Svitasheva, The analysis of general ambiguity inverse ellipsometric problem, Thin Solid Films, 313–314 (1998) 128–131.

[4] V.A. Gritsenko, Svitasheva, I.P. Petrenko. S.N. and H. Wong, J.B. Hu, and I.H. Wilson, Study of Excess Silicon at Si_3N_4/Thermal SiO_2 Interface Using EELS and Ellipsometric measurements, Journal of Electrochemical Society, 146, No. 2, (1999) 780–785.

[5] R.M.A. Azzam and N.M. Bashara, Ellipsometry and polarized light, second ed., North-Holland, 1979.

[6] Thin Solid Films, 313–314 (1998) — Proceedings of the Second International Conference on Spectroscopic Ellipsometry, USA, 1997.

[7] Svetlana Svitasheva, Modeling Methods of Optical Inhomogeneous Structures. Application of Ellipsometry, book, Lambert Academic Publishing, 2013.

[8] S.N. Svitasheva, and K.S. Zhuravlev, Dependences of the Optical Characteristics of $Al_xGa_{1-x}N$ Films on the Substrate Composition and Polarity, Optoelect., Instrum. &Data Process., 47, No. 8 (2011) 488–489.

[9] R.J. Archer, Determination of the properties of films on Silicon by the method of ellipsometry, J. Opt. Soc. Am., 52, No. 9 (1962) 970.

[10] N. Saxena, Changes in the phase and amplitude of polarized light reflected from a film-covered surface and their relations with thickness, J. Opt. Soc. Am., 12, No. 2, (1965) 226.

[11] S.N. Svitasheva Optical Constants of MBE n-type GaAs Films doped by Si or Te, JEMAA, Vol. 2, No. 6, (2010) 357–361 DOI: 10.4236/jemaa.2010.26046.

Свиташева Светлана Николаевна — д.ф.-м.н., с.н.с., Институт физики полупроводников, СО РАН;
e-mail: Svitasheva@isp.nsc.ru.
Дата поступления — 24 мая 2017 г.

МЕТОД СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ В МОДЕЛИРОВАНИИ СУБДИФФУЗИИ

В. А. Селезнев, Л. В. Пехтерева, Е. В. Исаева

Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск

УДК 62-83: 531.3

Для CTRW-модели процесса субдиффузии выведено уравнение динамики концентрации для двух шаблонов окрестности локального перемещения частиц — с 4(6) и 12 узлами. Разработаны численные методы решения этого уравнения и реализация стохастического метода случайных блужданий частиц. Доказана сходимость функции концентрации, полученной стохастическим методом, к решению уравнения динамики концентрации, и определено, что стохастический метод эффективнее численного решения уравнения динамики концентрации. Показано, что изменение геометрии шаблона, соответствующее физической реализации процесса, не сильно сказывается в реализации стохастического метода, в то время как уравнение субдиффузии и алгоритм его решения требуется строить заново. Предложенные методы моделирования субдиффузии применяются для решения одного класса уравнений с дробной производной по времени.

Ключевые слова: субдиффузия, CTRW-модель, метод Монте–Карло, численные методы, имитационные модели аномальной кинетики, дробная производная.

Введение

Процессы переноса на множествах евклидова пространства дробной размерности $d > 1$ с самоподобной структурой обладают тем свойством, что средний квадрат перемещения нелинейно зависит от времени t при $t \gg 0$:

$$\left\langle x^2 \right\rangle \sim Dt^a, \quad a = 1/d, \quad \text{при } a < 1 \tag{1}$$

Процессы, характеризующиеся свойством (1), относятся к классу субдиффузионных процессов. Для них уравнение диффузии представляется различными способами, в зависимости от физической реализации, для которой строится имитационная модель (уравнение классической диффузии, основанное на законе Фика, имеет стандартную форму). Подробное изложение моделей неклассической диффузии можно найти, например, в [5–8].

Авторами данной работы построены и численно реализованы модели субдиффузии, основанные на CTRW-модели, [1–4]. Блуждание диффундирующих частиц в поровом пространстве дробной сеточной размерности моделируется блужданием с задержками по узлам решетки с шагом h в евклидовом пространстве. Нами рассмотрены 2 шаблона окрестности локального перемещения частиц в CTRW-модели — с 4(6) и 12 узлами. Для этих шаблонов построены уравнения субдиффузии и разработаны численные схемы их решения. Также реализован метод прямого стохастического моделирования, имитирующий субдиффузионный процесс.

Нами доказана сходимость функции концентрации, полученной стохастическим методом, к решению уравнения динамики концентрации (функции плотности вероятности оказаться в момент t в точке x). Анализ построенных методов показывает, что метод Монте–Карло более эффективен, нежели метод численного решения уравнения: при заданной требуемой точности решения время вычислений на порядки ниже. Более того, его несомненное преимущество заключается в том, что при моделировании различных физических процессов изменение шаблона локальных перемещений приводит к изменению уравнения субдиффузии, и требуется заново строить алгоритм его решения, а в реализации стохастического метода это изменение сказывается не столь сильно.

1 Уравнение субдиффузии в CTRW-модели и его численное решение

Выведем уравнение, определяющее функцию концентрации $m(x,t)$ блуждающих частиц в точке пространства x в момент времени t. Так как субдиффузия — это замедленный по сравнению с классической диффузией процесс, и частицы не совершают больших скачков, то будем считать, что частицы имеют локализованный носитель. Тогда блуждание диффундирующих частиц в поровом пространстве дробной размерности можно моделировать блужданием с задержками по узлам евклидовой решетки с шагом h, причем заданы начальное распределение частиц $m(x,0) = m_0(x)$; функция источника $g(x,t)$; функция $f(t)$ плотности вероятности задержки частицы на время t.

Рассмотрим два шаблона окрестности локального перемещения частиц на плоскости — с 4 и 12 узлами. Сначала предположим, что на каждом шаге частица может перемещаться равновероятно в один из соседних узлов решетки (на плоскости 4 соседних узла, в пространстве — 6). Тогда время задержки t представляется случайной величиной с функцией плотности вероятности $f(t)$ вида:

$$f(t) = \frac{\alpha A}{(A^{1/\alpha} + t)^{\alpha+1}}, \qquad A = \frac{h^2 \sin(\alpha\pi)}{D_\alpha \alpha\pi}, \qquad 0 < \alpha < 1, \tag{2}$$

где $\alpha = 1/d$ — показатель аномальности, D_α — коэффициент диффузии. Представление (2) получено авторами, [1], исходя из требования того, что при больших значениях t функция концентрации удовлетворяет общему уравнению CTRW-модели, [5], со свойством (1). В этом случае уравнение субдиффузии принимает вид, [1]:

$$m(x,t) = \frac{1}{2n} \int_0^t \sum_{i=1}^{n} (m(x - e_i h, t - t') + m(x + e_i h, t - t'))f(t')dt' + \int_0^t g(x, t - t')F(t')dt' + m_0(x)F(t), \tag{3}$$

где n — размерность пространства ($n = 1, 2, 3$), e_i — координатные орты, $F(t)$ — вероятность задержки частицы на время, не меньшее t.

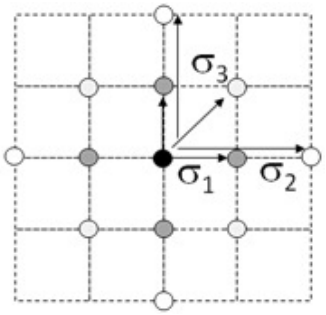


Рис. 1: Шаблон, задающий локальные перемещения частиц в R^2.

Для того чтобы задать локальное распределение концентрации более точно, рассмотрим 12-узловой шаблон на плоскости, изображенный на рис. 1. Вероятности перемещения в соседние, диагональные и дальние узлы зададим вероятностями σ_1, σ_2 и σ_3, причем $\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 = 1$. В этом случае, потребовав выполнение свойства (1), в работе [3] мы получили представление времени задержки t случайной величиной с функцией плотности вероятности $f(t)$ вида:

$$f(t) = \frac{\alpha A}{(A^{1/\alpha} + t)^{\alpha+1}}, \qquad A = \frac{h^2(2 - \sigma_1 + 2\sigma_2)\sin(\alpha\pi)}{D_\alpha \alpha\pi}, \qquad 0 < \alpha < 1, \tag{4}$$

И уравнение субдиффузии имеет вид, [3]:

$$m(x,t)=\int_0^t\Big(\sigma_1\sum_{i=1}^{2}\big(m(x-e_ih,t-t')+m(x+e_ih,t-t')\big)+\sigma_2\sum_{i=1}^{2}\big(m(x-2e_ih,t-t')+m(x+2e_ih,t-t')\big)+$$
$$+\sigma_3\big(m(x-(e_1+e_2)h,t-t')+m(x+(e_1+e_2)h,t-t')+m(x+(e_1+e_2)h,t-t')+m(x+(e_1+e_2)h,t-t')\big)\Big)f(t')dt'+$$
$$+\int_0^t g(x,t-t')F(t')dt'+m_0(x)F(t),\quad(5)$$

где n — размерность пространства ($n=1,2,3$), e_i — координатные орты.

Для моделирования субдиффузии нами построены численные схемы для решения уравнений (3) и (5), [1,5]. Для найденной сеточной функции $m_h(x,t)$: $|m_h(x,t)-m(x,t)|\sim C\tau^2$, где τ — шаг сетки по времени, C — константа, а порядок сложности вычислительного алгоритма составляет $O\Big(\frac{T^2L}{2\tau^2}\Big)$, где L — количество узлов решетки, T — заданное время.

Время вычислений при усложнении шаблона растет. В таблице 1 приведено время вычисления сеточной функции $m_h(x,t)$ на 4-шаблоне и 12-шаблоне (на компьютере с частотой процессора 1,66Ггц) на решетке с шагом $h=0,01$ для $T=100$, при $\tau=0,01$.

Время T	**50**	**100**	**500**	**1000**
4 узла, $a=0,5$	1:53	6:45	162:11	647:22
12 узлов, $a=0,5$				
4 узла, $a=0,8$	0:15	0:33	16:51	55:46
12 узлов, $a=0,8$				

Таблица 1: Время вычисления решения уравнения субдиффузии для разных значений T (мин:сек).

Рост времени вычисления в зависимости от T, указанный в таблице 1, экспериментально подтверждает оценки сложности алгоритмов, приведенные выше.

Шаблон 12 узлов подходит для широкого круга задач (вариации параметров σ_1, σ_2, σ_3 более точно задают локальное распределение концентрации, учитывается возможность перемещения в любую сторону), но его обобщение на трехмерный случай приводит к труднореализуемым численным схемам, сложность вычислительного алгоритма возрастает до $O\Big(\frac{T^3L}{2\tau^3}\Big)$. Далее, при необходимости изменения шаблона мы сталкиваемся с тем, что численные схемы значительно меняются, и каждый новый шаблон требует создания нового вычислительного алгоритма и аналитического подтверждения порядка сходимости и аппроксимации. Указанные сложности привели нас к поиску более эффективного способа моделирования субдиффузии.

2 Метод прямого стохастического моделирования

Прямая стохастическая имитационная модель субдиффузии строится как реализация блуждания частиц на равномерной решетке в R^n с заданной функцией плотности вероятности задержки частиц (2) или (3) для рассмотренных нами шаблонов. В соответствии с условиями CTRW-модели, в каждый момент времени частицы находятся в узлах равномерной решетки с шагом h в R^n ($n=1,2,3$). Распределение частиц по узлам x задается сеточной функцией концентрации $m_h(x,t)$ — количество частиц, заключенных в элементе объема множества в заданном узле x в момент времени t, отнесенное к общему количеству частиц.

1. В соответствии с начальной концентрацией $m(x,0)$ распределяем K частиц по узлам решетки (оценка числа K в зависимости от требуемой точности моделирования будет приведена далее). Количество частиц в узле x в начальный момент времени $t=0$ обозначим $k(x,0)=Sm_0(x)$, где
   $S=\dfrac{K}{\sum_{\text{по всем узлам s}} m_0(s)}$ — количество частиц, представляющее единицу массы.
2. Каждая частица задерживается в узле на некоторое случайное время τ, определенное плотностью вероятности $f(t)$, после чего совершает мгновенное перемещение в один из соседних узлов решетки,

разрешенных шаблоном (на шаблоне 4 узла — равновероятно в один из соседних узлов, на шаблоне 12 узлов — с заданными вероятностями σ_1, σ_2 и σ_3). Способ моделирования задержки τ частиц в узлах подробно описан в [1, 3].

3. В соответствии с функцией источника $g(x,t)$ в процесс блуждания постоянно включаются новые частицы. В момент времени t общее количество частиц определяется по формуле:

$$K(t) = K + S\int_{R^n} dx \int_0^t g(x,t^{'})dt^{'}$$

4. По истечении времени T подсчитывается итоговое количество частиц в каждом узле и приближенно восстанавливается функция:

$$m_h(x,t) = \frac{k(x,T)}{S}$$

Нами доказано, что функция $m_h(x,t)$, полученная в результате стохастической реализации блуждания частиц, сходится по вероятности к решению $m(x,t)$ уравнения субдиффузии. Получена вероятностная оценка требуемого для стохастического моделирования количества частиц в зависимости от требуемой точности отклонения стохастической реализации от решения уравнения субдиффузии:

$$P(max_x\,|m(x,t) - m_h(x,t)| < \varepsilon) = P_0, \quad \text{при } S \geq \left(\frac{1}{2\varepsilon}\Phi^{-1}\Big(\frac{1-P_0}{2}\Big)\right)^2 \tag{6}$$

где Φ — функция Лапласа.

В следующей части мы приведем анализ результатов численного моделирования.

3 Сравнение метода прямого стохастического моделирования и численного решения уравнения субдиффузии

Сравним результаты моделирования с теоретическими оценками. Обозначим $m_h(x,t)$ — функция концентрации, полученная методом численного решения уравнения, а $m_{st}(x,t)$ — полученная стохастическим методом. Мы вычислили и сравнили эти функции, задав одинаковую точность для обоих методов. Наши теоретические оценки погрешностей подтвердились, т.е. отклонение решения, полученного стохастическим методом, от численного решения уравнения не превышает погрешности, с которой численное решение приближает решение уравнения, и, следовательно, стохастическое решение должно иметь ту же погрешность, что и численное решение уравнения, при соблюдения условия (6).

Численные результаты показали, что, несмотря на нерегулярность функции разности $|m_h(x,T) - m_{st}(x,T)|$, построенной на плоскости для шаблонов 4 и 12 узлов, точность моделирования укладывается в теоретически определяемые рамки. Например, для шаблона 12 узлов при $T = 100$, $a = 0,5$, $\tau = 0,05$, $\sigma_1 = 0,5$, $\sigma_2 = 0,3$, $\sigma_3 = 0,2$, отклонение функций составляет $\varepsilon \sim \tau^2 = 0,0025$. Оценки отклонений в R^3 для функции разности $|m_h(x,T) - m_{st}(x,T)|$, проведенные для всей функции и выборочно на некоторых сечениях вертикальными плоскостями (локальный шаблон из 6 узлов, уравнение (3)), показали, что максимальное абсолютное отклонение также имеет порядок $\varepsilon \sim \tau^2$, среднеквадратическое отклонение несколько меньше. Поведение точности моделирования в R^2 с ростом времени T при $\tau = 0,05$ показано в таблице 2: $\varepsilon \sim \tau^2 = 0,0025$ (локальный шаблон из 4 узлов, уравнение (3)).

T	**10**	**50**	**100**	**500**
среднеквадратичное значение отклонения по всей области	0,00152	0,00167	0,00173	0,00164
максимальное абсолютное отклонение	0,00188	0,00205	0,00276	0,0030

Таблица 2: Экспериментально полученные значения точности моделирования при заданной точности $\varepsilon = \tau^2 = 0,0025$, $a = 0,5$.

Далее, сравним время, затраченное на моделирование субдиффузии методом численного интегрирования и прямого стохастического моделирования. Исходя из (6) и оценки сложности численного интегрирования, получаем:

$$r = \frac{t_{\text{сет}}}{t_{\text{стох}}} = \frac{2h^2 L(T^2 + T\varepsilon)}{M(T)T^\alpha}\left(\Phi^{-1}\Big(\frac{1-P_0}{2}\Big)\right)^2 \tag{7}$$

Зададим параметры: $\varepsilon = 0,01$, $h = 0,01$, $P_0 = 0,999$, $L = 10^4$. В табл. 3. приведено теоретически определенное в соответствии с (7) отношение времени моделирования обоими методами, а в табл. 4 — экспериментально полученное отношение. Из полученных результатов видно, что метод блуждания частиц является более эффективным.

T	**10**	**50**	**100**	**500**	**1000**
$\alpha = 0,3$	0,174	2,15	7,2	311,892	1264,144
$\alpha = 0,5$	0,1264	1,41	4	44,721	126,491
$\alpha = 0,8$	0,063	0,433	1,004	6,931	15,924

Таблица 3: Отношение времени моделирования $\dfrac{t_{\text{сет}}}{t_{\text{стох}}}$, вычисленное по (7)

T	**10**	**50**	**100**	**500**	**1000**
$\alpha = 0,3$	0,15	1,88	6,31	256,84	1004,21
$\alpha = 0,5$	0,092	1,00	3,74	35,10	110,10
$\alpha = 0,8$	0,051	1,00	1,01	4,95	13,03

Таблица 4: Отношение времени моделирования $\dfrac{t_{\text{сет}}}{t_{\text{стох}}}$, полученное практически для вычисления по шаблону 4 узла в R^2.

4 Применение численных методов для решения одного класса уравнений с дробной производной

В работе [4] доказано, что решения уравнений субдиффузии в R^n аппроксимируют с точностью $O(h^2)$ решения дифференциальных уравнений с дробной производной по t. Эти уравнения выводятся из (3) и (5) при $h \to 0$. Обозначим $\dfrac{\partial^a}{\partial t^a}$ — оператор дробного дифференцирования Римана-Лиувилля. Уравнение (5) аппроксимирует начальную задачу:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^\alpha m(\bar{x},t)}{\partial t^\alpha} = \dfrac{D}{2(2-\sigma_1+2\sigma_2)}\Lambda m(\bar{x},t) + Q(\bar{x},t); \\ I_{0+}^{1-\alpha} m(\bar{x},t)\big|_{t=0} = m_{1-\alpha}(\bar{x}); \end{cases} \tag{8}$$

где $Q(\bar{x},t)$ определяется через обратное преобразование Фурье по $\bar{x}$ и Лапласа по t от функции:

$$\tilde{Q}(\bar{u},s) = \tilde{G}(\bar{u},s)\tilde{F}(s)\tilde{C}_1(\bar{u},s) - \tilde{m}_1 - \alpha(\bar{u})$$

а функция $G(\bar{x},t) = m_0(\bar{x})\delta(t) + g(\bar{x},t)$ и $\tilde{C}_1(\bar{u},s) = \dfrac{s^\alpha + C\sum\limits_{i=1}^{n} u_i^2}{1 - \tilde{f}(s)\tilde{\lambda}(\bar{u})}$.

Уравнение (3) аппроксимирует задачу (8) при $\sigma_2 = \sigma_3 = 0$ и $\sigma_1 = 1$. Следовательно, построенное нами решение уравнений (3), (5) аппроксимирует решение уравнения (8) с точностью $O(h^2+\tau^2)$, а стохастическое решение уравнений (3), (5), аппроксимирует решение (8) с точностью $O(h^2)$.

Проведенная нами верификация метода Монте–Карло с численным решением привела к тому, что мы фактически нашли способ решения, не связанный с подробной обработкой шаблона. Информация о геометрии шаблона требуется только на первом этапе вычислений, при определении функции задержек. Далее можно использовать стохастический метод, как более простой.

Заключение

Для решения начальной задачи для уравнения с дробной производной с правой частью вида (8) мы предложили 2 метода, основанные на приближении этого уравнения интегроразностными уравнениями субдиффузии (3) и (5). Первый метод состоит в численном решении уравнений, второй — прямое стохастическое моделирование (метод Монте–Карло), подразумевающее моделирование при помощи ансамбля частиц и основанное на тех же гипотезах, из которых выводится уравнение субдиффузии.

Получены оценки аппроксимации и сходимости приближенных функций концентрации, полученных нашими методами, к решению уравнения субдиффузии.

Построенные численные решения уравнений (3) и (5) также использованы нами для верификации стохастического метода. Мы доказали, что функция концентрации может быть определена стохастическим методом с той же точностью, что и численное решение уравнения, но с большим преимуществом во времени моделирования. Погрешность вычислений распределяется неравномерно, но укладывается в заданные рамки.

Нами проверено, как стохастический метод работает на разных шаблонах. Изменение геометрии шаблона влечет необходимость переписывать весь алгоритм, а в методе МК это изменение сказывается не столь принципиально (появляются несколько дополнительных ветвей в цикле). Следовательно, мы нашли более простой метод вычисления, не связанный с подробной обработкой шаблона.

Список литературы

[1] Пехтерева Л. В. Селезнев В.А. О численной реализации интегрального уравнения CTRW-модели субдиффузии // Доклады АН ВШ РФ. — 2008. — №2(11). — С. 46–58.

[2] Пехтерева Л. В., Селезнев В. А., Исаева Е. В. Моделирование субдиффузии асимптотически эквивалентными CTRW-процессами. // Научный вестник НГТУ, 2013, № 3(52), С. 119–124.

[3] Е. В. Исаева, В. А. Селезнев. О численном методе решения интегрального уравнения субдиффузии в двумерном случае // Доклады АН ВШ РФ. — 2012. — №1(18). — С. 28–36.

[4] Пехтерева Л. В., Селезнев В. А. О методе Монте–Карло для уравнения субдиффузионного процесса с дробной производной по времени. // Сборник научных трудов Sworld, 2015, Т. 21, вып. 1, С. 70–78.

[5] Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach.// Phys. Rep. — 2000. — Vol.339. — p. 1–77.

[6] Учайкин В. В. Автомодельная аномальная диффузия и устойчивые законы. //Успехи физических наук, — 2003, — Т. 173, — №8, — С. 847–876.

[7] Р. Т. Сибатов, В. В. Учайкин. Дробно-дифференциальный подход к описанию дисперсионного переноса в полупроводниках.// Успехи физических наук, — 2009, — т. 179, №10, С.1079–1104.

[8] Заславский Г. М. Гамильтонов хаос и фрактальная динамика. — М.: Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2010.

Селезнев Вадим Александрович — проф. д.ф.-м.н., зав. каф. ИМ
Новосибирского государственного технического университета;
e-mail: selvad@ngs.ru
Пехтерева Лина Вадимовна — к.т.н.,ст. преподаватель каф. ВМ
Новосибирского государственного технического университета;
e-mail: lia8@ngs.ru
Исаева Елена Валерьевна — ст. преподаватель каф. ВМ
Новосибирского государственного технического университета;
e-mail: elena_is@ngs.ru
Дата поступления — 23 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ДИАГНОСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ p53-ЗАВИСИМЫХ МИКРОРНК

С. Д. Сенотрусова[1,2], О. Ф. Воропаева[1]

[1] *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519-6; 51-76

Разработаны математические модели динамики сети онкомаркеров p53-Mdm2-miRNA, в которой микроРНК имеют прямую положительную связь с белком p53. Выполнено численное исследование функционирования микроРНК в нормальных условиях и в условиях, когда p53 и его ингибитор Mdm2 проявляют критические для состояния пациента свойства и могут быть определены как диагностические маркеры онкологических и нейродегенеративных заболеваний. Адекватность математических моделей и результатов численного анализа подтверждается согласием с известными данными клинических и лабораторных исследований. Изучены варианты дерегуляции микроРНК. Показано, что нарушение связи в сети p53-miRNA оказывает существенное влияние на диагностические свойства микроРНК.

Ключевые слова: численное моделирование, уравнение с запаздыванием, онкомаркер, микроРНК, p53.

Введение

Белок p53 участвует в обеспечении адекватного ответа живого организма на накопление повреждений ДНК, в том числе в запуске программы апоптоза — вида клеточной смерти. Белок Mdm2 является одним из ключевых отрицательных регуляторов p53. Чрезмерное накопление или гиперактивация p53 могут вызывать массовую гибель клеток, а подавление функции p53 повышает риск развития опухолевых процессов. Это позволяет использовать p53 и Mdm2 в качестве биомаркеров онкологических заболеваний [1]–[3]. Известно также, что p53 регулирует целый класс микроРНК (miRNA или miR), которые характеризуются как важнейшие посредники p53 в подавлении опухолей [4]. Например, для семейств микроРНК miR-34 и miR-15/16, miR-145 и miR-107 определено множество целей, выполняющих, как и p53, антипролиферативные (а, значит, и противораковые) функции [5]. Одновременно мишени этих же микроРНК могут быть и регуляторами процессов, связанных с болезнью Альцгеймера, Паркинсона и другими дегенеративными заболеваниями. Более детально медико-биологические аспекты функционирования сети p53-Mdm2-miRNA обсуждаются в [4, 5] и цитируемой там литературе. Отметим, что микроРНК — это класс соединений, которые являются относительно новыми модуляторами экспрессии генов и занимают особое место среди онкомаркеров. МикроРНК стабильны в биологических жидкостях, могут быть измерены относительно просто (в сравнении с методикой определения уровней экспрессии генов) и задолго до возникновения патологического состояния. Исследования микроРНК как маркеров различных форм рака считаются одним из наиболее перспективных направлений биомедицины.

В настоящей работе принят достаточно общий подход, в рамках которого основное внимание направлено на изучение диагностического потенциала микроРНК конкретного типа — с прямой положительной связью микроРНК с p53, когда обратное воздействие микроРНК на p53 и Mdm2 с достаточной степенью достоверности может быть оценено как малосущественное. Разработаны две математические модели и выполнен комплекс численных экспериментов, демонстрирующих их адекватность как инструмента анализа свойств p53-зависимых микроРНК данного типа. В рамках принятых моделей даны основанные на результатах численного анализа оценки надежности микроРНК как факторов диагностики.

Исследование выполнено при поддержке гранта ведущих научных школ НШ-7214.2016.9.

1 Постановка задачи

1.1 Математическая модель сети p53-Mdm2-miRNA

При численном исследовании динамики p53-зависимых микроРНК в качестве базовой математической модели используется хорошо изученная модель сети p53—Mdm2 [6]–[10]. Согласно принятой модели связи микроРНК с p53, уравнение динамики микроРНК играет пассивную роль по отношению к системе уравнений, составляющих базовую модель. Таким образом, математическая модель сети p53-Mdm2-miRNA, учитывающая прямую положительную связь микроРНК с p53, представляет собой следующую нелинейную систему уравнений с запаздывающими аргументами:

$$\frac{dy_1}{dt} = a_1 - a_2 f(y_1(t), y_2(t), k_f) - a_3 y_1(t), \tag{1}$$

$$\frac{dy_2}{dt} = b_1 g(y_1(t-\tau_1), y_2(t-\tau_1)) - b_2 y_2(t), \tag{2}$$

$$\frac{dy_3}{dt} = c_1 + c_2 y_1(t-\tau_2) - c_3 y_3(t), \tag{3}$$

где взаимодействие белков определяется функциями

$$f(y_1, y_2, k_f) = \frac{1}{2}(y_1 + y_2 + k_f - \sqrt{(y_1 + y_2 + k_f)^2 - 4y_1 y_2}), \tag{4}$$

$$g(y_1, y_2) = \frac{y_1 - f(y_1, y_2, k_f)}{y_1 + k_g - f(y_1, y_2, k_f)}. \tag{5}$$

Здесь y_1, y_2, y_3 — уровни p53, Mdm2 и микроРНК, соответственно; a_1 и c_1 — скорости самопроизвольной генерации белка p53 и микроРНК; a_2 — удельная скорость деградации p53 посредством убиквитинирования; a_3, b_2, c_3 — удельные скорости распада p53, Mdm2 и микроРНК; b_1 и c_2— скорость генерации Mdm2 и удельная скорость генерации микроРНК, обусловленные взаимодействием с p53; k_f — константа диссоциации комплекса p53-Mdm2; k_g — константа диссоциации белка p53 и гена Mdm2. Параметры τ_1 и τ_2 определяют время запаздывания реакции Mdm2 и микроРНК на изменение состояния белка p53.

Начальные данные для системы (1)–(5) задаются в виде функций «истории»:

$$y_k(\theta) = \varphi_k(\theta),\ k = 1, 2, 3,\ \theta \in [-\tau, 0],\ \tau = \max(\tau_1, \tau_2). \tag{6}$$

Состояние нормы (базальное состояние, которому соответствуют параметры, отмеченные всюду верхним индексом ^{b}) определяется следующим набором значений параметров модели (1)–(5) (*y.e.* — условные или произвольные единицы):

$$a_1 = a_1^b = 1\frac{y.e.}{c},\ b_1 = b_1^b = 1\frac{y.e.}{c},\ c_1 = c_1^b = 1\frac{y.e.}{c},$$

$$a_2 = a_2^b = 3 \times 10^{-2}\ c^{-1},\ b_2 = b_2^b = 10^{-2}\ c^{-1},\ c_2 = c_2^b = 1\ c^{-1}, \tag{7}$$

$$a_3 = a_3^b = 10^{-4}\ c^{-1},\ c_3 = c_3^b = 1\ c^{-1},\ k_f = k_f^b = 180\ y.e.,\ k_g = k_g^b = 28\ y.e.$$

Следует отметить, что базальные значения параметров уравнений (1)–(2),(4)–(5) определены в [6], где отмечается согласованность значений (7) с экспериментальными данными. Стационарные и периодические решения этой системы уравнений в широком диапазоне значений параметров модели сети p53-Mdm2 согласуются с экспериментальными данными [3, 8]. Общий вид уравнения динамики микроРНК (3) соответствует принятой биологической модели и является в достаточной мере общепринятым. При выборе значений параметров уравнения (3) учитывалось наличие прямой связи микроРНК с p53 и согласование результатов моделирования с известными экспериментальными данными [5]. В дальнейшем для краткости обозначения размерностей параметров и переменных будут опускаться.

1.2 Численный алгоритм и методические расчеты

Особенностью задачи с начальным условием (1)–(6) является наличие функций с запаздывающими аргументами. Алгоритм решения задачи основан на использовании известного метода шагов, который сводится к последовательному решению задачи Коши (1)–(6) на интервалах времени, равных величине запаздывания τ . При этом функции с запаздывающими аргументами являются известными — заданными из начального условия (6) или из численного решения задачи, полученного на предыдущем этапе реализации метода шагов. Этот классический подход позволяет обоснованно привлекать для решения задачи широкий круг численных методов решения задачи Коши для ОДУ, а также способствует более экономичной организации компьютерных вычислений. На основании результатов численных экспериментов [9] для решения задачи применялся метод предиктор-корректор с итерациями по нелинейности, который обеспечивает второй порядок точности. Из соображений простоты численной реализации шаг по времени h выбирался таким образом, чтобы величины запаздывания τ_1 и τ_2 были кратными h .

Расчеты показали, что при достаточно больших значениях времени характер решения задачи (1)–(6) полностью определяется выбором значений параметров модели, а влияние начальных условий можно считать относительно кратковременным. Так, в случае параметров (7) независимо от вида функций «истории» (6) было получено стационарное решение $y_1^b \approx 154.6347$, $y_2^b \approx 81.3105$, $y_3^b \approx 155.6347$, которое согласуется с описанием состояния нормы [1, 3, 5, 6] и аналитическим стационарным решением системы (1)–(2) с учетом (4)–(5) [6]. Основываясь на этих результатах, в дальнейшем удобно полагать начальные данные (6) функциями, тождественно равными нулю. Из численного анализа решений следует, что существуют интервалы изменения параметров k_f и k_g, для которых можно указать интервал значений τ_1, когда решение теряет устойчивость (бифуркации Андронова — Хопфа). Увеличение τ_1 приводит к появлению релаксационных эффектов (слишком медленных ответов Mdm2 на резкое изменение p53 и наоборот).

При проведении расчетов величины запаздывания τ_1 и τ_2 варьировались в диапазоне от 60с до 10000с. Основные серии численных экспериментов, если это особо не оговорено, проводились при $\tau_1 = 120$с. При значениях запаздывания τ, не превышающих нескольких сотен секунд, оптимальной была признана расчетная сетка с разрешением не более 100 точек на 1 секунду, а при увеличении запаздывания шаг сетки может быть скорректирован в сторону роста. Более подробно вопросы построения оптимального численного алгоритма обсуждаются в [9].

2 Результаты численных экспериментов

2.1 Связь микроРНК с p53 в условиях стресса

Результаты предыдущих исследований [7]–[9] показали, что принятая математическая модель динамики сети p53-Mdm2 (1)–(2), (4)–(5) адекватно воспроизводит целый ряд известных экспериментальных фактов. Для данного исследования наиболее значимыми представляются полученные в ходе моделирования характерные ситуации, используемые в клинической практике для оценки p53 и Mdm2 как факторов онкопрогноза. Речь идет, в первую очередь, о возможности резкого снижения p53 и, как следствие, затухания p53-зависимого апоптоза, в результате чего в организме накапливаются клетки с дефектами ДНК, в том числе раковые клетки (далее будем упоминать ее как ситуацию C от *cancer*). Модель описывает также ситуацию с избыточным уровнем p53, которая угрожает чрезмерным p53-зависимым апоптозом и дегеративно-клеточными патологиями (далее — ситуация D от *degeneration*). Важное значение имеют решения в виде периодических колебаний уровней p53 и Mdm2, описывающих наблюдаемый *in vitro* ответ данной динамической системы на стресс (далее — ситуация R от *response*). Ключевую роль играет базирующееся на результатах лабораторных измерений (см., например, [1, 3, 6]) приближенное определение базального состояния системы p53-Mdm2 (далее — ситуация N от *normal*).

В настоящей работе изучены особенности нормального (при $c_i = c_i^b$) функционирования микроРНК в важных для клинической практики ситуациях C, D, R и N, характеризующих состояния системы p53-Mdm2. В ходе численных экспериментов показано, что если состояние сети p53-Mdm2 характеризуется как базальное (ситуация N), то и p53-зависимых микроРНК демонстрируют поведение, соответствующее норме. Точно так же, в критических для состояния пациента ситуациях со сверхвысоким (ситуация D) или чрезмерно низким (ситуация C) уровнем p53 микроРНК также принимают соответствующие экстремальные значения. Тем самым, в норме микроРНК повторяют поведение p53 и могут быть использованы в качестве диагностических маркеров дегенеративных, в том числе онкологических, заболеваний.

2.2 Трансактивация микроРНК как реализация прямой положительной связи с p53

В центре внимания целого ряда лабораторных исследований — оценка способности микроРНК активироваться в ответ на активацию p53. В настоящей работе эти данные, в первую очередь, используются для анализа адекватности принятой математической модели (1)–(5). Как и в лабораторных экспериментах, расчетные данные представляются в виде фолд-изменения: $fold = (y_{fin} - y_0)/y_0$, где y_0 и y_{fin} — начальное и конечное значения измеряемой величины.

Для сопоставлений привлекаются результаты экспериментальных измерений зрелых микроРНК в искусственно культивируемых клеточных культурах. В [5] исследуются, в частности, функциональные пробы дрожжевых культур с целью анализа способности белка p53 дикого типа трансактивировать микроРНК. Показано, что разные микроРНК могут активироваться с разной степенью интенсивности, так что p53-обусловленная фолд-индукция составляет 0.5–1 для miR-145, 115–130 для miR-10b и 500–580 для miR-34a. Здесь же *in vitro* анализировалась способность p53 трансактивировать p53-респонсивные (обеспечивающие передачу сигнала от белка p53 к его мишени) микроРНК в условиях, моделирующих синдром Ли-Фраумени (генетически обусловленную потерю функции p53-зависимого апоптоза, вызывающую поразительное множество разных форм рака у членов одной семьи). Продемонстрированная в лабораторном эксперименте [5] реакция miR-34a на активацию миссенс-мутантов p53 с частичной потерей функции также свидетельствует о наличии положительной прямой связи с p53. В [11] через 24 часа после активации p53 *in vitro* в человеческих опухолевых клетках MCF7 (аденокарцинома молочной железы человека), в которых экспрессируется p53 дикого типа, относительный уровень miR-145 возрастает в 12 раз. Полученные в расчетах с применением модели (1)–(5) диапазоны изменения микроРНК соответствуют наблюдаемым *in vitro* для достаточно большого набора клеточных культур и конкретных p53-респонсивных микроРНК с заданным типом связи.

На рис. 1 представлены результаты двух вариантов численных экспериментов, каждый из которых состоит из пяти серий расчетов, где серии I–IV связываются с лабораторными измерениями miR-34a [5], серия V — с измерениями miR-145c [11]. Схема проведения численных экспериментов состоит из двух этапов. Сначала в рамках модели воспроизводятся исходные свойства p53 до активации: для p53 дикого типа — базальное состояние системы p53-Mdm2, для мутантных — соответствующее эксперименту снижение уровня p53. Второй этап моделирует воздействие активирующего p53 вещества для наблюдения за последующей трансактивацией микроРНК. Считаем для простоты, что активирующее вещество вызывает отклик (в рамках принятой модели) в виде ускорения или, наоборот, затухания процесса самопроизвольной генерации p53. Это означает, что в расчетах ситуация активации p53 моделируется варьированием параметра a_1 по отношению к базальному состоянию — для сопоставления с данными [5, 11] для p53 дикого типа (в сериях V и I соответственно) или по отношению к состоянию со сниженным уровнем p53 — для сопоставления с данными [5] для мутантных p53 (в сериях II–IV). Предполагалось также, что регуляция микроРНК всегда соответствует норме, определяемой параметрами $c_i = c_i^b$ (7). Расчетные данные об изменении уровня микроРНК под воздействием стрессовых факторов, направленных на активацию p53, как и в соответствующих лабораторных исследованиях [5, 11], представляются в виде фолд-изменения, где y_{fin} — конечное значение уровня микроРНК на втором этапе эксперимента, y_0 — значение до активации, т. е. перед началом второго этапа моделирования. Очевидно, что положительные значения *fold* соответствуют повышению, а отрицательные — снижению уровня микроРНК относительно уровня до активации.

В первой части численных экспериментов предполагалось, что причина первоначального (до активации) угасания функции p53 в рамках принятой математической модели слабо влияет на способность активирующего вещества воздействовать на p53. В серии I активация микроРНК, соответствующая данным [5], получена только при достаточно высокой скорости генерации p53 $a_1 \approx 11a_1^b$. В серии II *in vitro* активировался миссенс-мутант p53 (A138S) со снижением функции примерно на 33.3 % ; в математической модели близкое к данному начальное состояние может быть получено в одном из вариантов: при $a_1 = 0.7a_1^b$, $a_2 = 1.5a_2^b$, $a_3 = 35a_3^b$, $b_1 = 1.7b_1^b$ или $b_2 = 0.6b_2^b$. Конечное состояние, соответствующее экспериментальному уровню трансактивации микроРНК, получен в модели при $a_1 = 5.8a_1^b$. В серии III *in vitro* активировался миссенс-мутант p53 (R337C) со снижением p53 до уровня 10 % от базального значения, а в модели такое начальное состояние может достигаться в одном из следующих случаев — при $a_1 = 0.065a_1^b$, $a_2 = 16a_2^b$, $a_3 = 600a_3^b$. Основной этап — активация микроРНК посредством p53 — осуществляется в модели через параметр $a_1 = 2.24a_1^b$, что позволяет достичь согласия с данными [5]. В серии IV сопоставляются данные о трансактивационной способности *in vitro* мутанта C141Y со снижением функции p53 до 5 % от базального. Эти начальные условия в математической модели могут быть получены при $a_1 = 0.02a_1^b$, $a_2 = 50a_2^b$ или $a_3 = 1400a_3^b$, а конечное состояние, близкое к эксперименту [5] — при $a_1 = 0.42a_1^b$. В серии V трансактивация микроРНК в ответ на

активацию p53 дикого типа, близкая к описанной в [11], соответствует решению задачи (1)–(6) при любом из параметров $a_1 = 2.92a_1^b$, $a_2 = 0.3a_2^b$, $b_1 = 0.292b_1^b$ или $b_2 = 3.4b_2^b$ (как и прежде, остальные параметры модели остаются равными значениям (7)).

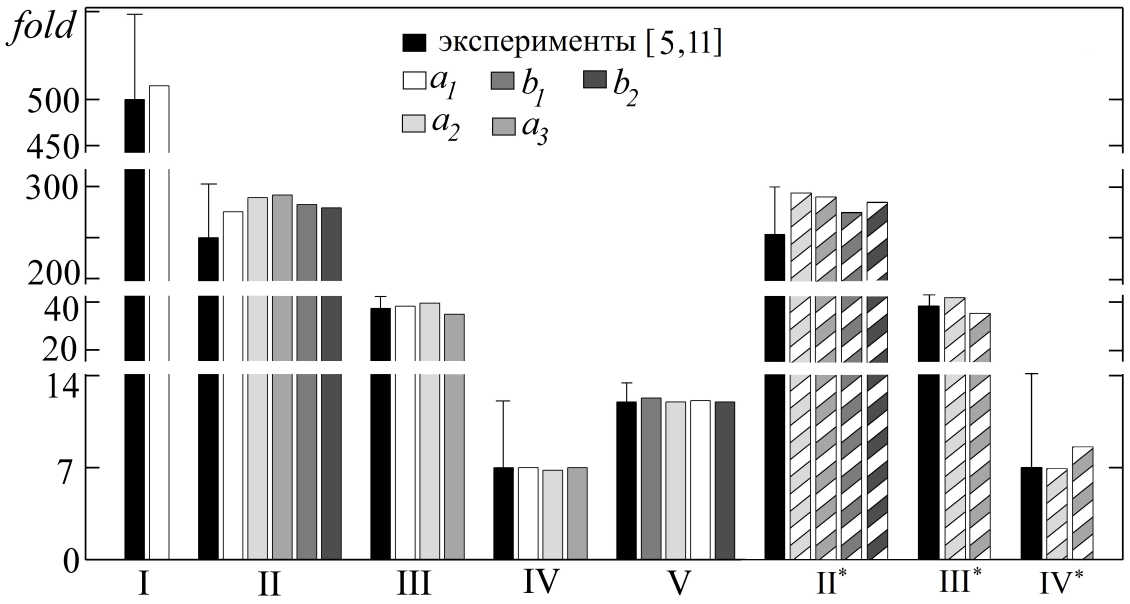


Рис. 1: Оценка способности микроРНК активироваться в ответ на активацию p53. Относительное изменение уровня miR-34a (столбцы I–IV) и miR-145 (столбец V) при активации p53 дикого типа (I, V) и мутантных p53 со сниженной функцией апоптоза (II–IV). Данные, помеченные *, получены в соответствующих расчетах с учетом причин первоначального снижения функции p53.

Во второй части численных экспериментов предполагалось, что активирующее вещество способно преодолеть угасание функции p53, однако первопричина этого дефекта сохраняется и после принудительной активации. Как и прежде, каждый численный эксперимент проводится в два этапа, при этом, в отличие от представленного ранее, на втором этапе учитываются изменения значений параметров модели, осуществленные на первом этапе. При данном подходе, очевидно, изменяются только результаты серий II—IV, они помечены звездочкой *. В серии II* соответствующее эксперименту снижение функции p53 на 33.3 % , как и первом варианте расчетов, было получено при $a_2 = 1.5a_2^b$, $a_3 = 35a_3^b$, $b_1 = 1.7b_1^b$ или $b_2 = 0.6b_2^b$, а конечное состояние микроРНК, близкое к [5] — при дополнительном изменении параметра $a_1 = qa_1^b$, где $q = 7.3, 100, 7.8, 7.8$ в каждом из вариантов первого этапа соответственно. В серии III* начальное состояние вновь достигается при $a_2 = 16a_2^b$ или $a_3 = 600a_3^b$. Основной этап — активация микроРНК посредством p53 — осуществляется через последующее изменение параметра a_1, который полагался в этих двух случаях равным $35a_1^b$ или $41a_1^b$ соответственно, что позволило достичь согласия с данными [5]. В серии IV* снижение функции p53 до уровня 5 % от базального получено при $a_2 = 50a_2^b$ или $a_3 = 1400a_3^b$, а на втором этапе для достижения конечного состояния, близкого к эксперименту [5], дополнительно полагалось $a_1 = 21a_1^b$ или $a_1 = 11a_1^b$ соответственно.

Приведенные в настоящем разделе результаты расчетов, безусловно, не претендуют на детальное воспроизведение экспериментов *in vitro*. Причины сложностей, возникающих при сопоставлении экспериментальных и расчетных данных, кроются в отсутствии (свойственном для большинства сложных динамических систем в биологии и медицине) необходимых для тщательного моделирования данных об условиях проведения лабораторных измерений, которые могли бы быть адекватно учтены в рамках принятой математической модели. Однако результаты сопоставлений дают представление о широте диапазонов изменения уровней p53, микроРНК и значений параметров, в которых принятую математическую модель функционирования сети p53-Mdm2-miRNA можно рассматривать как инструмент для приближенной оценки свойств p53-зависимых микроРНК с прямой положительной связью.

2.3 Нарушение функционирования микроРНК

Поводом для дальнейших численных экспериментов стали полученные в лабораторных и клинических исследованиях свидетельства о возможной дерегуляции микроРНК, а также значительной роли этих процессов в развитии злокачественных новообразований. В данной серии расчетов стрессовые условия, приводящие к дерегуляции микроРНК, моделировались как отклонение параметров c_1, c_2, c_3 от базальных значений c_1^b, c_2^b, c_3^b (7). В качестве допустимого изменения уровня микроРНК, при котором состояние микроРНК считается нормальным, будем принимать 50-процентное отклонение от базального уровня (в сторону убывания или роста). Эта оценка границы нормы является достаточно усредненной, она основана на анализе данных клинических и лабораторных измерений (см., например [5, 11]).

Результаты численных исследований показывают [10], что в рамках принятой математической модели при нарушении функционирования микроРНК наиболее вероятны ситуации, в которых характерные значения уровня микроРНК не соответствуют наблюдаемому уровню p53. Для каждой характерной ситуации C или D можно указать значения скоростей генерации или деградации микроРНК, при которых наблюдается восстановление базального уровня микроРНК ($fold \to 0$). Точно также, за счет сбоя в любом из параметров c_1, c_2, c_3 возможна существенная дерегуляция микроРНК, при которой достигаются экстремальные значения микроРНК, чаще — не соответствующие уровню p53. Поэтому проведение тщательных лабораторных исследований микроРНК, направленных на уточнение их свойств, в том числе способности быть самостоятельным регулятором процесса гибели клеток, представляется необходимым условием для адекватной оценки роли микроРНК как диагностических и прогностических биомаркеров.

2.4 Модифицированная модель сети p53-Mdm2-miRNA

Разработана модель функционирования сети p53-Mdm2-miRNA, в которой, в отличие от модели (1)–(5), используется более совершенное представление слагаемого, описывающего прямое положительное воздействие p53 на miRNA. Представляется, что эта мера позволит уточнить некоторые результаты представленного выше численного анализа. Для этого уравнение (3) заменяется следующим:

$$\frac{dy_3}{dt} = c_1 - c_2 f(y_1(t-\tau_2), y_3(t-\tau_2), k_m) - c_3 y_3(t), \tag{8}$$

где взаимодействие белка p53 и микроРНК рассматриваемого класса определяется функцией (4).

При построении математической модели одним из наиболее важных является вопрос об определении состояния нормы. Опираясь на оценки, представленные в экспериментальной работе [3], полагаем, что для усовершенствованной модели динамики микроРНК это состояние близко к описанному в предыдущих разделах настоящей работы. Вопрос об определении базальных значений параметров уравнения (8) решался на основе анализа лабораторных данных и общих представлений о совместной динамике микроРНК и p53. Так, из сопоставления результатов анализа функциональных проб дрожжевых культур, приведенных в [5], можно сделать предположение, что молекулы miR-34a — представители одного из наиболее изученных семейств микроРНК, для которых с некоторой степенью достоверности может быть принят вариант прямой положительной связи — активируются в норме в той же степени, что и p53. В рамках принятой математической модели это соответствует совместной динамике p53 и микроРНК при $c_1^b = 65$, $c_2^b = 1.2$, $c_3^b = 1.1$, $k_m^b = 50.4$. В ходе численных экспериментов получено, что решения модели (1), (2), (8) достаточно устойчивы к изменению параметра k_m, описывающего силу взаимодействия белка p53 и микроРНК. Отклонение от базальных значений любого из параметров c_1, c_2, c_3 может приводить к значительной дерегуляции микроРНК, при которой наблюдается рассогласованность в поведении p53 и p53-зависимых микроРНК. Таким образом, результаты исследования поведения микроРНК, выполненные в рамках усовершенствованной модели (1), (2), (4)–(5), (8), в значительной мере повторяют выводы, полученные на основе более лаконичной математической модели (1)–(5).

Заключение

В рамках решения задачи об уточнении диагностических свойств известных в клинической практике онкомаркеров выполнено математическое моделирование динамики класса микроРНК, экспрессия которых обусловлена воздействием p53 (положительная прямая связь). Предложены две математические модели и выполнен численный анализ решений в широком диапазоне параметров моделей.

Проведено численное исследование функционирования микроРНК в нормальных условиях и в условиях, когда p53 и его ингибитор Mdm2 принимают критические для состояния пациента значения и могут быть определены как диагностические маркеры онкологических и нейродегенеративных заболеваний. Адекватность принятых математических моделей и результатов численного анализа подтверждается качественным согласием с известными данными лабораторных исследований ряда конкретных микроРНК. Результаты сопоставлений дают представление о широте диапазонов изменения уровней p53, Mdm2, микроРНК и значений параметров, в которых принятые математические модели функционирования сети p53-Mdm2-miRNA можно рассматривать как инструмент для приближенной оценки свойств p53-зависимых микроРНК с прямой положительной связью.

Согласно результатам настоящих исследований, p53-зависимые микроРНК рассматриваемого класса могут быть использованы для уточнения функции p53 как биомаркера онкологических и нейродегенеративных заболеваний. Если сеть p53-miRNA функционирует нормально, то микроРНК дублируют диагностические свойства p53. Найдены варианты дерегуляции микроРНК, при реализации которых микроРНК являются даже лучшим маркером заболевания, чем p53. Вместе с тем, наиболее вероятны другие ситуации, когда дерегуляция микроРНК может приводить к установлению существенно завышенных или сверхнизких характерных уровней микроРНК, не соответствующих состоянию p53. Подобное поведение микроРНК, наблюдаемое вне связи с динамикой p53, свидетельствует о возможной самостоятельной роли микроРНК рассматриваемого класса как факторов диагностики, прогноза или терапевтической цели при нарушениях, связанных со сбоями в процессах апоптоза и пролиферации. Одновременно следует иметь в виду и возможную неоднозначность микроРНК-диагностики в этих условиях, требующих уточнения функции микроРНК.

Более детальное описание результатов этих исследований можно найти в [10].

Список литературы

[1] Lane D., Levine A. p53 research: The past thirty years and the next thirty years. Cold Spring Harb // Perspect. Biol. 2010. V. 2, № 12, P. a000893.

[2] Желтухин А.О., Чумаков П.М. Повседневные и индуцируемые функции гена p53 // Успехи биолог. химии. 2010. Т. 50, С. 447–516.

[3] Batchelor E., Mock C.S., Bhan I., Loewer A., Lahav G. Recurrent initiation: A mechanism for triggering p53 pulses in response to DNA damage // Molecular Cell. 2008. V. 30, № 3, P. 277–289.

[4] He L., He X., Lim L.P., Stanchina E., Xuan Z., Liang Y., Xue W., Zender L., Magnus J., Ridzon D., Jackson A.L., Linsley P.S., Chen C., Lowe S.W., Cleary M.A., Hannon G.J. A microRNA component of the p53 tumour suppressor network // Nature. 2007. V. 447, P. 05939.

[5] Bisio A., Sanctis V., Vescovo V., Denti M., Jegga A., Inga A., Ciribilli Ya. Identification of new p53 target microRNAs by bioinformatics and functional analysis // BMC Cancer. 2013. V. 13, № 552, 13p.

[6] Tiana G., Jensen M.H., Sneppen K. Time delay as a key to apoptosis induction in the p53 network // Eur. Phys. J. B. 2002. № 29, P. 135–140.

[7] Воропаева О.Ф., Козлова А.О., Сенотрусова С.Д. Численный анализ перехода от уравнения с запаздыванием к системе ОДУ в математической модели сети онкомаркеров // Вычислительные технологии. 2016. Т. 21, № 2, С. 12–25.

[8] Воропаева О.Ф., Шокин Ю.И., Сенотрусова С.Д. Математическое моделирование функционирования сети онкомаркеров. Доклады VI Международной конференции «Математическая биология и биоинформатика». Пущино, 16–21 октября 2016 г. Москва: Макс-Пресс, 2016. С. 102–103.

[9] Воропаева О.Ф., Шокин Ю.И., Непомнящих Л.М., Сенчукова С.Р. Математическое моделирование функционирования и регуляции биологической системы p53-Mdm2. Москва: изд-во РАМН, 2014. 176 с.

[10] Воропаева О.Ф., Сенотрусова С.Д., Шокин Ю.И. Дерегуляция p53-зависимых микроРНК:результаты математического моделирования // Математическая биология и биоинформатика. 2017. Т. 12, № 1, С. 151–175.

[11] Sachdeva M., Zhu S., Wu F., Wu H., Walia V., Kumar S., Elble R., Watabe K., Mo Y.-Y. P53 represses c-Myc through induction of the tumor suppressor miR-145 // PNAS. 2009. V. 106, № 9, P. 3207–3212.

Софья Дмитриевна Сенотрусова — студент Новосибирского государственного университета;
e-mail: senotrusova.s@mail.ru;
Ольга Фалалеевна Воропаева — д.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительных технологий
e-mail: vorop@ict.nsc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ИССДЕДОВАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ КУСОЧНО-ЛИНЕЙНЫХ ПРОЦЕССОВ НА ПУАССОНОВСКИХ ТОЧЕЧНЫХ ПОТОКАХ

О. В. Сересева[1], В. А. Огородников[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.6, 551.501

В работе исследуются статистические свойства кусочно-линейных процессов на пуассоновских потоках с независимыми негауссовскими случайными величинами в пуассоновских опорных точках. Исследуются асимптотические свойства некоторых вероятностных характеристик, в частности начальных моментов данного процесса и скорости их выхода на стационарный режим.

Рассмотрен подход к вычислению корреляционной функции процесса. Представлены результаты расчета корреляционной функции по модельным выборкам. Приведена зависимость корреляционной функции процесса от времени.

Ключевые слова: кусочно-линейные процессы, пуассоновский поток точек, одномерное распределение, корреляционная функция.

Введение

В работах Г.А. Михайлова [1, 2] был рассмотрен класс кусочно-постоянных процессов, в которых узловые точки на временной оси представляют собой поток Пальма, а значениями процесса в узловых точках являются независимые величины с заданной функцией распределения. Одномерное распределение такого кусочно-постоянного процесса в любой точке временной оси совпадает с заданным распределением в опорных точках, а корреляционная функция принадлежит к классу произвольных выпуклых функций. В работах Огородникова В.А., Савельева Л.Я., Сересевой О.В. [3–7] рассматривается кусочно-линейный процесс с независимыми одинаково распределенными случайными значениями в опорных точках, что, по сути, является модификацией кусочно-постоянного процесса, описанного Г.А. Михайловым.

В работах [3, 4] приведены результаты исследования нестационарного кусочно-линейного процесса на пуассоновских потоках, значения которого в опорных точках являются суммой независимых одинаково распределенных величин с последовательно увеличивающимся числом слагаемых с произвольным одномерным распределением. Получены точные выражения для функции распределения случайных переменных, образующих этот процесс, их начальных моментов произвольного порядка k, $k = 1, 2, \ldots$ и дисперсии как функций от времени. Для кусочно-линейного процесса получены точные выражения для средних значений и дисперсий как функций от времени. Исследованы асимптотические свойства этих функций.

Наряду с нестационарным кусочно-линейным процессом в работе [4] был рассмотрен кусочно-линейный процесс с независимыми негауссовскими случайными величинами в пуассоновских опорных точках. Для процесса данного типа получены точные выражения для среднего значения, дисперсии, коэффициентов асимметрии и эксцесса как функций от времени. Этот кусочно-линейный процесс в работе [4] был представлен в виде:

$$Y(t) = (Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1})\frac{t - S_{\nu(t)-1}}{S_{\nu(t)} - S_{\nu(t)-1}} + Y_{\nu(t)-1} = (Y_{\nu(t)} - Y_{\nu(t)-1})Q(t) + Y_{\nu(t)-1}, \quad S_{\nu(t)-1} \le t < S_{\nu(t)}, \qquad (1)$$

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 15-01-01458-а, 16-01-00145, 16-31-00123-мол-а, 17-41-543338 р_мол_а).

где $\nu(t)$ — целочисленные случайные величины $\nu(t) = Min\{n \geq 1 : S_n \geq t\} \in [0,\infty)$, $t > 0$, $S_0 = 0$, $S_{\nu(t)} = \sum\limits_{i=1}^{\nu(t)} X_i$, $\nu(t) \geq 1$, X_i — независимые положительные случайные величины с экспоненциальной плотностью распределения $f(x) = \lambda \exp(-\lambda x)$, $x \geq 0$. Величины $Y_{\nu(t)}$: $Y_0 = \alpha_0$, $Y_{\nu(t)} = \alpha_{\nu(t)}$, $\nu(t) \geq 1$ в выражении (1) являются независимыми между собой и от X_i случайными величинами с произвольным одномерным распределением $G(y)$.

В настоящей работе представлены результаты численных исследований одномерных распределений и корреляционных функций кусочно-линейного процесса с независимыми негауссовскими случайными величинами в пуассоновских опорных точках.

1 Одномерные распределения кусочно-линейного процесса

В работе [4] было показано, что кусочно-линейный процесс вида (1) для произвольных распределений величин $Y_{\nu(t)}$ является асимптотически стационарным по средним значениям, дисперсиям, асимметрии и эксцессу. В отличие от кусочно-постоянных процессов, рассмотренных в работах Г.А. Михайлова [1,2], одномерное распределение (и соответствующие моменты) исследуемого процесса в любой точке временной оси не совпадают с заданным распределением в опорных точках.

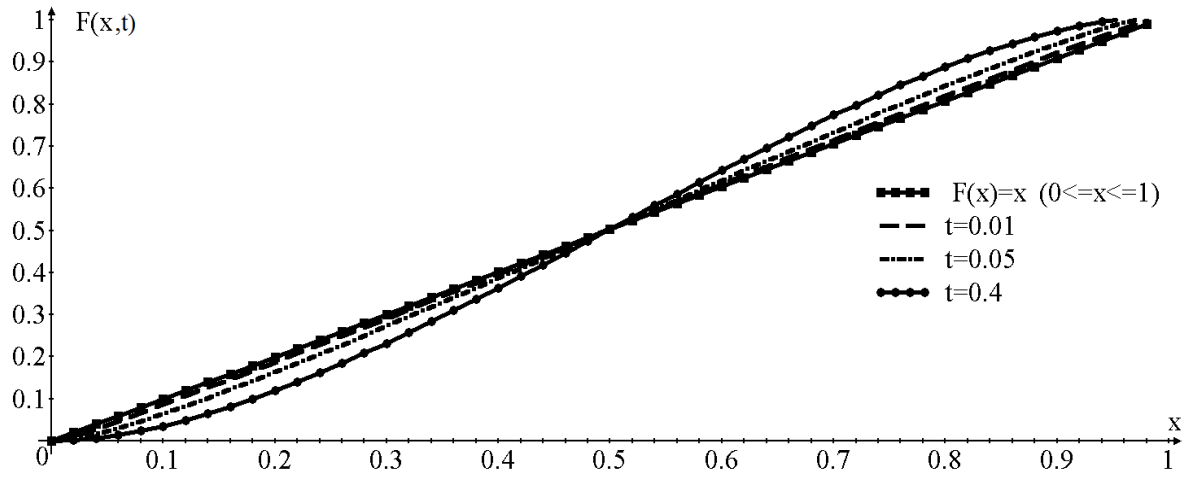


Рис. 1: Функции одномерного распределения $F(x,t)$ процесса $Y(t)$ вида (1) с независимыми равномерными случайными величинами из интервала (0,1) в пуассоновских опорных точках в зависимости от времени t.

На рисунках 1 – 3 приведены результаты оценивания по модельным выборкам одномерных распределений вероятностей $F(x,t)$ процесса (1) для различных распределений $G(y)$ независимых случайных величин $Y_{\nu(t)}$ в пуассоновских опорных точках: равномерного из интервала (0,1) (Рис. 1), экспоненциального распределения вида $G(x) = 1 - \exp(-\lambda x)$ (Рис. 2) и стандартного нормального (Рис. 3). При моделировании использовался 1000000 траекторий процесса (1). При больших значениях t процесс выходит на стационарный уровень. Следует отметить, что начальные одномерные распределения в первых двух случаях не имеют точек перегиба, а при $t \to \infty$ точка перегиба возникает. Для нормального начального распределения точка перегиба сохраняется.

В работе [4] было показано, что для случайного процесса $Y(t)$ вида (1) первые четыре начальных момента $m_k(t) = E[Y^k(t)]$, $k = 1,\ldots,4$ имеют вид:

$$
\begin{aligned}
m_1(t) &= E[Y(t)] = \mu_1, \\
m_2(t) &= E[Y^2(t)] = 2(\mu_2 - \mu_1^2)E[Q^2(t) - Q(t)] + \mu_2, \\
m_3(t) &= E[Y^3(t)] = \mu_3 + 3(\mu_3 - \mu_2\mu_1)E[Q^2(t) - Q(t)], \\
m_4(t) &= E[Y^4(t)] = \mu_4 E[1 - 4Q(t) + 6\,Q^2(t) - 4Q^3(t) + 2Q^4(t)] + \\
&\quad + 4\mu_3\mu_1 E[Q(t) - 3Q^2(t) + 4Q^3(t) - 2Q^4(t)] + 6\mu_2^2 E[Q^2(t) - 2Q^3(t) + Q^4(t)],
\end{aligned}
\tag{2}
$$

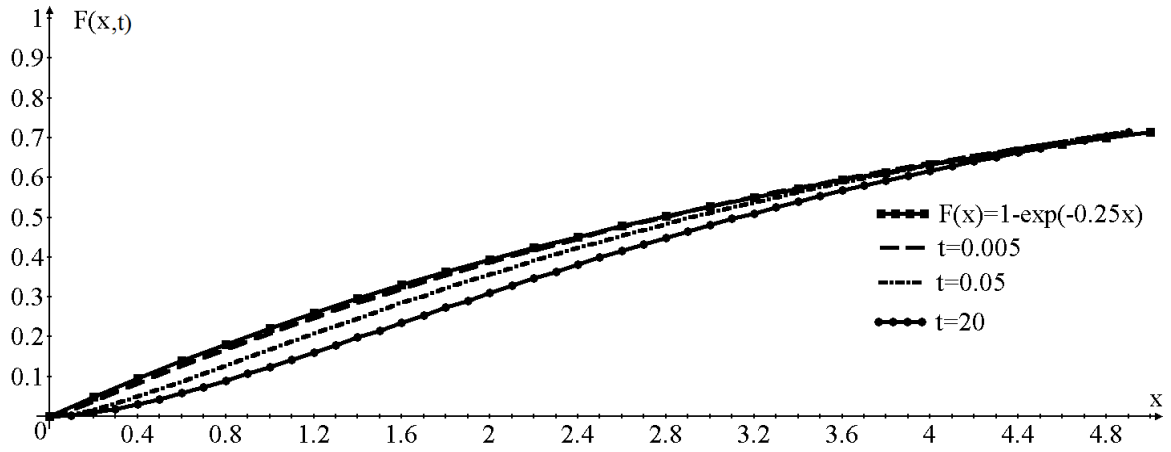


Рис. 2: Функции одномерного распределения $F(x,t)$ процесса $Y(t)$ вида (1) с независимыми экспоненциально распределенными случайными величинами ($G(x) = 1 - \exp(-\lambda x),\ \lambda = 0.25$) в пуассоновских опорных точках в зависимости от времени t.

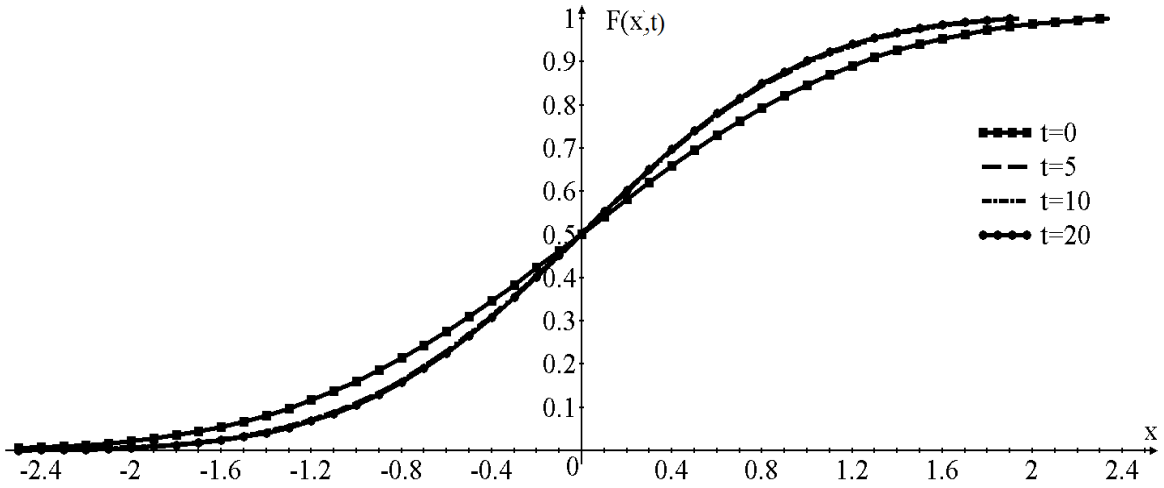


Рис. 3: Функции одномерного распределения $F(x,t)$ процесса $Y(t)$ вида (1) с независимыми стандартными нормальными величинами в пуассоновских опорных точках в зависимости от времени t.

где $E[Y^k_{\nu(t)}] = E[Y^k_0] = \mu_k,\ k = 1, 2, \ldots$ начальный момент порядка k случайной величины $Y_{\nu(t)}$, а начальный момент $E[Q^k(t)]$ случайной величины $Q(t)$ порядка $k = 1, 2, \ldots$, как показано также в [4], имеет вид:

$$E[Q^k(t)] = \frac{1}{k+1}(1 - e^{-\lambda t}(\lambda t + 1) + (\lambda t)^k(1 + k + \lambda t)\Gamma[1 - k; \lambda t]), \quad k = 1, 2, \ldots.$$

Здесь $\Gamma[a,\, z] = \int\limits_z^\infty x^{a-1}e^{-x}dx$ есть неполная гамма-функция.

При этом

$$\lim_{t\to 0} m_2(t) = \mu_2; \quad \lim_{t\to\infty} m_2(t) = \mu_2 - \frac{1}{3}(\mu_2 - \mu_1^2)$$

$$\lim_{t\to 0} m_3(t) = \mu_3; \quad \lim_{t\to\infty} m_3(t) = \frac{1}{2}(\mu_3 + \mu_2\mu_1)$$

$$\lim_{t\to 0} m_4(t) = \mu_4; \quad \lim_{t\to\infty} m_4(t) = \frac{1}{5}(2\mu_4 + 2\mu_3\mu_1 + \mu_2^2)$$

Из приведенных последних формул видно, что кусочно-линейный процесс $Y(t)$ вида (1) является асимптотически стационарным по приведенным характеристикам.

В Таблице 1 приведены оценки начальных моментов $m_1(t)$, $m_2(t)$, $m_3(t)$, $m_4(t)$, вычисленные по модельным выборкам для процесса (1), а также соответствующие значения этих моментов, вычисленные по теоретическим формулам (2). Расчеты производились для значения $\lambda = 0.25$ пуассоновского потока точек и для равномерно распределенных на интервале $(0, 1)$ независимых случайных величин $Y_{\nu(t)}$ в пуассоновских опорных точках. При оценке по модельным выборкам использовался 1 000 000 траекторий процесса. Из таблицы видно, что с точностью до статистической погрешности оценки рассматриваемых моментов, полученные по модельным выборкам, и их теоретические значения совпадают, при этом значения этих моментов достаточно быстро выходят на стационарный уровень.

Таблица 1: Оценки начальных моментов $m_1(t)$, $m_2(t)$, $m_3(t)$, $m_4(t)$, вычисленные по модельным выборкам и формулам (2).

t	$m_2(t)$ теор.	$m_2(t)$ мод.	$m_3(t)$ теор.	$m_3(t)$ мод.	$m_4(t)$ теор.	$m_4(t)$ мод.
0.0	0.333	0.333	0.250	0.250	0.200	0.200
0.2	0.319	0.319	0.229	0.229	0.175	0.176
0.4	0.314	0.314	0.221	0.221	0.166	0.166
0.6	0.311	0.311	0.216	0.216	0.161	0.161
0.8	0.308	0.309	0.213	0.213	0.157	0.157
1.0	0.307	0.307	0.211	0.211	0.155	0.155
1.2	0.306	0.306	0.209	0.209	0.153	0.153
1.4	0.305	0.306	0.208	0.208	0.152	0.152
1.6	0.305	0.305	0.207	0.207	0.151	0.151
1.8	0.305	0.305	0.207	0.207	0.150	0.150
2.0	0.304	0.304	0.207	0.207	0.150	0.150

2 Корреляционная структура кусочно-линейного процесса

В работе [7] было показано, что корреляционная функция кусочно-линейного процесса вида (1) в отличие от выпуклых корреляционных функций кусочно-постоянных процессов [1], [2] в асимптотике имеет точку перегиба. В данной работе были проведены численные эксперименты по исследованию зависимости корреляционных функций кусочно-линейных процессов (1) от вида функции распределения $G(x)$ значений процесса в пуассоновских опорных точках. Можно теоретически показать [8], что нормированная корреляционная функция кусочно-линейного процесса (1) не зависит от вида распределения $G(x)$ величин $Y_{\nu(t)}$, что также

подтверждается численными экспериментами. В расчетах моделировались пары ансамблей из 1 000 000 траекторий кусочно-линейного процесса (1) в каждой паре, с одними и теми же параметрами пуассоновского потока точек, но разными функциями распределения $G(y)$ в узловых точках. По этим ансамблям траекторий оценивались соответствующие корреляционные функции. Оказалось, что различие функций полученных для этих двух ансамблей находится в пределах статистической погрешности оценки коэффициентов корреляции, соответствующей данному объему выборки.

Были также проведены численные эксперименты, связанные с исследованием зависимости корреляционной функции $r(t,\tau)$ кусочно-линейного процесса вида (1) от параметра λ пуассоновского потока и от времени. Результатами исследования, судя по различным характеристикам процесса, стало, то, что он не является стационарным, а выходит на стационарный уровень при $t \to \infty$. Численно показано, что в начальный момент времени корреляционные функции при различных параметрах λ пуассоновского потока являются выпуклыми функциями, однако при $t \to \infty$ в них появляется точка перегиба. На рисунке 4 приведены графики корреляционных функций $r(t,\tau)$ кусочно-линейного процесса вида (1) для различных значений параметра λ пуассоновского потока точек и времени t.

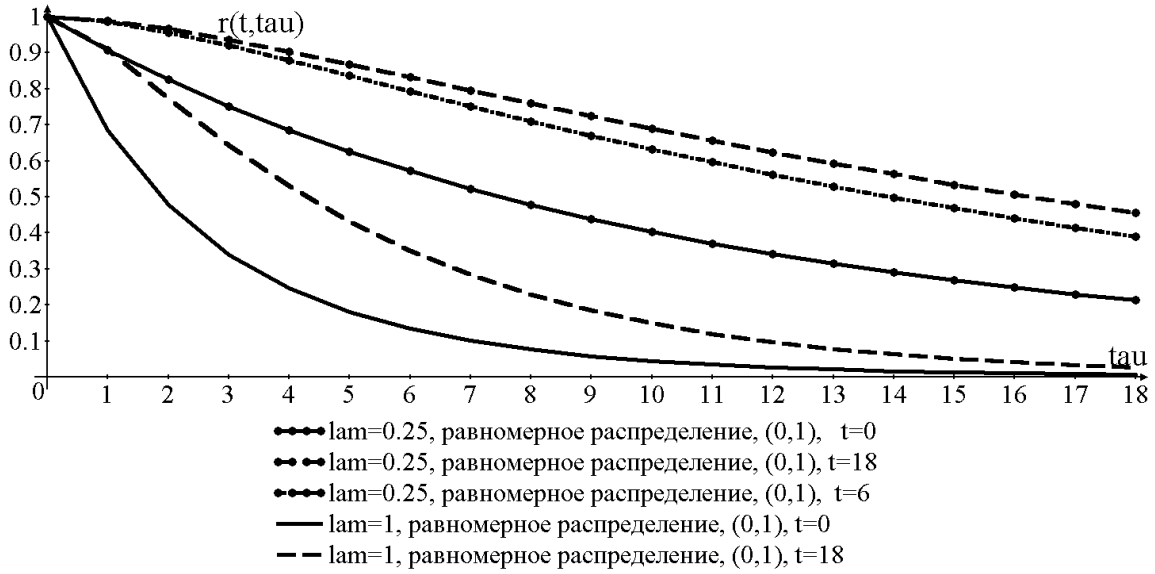


Рис. 4: Корреляционные функции $r(t,\tau)$ кусочно-линейного процесса вида (1) в зависимости от параметра λ пуассоновского потока и времени t.

Заключение

В данной работе продемонстрированы некоторые статистические свойства кусочно-линейных процессов на пуассоновских потоках с независимыми негауссовскими случайными величинами в пуассоновских опорных точках. Приведены одномерные распределения кусочно-линейного процесса вида (1) для различных распределений вероятностей независимых случайных величин $Y_{\nu(t)}$ в пуассоновских опорных точках. Показано, что при больших значениях t процесс выходит на стационарный уровень и при $t \to \infty$ в одномерных распределениях возникает точка перегиба. Однако, для нормального распределения, взятого в опорных точках, точка перегиба сохраняется и для начальных моментов времени, в отличие от равномерного или экспоненциального распределений. Представлены результаты расчета корреляционной функции по модельным выборкам. Численно показано, что нормированная корреляционная функция кусочно-линейного процесса (1) не зависит от вида распределения величин $Y_{\nu(t)}$ в пуассоновских опорных точках. Кусочно-линейные процессы, рассмотренные в работе, могут быть использованы для моделирования некоторых негауссовских метеорядов, полезны в финансовой математике.

Список литературы

[1] Михайлов Г.А. Моделирование случайных процессов и полей на основе точечных потоков Пальма // Докл. АН СССР, 1982, т. 3, N 3, стр. 531–535.

[2] Михайлов Г.А. Оптимизация весовых методов Монте-Карло // — М: Наука, 1986 [Engl.transl.: Springer-Verlag, 1992].

[3] Савельев Л.Я., Огородников В.А., Сересева О.В. Стохастическая модель кусочно-линейного процесса // Вестник Сыктывкарского университета. Сер. 1, Вып. 7, 2007. С. 67–76.

[4] Сересева О.В. Нестационарные и асимптотически стационарные кусочно-линейные процессы на пуассоновских потоках и некоторые их свойства // Труды конференции молодых ученых. ИВМиМГСОРАН, 2016. С. 83–92.

[5] Сересева О.В. Стохастическая модель кусочно-линейного процесса на пуассоновском потоке // Вычислительные технологии. Том 13. Специальный выпуск 4, 2008. С. 114–119.

[6] Ogorodnikov V.A., SavelievL.Ya., Sereseva O.V. Computation stochastic models of piecewise random processes. // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. — 2007. — Vol. 22, No. 3. — P. 505–514.

[7] Sereseva Olga V. and Ogorodnikov Vasily A. Piecewise Linear Processes on Pouisson Flow // Proceedings of the International Workshop “Applied Methods of Statistical analysis. Nonparametric approach”. Novosibirsk&Belokurikha, 2015, pp. 384–391.

[8] Sereseva Olga V. and Ogorodnikov Vasily A. Correlation structure of the piecewise linear process on pouisson flow // Proceedings of the International Workshop “Applied Methods of Statistical analysis. Nonparametric method in cybernetics and system analysis”. Krasnoyarsk, 2017, pp. 292–298.

Ольга Владимировна Сересева — к.ф.-м.н., мл. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: seresseva@mail.ru;
Василий Александрович Огородников — д.ф.-м.н., главн. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: ova@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

ИЕРАРХИЧЕСКИЙ КЛАСТЕРНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ ТЕКСТУРНЫХ ДАННЫХ ПОВЕРХНОСТИ ЗЕМЛИ

В. С. Сидорова

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 528.852

Рассматривается автоматическая кластеризация и последующая сегментация аэроснимков по текстурным признакам. Использован дивизимный гистограммный иерархический алгоритм с поиском кластеров заданной отделимости. Учтены особенности сегментации по статистическим текстурным признакам. Параметры модели изображения, известной как SAR, используются в качестве текстурных признаков для автоматической неконтролируемой классификации лесных ландшафтов на аэроснимках.

Ключевые слова: дистанционное зондирование, неконтролируемая классификация, многомерная гистограмма, разделимость кластеров, иерархический алгоритм, текстура.

Введение

В предлагаемом иерархическом алгоритме кластеризации текстурных изображений акцент сделан на оценку разделимости кластеров. В [1] был предложен подобный алгоритм для мультиспекральных изображений. Однако статистические текстурные признаки имеют свои особенности, поэтому здесь дана модификация алгоритма. Внутри каждого кластера дальнейшая кластеризаааация осуществляется по алгоритму Наренды [2]. В методе [2] гистограмма рассматривается как плотность вероятности векторов. Быстрый непараметрический алгоритм Наренды разделяет векторное пространство признаков по унимодальным кластерам, модальные векторы которых соответствуют всем локальным максимумам гистограммы, границы кластеров проходят по долинам, областям низкой плотности векторного пространства. Этот жесткий алгоритм, используя графы, одновременно и быстро решает три основные задачи кластеризации: находит моды кластеров, устанавливает границы между кластерами и все вектора разносит по кластерам. Иерархический алгоритм позволяет автоматически выбирать различную детальность квантования в подобластях векторного пространства в зависимости от разделимости кластеров в них. Что позволяет получить существенно меньше и хорошо разделенных кластеров. В этой работе рассчитываются статистические текстурные признаки в окрестности каждой точке по модели SAR [3]. В качестве примера рассматриваются изображения леса. На черно-белых полутоновых аэроснимках масштаба 1:50000, текстура лесных сообществ формируется чередованием темных и светлых пятен, соответствующих группам деревьев различных пород. Визуальный анализ аэроснимков (дешифрирование) является составной частью инвентаризации и мониторинга в лесоводстве. Текстурных свойств изображений часто бывает достаточно, чтобы различить тип леса и его возраст [4].

1 Текстурные признаки

В качестве текстурных признаков используются приближенные значения параметров модели случайного некаузального поля SAR [3]. На дискретном двумерном фрагменте $M \times M$ изображения определена матрица уровней серого тона $g(x, y)$; $x, y = 0, 1, \ldots M-1$. Для приближенного вычисления параметров модели SAR в [3] предложен метод максимального правдоподобия. Эти параметры $f_N = (\hat{\theta}_{(i,j)})$; $(i, j) \in N, (\hat{\rho}_N)$ могут интерпретироваться с точки зрения некоторых визуальных свойств текстуры. Величины $\hat{\theta}$ могут характеризовать направленность. Параметр $\hat{\rho}_N$ имеет прямую связь со степенью зернистости текстуры. Чем больше

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 13-07-00068) и программы № 43 Президиума РАН (проект № 32).

значение $\hat{\rho}_N$ образца, тем тоньше текстура. Рассматриваемое изображение предварительно эквализуется [5]. Вокруг каждой точки изображения рассматривается квадратное окно $M \times M$. Матрица $g(x, y)$ модели SAR нормализуется вычитанием среднего из значения уровня серого в каждой точке окна и делением на стандартное отклонение. Найденные для каждой точки изображения параметры модели f_N растягиваются затем в пределы от 0 до 255 и используются как признаки для классификации, возможно в сочетании с другими характеристиками.

2 Меры качества

Параметром детальности является число уровней квантования N векторного пространства признаков. Мера изолированности для отдельного унимодального кластера $M_(N)$ (1), и мера качества распределения в целом $m(N)$ по $K(N)$ кластерам (2) были определены в [6]:

$$M^j(N) = \frac{1}{H^j(N)} \frac{1}{B^j(N)} \sum_{i=1}^{B^j(N)} h_i^j(N) \tag{1}$$

$$M(N) = \frac{1}{K(N)} \sum_{j=1}^{K(N)} M^j(N), \tag{2}$$

где $h_i^j(N)$ — значение гистограммы в i-той точке границы кластера j, $B^j(N)$ — число точек границы кластера, $B^j(N)$ — максимальное значение гистограммы. Чем меньше (1), тем лучше кластер. Минимумы (2) соответствуют лучшим классификациям. Границы кластера легко вычислить, используя список соседей всех векторов, построенный алгоритмом Нарендры. Всегда $M^j(N) <= 1$ и $M(N) <= 1$. Можно показать, что мера (1) характеризует отношение объема точек вблизи границ кластера к его полному объему. Поэтому кластер характеризуется индивидуальной отделимостью. Мера (2) удовлетворяет условиям кластерной достоверности [7]. Она уменьшается с ростом компактности кластеров и с ростом расстояния между модальными векторами кластеров. На границах кластеров плотность вероятности не опускается до нуля, если кластеры тесно расположены. Такие кластеры типичны для данных дистанционного зондирования земной поверхности. Часто предлагается измерять компактность кластера среднеквадратичным отклонением признаков. Но среднеквадратичное отклонение признаков для таких кластеров зависит не только от их компактности, но и от их радиуса, поэтому при тесном расположении кластеров возникает неопределенность в нахождении разделимости. Мера (2) соотносит не расстояния, а плотности вероятности, что, кстати, намного дешевле.

3 Особенности сегментации по текстурным признакам

Статистические текстурные признаки являются пространственными характеристиками, а не точечными в отличие от спектральных, поэтому есть некоторые особенности кластеризации. Рассмотрены следующие особенности, требующие модификации кластерного алгоритма:
а) статистика собирается по окрестности точки — окну, и требуется определить его размер;
б) пиксели окна могут на границах объектов относится к различным текстурам и создавать ложные кластеры, которые требуют специальной обработки.

Выбор размера окна. Текстурные признаки вычисляются в окрестности (окне) каждой точки изображения. Предложен автоматический выбор окна одного размера для всех точек изображения. От размера окна существенно зависят результаты кластеризации. Следующие соображения принимались во внимание. Размер должен быть достаточно велик, чтобы самой крупнозернистой текстуре была обеспечено достаточно статистики. Это можно проверить, постепенно увеличивая размер окна и оценивая значение текстурных признаков. Когда значение признака стабилизируется, то можно найти искомый размер. Если на изображении лишь одна текстура, то искомый размер должен быть не меньше найденного, но может быть как угодно большим. Однако, реальное изображение содержит различные текстуры, по-этому, чтобы точнее провести сегментацию, нужно использовать найденный, наименьший размер. Если изображение содержит достаточно протяженные объекты с одинаковой текстурой, а не одни границы, то для правильного размера окна все результаты кластеризации будут оставаться близкими (включая число полученных кластеров) для соседних значений размера окна. Особенно это справедливо, если на границах кластеров в векторном пространстве плотность векторов мала, а это свойство хорошо разделенных кластеров. Ранее сравнивались количества

полученных кластеров в оптимальных распределениях (соответствующих минимумам меры разделимости кластеров) при изменении детальности в алгоритме Нарендры. Теперь сравниваются количества полученных кластеров в распределениях, полученных для низких значений меры отделимости кластеров, заданной для нового иерархического гистограммного алгоритма кластеризации текстурных данных ДЗЗ.

Другая особенность текстуры в том, что на границах объектов с разной текстурой появляются ложные кластеры из-за того, что текстурные признаки рассчитываются по протяженному окну точек изображения, и в это окно попадают точки соседних различных текстур. Обычно эти ложные кластеры формируют ряд узких сегментов на границах текстур в плоскости изображения. После проведения гистограммной иерархической кластеризации текстурных признаков и глобальной предварительной сегментации изображения в соответствии с кластеризацией проводится обработка ложных кластеров. Для их индикации применяется пороговый метод, для ложных кластеров доля граничных точек по отношению к площади превышает заданный порог. Для объединения ложных кластеров и их присоединения к истинному предложена модификация алгоритма [8] (с анализом контекста изображения и кластерной разделимости в пространстве признаков). Не ложные кластеры назовем основными. Ложные кластеры объединяются с основными по следующему предложенному правилу.

Для ложного кластера сначала отыскиваются два его наиболее представительных соседа по изображению. Представительность определяется по длине границы. Для ее вычисления карта кластеров, полученная основным алгоритмом, единожды автоматически построчно просматривается, и суммируется число граничных точек сегментов каждого кластера по вертикали и горизонтали. Затем из этих двух представительных выбирается тот кластер, который хуже отделен от ложного в векторном пространстве. В формуле (1) для ложного кластера суммируются только векторы границы с представительным кластером.

Ложный кластер присоединяется к тому из двух претендентов, для которого значение меры (3) больше, и на границе с ним средняя плотность его векторов больше. Алгоритм для объединения последовательности ложных кластеров. На границах объектов с различной текстурой часто образуется последовательность ложных кластеров, чьи тонкие сегменты заключены между двумя соседними. Обычно они плохо разделены в векторном пространстве. Автоматически выбирается какое-то число наиболее крупных и компактных в плоскости изображения кластеров. Это число может быть вычислено, если задать другие ограничения: по минимальному объему кластера, или по значению максимальной разделимости кластера, или по порогу компактности d. Выбранные кластеры объявляются основными, и к ним присоединяются остальные (ложные) следующим образом. Рассмотрим последовательно список всех кластеров. Если кластер ложный, то исследуем двух его соседей для присоединения по описанному выше правилу, учитывая различный размер ячеек квантования векторного пространства в соседних кластерах, построенных иерархическим алгоритмом. Если кластер для присоединения окажется основным, то ложный присоединим к нему, иначе начнем выстраивать цепочку ложных кластеров, пока не попадется основной, и тогда всей цепочке присвоим его номер. Если же цепочка замкнется, то объявим ее новым кластером. В результате работы алгоритма соседние ложные кластеры будут объединены в областях высокой плотности векторов, граница же между объединенными кластерами будет проходить в областях низкой плотности, следуя принципу кластеризации метода Нарендры.

4 Пример

На рис. 1а представлено исходное эквализованное черно-белое изображение лесного ландшафта, полученное с самолета, масштаба 1:50 000. Эквализация оставила 30 уровней из 256. На рис. 1б лесоводами представлена карта, полученная с применением наземной таксации. Каждому выделу с номером на карте рис. 1b соотносится его описание по преобладающей породе. Здесь представлены кедровники и сосняки различных возрастных фаз, а также березняки II фазы развития, болота и немного (две 27 и 20) вырубок. Кедровники окрашены синими тонами, сосняки коричневыми и розовыми, березняки белыми, болота и вырубки черными. Сверху вниз протекает речка, сопровождаемая старицами (красные). Трудность при кластеризации состоит в том, что отдельные фазы развития кедровников и сосняков плохо различимы на исходном снимке. На рис. 1а представлено изображение лесного ландшафта (1781×1157), На рис. 1б картосхема наземной таксации.

Для вычисления текстурных признаков размер окна был определен 16×16 (здесь одинаковый для всех областей). Заметим, что только для размеров окна при $i = 3$ и $i = 4$ (с близкими значениями числа кластеров) 16*16 и 18*18, кластеры различных типов леса хорошо разделились с заданной отделимостью $d = 0.15$. Для кластеризации был выбран размер 16*16. Этот размер практически соответствует размеру области

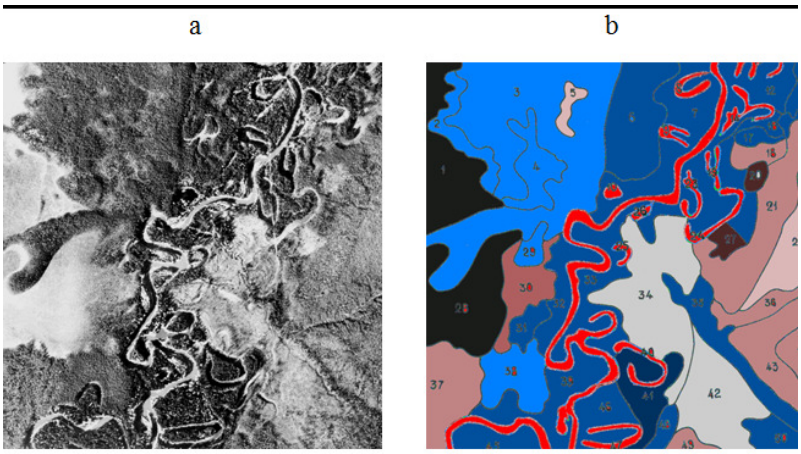


Рис. 1: a. Эквализованное изображение лесного ландшафта на аэроснимке. В средней части по диагонали находится река. b. Картосхема наземной таксации, указаны номера выде-лов, их описание: 1, 28 — болота, 34, 42 — березовые леса, 2, 4, 6, 7, 12, 16, 17, 29, 31, 32, 33, 35, 38, 39, 41, 45, 46, 48, 50 - кедровые леса, сосновые леса: 18, 21, 22, 36, 43, 30, 37, 10, 12, 13, 27, 49

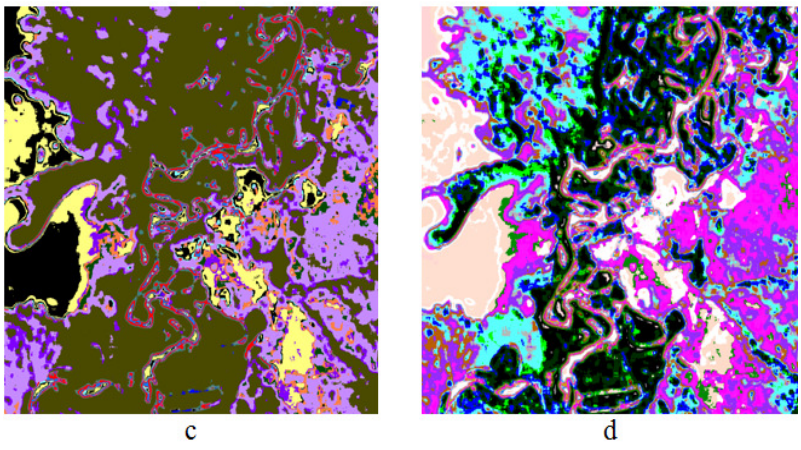


Рис. 2: c. Кластеризация для семи этапов иерархии. d. Кластеризация для четырнадцати этапов иерархии.

таксации, принятом в лесоводстве (1 га=100м × 100м). Так как текстура рассматриваемых лесов на изображении изотропна, то в качестве признаков модели SAR рассмотрим только признак ($\hat{\rho}$), измеряющий степень зернистости. Таким образом, для кластеризации имеем три признака: средний уровень серого, стандартное отклонение и ($\hat{\rho}$). отдельные фазы развития кедровников и сосняков плохо различимы на исходном снимке.

На рис. 2c при заданной отделимости кластера $d = 0.15$ (всегда $0 < d < 1$) представлена кластеризация семи этапов иерархии. Получено восемь кластеров. На этом этапе иерархии кластеры, относящиеся к соснякам и кедровникам, полностью разделились. Также выделись березники и болота. Каппа Коэна [9], характеризующая степень соответствия классификаций равна 0.91, что считается очень хорошим показателем согласованности. (Заметим, что выдел может содержать некоторый процент деревьев, отличных от основного насаждения). На рис. 2d полученная карта для 14 этапов иерархии. Здесь кластеры разделились по возрастам сообществ. Каппа Коэна равна 0.83.

Заключение

Используя текстурные признаки аэроснимка, мы автоматически построили карту кластеров, которая соответствует карте лесных насаждений, полученной лесоводами с помощью наземной таксации. Иерархический подход с заданием максимальной отделимости кластера и дифференцированным выбором детальности в

подобластях пространства признаков позволил избавиться от плохо изолированных кластеров. Полученных кластеров немного. Они хорошо разделены, не смотря на то, что уровень квантования для отдельных областей высок, что позволило различить визуально близкие текстуры.

Список литературы

[1] V.S.Sidorova. Detecting Clusters of Specified Separability for Multispectral Data on Various Hierarchical Levels // Pattern Recognition and Image Analysis. 2014. V. 24, No. 1. P. 151–155.

[2] Narendra P.M., Goldberg M. A Non-parametric Clustering Scheme for LANDSAT // Pattern Recognition. 1977. No. 9. P. 207–215.

[3] Kashyap R.L., Chellapa R. Estimation and Choice of Neighbors in Spatial Interaction Models of Images. // IEEE Trans. Inform. Theory.1983. vol.1. P. 60–72.

[4] Sedykh V.H. // Shaping the Cedar Forests. Novosibirsk "Science" 1979.

[5] R.M. Haralick, K. Shanmugam, I. Dinstein. Textural Features for Image Classification. IEEE Trans. Syst. Man. Cybern. 1973. Vol. SMS-3. P. 610–621

[6] Sidorova V.S. Histogram Clustering Validation for Multispectral Image. Avtometria. 2007. Vol.43, No. 1. P. 37–43.

[7] Halkidi M., Batistakis Y. and Vazirgiannis M. On clustering vali-dation techniques. Journal of Intelligent Information Systems. 2001. 17(2-3). P. 107.

[8] В.С.Сидорова. Алгоритм кластеризации текстурных данных дистанционного зондирования. Ж. Автометрия 2010 Т. 46, № 5, с. 43–52.

[9] Грауэр Л.В., Архипова О.А. // Непараметрические критерии независимости. 2014. Санкт-Петербург -S Center, 1/30. https://compscicenter.ru/media/slides/math_stat_2014_spring/2014_03_28_math_stat_2014_spring_1.pdf

Валерия Сергеевна Сидорова — н.с. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: svs@sscc.ru.

Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ОЦЕНКИ СТАТИСТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НЕОДНОРОДНЫХ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ ПО ВЫБОРКАМ МАЛОГО ОБЪЕМА

С. С. Скворцов[1], О. В. Сересева[1], Н. А. Каргаполова[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.6, 551.501

В работе приведены результаты анализа по выборкам малого объёма реальных данных статистической структуры случайного поля среднесуточной приземной температуры воздуха на территории Новосибирской области. Приведены результаты исследования одномерного распределения рассматриваемого поля, построены соответствующие аппроксимации аналитическими функциями. Для аппроксимации распределений температуры использованы смеси нормальных распределений. На основе специально разработанного критерия были проверены гипотезы об однородности и изотропности поля по корреляциям. Полученные результаты является входными параметрами стохастической модели совместных полей среднесуточной температуры и относительной влажности.

В приоритет была поставлена высокая плотность станций на территории, а также отсутствие пропусков в наблюдениях. Таким образом, данные, удовлетворяющие условиям, представляют наблюдения на 30 метеорологических станциях Новосибирской области в период с 2001 по 2004 год. Наблюдаемый месяц — Январь.

Ключевые слова: стохастическая модель, однородные поля, изотропные поля, метод обратной функции, смесь нормальных распределений.

Введение

Данная работа связана с разработкой численных стохастических параметрических моделей метеорологических пространственных двумерных полей с использованием данных наблюдений с метеорологических станций. При построении моделей такого типа обычно учитывается одномерное распределение вероятностей и корреляционная функция. Во многих случаях одномерное распределение может зависеть от пространственных координат, а значения корреляционной функции от пространственных координат соответствующих двух точек области. На первом этапе построения модели необходимо выбрать подходящее приближение, то есть определить, зависит ли одномерное распределение от пространственных координат и является ли поле однородным изотропным, однородным или неоднородным по корреляциям.

Целью работы является проверка предположения однородности и изотропности поля среднесуточной температуры по корреляциям, по имеющимся наблюдениям на 30 метеорологических станциях Новосибирской области в период с 2001 по 2004 год (наблюдаемый месяц — Январь). По этим данным в работе исследуется алгоритм проверки степени однородности поля, предложенный в работе [1], рассматривается также алгоритм проверки степени однородности изотропности поля.

Полученные результаты будут использованы для построения стохастической модели совместных полей среднесуточной температуры и относительной влажности.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов: гранты РФФИ № 15-01-01458-а, 16-31-00038-мол-а, 16-31-00123-мол-а, 17-41-543338-р-мол-а и Грант президента РФ МК-659.2017).

1 Аппроксимация плотности распределения

Для нормализации поля среднесуточной температуры воздуха необходимо знать одномерное распределение этой величины. Метеорологические станции расположены не равномерно на рассматриваемой территории, половина из них расположена вблизи Обского моря (подобласть A), вторая половина на оставшейся территории (подобласть B). Поэтому в работе вся область была поделена на эти две части и по соответствующим группам станций отдельно оценивались одномерные распределения.

Поле среднесуточной температуры полагается однородным по распределению, в рамках каждой подобласти, и, вообще говоря, неоднородным по всей области. Функции распределения температуры будут аппроксимированы смесями нормальных распределений для каждой подобласти при помощи EM-алгоритма [3].

Плотность распределения, выбранная для среднесуточной температуры подобласти A, является смесью из трех нормальных компонент:

$$f_A(x) = \sum_{i=1}^{3} \frac{a_i}{\sqrt{2\pi\sigma_i^2}} e^{-\frac{(x-\mu_i)^2}{2\sigma_i^2}},$$

где

$$a_1 = 0.30665732,\ \mu_1 = -5.81991733,\ \sigma_1^2 = 9.20264129,$$
$$a_2 = 0.03351083,\ \mu_2 = -37.93288998,\ \sigma_2^2 = 16.07278080,$$
$$a_3 = 0.65983184,\ \mu_3 = -19.75634399,\ \sigma_3^2 = 25.47740525.$$

В табице 1 приведены выборочные значения средних, дисперсий, коэффициентов ассиметрии и эксцесса для поля среднесуточной температуры воздуха в среднем по всем станциям подобласти A и соответствующие им аналогичные характеристики, вычисленные по плотности $f_A(x)$

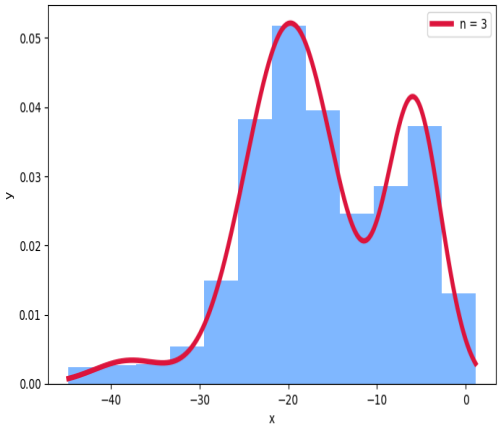


Рис. 1: Эмпирическая и модельная плотности распределения поля среднесуточной температуры воздуха (подобласть A).

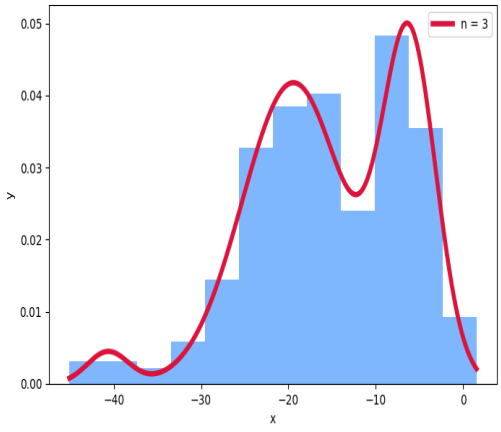


Рис. 2: Эмпирическая и модельная плотности распределения поля среднесуточной температуры воздуха (подобласть B).

Таблица 1: Характеристики реального и модельного распределения поля среднесуточной температуры воздуха (подобласть A).

Характеристика	Реальные данные	Модель
Среднее	-16.0917	-16.1047
Дисперсия	77.3740	77.6368
Ассиметрия	-0.2684	-0.2622
Эксцесс	-0.1381	-0.1439

Плотность распределения $f_B(x)$, выбранная для среднесуточной температуры из подобласти B, так же является смесью из трех нормальных компонент вида $f_A(x)$ с параметрами:

a_1=0.35918038, μ_1=-6.14431458, σ_1^2=9.43806469,
a_2=0.02652844, μ_2=-40.66030923, σ_2^2=5.65727484,
a_3=0.61429118, μ_3=-19.42359541, σ_3^2=34.42618248.

В таблице 2 приведены характеристики, аналогичные характеристикам из таблицы 1, для подобласти B.

Таблица 2: Характеристики реального и модельного распределения поля среднесуточной температуры воздуха (подобласть B).

Характеристика	Реальные данные	Модель
Среднее	-15.2173	-15.2310
Дисперсия	82.2968	82.3375
Ассиметрия	-0.5435	-0.5394
Эксцесс	0.0745	0.0312

2 Нормализация данных, оценка корреляционной матрицы и ее статистической погрешности

Под нормализацией негауссовской случайной величины в данной работе понимается преобразование вида $T_{Nor} = \Phi^{-1}(F(T))$, где $F(x) = \int\limits_{-\infty}^{x} f(x)dx$ — функция распределения среднесуточной температуры, $f(x)$ — функция плотности распределения среднесуточной температуры, полученная аппроксимацией наблюдений, а $\Phi(x)$ — функция стандартного нормального распределения.

Ввиду того, что для моделирования используются нормализованные данные, исследование корреляционной структуры поля так же будет проведено на этих нормализованных данных.

$$T_{Nor} = \Phi^{-1}(F(T)),$$

где в зависимости от подобласти, $F(x)$принимает вид либо $F_A(x)$, либо $F_B(x)$.

По нормализованным данным, соответствующим реальным данным о среднесуточной температуре воздуха на всех станциях Новосибирской области оценивается корреляционная матрица

$$R_{Nor} = (r_{ij}) = \left\| \begin{array}{llll} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1S} \\ r_{12} & r_{22} & \dots & r_{2S} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{1S} & r_{2S} & \dots & r_{SS} \end{array} \right\|.$$

Для оценки используются стандартные формулы для выборочной корреляционной матрицы по данным объема $N = MY$ где $M = 31$ — число дней в месяце, $Y = 4$ — число лет наблюдений, S — число станций во всей области.

Оценка статистической погрешности выборочных коэффициентов корреляции (элементов матрицы R_{Nor}) осуществляется следующим образом:

1. Моделируется N нормальных векторов размерности S с корреляционной матрицей R_{Nor}, где $N = MY$ определенный выше объем выборки.

2. По полученным модельным данным (совпадающим по структуре и объему с реальными данными) оценивается модельная корреляционная матрица R^m

3. Процедура 1. – 2. повторяется K раз, образуя ряд модельных нормализованных корреляционных матриц $R_1^m,\ R_2^m,\ \dots,\ R_K^m,\quad K = 10^5$, ($R_k^m = (r_{k,ij}^m)$).

По полученному ряду оценивается стандартное отклонение каждого выборочного коэффициента корреляции из матрицы R_{Nor} по формуле

$$\Sigma_{Nor} = (\sigma_{ij}), \quad \sigma_{ij} = \sqrt{\frac{1}{K-1}\sum_{k=1}^{K}(r^m_{ij,k} - \overline{r^m_{ij}})^2}, \ \overline{r^m_{ij}} = \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} r^m_{ij,k}, \ i,j = 1,\ldots,S.$$

По реальным данным объем выборки N равен 119, а число выборок K в расчетах, как отмечалось, бралось равным 100000.

3 Исследование корреляционной структуры поля нормализованной среднесуточной температуры воздуха.

Каждому коэффициенту корреляции из матрицы R_{Nor} соответствуют две станции i и j с координатами x_i, y_i и x_j, y_j. Поэтому для каждой пары станций имеется следующий вектор значений: $(r_{ij},\ x_i - x_j,\ y_i - y_j,\ \sigma_{ij})$, где r_{ij} — оцененный коэффициент корреляции матрицы R_{Nor} между i-ой и j-ой станциями, $x_i,\ y_i$ — координаты соответствующей станции, σ_{ij} — оцененная выше соответствующая статистическая погрешность коэффициента корреляции.

Таким образом элементы r_{ij} корреляционной матрицы R_{Nor} являются значениями корреляционной функции $r_{ij} = r(x_i,\ y_i,\ x_j,\ y_j)$ дискретного аргумента. Поскольку станции в области расположены не равномерно, то по структуре матрицы R_{Nor} без специального анализа трудно определить, является ли поле однородным изотропным, однородным или неоднородным. В работе [1] рассмотрен специальный способ оценки степени однородности поля по реальным данным, который состоит в том, что среди всевозможных двойных пар станций (точек) в рассматриваемой сети, отбираются те двойные пары, в которых по заранее выбранному критерию, отрезки, соединяющие точки в каждой паре, можно считать параллельными и равными.

3.1 Предположение изотропности поля

Для проверки предположения об изотропности поля необходимо среди всевозможных двойных пар точек найти такие пары, в которых с точки зрения некоторого критерия, отрезки, соединяющие точки в каждой паре, можно было бы считать равными по длине. В качестве такого критерия в данной работе выбирается следующее условие: пусть нам известна корреляционная функция $r(x_i, x_j, y_i, y_j) = r(\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2})$ рассматриваемого поля. Если для поля на станциях с такой корреляционной функцией выполняется условие:

$$\left| r\left(\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}\right) - r\left(\sqrt{(x_k - x_l)^2 + (y_k - y_l)^2}\right)\right| \le \varepsilon(\sigma_{ij} + \sigma_{kl}) \tag{1}$$

где $i,\ j,\ k,\ l$ — индексы соответствующих станций, σ_{ij} — статистическая погрешность реального коэффициента корреляции r_{ij} нормализованного поля температуры, то отрезки, соединяющие соответствующие пары станций считаются равными. В качестве корреляционной функции $r(x_i, x_j, y_i, y_j) = r(\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2})$ выбирается функция вида $r(x_i, x_j, y_i, y_j) = e^{-a\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}^q}$, в которой параметры a и q выбираются таким образом, чтобы средний квадрат разности между ней и $r_{ij} = r(x_i,\ y_i,\ x_j,\ y_j)$ был минимален. Значения этих параметров приведены в таблице 3.

Таблица 3: Параметры аппроксимирующей корреляционной функции изотропного поля

Параметр	Значение
a	0.0009380132975188
q	1.4127988376958411

Данное условие, по сути является условием равноудаленности точек в разных парах, то есть выбираются только те четверки станций, где расстояние между станциями в одной паре близко к расстоянию между станциями в другой паре (близость определяется величиной ε). После того, как выбраны подходящие пары, необходимо проверить, близки ли на них коэффициенты корреляции.

Для этого используется условие:

$$|r_{ij} - r_{kl}| \leq \sigma_{ij} + \sigma_{kl}. \tag{2}$$

Выполнение условия (2) означает, что разница коэффициентов корреляций между значениями поля на этих двух парах станций, расстояния между которыми крайне близки, не больше статистической погрешности, что говорит в пользу предположения об изотропности поля.

Таблица 4: Показатели степени изотротропности поля для различных значений ε.

ε	N — количество четверок станций, удовлетворяющих условию	M — количество четверок станций, удовлетворяющих условиям (1) и (2)	$\frac{N}{M} \times 100$
0.1	1286	367	28.54%
0.09	1165	330	28.33%
0.08	1026	292	28.46%
0.07	908	251	27.64%
0.06	789	221	28.01%
0.05	658	178	27.05%
0.04	513	143	27.88%
0.03	367	108	29.43%
0.02	238	66	27.73%
0.01	108	27	25.00%

Из таблицы 4 видно, что в пользу предположения изотропности нормализованного поля температуры говорит в среднем только 28% случаев, для которых были выполнены условия (1) и (2), причем этот показатель слабо зависит от выбора ε.

Таким образом приближение изотропности представляется весьма грубым.

3.2 Предположение однородности поля

Для проверки предположения об однородности поля, необходимо среди всевозможных двойных пар точек найти такие, в которых с точки зрения некоторого критерия, отрезки, соединяющие точки в каждой паре, можно было бы считать параллельными и равными по длине.

В качестве такого критерия в данной работе выбирается следующее условие: пусть нам известна корреляционная функция рассматриваемого поля $r(x_i, x_j, y_i, y_j) = r(x_i - x_j, y_i - y_j)$. Если для поля на станциях с такой корреляционной функцией выполняется условие:

$$|r(x_i - x_j, y_i - y_j) - r(x_k - x_l, y_k - y_l)| \leq \varepsilon(\sigma_{ij} + \sigma_{kl}), \tag{3}$$

где i, j, k, l — индексы соответствующих станций, σ_{ij} — статистическая погрешность реального коэффициента корреляции r_{ij} нормализованного поля температуры, то отрезки, соединяющие соответствующие пары станций считаются параллельными и равными по длине. В качестве корреляционной функции $r(x_i, x_j, y_i, y_j) = r(x_i - x_j, y_i - y_j)$ выбирается функция вида

$$r = e^{-(a(x_i - x_j)^2 + b(x_i - x_j)(y_i - y_j) + c(y_i - y_j)^2)^q}, \tag{4}$$

в которой параметры a, b, c, q выбираются таким образом, чтобы средний квадрат разности между ней и $r_{ij} = r(x_i, y_i, x_j, y_j)$ был минимален. Значения этих параметров приведены в таблице 5.

Данное условие является условием параллельности и равенства по длине отрезков, соединяющих пары станций в рассматриваемой четверке станций (здесь близость и параллельность определяются величиной ε).

После того, как выбраны подходящие пары, необходимо проверить, близки ли на них коэффициенты корреляции.

Для этого также используется условие (2). Выполнение этого условия означает, что разница коэффициентов корреляций между значениями поля на этих двух парах станций, расстояния между которыми крайне близки, а соответствующие отрезки параллельны, не больше статистической погрешности. Это говорит в пользу предположения об однородности поля.

Таблица 5: Параметры аппроксимирующей корреляционной функции однородного поля

Параметр	Значение
a	4.65786848e-05
b	-5.46216340e-05
c	8.28846032e-05
q	7.26780874e-01

Таблица 6: Показатели степени однородности поля для различных значений ε.

ε	N – количество четверок станций, удовлетворяющих условию (3)	M – количество четверок станций, удовлетворяющих условиям (3) и (2)	$\frac{N}{M} \times 100$
0.1	1126	692	61.46%
0.09	1014	627	61.83%
0.08	906	561	61.92%
0.07	788	485	61.55%
0.06	650	400	61.54%
0.05	563	347	61.63%
0.04	454	283	62.33%
0.03	353	224	63.46%
0.02	228	144	63.16%
0.01	116	69	59.48%

Из таблицы 6 видно, что в пользу предположения однородности нормализованного поля температуры говорит в среднем только 62% случаев, для которых были выполнены условия (3) и (2), причем этот показатель слабо зависит от выбора ε.

Такое приближение принимается как удовлетворительное.

Заключение

После выбора соответствующего приближения, в данном случае приближения однородного поля, численная параметрическая стохастическая модель полей температуры будет строится с выбранными в данной работе одномерными распределениями и корреляционной функцией. В качестве продолжения данной работы предполагаются аналогичные исследования для полей среднесуточной относительной влажности по выборкам такого же объема, которые имеют более сложную корреляционную структуру. Отметим, что если при построении стохастических моделей реальных процессов, ни одно из рассмотренных приближений (однородности изотропности и однородности) не подходит для построения модели, то необходимо рассматривать подходы к моделированию неоднородных полей. Некоторые из приближенных способов построения неоднородных полей рассмотрены в работе [2].

Список литературы

[1] Огородников В.А., Сересева О.В. Мультипликативная численная стохастическая модель полей суточных сумм жидких осадков и ее использование для оценки статистических характеристик экстремальных режимов их выпадения. // Оптика атмосферы и океана. 2015. Т. 28. № 03. С. 238–245

[2] Ogorodnikov V. and Sereseva O. Approximate numerical modeling of inhomogeneous stochastic fields of daily sums of liquid precipitation. // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. — 2014. — Vol. 29, No. 6. — P.375–382.

[3] The EM algorithm // The Elements of Statistical Learning. — New York: Springer, 2001 — P. 236–243

Степан Сергеевич Скворцов — аспирант Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: skvortsovstepan54@gmail.com;
Ольга Владимировна Сересева — к.ф.-м.н., мл. науч. сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: seresseva@mail.ru;
Нина Александровна Каргаполова — к.ф.-м.н., науч. сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: nkargapolova@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

О РЕАЛИЗАЦИИ НА GPU БАЗОВЫХ АССОЦИАТИВНЫХ ПРОЦЕДУР ЯЗЫКА STAR

Т. В. Снытникова, А. Ш. Непомнящая

Институт Вычислительной Математики и Математической Геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.68->519.17

Ассоциативные (контекстно адресуемые) параллельные процессоры типа SIMD с вертикальной обработкой информации ориентированы на решение задач нечисловой обработки данных. Моделирование работы таких систем описывается с помощью абстрактной модели типа SIMD (Star–машины). В работе [1] построена библиотека стандартных процедур языка STAR. В работе [2] приведена эффективная реализация на GPU простейших операций языка STAR. В данной работе приводится эффективная реализация на GPU библиотеки стандартных процедур языка STAR. Проведено сравнение времени работы данной реализации с временем работы подобных алгоритмов из стандартных библиотек (STL на CPU и CUDA thrust на GPU). Планируется использовать представленную выше на GPU библиотеку стандартных процедур языка STAR для решения задач на графах.

Ключевые слова: вертикальная обработка данных, графический ускоритель, эффективность, высокопроизводительные вычисления.

Введение

Ассоциативные параллельные процессоры типа SIMD с вертикальной обработкой информации и с простейшими процессорными элементами (ПЭ) выполняют массовый параллельный поиск по содержимому памяти и используют двумерные таблицы в качестве базовой структуры данных. Такая архитектура ориентирована на решение задач нечисловой обработки. Сюда относятся теория графов, реляционные базы данных, базы знаний, экспертные системы, обработка сейсмических данных.

В работе [3] построена абстрактная модель типа SIMD (Star–машина), которая описывает работу ассоциативной архитектуры на микроуровне. Ассоциативные параллельные алгоритмы записываются в виде процедур на языке высокого уровня STAR. Для удобного проектирования и анализа ассоциативных алгоритмов в работе [1] были выделены базовые ассоциативные параллельные алгоритмы. Соответствующие процедуры составляют библиотеку стандартных процедур языка STAR.

В работе [2] приведена эффективная реализация на GPU типов данных и простейших операций языка STAR. В данной работе приводится эффективная реализация на GPU библиотеки стандартных процедур языка STAR.

1 Свойства Star–машины и особенности ее моделирования на GPU

В работе [4] Поттер выделил основные свойства ассоциативных параллельных моделей и архитектур, которым, в частности, удовлетворяет Star–машина (рис. 1). Ключевыми для моделирования на других типах архитектур являются следующие свойства ассоциативных параллельных моделей.

- Мелкозернистость: каждое слово данных обрабатывается отдельным ПЭ.
- Синхронизация: последовательное устройство управления (ПУУ) передает инструкцию всем ячейкам; активные ячейки выполняют команду, полученную от ПУУ, в то время как неактивные ячейки принимают команду, но не выполняют ее.
- Быстрый обмен результатом вычисления между ПЭ: ПУУ может дать команду выбранному ПЭ передать данные по шине, все другие ПЭ получают значение с шины.

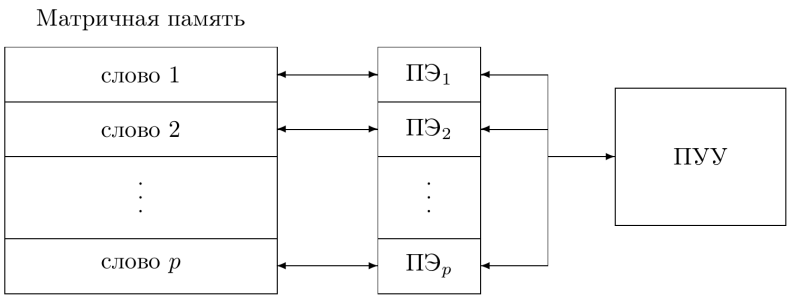


Рис. 1: Модель Star–машины

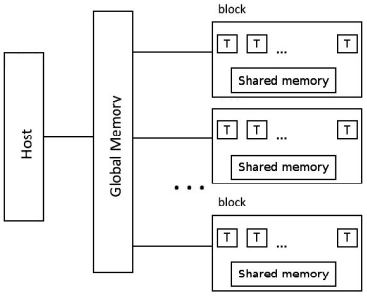


Рис. 2: Модель GPU

На графических ускорителях можно смоделировать эти свойства следующим образом:

- Каждый ПЭ моделируется отдельным потоком вычислений в блоке (T на рис. 2), слово матричной памяти моделируется элементом массива данных в глобальной памяти (индекс элемента в массиве выражается через индекс потока/блока).
- На графический ускоритель инструкции от процессора поступают пакетом (через вызов __global__ процедуры). В __global__- процедурах предусмотрена возможность синхронизации по потокам одного блока, но возможность синхронизации по блокам отсутствует. При необходимости синхронизации вычислений инструкции должны быть разнесены в разные __global__- процедуры. При этом накладные расходы на запуск __global__- процедур занимают около $15 - 20\mu c$.
- Данные передаются в глобальную память. При этом возможно два варианта: через копирование данных на процессор (Host на рис. 2) или через передачу указателя на данные.

Для эффективной реализации Star–машины на GPU должны выполняться следующие свойства:

- Константное время выполнения глобальных операций: побитовые логические операции, доступ к столбцам и строкам матричной памяти как на чтение, так и на запись и другие базовые операции языка Star [3]. В работе [2] приведена эффективная реализация базовых операций языка Star и показано, что базовые операции, не требующие синхронизации по данным, выполняются за константное время.
- ПУУ может выбрать старшую ячейку из множества активных ячеек за единицу времени. Реализация данной операции критична к синхронизации по данным. В работе [2] приведена реализация этой базовой операции с временной сложностью $O(\lceil \log_{64}(N) \rceil)$, где N — число строк таблицы.
- Базовые операции поиска (=, <, >, min, max) и арифметические операции выполняются за время, пропорциональное числу битовых столбцов в таблице, а не числу ее строк. Данные операции выполняются процедурами библиотеки стандартных процедур языка STAR [1]. Особенности их реализации приводятся ниже.

Таким образом будет показано, что с помощью графических ускорителей можно реализовать Star–машину с сохранением всех ее основных свойств.

2 Описание библиотеки базовых ассоциативных процедур языка Star

Библиотека включает процедуры для нечисловой обработки данных и процедуры для числовой обработки данных.

Приведем процедуры, которые относятся к первой группе. Эти процедуры используют управляющий слайс (битовый столбец), в котором отмечены позиции анализируемых строк соответствующей матрицы. Процедуры для нахождения позиции строк заданной матрицы T, в которых записан минимальный / максимальный элемент: MIN(T, X, Z) и MAX(T, X, Z), соответственно.

Процедуры, которые по заданной матрице T, по образцу v и по управляющему слайсу X находят позиции строк, удовлетворяющих условию поиска: MATCH(T, X, v, Z) для ROW(j, T)=v, LESS(T, X, v, Y) для

ROW(j, T)<v и GREAT(T, X, v, Y) для ROW(j, T)>v. Процедура GEL(T, v, Y, Z) обобщает процедуры LESS и GRAET: в слайсе Y отмечены позиции строк, которые больше образца, а в слайсе Z — меньше образца.

Процедуры, которые по двум заданным матрицам T и F и по управляющему слайсу X находят позиции строк, удовлетворяющих условию поиска: HIT(T, F, X, Z) для ROW(j, T)=ROW(j, F), SETMIN(T, F, X, Z) для ROW(j, T)<ROW(j, F) и SETMAX(T, F, X, Z) для ROW(j, T)>ROW(j, F).

Приведем процедуры для числовой обработки. Процедуры построчного сложения матриц ADDV(T, F, X, R) и добавления к строкам матрицы T двоичного слова v ADDC(T, X, v, R). Строки матрицы R, которые отмечены '0' в слайсе X, состоят из нулей. Процедура ADDC1(T, X, v, R) отличается от ADDC тем, что в строки матрицы R, которые отмечены '0' в слайсе X, записывает соответствующие строки матрицы T. Аналогично определены процедуры вычитания SUBTV(T, R, X, R), SUBTC(T, X, v, R), SUBTC1(T, X, v, R).

Также в библиотеку входят различные процедуры копирования. Процедура CLEAR(n, T) записывает нули во все n столбцов матрицы T. Процедура WCOPY(v, X, F) записывает двоичное слово v в те строки матрицы F, которые отмечены '1' в слайсе X. Остальные строки матрицы F состоят из нулей. Процедура WMERGE(v, X, F) записывает двоичное слово v в те строки матрицы F, которые отмечены '1' в слайсе X, при этом остальные строки матрицы F не меняются. Процедура TCOPY(T, F) копирует все столбцы матрицы T в соответствующие столбцы матрицы F. Размеры матриц совпадают. Процедура TCOPY1(T, j, h, F) выделяет из матрицы T j-ю полосу шириной h и копирует ее в матрицу F. TCOPY2(T, j, h, F) копирует матрицу T в j-ю полосу матрицы F. Процедура TMERGE(T, X, F) записывает строки матрицы T, отмеченные '1' в слайсе X, в соответствующие строки матрицы F. Остальные строки матрицы F не меняются.

3 Особенности реализации библиотеки стандартных процедур и сравнение с STL, CUDA thrust

Базовые алгоритмы можно разделить на следующие группы по способу работы с таблицами.

I В алгоритме используются базовые операции, критичные к синхронизации: MIN, MAX.
Алгоритмы этой группы при реализации разбиваются на несколько __global__-процедур.

II В алгоритме не используются базовые операции, критичные к синхронизации : MATCH, LESS, GREAT, GEL, HIT, SETMIN, SETMAX.
Алгоритмы этой группы могут быть представлены в виде __device__-процедур. Это позволяет встраивать их в реализации других алгоритмов без накладных расходов на производительность.

III Арифметические алгоритмы: ADDV, ADDC, ADDC1, SUBTV, SUBTC, SUBTC1.
Арифметические алгоритмы при вычислении используют слайс переноса на следующий разряд. Для проверки корректности вычислений необходимо убедиться, что после вычислений в нем нет единичных элементов. Для этого используется базовая операция, критичная к синхронизации. Таким образом, арифметические алгоритмы занимают промежуточное положение между I и II группой.

IV В алгоритме не используются базовые операции, критичные к синхронизации. Столбцы могут обрабатываться независимо друг от друга: CLEAR, WCOPY, WMERGE, TCOPY, TCOPY1, TCOPY2, TMERGE.
Для данной группы алгоритмов столбцы можно обрабатывать как поочередно (как во II группе алгоритмов), так и одновременно (двухуровневый параллелизм), поскольку нет зависимости по данным. В последнем случае, при достаточном количестве вычислительных ресурсов, процедуры выполняются за константное время.

4 Сравнение производительности библиотеки базовых процедур языка STAR с процедурами библиотек STL и CUDA thrust

Все расчеты проводились на графической карте NVIDIA GEFORCE 920M и процессоре CORE i5.

Стоит отметить следующее:



Рис. 3: Представление данных

- Ассоциативные алгоритмы используют другое представление данных.
  На рисунке 3 показаны представление структуры vector<int> из 64-х элементов для библиотек STL и CUDA thrust и представление этих же данных для реализации Star–машины. В структуре vector<int> каждое из целых чисел массива представляет собой 32-х разрядную бинарную строку. Для использования в реализации Star–машины такое представление не подходит, поскольку обработка происходит не по строкам, а по столбцам. Поэтому каждый столбец из 64-х битов составляет одно 64-х разрядное целое число. За счет такого вертикального представления данных пустые разряды можно не включать в таблицу для экономии памяти и уменьшения времени работы.

- Сравниваемые алгоритмы часто отличаются входными и выходными параметрами.
  В ассоциативных алгоритмах в качестве параметра используется управляющий слайс, в котором отмечены позиции обрабатываемых строк. Поэтому алгоритмически нет различия между обработкой всего множества данных или какого-то их подмножества. В алгоритмах из библиотек STL и CUDA thrust время обработки всех строк может существенно отличаться от времени обработки какого-то их подмножества (предикатная форма).
  В ассоциативных алгоритмах поиска в качестве выходных данных также используется слайс, в котором отмечены все вхождения искомого элемента. Алгоритмы библиотек STL и CUDA thrust выдают только одно вхождение искомого элемента.

Поэтому рассматриваемое сравнение реализаций носит условный характер, тем не менее дает некоторое представление о производительности.

4.1 I группа алгоритмов: MIN

Из первой группы алгоритмов рассмотрим процедуру MIN. Теоретическая сложность реализации ассоциативного алгоритма $O(h \cdot \lceil \log_{64}(N) \rceil)$, где h — количество столбцов обрабатываемой таблицы, N — количество строк. На рис. 4 видна слабая зависимость времени счета (μc) от количества строк (N).

Приведем сравнение производительности следующих реализаций:

- **min** — реализация ассоциативного алгоритма MIN;
- **STL** — последовательная реализация std::min_element() из библиотеки *STL* [5];
- **thrust** — реализация на CUDA thrust::min_element() библиотеки thrust [6] ;
- **thrust*** — реализация на CUDA с использованием библиотеки thrust выдает вектор, в котором помечены позиции всех минимальных элементов.

На рисунке 5 показано отношение времени работы реализаций ко времени работы реализации ассоциативного алгоритма на данных разного размера (N — количество элементов массива/количество строк в таблице). Из рисунка видно, что параллельные реализации дают выигрыш по времени при $N \geq 5\,000$. Реализации *min* и *thrust_min_element** дают сравнимый результат на диапазоне $N \leq 50\,000$. Реализация *min* дает заметный выигрыш по производительности относительно *thrust* :: *min_element* при $N \geq 100\,000$.

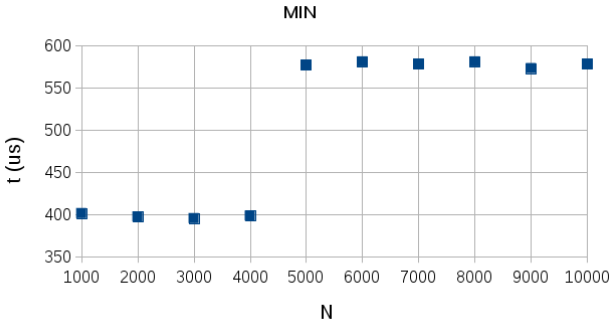


Рис. 4: Время работы с таблицами разной длины.

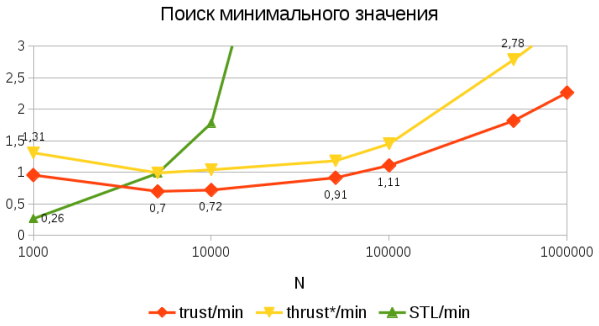


Рис. 5: Отношение времени работы реализации.

4.2 II группа алгоритмов: MATCH

Из алгоритмов II группы будем проводить сравнение на алгоритме MATCH. Оценки теоретической сложности ассоциативного алгоритма и его реализации на графическом ускорителе совпадают: $O(h)$, где h — ширина строки таблицы.

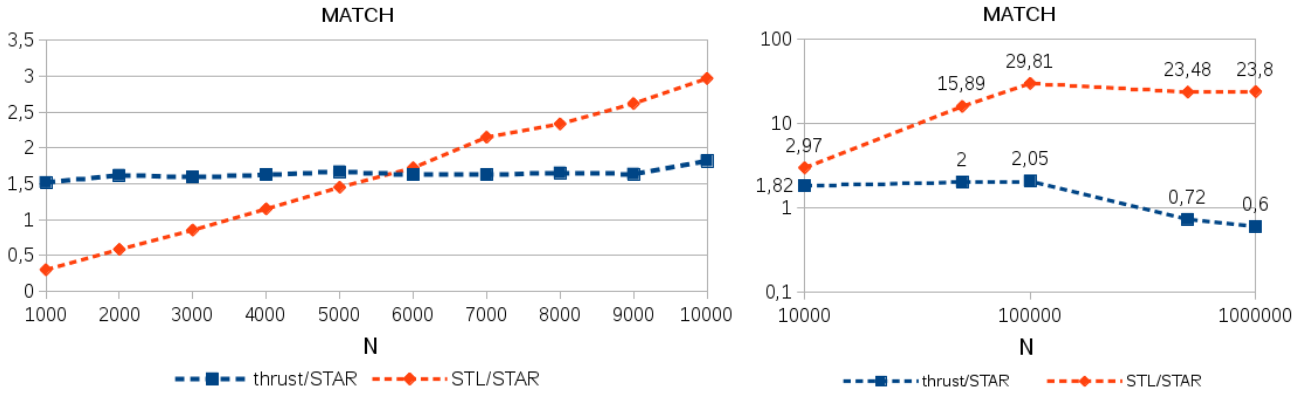


Рис. 6: Сравнение времени работы алгоритмов поиска.

Приведем сравнение следующих реализаций:

- **STAR** — реализация ассоциативного алгоритма MATCH;
- **STL** — процедура std::find();
- **thrust** — процедура thrust::find().

Отметим, что алгоритмы библиотек STL и thrust передают указатель на одно из вхождений искомого элемента и поиск проводится по всем элементам массива. Из рисунка 6 видно, что последовательный алгоритм из библиотеки STL работает быстрее для векторов небольшой размерности (до 6 000 элементов), но с ростом размерности значительно уступает параллельным реализациям.

В случае, когда все блоки могут обрабатываться одновременно ($N \leq 100\,000$ на GEFORCE 920M), реализация ассоциативного алгоритма MATCH работает в $1,5 - 2$ раза быстрее, чем thrust::find().

4.3 III группа алгоритмов: SUBTV

Из группы арифметических алгоритмов рассмотрим процедуру поэлементного вычитания массивов. Теоретическая сложность ассоциативной процедуры SUBTV оценивается как $O(h)$, где h — ширина таблицы,

и не зависит от длины таблицы N. Теоретическая сложность реализации на графическом ускорителе — $O(h + \lceil \log_{64}(N) \rceil)$.

Проводится сравнение производительности следующих реализаций:

- **subtv** — реализация ассоциативного алгоритма SUBTV;
- **STL** — процедура std::transform(...,std::minus<int>());
- **thrust** — процедура thrust::transform(...,thrust::minus<int>());

В библиотеках STL и thrust есть процедура transform_if(...), предикатный аналог используемой процедуры, но время его работы отличается не существенно, поэтому рассматриваться не будет.

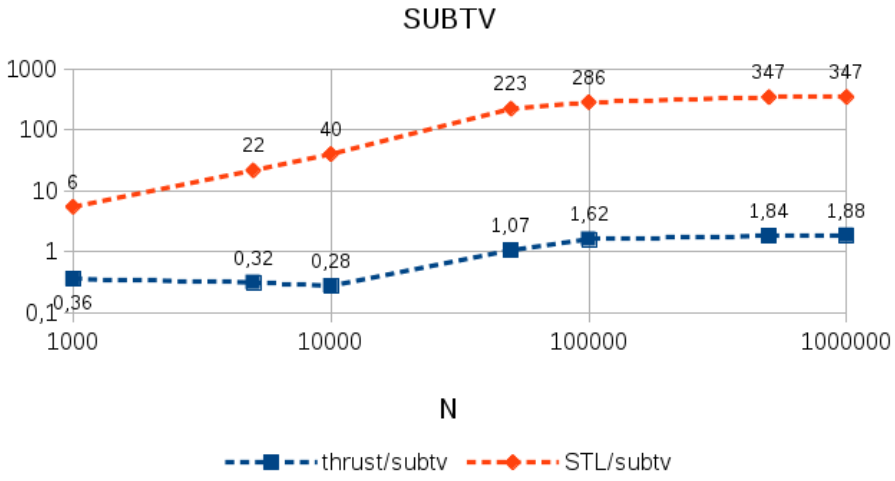


Рис. 7: Отношение времени работы реализации.

Из рисунка 7 видно, что реализация ассоциативного алгоритма работает медленнее реализации из библиотеки thrust на данных при $N \leq 10\,000$, работает сравнимое время при $N \approx 50\,000$ и работает быстрее на данных большего размера. Последовательная реализация сильно уступает в производительности параллельным.

4.4 IV группа алгоритмов: TMERGE

Для данной группы алгоритмов столбцы можно обрабатывать как поочередно, так и одновременно, поскольку нет зависимости по данным. Поэтому сравним оба варианта:

- **tmarge1D:** столбцы обрабатываются поочередно, как во II группе алгоритмов.
- **tmarge2D:** столбцы обрабатываются одновременно ($gridDim.y = h$).

Приведем сравнение со следующими реализациями:

- **STL:** std::copy() проводит копирование всех элементов;
- **STL_if:** copy_if проводит копирование только тех элементов, которые удовлетворяют некоторому предикату (данная процедура не была включена в библиотеку STL, ее реализация была взята из [5]);
- **thrust:** thrust::copy() проводит копирование всех элементов;
- **thrust_if** thrust::copy_if() проводит копирование только тех элементов, которые удовлетворяют некоторому предикату.

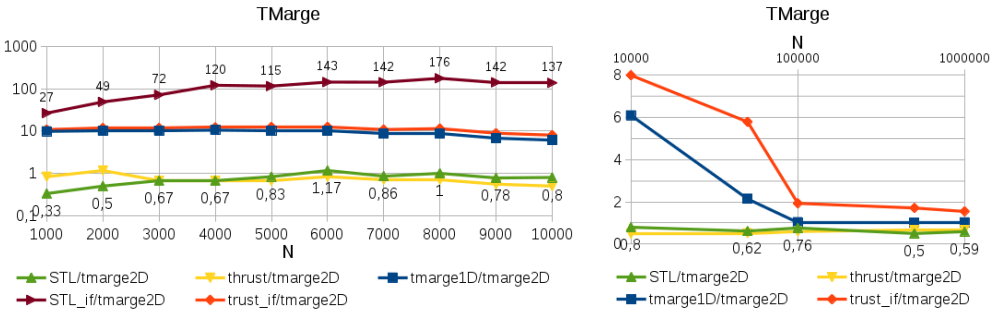


Рис. 8: Отношение времени работы реализации.

Из рисунка 8 видно следующее. Реализация tmarge2D сравнима по времени с беспредикатными версиями стандартных библиотек STL и thrust ($4-6\mu c$ на векторах до 10 000 элементов) и существенно выигрывает в производительности у предикатных. Реализация с поочередным обрабатыванием столбцов tmarge1D сравнима в работе с thrust_if на векторах до 10 000 элементов (tmarge1D: $60\mu c$, thrust_if: $70-80\mu c$) и совпадает с tmerge2D на векторах более 100 000 элементов, когда не достаточно ресурсов для физически одновременного исполнения блоков.

5 Выводы

Star–машина использует существенно другое представление данных, поэтому механический перенос ассоциативных алгоритмов на ЭВМ стандартной архитектуры невозможен.

Построенная реализация базовых ассоциативных алгоритмов на GPU дает существенное ускорение по сравнению с библиотекой STL и, зачастую, выигрывает в производительности у библиотеки CUDA thrust.

В представленной реализации Star–машины есть потенциал для оптимизации, связанный с вычислением конфигурации блоков с учетом свободных ресурсов.

Для группы ассоциативных алгоритмов возможен двухуровневый параллелизм при достаточных вычислительных ресурсах: IV группа базовых процедур, алгоритм Уоршалла [2].

Список литературы

[1] Nepomniaschaya A. S. Basic associative parallel algorithms for vertical processing systems // Bulletin of the Novosibirsk Computing Center. 2009. Vol. 9. P. 63–77.

[2] Снытникова Т. В., Непомнящая А. Ш. Решение задач на графах с помощью Star–машины, реализуемой на графических ускорителях // Прикладная дискретная математика, 2016, No3(33), С. 98–115.

[3] Nepomniaschaya A. S., Dvoskina M. A. A simple implementation of Dijkstra's shortest path algorithm on associative parallel processors // Fundamenta Informaticae. IOS Press, 2000. Vol. 43. P. 227–243.

[4] Potter J. L. Associative Computing: A Programming Paradigm for Massively Parallel Computers. Perseus Publishing, 1991.

[5] Страуструп Б. Язык программирования C++. Специальное издание. Бином, 2012.

[6] Realeases-thrust/thrust-GitHub. 2017. https://github.com/thrust/thrust/releases.

Татьяна Валентиновна Снытникова — мл. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: snytnikovat@ssd.sscc.ru;
Анна Шмилевна Непомнящая — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: anep@ssd.sscc.ru.
Дата поступления — 25 мая 2017 г.

ЭФФЕКТИВНЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ДЛЯ ЗАДАЧИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УПРУГИХ ВОЛН В ДВУХМЕРНОЙ ФРАКТАЛЬНОЙ СЛУЧАЙНОЙ СРЕДЕ

О. Н. Соболева[1,2,3]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[3] *Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск*

УДК 517.968

В геофизической неоднородной среде, как правило, координаты мелкомасштабных неоднородностей точно неизвестны. По этой причине физические параметры среды описывают статистическими полями. Лабораторные исследования кернов и полевые измерения показали, что в сильно неоднородных средах значительно увеличивается разброс параметров среды, если масштаб измерений уменьшается. Этот факт привел многих исследователей к пониманию того, что такие среды хорошо описываются случайными фрактальными полями. В настоящей работе с помощью метода подсеточного моделирования получены уравнения для эффективных коэффициентов в уравнениях для упругих волн, если модуль параметры среды аппроксимируются непрерывными мультипликативными каскадами с логарифмически нормальным распределением.

Ключевые слова: сейсмические волны, многомасштабные неоднородные среды, подсеточное моделирование, эффективные коэффициенты.

Введение

Осадконакопление в достаточно спокойных условиях (в отсутствии антропогенных факторов или природных катастроф) приводит к тому, что природные неоднородные среды приобретают свойства слоистой системы. Как правило, решение таких задач основано на аналитическом или численном решении уравнений с кусочно-постоянными коэффициентами для сред с разного вида регулярными неоднородностями – слоями. Однако для природных сред, особенностью которых является их существенная неоднородность, решение задачи требует больших вычислительных затрат и использование его для анализа и интерпретации результатов существенно затруднено. Обычно мелкомасштабные аномалии поля можно учесть с помощью эффективных коэффициентов, используя статистические подходы [1]. При полномасштабном численном моделировании процесса распространения волн в средах, включающих мелкомасштабные неоднородности эффективные коэффициенты слабо зависят от граничных условий, если масштаб неоднородностей много меньше длины волны. В этом случае для определения эффективных коэффициентов нужно учитывать члены высшего порядка в теории возмущений [1]. Геофизическая, среда, как правило, является многомасштабной, к тому же координаты мелкомасштабных неоднородностей точно неизвестны. Поэтому часто среда описывается статистическими полями. Лабораторные исследования кернов и полевые измерения показали, что в неупорядоченных неоднородных средах увеличивается разброс по величине параметров среды и уменьшается корреляционная длина, если масштаб измерений уменьшается [2], [3]. Такие геофизические неупорядоченные среды хорошо описываются мультипликативными иерархическими каскадами с негауссовским распределением вероятностей и фрактальными моделями [2]. Этот факт позволяет для построения эффективного решения применять метод подсеточного моделирования. В настоящей работе с помощью метода подсеточного моделирования получены эффективные коэффициенты для задачи распространения упругих волн, если параметры аппроксимируются непрерывными мультифракталами с логарифмически нормальным распределением вероятностей в изотропной среде.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 15-01-01458).

1 Постановка задачи

Уравнения для задачи распространения упругих волн в двумерной неоднородной изотропной среде имеют вид:

$$\begin{aligned}\rho\frac{\partial^2 u_{x_1}}{\partial^2 t}-\frac{\partial}{\partial x_1}\left((\lambda+2\mu)\frac{\partial u_{x_1}}{\partial x_1}+\lambda\frac{\partial u_{x_2}}{\partial x_2}\right)-\frac{\partial}{\partial x_2}\left(\mu\frac{\partial u_{x_1}}{\partial x_2}+\mu\frac{\partial u_{x_2}}{\partial x_1}\right) &= f_{x_1}(\mathbf{x},t)\\ \rho\frac{\partial^2 u_{x_2}}{\partial^2 t}-\frac{\partial}{\partial x_1}\left(\mu\frac{\partial u_{x_1}}{\partial x_2}+\mu\frac{\partial u_{x_2}}{\partial x_1}\right)-\frac{\partial}{\partial x_2}\left(\lambda\frac{\partial u_{x_1}}{\partial x_1}+(\lambda\ +2\mu)\frac{\partial u_{x_2}}{\partial x_2}\right) &= f_{x_2}(\mathbf{x},t)\end{aligned} \tag{1}$$

где $\mathbf{x}$ — вектор координат, t- время, ρ — плотность, $\lambda(\mathbf{x})$, $\mu(\mathbf{x})$ — коэффициенты Ламе, $u_{x_1}(\mathbf{x},t)$ and $u_{x_2}(\mathbf{x},t)$ — компоненты смещения, $f_{x_1}(\mathbf{x},t)$, $f_{x_2}(\mathbf{x},t)$ — компоненты источника с доминантной частотой ω_0. Для моделирования случайных полей $\lambda(\mathbf{x})$, $\mu(\mathbf{x})$, ρ используется подход, подробно описанный в работе [4]. Пусть, например, поле коэффициента $\mu(\mathbf{x})$ известно. Это означает, что выполнено его измерение на некотором масштабе l_0 в каждой точке. Чтобы перейти к более грубой сетке масштабов не достаточно сгладить это поле по масштабу l, $l > l_0$, потому что сглаженное поле не будет правильно описывать физический процесс описываемый системой уравнений (1) на интервале масштабов $(l,\ L)$, где L максимальный масштаб неоднородности среды. Это объясняется тем, что флуктуации коэффициента $\mu(\mathbf{x})$ на интервале масштабов $(l_0,\ L)$ коррелируют с флуктуациями полей $\frac{\partial u_{x_i}}{\partial x_j}$, $(i=1,2,\ j=1,2)$ и эти корреляции могут быть достаточно большими. Рассмотрим безразмерное поле ψ, равное отношению полей полученных сглаживанием поля $\mu(\mathbf{x},l_0)$ по двум различным l, l' масштабам, близким к l_0. Пусть $\mu(\mathbf{x},l)$ сглаженное по масштабу l поле $\mu(\mathbf{x},l_0)$. Для ψ имеем сотношение $\psi(\mathbf{x},l,l')=\mu(\mathbf{x})_{l'}/\mu(\mathbf{x})_l$, $l'<l$. Поле ψ меняется плавно по сравнению с полями $\mu(\mathbf{x},l)$, $\mu(\mathbf{x},l')$. Разложим поле ψ в ряд относительно $(l-l')$, и оставим только члены первого порядка малости при $l'\to l$. В результате получим:

$$\frac{\partial \ln\mu_l(\mathbf{x})}{\partial \ln l}=\varphi(\mathbf{x},l), \tag{2}$$

здесь $\varphi(\mathbf{x},l')=(\partial\psi(\mathbf{x},l',l'y)/\partial y)\mid_{y=1}$. Мелкомасштабные флуктуации поля φ наблюдаются только в некотором конечном диапазоне масштабов $l_0, L)$. Решение уравнения (2) равно

$$\mu_{l_0}(\mathbf{x})=\mu_0\exp\left(-\int_{l_0}^{L}\varphi(\mathbf{x},l_1)\frac{dl_1}{l_1}\right), \tag{3}$$

здесь μ_0 — константа. Согласно теореме о суммах независимых случайных полей [6], если дисперсия $\varphi(\mathbf{x},l)$ в данной точке конечна, то при больших значениях L/l_0 интеграл в (3) стремится к полю с нормальным распределением вероятностей. Коэффициент плотности ρ моделируется таким же образом:

$$\rho_{l_0}(\mathbf{x})=\rho_0\exp\left(-\int_{l_0}^{L}\chi(\mathbf{x},l_1)\frac{dl_1}{l_1}\right). \tag{4}$$

Для получения эффективных коэффициентов, задача решается при условии, что $\lambda(\mathbf{x})$=$\mu(\mathbf{x})$, как первый шаг.

Предполагается, что поля $\varphi(\mathbf{x},l)$, $\chi(\mathbf{x},l)$ имеют нормальное распределение и изотропные, однородные корреляционные функции:

$$\begin{aligned}&<\ \varphi(\mathbf{x},l)\ \varphi(\mathbf{y},l')>-<\varphi(\mathbf{x},l)><\varphi(\mathbf{y},l')>=\Phi^{\varphi\varphi}(\mathbf{x}-\mathbf{y},l,l')\delta(\ln l-\ln l'),\\ &<\ \chi(\mathbf{x},l)\ \chi(\mathbf{y},l')>-<\chi(\mathbf{x},l)><\chi(\mathbf{y},l')>=\Phi^{\chi\chi}(\mathbf{x}-\mathbf{y},l,l')\delta(\ln l-\ln l'),\\ &<\ \varphi(\mathbf{x},l)\ \chi(\mathbf{y},l')>-<\varphi(\mathbf{x},l)><\chi(\mathbf{y},l')>=\Phi^{\varphi\chi}(\mathbf{x}-\mathbf{y},l,l')\delta(\ln l-\ln l').\end{aligned} \tag{5}$$

Угловые скобки означают статистическое усреднение.

2 Подсеточное моделирование

Функции плотности и коэффициент Ламе разделим на две компоненты относительно масштаба l. Крупномасштабные компоненты (надсеточные) $\mu(\mathbf{x},l)$, $\rho(\mathbf{x},l)$, получим статистическим усреднением по всем $\varphi(\mathbf{x},l_1)$

и $\chi(\mathbf{x}, l_1)$ при $l_0 < l_1 < l$, $l - l_0 = dl$ где $l - l_0 = dl$ мало. Мелкомасштабные (подсеточные) компоненты $\rho'(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}) - \rho(\mathbf{x}, l)$, $\mu'(\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x}) - \mu(x, l)$ можно записать как:

$$\begin{aligned}
\rho(\mathbf{x}, l) &= \rho_0 \exp\left[-\int_l^L \chi(\mathbf{x}, l_1)\frac{dl_1}{l_1}\right], \\
\rho'(\mathbf{x}) &= \rho(\mathbf{x}, l)\left[\exp\left[-\int_{l_0}^{l} \chi(\mathbf{x}, l_1)\frac{dl_1}{l_1}\right] - 1\right], \ \langle\rho'(\mathbf{x})\rangle = 0, \\
\mu(\mathbf{x}, l) &= \mu_0 \exp\left[-\int_l^L \varphi(\mathbf{x}, l_1)\frac{dl_1}{l_1}\right]\left\langle\exp\left[-\int_{l_0}^{l} \varphi(\mathbf{x}, l_1)\frac{dl_1}{l_1}\right]\right\rangle, \\
\mu'(\mathbf{x}) &= \mu(\mathbf{x}, l)\left[\frac{\exp\left[-\int\limits_{l_0}^{l} \varphi(\mathbf{x}, l_1)\frac{dl_1}{l_1}\right]}{\left\langle\exp\left[-\int\limits_{l_0}^{l} \varphi(\mathbf{x}, l_1)\frac{dl_1}{l_1}\right]\right\rangle} - 1\right], \ \langle\mu'(\mathbf{x})\rangle = 0.
\end{aligned} \tag{6}$$

После преобразования Фурье по времени уравнения (1) будут иметь вид:

$$\begin{aligned}
&\omega^2\rho u_{x_1} + \frac{\partial}{\partial x_1}\left(3\mu\frac{\partial u_{x_1}}{\partial x_1} + \mu\frac{\partial u_{x_2}}{\partial x_2}\right) + \frac{\partial}{\partial x_2}\left(\mu\frac{\partial u_{x_1}}{\partial x_2} + \mu\frac{\partial u_{x_2}}{\partial x_1}\right) = -f_{x_1}(\omega, \mathbf{x}) \\
&\omega^2\rho u_{x_2} + \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\mu\frac{\partial u_{x_1}}{\partial x_2} + \mu\frac{\partial u_{x_2}}{\partial x_1}\right) + \frac{\partial}{\partial x_2}\left(\mu\frac{\partial u_{x_1}}{\partial x_1} + 3\mu\frac{\partial u_{x_2}}{\partial x_2}\right) = -f_{x_2}(\omega, \mathbf{x})
\end{aligned} \tag{7}$$

Используя (6) усредним решение системы (7) по мелкомасштабным компонентам:

$$\begin{aligned}
&\omega^2\rho(\mathbf{x},l)\, u_{x_1}(\omega, \mathbf{x},l) + \frac{\partial}{\partial x_1}\left(3\mu(\mathbf{x},l)\frac{\partial u_{x_1}(\omega, \mathbf{x},l)}{\partial x_1} + \mu(\mathbf{x},l)\frac{\partial u_{x_2}(\omega, \mathbf{x},l)}{\partial x_2}\right) \\
&+\frac{\partial}{\partial x_2}\left(\mu(\mathbf{x},l)\frac{\partial u_{x_1}(\omega, \mathbf{x},l)}{\partial x_2} + \mu(\mathbf{x},l)\frac{\partial u_{x_2}(\omega, \mathbf{x},l)}{\partial x_1}\right) \\
&+\omega^2\left\langle\rho'(\mathbf{x})\, u'_{x_1}(\mathbf{x})\right\rangle + \frac{\partial}{\partial x_1}\left\langle 3\mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_1} + \mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_2}\right\rangle \\
&+\frac{\partial}{\partial x_2}\left\langle\mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_2} + \mu(\mathbf{x}')\frac{\partial u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_1}\right\rangle = -f_{x_1}(\mathbf{x}) \\
&\omega^2\rho(\mathbf{x},l)\, u_{x_2}(\omega, \mathbf{x},l) + \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\mu(\mathbf{x},l)\frac{\partial u_{x_1}(\omega, \mathbf{x},l)}{\partial x_2} + \mu(\mathbf{x},l)\frac{\partial u_{x_2}(\omega, \mathbf{x},l)}{\partial x_1}\right) \\
&+\frac{\partial}{\partial x_2}\left(\mu(\mathbf{x},l)\frac{\partial u_{x_1}(\omega, \mathbf{x},l)}{\partial x_1} + 3\mu(\mathbf{x},l)\frac{\partial u_{x_2}(\omega, \mathbf{x},l)}{\partial x_2}\right) \\
&+\omega^2\left\langle\rho'(\mathbf{x})\, u'_{x_2}(\mathbf{x})\right\rangle + \frac{\partial}{\partial x_1}\left\langle\mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_2} + \mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_1}\right\rangle \\
&+\frac{\partial}{\partial x_2}\left\langle\mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_1} + 3\mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_2}\right\rangle = -f_{x_2}(\omega, \mathbf{x})
\end{aligned} \tag{8}$$

В этом надсеточном уравнении есть подсеточные члены: $S_1 = \left\langle\rho'(\mathbf{x})\, u'_{x_1}(\mathbf{x})\right\rangle$, $S_2 = \left\langle\rho'(\mathbf{x})\, u'_{x_2}(\mathbf{x})\right\rangle$, $S_3 = \left\langle 3\mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_1} + \mu(\mathbf{x}')\frac{\partial u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_2}\right\rangle$, $S_4 = \left\langle\mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_2} + \mu(\mathbf{x}')\frac{\partial u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_1}\right\rangle$, $S_5 = \left\langle\mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_1} + 3\mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_2}\right\rangle$. Подсеточные члены в (8) неизвестны и не могут быть отброшены без предварительной оценки. Оценки этих выражений в (8) определяют подсеточную модель. Для оценки используем теорию возмущений. Вычитая систему (8) из системы (7) и отбрасывая члены второго порядка

малости, получим подсеточные уравнения:

$$
\begin{aligned}
& \rho(\mathbf{x},l)\,\omega^2 u'_{x_1}(\mathbf{x}) + 3\mu(\mathbf{x},l)\,\frac{\partial^2 u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_1^2} + 2\mu(\mathbf{x},l)\,\frac{\partial^2 u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_1} + \mu(\mathbf{x},l)\,\frac{\partial^2 u'_{x_1(\mathbf{x})}}{\partial x_2^2} \\
= \; & -\omega^2 \rho' u_{x_1}(\omega,\mathbf{x},l) - \frac{\partial}{\partial x_1}\left(3\mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_1}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_1} + \mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_2}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_2}\right) \\
& -\frac{\partial}{\partial x_2}\left(\mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_2}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_1} + \mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_1}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_2}\right) \qquad (9) \\
& \omega^2 \rho(\mathbf{x},l)\,u'_{x_2}(\mathbf{x}) + 2\mu(\mathbf{x},l)\,\frac{\partial^2 u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_2 \partial x_1} + \mu(\mathbf{x},l)\,\frac{\partial^2 u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_1^2} + 3\mu(\mathbf{x},l)\,\frac{\partial^2 u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_2^2} \\
= \; & -\omega^2 \rho' u_{x_2}(\omega,\mathbf{x},l) - \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_1}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_2} + \mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_2}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_1}\right) \\
& -\frac{\partial}{\partial x_2}\left(\mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_1}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_1} + 3\mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_2}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_2}\right)
\end{aligned}
$$

Смещения $u_{x_i}(\omega,\mathbf{x},l)$ в правой части (9) предполагаются известными. Для фрактальных полей малое изменение масштаба измерения вызывает значительное возмущение поля. Поэтому можно предположить, что $\mu(\mathbf{x},l)$, $\rho(\mathbf{x},l)$, $u_{x_i}(\omega,\mathbf{x},l)$ и призводные этих полей меняются медленнее, чем $\mu(\mathbf{x})'$, $\rho(\mathbf{x})'$, u'_{x_i} и их производные. Функция Грина для уравнений (9) имеет вид:

$$
\begin{aligned}
G_{ij}(x_1,x_2,x'_1,x'_2) &= \frac{1}{8i\rho}\left(A\delta_{ij} - B\left(2\gamma_i\gamma_j - \delta_{ij}\right)\right),\ r = \sqrt{(x_1-x'_1)^2 + (x_2-x'_2)^2}, \\
A &= \frac{1}{\alpha^2}H_0^{(2)}(k_\alpha r) + \frac{1}{\beta^2}H_0^{(2)}(k_\beta r),\ B = \frac{1}{\alpha^2}H_2^{(2)}(k_\alpha r) - \frac{1}{\beta^2}H_2^{(2)}(k_\beta r), \\
k_\alpha &= \omega/\alpha \quad k_\beta = \omega/\beta,\ \gamma_i = \frac{x_i - x'_i}{r}, \alpha^2 = 3\beta^2,\ \beta = \sqrt{\frac{\mu(\mathbf{x},l)}{\rho(\mathbf{x},l)}},
\end{aligned}
$$

где $H_m^{(2)}(\cdot)$ функции Хенкеля второго порядка. Поэтому решение системы (9) имеет вид

$$
\begin{aligned}
u'_{x_1}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{8i\rho(\mathbf{x},l)}\int \left(A - B\left(2\gamma_1^2 - 1\right)\right)\Omega_{x_1}(\omega,\mathbf{x}',l) - 2\gamma_1\gamma_2 B\Omega_{x_2}(\omega,\mathbf{x}',l)\,d\mathbf{x}', \\
u'_{x_2}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{8i\rho(\mathbf{x},l)}\int -2\gamma_1\gamma_2 B\Omega_{x_1}(\omega,\mathbf{x}',l) + \left(A - B\left(2\gamma_2^2 - 1\right)\right)\Omega_{x_2}(\omega,\mathbf{x}',l)\,d\mathbf{x}',
\end{aligned}
$$

где

$$
\begin{aligned}
& \Omega_{x_1}(\omega,\mathbf{x},l) = -\omega^2\rho' u_{x_1}(\omega,\mathbf{x},l) - \frac{\partial}{\partial x_1}\left(3\mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_1}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_1} + \mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_2}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_2}\right) \\
& -\frac{\partial}{\partial x_2}\left(\mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_2}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_1} + \mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_1}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_2}\right), \\
& \Omega_{x_2}(\omega,\mathbf{x},l) = -\omega^2\rho' u_{x_2}(\omega,\mathbf{x},l) - \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_1}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_2} + \mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_2}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_1}\right) \\
& -\frac{\partial}{\partial x_2}\left(\mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_1}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_1} + 3\mu'(\mathbf{x})\,\frac{\partial u_{x_2}(\omega,\mathbf{x},l)}{\partial x_2}\right).
\end{aligned}
$$

Подставляя это решение в подсеточные члены придем к следующим формулам

$$
\begin{aligned}
S_1 &= \frac{1}{8i\rho(\mathbf{x},l)}\left\langle \rho'(\mathbf{x})\int\left(A(r)-B(r)\left(2\gamma_1^2-1\right)\right)\Omega_{x_1}(\omega,\mathbf{x}',l)-2\gamma_1\gamma_2 B(r)\,\Omega_{x_2}(\omega,\mathbf{x}',l)\,d\mathbf{x}'\right\rangle,\\
S_2 &= \frac{1}{8i\rho(\mathbf{x},l)}\left\langle \rho'(\mathbf{x})\int\left(A(r)-B(r)\left(2\gamma_2^2-1\right)\right)\Omega_{x_2}(\omega,\mathbf{x}',l)-2\gamma_1\gamma_2 B(r)\,\Omega_{x_1}(\omega,\mathbf{x}',l)\,d\mathbf{x}'\right\rangle,\\
S_3 &= \frac{1}{8i\rho(\mathbf{x},l)}\left\langle \mu'(\mathbf{x})\int\left(3\frac{\partial}{\partial x_1}\left(A(r)-B(r)\left(2\gamma_1^2-1\right)\right)-2\frac{\partial}{\partial x_2}\gamma_1\gamma_2 B(r)\right)\Omega_{x_1}(\omega,\mathbf{x}',l)\,d\mathbf{x}'\right\rangle\\
&+\frac{1}{8i\rho(\mathbf{x},l)}\left\langle \mu'(\mathbf{x})\int\left(\frac{\partial}{\partial x_2}\left(A(r)-B(r)\left(2\gamma_2^2-1\right)\right)-6\frac{\partial}{\partial x_1}\gamma_1\gamma_2 B(r)\right)\Omega_{x_2}(\omega,\mathbf{x}',l)\,d\mathbf{x}'\right\rangle, \qquad (10)\\
S_4 &= \frac{1}{8i\rho(\mathbf{x},l)}\left\langle \mu'(\mathbf{x})\int\left(\frac{\partial}{\partial x_2}\left(A(r)-B(r)\left(2\gamma_1^2-1\right)\right)-2\frac{\partial}{\partial x_1}\gamma_1\gamma_2 B(r)\right)\Omega_{x_1}(\omega,\mathbf{x}',l)\,d\mathbf{x}'\right\rangle\\
&+\frac{1}{8i\rho(\mathbf{x},l)}\left\langle \mu'(\mathbf{x})\int\left(\frac{\partial}{\partial x_1}\left(A(r)-B(r)\left(2\gamma_2^2-1\right)\right)-2\frac{\partial}{\partial x_2}\gamma_1\gamma_2 B(r)\right)\Omega_{x_2}(\omega,\mathbf{x}',l)\,d\mathbf{x}'\right\rangle,\\
S_5 &= \frac{1}{8i\rho(\mathbf{x},l)}\left\langle \mu'(\mathbf{x})\int\left(\frac{\partial}{\partial x_1}\left(A-B\left(2\gamma_1^2-1\right)\right)-6\frac{\partial}{\partial x_2}\gamma_1\gamma_2 B\right)\Omega_{x_1}(\omega,\mathbf{x}',l)\,d\mathbf{x}'\right\rangle\\
&+\frac{1}{8i\rho(\mathbf{x},l)}\left\langle \mu'(\mathbf{x})\int\left(3\frac{\partial}{\partial x_2}\left(A-B\left(2\gamma_2^2-1\right)\right)-2\gamma_1\gamma_2\frac{\partial}{\partial x_1}B\right)\Omega_{x_2}(\omega,\mathbf{x}',l)\,d\mathbf{x}'\right\rangle,
\end{aligned}
$$

Получим оценки для подсеточных членов в уравнении (8) используя выражения из (6). Применим интегрирование по частям и перейдем к полярным координатам. Пренебрегая членами порядка L^2, получим

$$
\begin{aligned}
&\omega^2\left\langle \rho'(\mathbf{x})\,u'_{x_1}(\mathbf{x})\right\rangle\simeq 0,\ \ \left\langle \rho'(\mathbf{x})\,\omega^2 u'_{x_2}(\mathbf{x})\right\rangle\simeq 0, \qquad (11)\\
&\left\langle 3\mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_1}+\mu(\mathbf{x}')\frac{\partial u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_2}\right\rangle\simeq\\
&-\frac{10}{9}\Phi^{\varphi\varphi}(0,l)\frac{dl}{l}\ 3\mu(\mathbf{x},l)\frac{\partial u_{x_1}(\mathbf{x},l)}{\partial x_1}-2\Phi^{\varphi\varphi}(0,l)\frac{dl}{l}\ \mu(\mathbf{x},l)\frac{\partial u_{x_2}(\mathbf{x},l)}{\partial x_2},\\
&\left\langle \mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_2}+\mu(\mathbf{x}')\frac{\partial u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_1}\right\rangle\simeq-\frac{1}{3}\Phi^{\varphi\varphi}(0,l)\frac{dl}{l}\mu(\mathbf{x},l)\left(\frac{\partial u_{x_2}(\mathbf{x},l)}{\partial x_1}+\frac{\partial u_{x_1}(\mathbf{x},l)}{\partial x_2}\right),\\
&\left\langle \mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_1}(\mathbf{x})}{\partial x_1}+3\mu'(\mathbf{x})\frac{\partial u'_{x_2}(\mathbf{x})}{\partial x_2}\right\rangle\simeq\\
&-2\Phi^{\varphi\varphi}(0,l)\,d\mathbf{x}'\frac{dl}{l}\mu(\mathbf{x},l)\frac{\partial u_{x_1}(\mathbf{x},l)}{\partial x_1}-\frac{10}{9}\Phi^{\varphi\varphi}(0,l)\,3\mu(\mathbf{x},l)\frac{dl}{l}\frac{\partial u_{x_2}(\mathbf{x},l)}{\partial x_2}
\end{aligned}
$$

Подставим полученные оценки в надсеточные уравнения и приводем подобные члены. Получим, что со вторым порядком точности по (dl/l) параметры μ_{0l}^j удовлетворяют уравнениям

$$
\begin{aligned}
\mu_{0l}^{(1)} &= \left(1-\langle\varphi\rangle\frac{dl}{l}-\frac{11}{18}\Phi^{\varphi\varphi}(0,l)\frac{dl}{l}\right)\mu_0\\
\mu_{0l}^{(2)} &= \left(1-\frac{3}{2}\Phi^{\varphi\varphi}(0,l)\frac{dl}{l}-\langle\varphi\rangle\frac{dl}{l}\right)\mu_0\\
\mu_{0l}^{(3)} &= \left(1-\langle\varphi\rangle\frac{dl}{l}+\frac{1}{6}\Phi^{\varphi\varphi}(0,l)\frac{dl}{l}\right)\mu_0
\end{aligned}
$$

Если $dl\to 0$, то для эффективных коэффициентов μ_{0l}^j, ρ_{0l} получаются уравнения

$$
\begin{aligned}
\rho_{0l} &= \rho_0,\\
\frac{d\ln\mu_{0l}^{(1)}}{d\ln l} &= -\frac{11}{18}\Phi^{\varphi\varphi}(0,l)-\langle\varphi\rangle, \qquad \mu_{0l_0}^{(1)}=\mu_0,\\
\frac{d\ln\mu_{0l}^{(2)}}{d\ln l} &= -\frac{3}{2}\Phi^{\varphi\varphi}(0,l)-\langle\varphi\rangle, \quad \mu_{0l_0}^{(2)}=\mu_0,\\
\frac{d\ln\mu_{0l}^{(3)}}{d\ln l} &= \frac{1}{6}\Phi^{\varphi\varphi}(0,l)-\langle\varphi\rangle, \qquad \mu_{0l_0}^{(2)}=\mu_0. \qquad (12)
\end{aligned}
$$

Если среда масштабно-инвариантная, то решения уравнений (12) имеют простой вид:

$$\rho_{0l} = \rho_0, \quad \mu_{0l}^{(1)} = \mu_0 \left(\frac{l}{l_0}\right)^{-\frac{11}{18}\Phi_0^{\varphi\varphi}-\langle\varphi\rangle}, \quad \mu_{0l}^{(2)} = \mu_0 \left(\frac{l}{l_0}\right)^{-\frac{3}{2}\Phi_0^{\varphi\varphi}-\langle\varphi\rangle}, \quad \mu_{0l}^{(2)} = \mu_0 \left(\frac{l}{l_0}\right)^{\frac{1}{6}\Phi_0^{\varphi\varphi}-\langle\varphi\rangle}. \tag{13}$$

3 Численный эксперимент

Численное моделирование для проверки предлагаемого подхода было проведено для трехмерного уравнения акустики. На рис. 1 приведен упругий модуль для трех масштабов.

На рис. 2 представлены результаты расчетов. Кривая 1 — высислено смещение, если во всей области плотность и модуль упругости постоянны и равны средним значениям. Кривая 2 расчитана с эффективными коэффициентами. Кривая 3 — усредненное по 60 реализациям смещение, если μ моделируется мультипликативным каскадом. Кривая 4 — усредненное по 60 реализациям смещение, если μ и ρ моделируются мультипликативными каскадами.

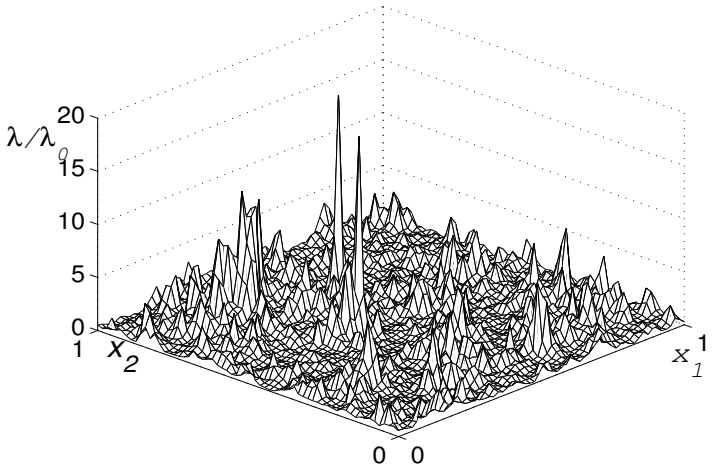


Рис. 1: упругий модуль для трех масштабов в сечении $z = 1/2$.

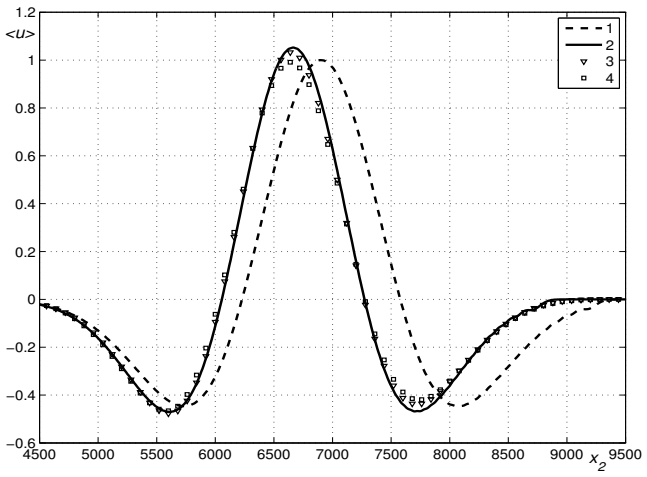


Рис. 2: Результаты численного тестирования

Заключение

В работе получены эффективные коэффициенты для уравнения акустики и двухмерных уравнений теории упругости. Параметры моделей описываются крайне нерегулярными случайными полями близкими к мультифракталам. Мультифракталы получаются, если масштаб l_0 в формуле (3) устремить к нулю. Предложенный алгоритм проверяется прямым численным моделированием трехмерного уравнения акустики. Численная проверка показала хорошее соответствие теоретического результата с результатом, полученным прямым численным моделированием.

Список литературы

[1] Sahimi M. Flow phenomena in rocks: from continuum models, to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing // Reviews of Modern Physics. 1993. V. 65. P. 1393–1534.

[2] Davis, A., A. Marshak, W. Wiscombe, and R. Cahalan, Multifractal characterizations of nonstationarity and intermittency in geophysical fields: Observed, retrieved, or simulated // J. Geophys. Res. 1994. V. 99. P. 8055— 8072.

[3] Sahimi M. and Tajer S.E. Self-affine fractal distributions of bulk density, elastic moduli and seismic wave velocities of rock // Physical Rewiew E. 2005. V. 71, 046301.

[4] Соболева О.Н., Курочкина Е. П. Подсеточное моделирование процессов протекания в анизотропной фрактальной среде// ПМТФ. 2009. № 5. С. 75–89.

[5] Kolmogorov A. N. A refinement of previous hypotheses concerning the local structure of turbulence in a viscous incompressible fluid at high Reynolds number
Journal Fluid Mechanics. 1962. V. 13. P. 82–85.

[6] Гнеденко Б.В., Колмогоров А.Н. Предельные распределения для сумм независимых случайных величин. Ленинград: Гостехиздат, 1954.

[7] Dagan G., Flow and transport in Porous Formation, Berlin, Springer-Verlag, 1989.

[8] Рытов С. М., Кравцов Ю. А., Татарский В. И. Введение в статистическую радиофизику, Часть 2, Случайные поля, Наука, Москва, 1978.

[9] Ogorodnikov V.A., Prigarin S.M. Numerical Modeling of Random Processes and Fields: Algorithms and Applications, Utrecht, The Netherlands, 1996

Ольга Николаевна Соболева — д.ф.-м.н., вед. науч.сотр. Новосибирского государственного университета;
e-mail: olga@nmsf.sscc.ru;
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕЙСТВИЯ АТАК НА БЕСПРОВОДНЫЕ СЕНСОРНЫЕ СЕТИ

О. Д. Соколова[1], В. В. Шахов[1,2], А. Н. Юргенсон[1]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск*

УДК 51-74

Рассматривается задача функционирования беспроводных сетей в условиях несанкционированных вторжений, под действием атак. Исследуется моделирование атак Black Hole и Jamming на узлы БСС. В качестве модели беспроводной сети используются графы единичных кругов (UDG-графы), которые наиболее адекватно описывают связи в беспроводных сетях, где передача информации между узлами возможна, если они находятся в пределах взаимной достижимости радиосигнала. Полученные аналитические результаты согласуются с результатами имитационного моделирования.

Ключевые слова: беспроводные сенсорные сети, несанкционированные вторжения, атаки Black Hole и Jamming.

Введение

Технологии, основанные на беспроводных сенсорных сетях, используются во многих сферах, и с каждым годом это использование расширяется. Очевидно, что необходимо уделять особое внимание вопросам безопасности функционирования БСС. Из-за присущих сенсорным узлам ресурсных ограничений, существующие методы сетевой безопасности, в том числе разработанные для мобильных сетей Ad-Hoc, плохо подходят для БСС. В качестве важного вопроса безопасность в беспроводных сенсорных сетях привлекает многих исследователей. Полностью нивелировать последствия несанкционированных вторжений в сеть возможно далеко не во всех случаях. Однако можно снизить последствия атак, если выбрать правильные способы защиты.

1 Беспроводные сенсорные сети

Беспроводные технологии становятся все более популярными в повседневной жизни. Они позволяют использовать для сбора данных с больших территорий несколько устройств без физических соединений, без необходимости подключения к сети. Беспроводные сенсорные сети [1], используемые в различных областях (например, мониторинг территории), обычно образованы большим количеством сетевых узлов — автономных устройств, с помощью которых можно получать информацию о наблюдаемых параметрах и передавать ее для дальнейшей обработки. Каждый узел в сети должен иметь модуль для сбора данных и автономный источник питания (чаще всего непополняемый). Кроме того, узлы должны быть оснащены устройствами беспроводной связи, чтобы передавать собранную информацию по радиоканалу. Все собранные данные передаются в один или несколько стоков, которые затем передают информацию базовой станции. Сбор данных и передача в стоки происходит по некоторым алгоритмам маршрутизации. Таким образом, все узлы образуют распределенную, самоорганизующуюся систему.

Несмотря на очевидные преимущества систем с беспроводной связью, они отличаются также и большей по сравнению с проводными сетями уязвимостью. Вследствие организации связей без физических соединений, БСС подвержены многочисленным угрозам безопасности — нарушить беспроводную передачу можно либо непреднамеренно (из-за существующих помех) либо в результате предумышленного вторжения. Для

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке проекта № 11 Программы фундаментальных исследований Президиума РАН.

организации воздействия используются радиопомехи, различные программы с целью изменения или ликвидации информации и др. В простейшей форме злоумышленник препятствует набору частотных диапазонов, используемых для связи, путем передачи непрерывного сигнала помех или нескольких коротких импульсов помех. Целью атаки Node replication (клонирование узла) является изменение данных, которые передаются в базовую станцию. Атака Jamming (создание помех) воздействует на узлы и на каналы передачи данных и затрудняет передачу информации. Действие атаки Black Hole ("черная дыра") оказывается возможным вследствие уязвимости протоколов маршрутизации БСС — узел, который подвергся атаке, рассылает всем смежным узлам ложную информацию о том, что он находится близко к стоку, вследствие чего происходит изменение маршрутизации и вся передаваемая информация теперь проходит через атакованный узел, вследствие чего она может быть заблокирована. Для обнаружения вторжений в БСС и умения противодействовать атакам необходимо использовать надежные протоколы маршрутизации, средства обнаружения вторжений в сеть. Следовательно, важным становится процесс моделирования работы сети, передачи информации в ней, особенно под влиянием воздействий.

2 Моделирование сенсорных сетей

В качестве модели для современных сетей пепредачи данных (в частности, для БСС) удобно использовать случайные геометрические графы, в котором вершины распределены случайным образом на области с евклидовой метрикой. Будем считать, что сигнал от каждого узла распространяется во все стороны с одинаковым для всех устройств радиусом. Узлы могут получать и передавать данные друг другу, если они находятся в пределах взаимной достижимости сигнала. Поэтому смежность двух вершин в таком графе равносильна расположению одной вершины в круге, образованном другой вершиной. Это означает, что в моделируемом графе ребро между двумя вершинами существует, если расстояние между ними в евклидовой метрике меньше либо равно заданного числа. В этом случае удобно использовать в качестве моделей для топологии сети подкласс случайных геометрических графов — графы единичных кругов (Unit Disk Graphs, UDG-графы) [3, 9].

Определение Граф $G = (V, E)$ называется UDG-графом (unit disk graph, граф единичных кругов) если ребро $e = (u, v)$ между вершинами $u, v \in V$ существует в том и только том случае, когда в Евклидовой метрике расстояние между u и v меньше либо равно 1 (или некоторого заданного числа r).

Рассмотрим граф единичных кругов $G = (V, E)$, $|V| = n$, для каждого ребра $e \in E$ поставим в соответствие величину $f(e)$, зависящую от его длины. Это может быть, например, величина, отражающая потребление энергии для передачи данных от одного узла к другому, которая пропорционально квадрату расстояния между узлами. От расстояния между узлами также зависит и количество повторных передач для обеспечения надежной доставки информации [4]. В множестве вершин графе G выделяем одну вершину s — сток, т.е. узел (или один из узлов, если стоков несколько), в который должна собираться информация, передаваемая вершинами сети. Для построения маршрутов от каждой вершины к стоку, на графе строится остовное дерево T (т. е. дерево, содержащее все вершины графа), с направленными ребрами. Алгоритм построения такого дерева зависит от выбранного алгоритма маршрутизации [4, 6]. По направленным дугам от каждой вершины v_i дерева T происходит передаются данные к стоку s.

Количество направленных дуг, входящих в вершину v_i, будем обозначать $d^+(v_i)$.

Для генерации топологий беспроводных сетей использовался метод, описанный в работе [8].

3 Моделирование атак на сенсорную сеть

В качестве критерия устойчивости сенсорной сети будем рассматривать функционирование сети в условиях воздействия различных атак на ее узлы. В результате действия атак может выходить из строя один узел (атака Black Hole) или несколько узлов (атака Jamming). Если какой-то узел, подвергшийся атаке, выходит из строя, то вся информация, переданная в него другими узлами, будет потеряна. В остовном дереве T, построенном по некоторому алгоритму маршрутизации, множество таких узлов (информация от которых потеряна) образует подмножество $V' \in V$. Таким образом, в качестве критерия устойчивости построенного дерева к определенной атаке удобно взять параметр — количество таких узлов $n' = |V'|$ или их нормированное количество: n' деленное на общее число вершин в графе $|V|$.

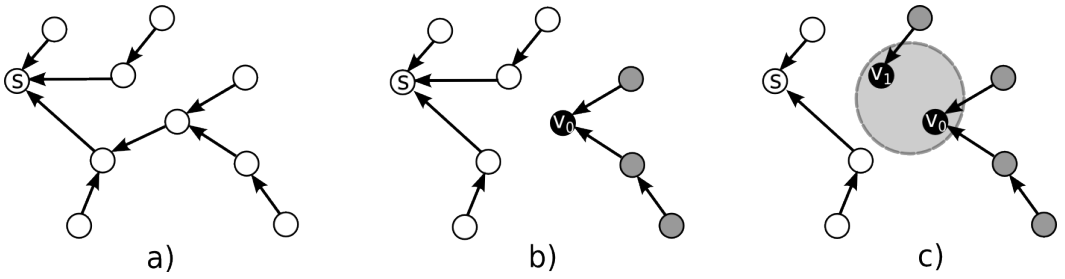


Рис. 1: a) БСС без воздействия атаки; b) атака Black Hole (черным отмечена атакованная вершина, серым — вершины от которых будет потеряна информация); c)атака Jamming (черным отмечены атакованные вершины, попавшие в область действия источника помех, серым — вершины от которых будет потеряна информация).

4 Атака Black Hole

Одним из наиболее опасных разрушающих воздействий в БСС является атака Black Hole [2,7]. В связи с особенностями развертывания БСС, слабыми методами защиты передачи информации, осуществление атаки Black Hole на узлы сети все чаще используется при несанкционированном вторжении. Такую атаку можно организовать двумя способами: разместив в области действия сети новый узел, с помощью которого организуется атака на другие узлы (с целью захвата передаваемой информации) либо взломав один из узлов, участвующих в сборе и передаче информации. Атакованный узел может удалить все пакеты, переданные в него другими узлами для транзитной передачи. Кроме того, этот узел v_0 может распространять по сети ложную информацию, что он является ближайшим узлом к стоку s, а это приводит к изменению маршрутизации.

Для моделирования способов сбора информации от всех узлов и передачи ее в стоки строится дерево T — остовное дерево графа G. Будем считать, что в этом построенном дереве множество узлов, информация от которых потеряна, образует подмножество $V' \in V$. Для оценки устойчивости рассматриваемой сети к атакам будем рассматривать параметр — количество таких узлов $n' = |V'|$ (в численных расчетах будем использовать нормированное количество: n' деленное на общее число вершин в графе $n = |V|$).

Рассмотрим остовное дерево T, построенное для анализа функционирования сети, пусть в нем имеется n вершин, из них одна вершина является стоком. Для удобства обозначим уровни в этом дереве: сток считаем нулевым уровнем; вершины, которые сразу передают информацию в сток — первый уровень и т.д., номер последнего уровня обозначим a.

В [4] авторами было показано, что математическое ожидание числа вершин n', от которых будет потеряна информация после атаки Black Hole, равно:

$$E(n') = \frac{1}{n}(1 + 2|V_1| + \cdots + (a-1)|V_a|), \tag{1}$$

где $V_j \in V$ — вершины, принадлежащие уровню j. В этом случае из формулы (1) следует, что чем меньше число транзитов для передачи от данных от вершины к стоку (число хопов), тем меньше $E(n')$.

5 Атака Jamming

Рассмотрим теперь сеть с такой же топологией, где сбор данных идет по тому же самому остовному дереву T, но внешнее воздействие осуществляется другой атакой — “Jamming”. Подвергаться атаке может не одна вершина, а k вершин, находящихся в зоне действия атаки.

Предположим, на расстоянии R или меньше от источника помех приемники сенсоров гарантировано не могут принять сигнал, тогда k пропорционально площади зоны действия атаки: $k = \rho\pi R^2$, где ρ — плотность, т.е. количество вершин на единицу области.

Для некоторых простых случаев вида остовного дерева T можно вычислить аналитические оценки матожидания величины n'.

Рассмотрим “симметричное” остовное дерево T, имеющее n вершин, для каждой вершины v значение $d^+(v) = m$, кроме вершин последнего уровня (рис. 2). Считаем, что каждая ветвь дерева имеет одинаковое

число уровней. В этом случае номер последнего уровня a связан с m следующим соотношением:

$$n = 1 + m + m^2 + \cdots + m^a. \tag{2}$$

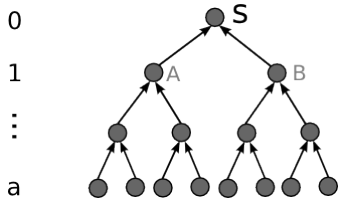


Рис. 2: Пример "симметричного" остовного дерева.

Утверждение. *Пусть число атакованных различных вершин $k = 2$ $(k \le m)$, вершины атакованы с равной вероятностью независимо друг от друга, тогда*

$$E(n') = 2 + \frac{1}{n(n-1)}\Big(2m^2(1 + 2m + 3m^2 + \cdots + am^{a-1})(n - m^a) - \\ - 2m\big((1 + m + \cdots + m^{a-1}) + 2m(1 + m + \cdots + m^{a-2}) + \cdots + am^{a-1}\big)\Big), \tag{3}$$

Доказательство. Для вычисления $E(n')$ нужно перебрать все варианты возможных расположений атакованных вершин (это $n(n-1)$ вариантов), и для каждого варианта вычислить значение n', затем разделить его на $n(n-1)$.

1) Если атакована вершина уровня 0, то теряется информация от всех n вершин. Такое может случится в $k(n-1)$ случаях, получаем слагаемое $\frac{k(n-1)n}{n(n-1)} = k$.

2) Атакованные вершины попадают в разные поддеревья уровня 1 (например, поддеревья A и B на рис. 2). Обозначим (аналог формулы (1)) $\xi = 1 + 2m + 3m^2 + \cdots + am^{a-1}$ — количество вершин, от которых потеряна информация, если атакована одна вершина в поддереве A (с учетом всевозможных ее расположений). Тогда, учитывая все возможные расположения второй атакованной вершины, в этом случае число вершин, от которых будет потеряна информация, равно $2\xi(1+m+\cdots+m^{a-1})$. Используя формулу (2) получим: $2\xi(n-m^a)$. На уровне 1 располагается m вершин и следовательно мы имеем m поддеревьев. Атакованные вершины могут попадать в разные поддеревья или в одно поддерево, значит второе слагаемое в формуле (3): $m^2\xi(n - m^a + 1)$.

3) Если атакованные вершины попадают в одно поддерево (m случаев), то надо учесть случай, когда одна атакованная вершина является потомком другой атакованной вершины (и наоборот, т.е. множитель 2). Т.е. нужно вычесть количество вершин, попадающих в такие пересечения. Поддерево уровня 1 повторно считается 1 раз в поддереве A, т.е вершин в пересечении $1 + m + \cdots + m^{a-1}$. Поддеревья уровня 2 (их m в поддереве A) повторно считаются 2 раза (если вторая атакованная вершина попадает в уровень 2 и уровень 1). В поддереве уровня 2 число вершин равно $1 + m + \cdots + m^{a-2}$. Всего вершин $2m(1 + m + \cdots + m^{a-2})$. На последнем уровне это число равно am^{a-1}.

Получаем последнее слагаемое в формуле (3):
$-2m\big((1 + m + \cdots + m^{a-1}) + 2m(1 + m + \cdots + m^{a-2}) + \cdots + am^{a-1}\big)$. □

Вариант атаки, описанный в утверждении 1, назовем "Random" (случайный). Необходимо учесть, что при атаке "Jamming" из-за свойства UDG-графа большая часть атакуемых вершин является "потомками" других атакованных вершин. Т.е. формула (3) не может быть использована, удобнее применить имитационное моделирование.

Следует учитывать, что некоторые узлы могут быть поражены вне зоны действия радиуса R (будем обозначать такую атаку "Jamming R"). Для таких узлов вероятность $p(x)$ выхода из строя зависит от расстояния x до источника атаки. В этом случае оценка количества атакованных узлов вычисляется по формуле:

$$N = \rho\pi R^2 + 2\pi\rho \int_R^\infty x p(x) dx$$

Так, если вероятность $p(x)$ является экспоненциальной убывающей функцией [5]: $p(x) = e^{-(x-R)}, \quad x > R$, то $N = \rho\pi(R^2 + 2R + 2)$.

6 Результаты моделирования воздействия атак

В работе [4] были представлены результаты экспериментов для атаки Black Hole на БСС. Аналогично предложенному в работе методу были проведены эксперименты для воздействия атак “Jamming” и “Jamming R”. Для проведения экспериментов “Jamming” и “Jamming R”. Рассматривались графы с количеством вершин $|V| = 500$ (радиус достижимости вершин $r = 30$). Было проведено моделирование воздействия атак на случайную область (420x420 точек) с заданным радиусом.

Предполагалось, что атака “Jamming R” выводит из строя вершины с вероятностью $p(x) = 1/10x$, где x расстояние от вершины до источника атаки.

На рис. 3 представлены результаты экспериментов воздействия атак “Jamming” и “Jamming R” и “Random” (число атакованных вершин совпадает с числом атакованных вершин при атаке “Jamming”, но вершины атакуются случайно и независимо друг от друга) на остовное дерево (для построения остовного дерева использовался алгоритм маршрутизации Minimum Hop Route [10]). По оси ординат отмечается нормированное среднее число вершин, от которых потеряна информация. По оси абсцисс — различные радиусы поражения атаки.

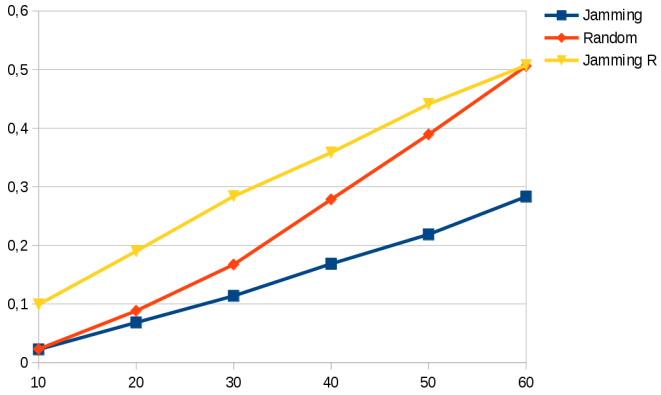


Рис. 3: Нормированное среднее число вершин, от которых теряется информация для разных типов атаки “Jamming”.

На рис. 4 и 5 представлены результаты экспериментов воздействия атак “Jamming” и “Jamming R” на каждое из остовных деревьев, построенных для разных алгоритмов маршрутизации (описанными в [4] алгоритмами). Из рисунка видно, что дерево, построенное алгоритмом Minimum Energy Route (Greedy), является самым уязвимым, а алгоритм Minimum Hop Route строит наиболее устойчивое дерево. Хотя, если сравнивать веса остовных деревьев, то алгоритм Minimum Energy Route является лучшим.

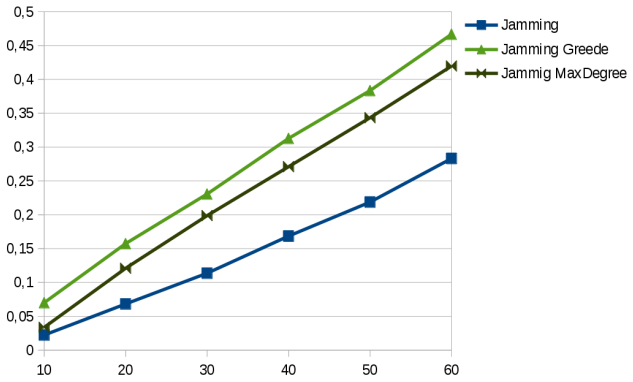


Рис. 4: Нормированное среднее число вершин, от которых теряется информация после атаки “Jamming”.

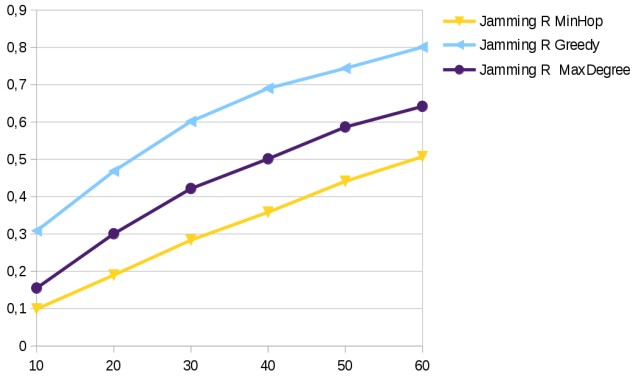


Рис. 5: Нормированное среднее число вершин, от которых теряется информация после атаки “Jamming R” для разных алгоритмов маршрутизации.

Интересно, что для атаки “Jamming” среднее число вышедших из строя вершин линейно зависит от радиуса атаки и плотности размещения вершин на заданной области.

Заключение

Исследование воздействия атаки Jamming в общем случае проведено с помощью имитационного моделирования. Чтобы оценить уязвимость остовного дерева передачи данных, в качестве критерия рассматривался параметр — «нормированное число вершин, от которых потеряна информация». Результаты, полученные после экспериментов, хорошо согласуются с формулами, полученными в предыдущем разделе. Очевидно, что ущерб от разрушающего воздействия атаки Jamming на узлы БСС существенно зависит от того, какой алгоритм маршрутизации применяется в сети для сбора и передачи пакетов. Таким образом, надежность сети можно повысить, выбрав более защищенный метод.

Список литературы

[1] E. Cayirci, C. Rong. Security in Wireless Ad Hoc and Sensor Networks. John Wiley & Sons, 2009.

[2] K.S. Praveen, H.L. Gururaj, B. Ramesh. Comparative Analysis of Black Hole Attack in Ad Hoc Network Using AODV and OLSR Protocols. Procedia Computer Science, vol. 85, 2016, P. 325–330.

[3] A. Clark, C. Colbourn, D. Johnson. Unit disk graphs // Discrete Mathematics, vol.86, 1990, Pages 165–177.

[4] Шахов В.В., Юргенсон А.Н., Соколова О.Д. Моделирование воздействия атаки Black Hole на беспроводные сети // Программные продукты и системы. 2017. Том 30. № 1. С. 34–39.

[5] Vladimir V. Shakhov. Experiment Design for Parameter Estimation in Sensing Models. Springer Lecture Notes in Computer Science, vol. 8072, 2013, P 151-158.

[6] A. Safonov, A. Lyakhov, A. Urgenson, O. Sokolova Wireless groupcast routing with palette of transmission methods // Multiple Access Communications, 2012, p. 97–108.

[7] S. Dokurer, Y. Erten, C. Acar. Performance analysis of ad-hoc networks under black hole attacks. In Proc. of IEEE Int. Conf. SoutheastCon 2007, March 2007, P. 148–153.

[8] Vladimir V. Shakhov, Olga Sokolova, Nastya Yurgenson. A Fast Method for Network Topology Generating. Lecture Notes in Computer Science, Springer, vol. 8715, 2014, P. 96–101.

[9] В. В. Шахов, А. Н. Юргенсон, О. Д. Соколова Эффективный метод генерации случайных геометрических графов для моделирования беспроводных сетей” // Прикладная дискретная математика, — 2016, — № 4(34), — С. 99–109

[10] Yang L., Yang H.C., Wu K. Minimum-energy route configuration for wireless ad hoc networks. 2006 IEEE Int. Performance Computing and Communications Conf. Phoenix, AZ, 2006, pp. 6–14.

Владимир Владимирович Шахов — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный технический университет;
e-mail: shakhov@rav.sscc.ru;
Соколова Ольга Дмитриевна — к.т.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: olga@rav.sscc.ru;
Анастасия Николаевна Юргенсон — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: nastya@rav.sscc.ru.
Дата поступления — 1 июня 2017 г.

ЭКОНОМИЧНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ЛАПЛАСА

С. Б. Сорокин[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*
[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.632

Одним из широко используемых подходов к решению задачи Коши для уравнения Лапласа является сведение ее к обратной задаче [1],[2]. Как правило, для решения последней применяется итерационная процедура. В работе будет описан экономичный прямой метод численного решения обратной задачи в областях прямоугольной формы. Идея основана на разложении искомого решения по базису, состоящему из собственных функций разностного аналога оператора Лапласа. Метод близок к предлагавшимся в [3],[4] алгоритмам, решающим задачу на дифференциальном уровне.

Ключевые слова: задача Коши для уравнения Лапласа, обратная задача, численное решение, экономичный прямой метод.

1 Постановка задачи

В области

$$\Omega = \{(x_1, x_2) \in R^2 : \ x_1 \in (a, b), \ x_2 \in (c, d)\}$$

рассмотрим начально-краевую задачу для уравнения Лапласа (задачу продолжения)

$$\begin{aligned} &-\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} = 0, \quad (x_1, x_2) \in \Omega, \\ &-\frac{\partial u}{\partial x_1}(a, x_2) = 0, \quad x_2 \in (c, d), \\ &u(a, x_2) = u_a(x_2), \quad x_2 \in (c, d), \\ &-\frac{\partial u}{\partial x_2}(x_1, c) = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x_2}(x_1, d) = 0, \quad x_1 \in (a, b). \end{aligned} \tag{1}$$

Необходимо найти функцию $u(x_1, x_2)$ в области Ω по данным $u_a(x_2)$.

Следуя [1],[2], сведем задачу продолжения (1) к обратной задаче:

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке программы Фундаментальных исследований ОМН РАН "Современные вычислительные и информационные технологии решения больших задач", программы Фундаментальных исследований Президиума РАН "Интеллектуальные информационные технологии, математическое моделирование, системный анализ и автоматизация" .

Определить функцию $q(x_2)$ из соотношений

$$\begin{aligned}
&-\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}-\frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}=0, \quad (x_1,x_2)\in\Omega,\\
&-\frac{\partial u}{\partial x_1}(a,x_2)=0, \quad x_2\in(c,d),\\
&u(b,x_2)=q(x_2), \quad x_2\in(c,d),\\
&-\frac{\partial u}{\partial x_2}(x_1,c)=0, \quad \frac{\partial u}{\partial x_2}(x_1,d)=0, \quad x_1\in(a,b).
\end{aligned} \tag{2}$$

по дополнительной информации

$$u(a,x_2)=u_a(x_2), \quad x_2\in(c,d). \tag{3}$$

Т.о. среди всех задач (2), отличающихся друг от друга функцией $q(x_2)$, надо указать такую задачу (такую $q(x_2)$) чтобы ее решение $u(x_1,x_2)$ удовлетворяло равенству (3).

Будем решать обратную задачу на дискретном уровне. Построим дискретный аналог (2),(3).

2 Дискретизация обратной задачи

Построим равномерные сетки:

$$\bar\omega_1=\{x_{1,i}=x_{1,i-1}+h_1,\ 1\le i\le N_1+1,\ x_{1,0}=a,\ x_{1,N_1+1}=b,\ h_1=\frac{b-a}{N_1+1}\},$$
$$\bar\omega_2=\{x_{2,j}=x_{2,j-1}+h_2,\ 1\le j\le N_2+1,\ x_{2,0}=c,\ x_{2,N_2+1}=d,\ h_2=\frac{d-c}{N_1+1}\}$$
$$\bar\omega=\{\ x_{i,j}=(x_{1,i},x_{2,j})\in\bar\Omega, \quad x_{1,i}\in\bar\omega_1, \quad x_{2,j}\in\bar\omega_2\}.$$

Дискретная аналог обратной задачи (2),(3) формулируется следующим образом:

Среди всех задач

$$\Lambda_1 u^h(x_{1,i},x_{2,j})+\Lambda_2 u^h(x_{1,i},x_{2,j})=0, \quad i=\overline{0,N_1},\ j=\overline{0,N_2+1} \tag{4}$$

$$u^h(x_{1,N_1+1},x_{2,j})=q^h(x_{2,j}), \quad j=\overline{0,N_2+1} \tag{5}$$

отличающихся друг от друга сеточной функцией $q^h(x_{2,j})$, надо указать такую задачу (такую сеточную функцию $q^h(x_{2,j})$) чтобы ее решение $u^h(x_{1,i},x_{2,j})$ удовлетворяло равенству

$$u^h(x_{1,0},x_{2,j})=u_a(x_{2,j}), \quad x_{2,j}\in[c,d]. \tag{6}$$

Здесь действие операторов Λ_1 и Λ_2 определяются равенствами:

$$\Lambda_1 y^{(1)}(x_{1,i})=\begin{cases}-\dfrac{2}{h_1}y^{(1)}_{x_1}(x_{1,0}), & i=0,\\ -y^{(1)}_{\bar x_1 x_1}(x_{1,i}), & i=\overline{1,N_1},\end{cases}$$

$$\Lambda_2 y^{(2)}(x_{2,j})=\begin{cases}-\dfrac{2}{h_2}y^{(2)}_{x_2}(x_{2,0}), & j=0,\\ -y^{(2)}_{\bar x_2 x_2}(x_{2,j}), & j=\overline{1,N_2},\\ \dfrac{2}{h_2}y^{(2)}_{\bar x_2}(x_{2,N_2+1}), & j=N_2+1.\end{cases}$$

3 Численный метод

Выберем в качестве базиса сеточных функций, заданных на сетке $\bar{\omega}_2$ набор собственных функции дискретной спектральной задачи

$$\Lambda_2 \mu_{k_2}^{(2)}(x_{2,j}) = \lambda_{k_2}^{(2)} \mu_{k_2}^{(2)}(x_{2,j}), \quad x_{2,j} \in \bar{\omega}_2,$$

$$k_2 = \overline{0, N_2 + 1}.$$

Разложим подлежащую определению сеточную функцию $q^h = \{q^h(x_{2,j})\}_{j=0}^{N_2+1}$ (заданную на сетке $\bar{\omega}_2$) по этому базису:

$$q^h = \sum_{k=0}^{N_2+1} \alpha_k \mu_k^{(2)}.$$

Очевидно, что определение q^h эквивалентно отысканию коэффициентов α_k в ее разложении по базису.

Для каждой базисной функции $\mu_k^{(2)}$ находим решение

$$U_k(x_{1,i}, x_{2,j}), \quad i = \overline{0, N_1 + 1},\ j = \overline{0, N_2 + 1}$$

вспомогательной задачи

$$\begin{aligned} &\Lambda_1 U_k(x_{1,i}, x_{2,j}) + \Lambda_2 U_k(x_{1,i}, x_{2,j}) = 0, \quad i = \overline{0, N_1},\ j = \overline{0, N_2 + 1}, \\ &U_k(x_{1,N_1+1}, x_{2,j}) = \mu_k^{(2)}(x_{2,j}), \quad j = \overline{0, N_2 + 1}. \end{aligned} \tag{7}$$

Тогда, в силу линейности задачи (4),(5), ее решение представимо виде линейной комбинации

$$u^h(x_{1,i}, x_{2,j}) = \sum_{k=0}^{N_2+1} \alpha_k U_k(x_{1,i}, x_{2,j}).$$

Коэффициенты α_k можно определить из дополнительного условия (6)

$$u^h(x_{1,0}, x_{2,j}) \equiv \sum_{k=0}^{N_2+1} \alpha_k U_k(x_{1,0}, x_{2,j}) = u_a(x_{2,j}), \quad j = \overline{0, N_2 + 1}. \tag{8}$$

Для нахождения решения $U_k(x_{1,i}, x_{2,j})$ вспомогательной задачи (7) можно использовать один из двух широко известных алгоритмов: разложение в двойной ряд и разложение в однократный ряд. В обоих случаях решение для каждого номера задачи k представляется в форме

$$U_k(x_{1,i}, x_{2,j}) = \gamma_k(x_{1,i}) \mu_k^{(2)}(x_{2,j}). \tag{9}$$

В первом случае сеточная функция $\gamma_k(x_{1,i})$, заданная на сетке $\bar{\omega}_1$, выписывается в явном виде

$$\gamma_k(x_{1,i}) = \sum_{n=1}^{N_1+1} [\frac{\mu_n^{(1)}(x_{1,N_1})}{h_1} \frac{1}{\lambda_n^{(1)} + \lambda_k^{(2)}}] \mu_n^{(1)}(x_{1,i}),$$
$$k = 0, 1, 2, ..., N_2 + 1.$$

Здесь $\lambda_n^{(1)}$, $\mu_n^{(1)}(x_{1,i})$ собственные числа и собственные функции спектральной задачи

$$\Lambda_1 \mu_n^{(1)}(x_{1,j}) = \lambda_n^{(1)} \mu_n^{(1)}(x_{1,j}), \quad x_{1,j} \in \bar{\omega}_1,$$

$$n = \overline{0, N_1}.$$

Во втором случае для вычисления $\gamma_k(x_{1,i})$ необходимо решить трехточечное уравнение

$$\Lambda_1 \gamma_k(x_{1,i}) + \lambda_k^{(2)} \gamma_k(x_{1,i}) = \frac{1}{h_1^2} \delta_{i,N_1} \quad i = 0, 1, ..., N_1.$$

Разложим дополнительную информацию $u_a(x_{2,j})$ по базису $\mu_k^{(2)}$:

$$u_a(x_{2,j}) = \sum_{k=0}^{N_2+1} \beta_k \mu_k^{(2)}(x_{2,j}), \quad j = \overline{0, N_2+1}. \tag{10}$$

Подставляя (9),(10) в (8) получаем

$$\sum_{k=0}^{N_2+1} \alpha_k \gamma_k(x_{1,0}) \mu_k^{(2)}(x_{2,j}) = \sum_{k=0}^{N_2+1} \beta_k \mu_k^{(2)}(x_{2,j}).$$

Отсюда коэффициенты α_k равны

$$\alpha_k = \frac{\beta_k}{\gamma_k(x_{1,0})}$$

и искомое краевое условие вычисляется по формуле

$$q^h(x_{2,j}) = \sum_{k=0}^{N_2+1} \alpha_k \mu_k^{(2)}(x_{2,j}), \quad j = 0, 1, ..., N_2+1.$$

Заключение

В работе представлен экономичный прямой метод численного решения задачи Коши для уравнения Лапласа. Стоимость его реализации составляет величину порядка $O(N_1 N_2)$ арифметических опереаций.

Метод очевидным образом обобщается на случай различных других типов неоднородных краевых условий и уравнение Пуассона.

Второй из используемых алгоритмов позволяет применять описанный подход к операторам с переменными коэффициентами вида

$$-\frac{\partial}{\partial x_1}(k_1(x_1)\frac{\partial u}{\partial x_1}) - \frac{\partial}{\partial x_2}(k_2(x_1)\frac{\partial u}{\partial x_2}) + k_3(x_1)u.$$

Возможна так же его реализация в цилиндрических координатах для операторов имеющих следующую форму

$$-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rk_1(r)\frac{\partial u}{\partial r}) - \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial \varphi}(k_2(r)\frac{\partial u}{\partial \varphi}) + k_3(r)u.$$

Наконец, не представляет труда распространить метод на трехмерный случай.

Список литературы

[1] S.I. Kabanikhin, A.L. Karchevsky, Method for solving the Cauchy Problem for an Elliptic Equation, Journal of Inverse and Ill-posed Problems, 3. 1 (1995), 21-46.

[2] Кабанихин С.И Обратные и некорректные задачи, Новосибирск: Сибирское научное издательство, 2009.

[3] A.L. Karchevsky Reformulation of an inverse problem statement that reduces computational costs. EURASIAN JOURNAL OF MATHEMATICAL AND COMPUTER APPLICATIONS Volume 1, Issue 2(2013) 4-20

[4] Ai-lin Qian Spectral method and its application to a Cauchy problem of the Laplace equation. IJRRAS 14 (1) January 2013

Сергей Борисович Сорокин — д.ф.-м.н., вед. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: sorokin@sscc.ru;
Дата поступления — 25 апреля 2017 г.

ЭКОНОМИЧНЫЕ МЕТОДЫ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ЖЕСТКИХ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ПЫЛИ В ОКОЛОЗВЕЗДНЫХ ДИСКАХ

О. П. Стояновская[1,2], В. Н. Снытников[1,2], Э. И. Воробьев[3,4], Т. В. Маркелова[1]

[1] *Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, 630090, Новосибирск,*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск,*

[3] *Институт физики, Южный федеральный университет, 344090, Ростов-на-Дону,*

[4] *Институт астрофизики, Венский университет, 1180, Вена, Австрия.*

УДК 519.688

В работе проводится анализ методов численного интегрирования по времени уравнений движения твердой фазы, которые применяются в современных астрофизических кодах для моделирования газопылевых околозвездных дисков. Вычислительную трудность при этом представляет случай, когда характерное время обмена импульсом между фазами на несколько порядков меньше, чем характерные времена действия других сил.
(1) Показано, что некоторые применяемые в кодах схемы, обладающие безусловной устойчивостью и первым порядком аппроксимации, имеют низкую фактическую точность при приемлемых шагах интегрирования по времени, а для достижения необходимой точности в несколько процентов требуется применять шаги по времени столь же мелкие, как и в явных методах для обеспечения устойчивости.
(2) Приведены экономичные методы первого порядка аппроксимации, которые позволяют избегать дополнительных ограничений на шаг по времени со стороны трения при расчете движения тел любого размера.
Приведены результаты расчета динамики двухфазного самогравитирующего диска с использованием одного из методов.

Ключевые слова: околозвездный диск, жесткие уравнения, среда газ-пыль .

Введение

При моделировании динамики околозвездного диска требуется интегрировать по времени уравнение движения пылевой компоненты диска:

$$\frac{dv}{dt} = g + g_{\rm drag}, \tag{1}$$

где $g_{\rm drag} = \dfrac{u-v}{t_{\rm stop}}$ — ускорение тела под действием трения о газ, g — ускорение тела за счет неаэродинамических сил, v — скорость тел, u — скорость газа. Для тел, размер которых сопоставим с длиной свободного пробега молекулы газа (свободно-молекулярное обтекание), время остановки определяется соотношением:

$$t_{\rm stop} = \frac{a\rho_{\rm s}}{\rho c_s}, \tag{2}$$

где a — радиус сферической частицы, $\rho_{\rm s}$ — плотность вещества твердой фазы, ρ-плотность обтекающего газа, c_s — скорость звука в газе. Для околозвездного диска справедливо $\dfrac{c_{\rm s}}{v_{\rm K}} = \dfrac{H}{r}$, где $v_{\rm K} = \sqrt{\dfrac{GM}{r}}$ — кеплерова скорость, M — масса звезды, G — гравитационная постоянная, $H(r)$ — высота диска, r — расстояние от

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (16-07-00916) и гранта Президента РФ (МК-5915.2016.1)., Министерства образования и науки РФ, в том числе проекта 3.5602.2017/БЧ.

протозвезды до точки внутри диска. Тогда, положив что $\Omega = \frac{v_K}{r} = \sqrt{\frac{GM}{r^3}}$ — кеплеровская частота, $\Sigma = \int\limits_{-H}^{H} \rho dz$ — поверхностная плотность диска, соотношение (2) принимает вид

$$t_{\text{stop}} = \frac{a\rho_s}{\Sigma\Omega}. \tag{3}$$

Вычислительную трудность при интегрировании уравнения (1) представляет случай, когда характерное время для аэродинамической силы (t_{stop}, время установления или релаксации скорости пыли относительно скорости газа, в англоязычной литературе stopping time) на несколько порядков меньше, чем характерные времена действия других сил (гравитационной, центробежной). Наличие в системе нескольких времен означает, что применяя явные методы интегрирования, мы должны использовать шаг меньший, чем минимальное характерное время, но проводить интегрирование на интервале, большем, чем максимальное характерное время. Для задач моделирования, в которых каждый временной шаг является вычислительно трудоемким (двух и трехмерные уравнения, учет собственного гравитационного или магнитного поля вместе с другими физико-химическими процессами), использовать явные методы интегрирования оказывается невозможным, если требуется рассчитывать динамику мелкой пыли, сильно связанной с газом.

Явный метод первого порядка аппроксимации для уравнения (1) будет иметь вид:

$$\frac{v^{n+1} - v^n}{\tau} = g^n + \frac{u^n - v^n}{t_{\text{stop}}}, \tag{4}$$

где v^n — скорость тела в текущий момент времени t (на временном слое n), v^{n+1} — скорость тела в следующий момент времени $t + \tau$, (на временном слое $n + 1$). Отметим, что уравнение (1) возникает при реализации численных схем расщепления по физическим процессам для системы уравнений динамики двухфазного диска, поэтому величины g и u в (4) также снабжены индексами временнОго шага. Пусть $g^n = 0$ и $u^n = 0$, тогда (4) примет вид:

$$v^{n+1} = \left(1 - \frac{\tau}{t_{\text{stop}}}\right) v^n = \left(1 - \frac{\tau}{t_{\text{stop}}}\right)^n v_0. \tag{5}$$

Из (5) следует, что необходимое условие ограниченности v^{n+1} при любом n: $\left|1 - \frac{\tau}{t_{\text{stop}}}\right| < 1$, что эквивалентно

$$\tau < 2t_{\text{stop}}. \tag{6}$$

Рассмотрим, насколько приемлемым является такое ограничение на шаг по времени. Пусть пылинка имеет радиус 1 мкм, тогда для массивного диска, в котором для $r = 20$ АЕ, $\Sigma = 100$ г см$^{-2}$ из (3) получим $t_{\text{stop}} \approx 100$ сек.

Для интегрирования уравнений динамики диска (обычно на протяжении 10 и более оборотов его периферийной части) применяется шаг по времени, определяемый из условия Куранта $\tau < \frac{\Delta r}{v}$, где Δr — размер, на котором происходит дискретизация пространственных производных (длина ячейки сетки или радиус сглаживания в гидродинамике сглаженных частиц Smoothed Particle Hydrodynamics). Оценим характерную величину этого шага. Пусть внутренняя граница диска составляет $r = 1$ АЕ, мы проводим моделирование его динамики в цилиндрической системе координат, разбивая полный оборот на 256 ячеек. Получаем

$$\tau = \frac{\Delta r}{v_K} = \frac{2\pi r}{256 v_K} \approx 1,23 \times 10^5 \text{ сек}. \tag{7}$$

Видно, что для того, чтобы удовлетворить условию (6) требуется проводить в 1000 раз больше временных шагов. Из теории численных методов решения жестких задач известно, что ограничение на шаг по времени со стороны трения можно снять, если использовать для расчета неявную схему, например, неявный метод Эйлера:

$$\frac{v^{n+1} - v^n}{\tau} = g^{n+1} + \frac{u^{n+1} - v^{n+1}}{t_{\text{stop}}}. \tag{8}$$

Однако в силу того, что значения g^{n+1}, u^{n+1} неизвестны, организация вычислений по такой схеме требует итераций до сходимости, в случае двух и трехмерных уравнений на каждой итерации требуется обращение матриц. Поэтому в современных работах по моделированию динамики газопылевых дисков применяются следующие более экономичные подходы [1, 4, 5, 8] .

1 Тестируемые схемы

1.1 Ассимптотическое приближение или аппроксимация коротких времен

Наиболее экономичный с точки зрения вычислительных затрат подход связан с переходом к асимптотическому приближению, которое имеет несколько названий: терминальное приближение, приближение коротких времен, диффузионное приближение, приближение малого запаздывания. В этом приближении скорость тел и скорость газа связаны простым алгебраическим соотношением:

$$v = g_{\text{rel}} t_{\text{stop}} + u, \tag{9}$$

где $g_{\text{rel}} = g - g_u$ — разность ускорений, действующих на газ и на тела. В работе [9] показано, при описании радиальной миграции тел, коротые дрейфуют по орбитам, близким к Кеплеровым, приближение (9) дает относительную погрешность вычисления радиальной скорости, равную St^2, где $St = t_{\text{stop}}\Omega$ — число Стокса. Это означает, что приближение (9) дает корректные результаты только для пыли ограниченного размера, для которой справедливо $(St)^2 < 0.1$.

1.2 Схема смешанного временного слоя

Схема смешанного временного слоя имеет вид:

$$\frac{v^{n+1} - v^n}{\tau} = \frac{u^n - v^{n+1}}{t_{\text{stop}}} + g^n. \tag{10}$$

Эта схема используется, например, в работе [2].

1.3 Квазианалитическая схема без расщепления

$$v^{n+1} = (g^n t_{\text{stop}} + u^n) + (v^n - g^n t_{\text{stop}} - u^n) e^{-\frac{\tau}{t_{\text{stop}}}}. \tag{11}$$

1.4 Схемы, основанные на методе расщепления

В работе мы будем тестировать схемы, основанные на методе расщепления по физическим процессам, которые имеют первый порядок аппроксимации по времени (например, [5, 8]): первый этап схемы расщепления — нахождение скорости отдельного тела за счет неаэродинамического (гравитационного) ускорения:

$$\frac{v^{n+1/2} - v^n}{\tau} = g, \tag{12}$$

второй этап схемы расщепления — коррекция скорости пылинки за счет трения:

$$\frac{v^{n+1} - v^{n+1/2}}{\tau} = g_{\text{drag}}. \tag{13}$$

Этапы (12)–(13) некоммутативны, в случае изменения порядка мы получаем схему:

$$\frac{v^{n+1/2} - v^n}{\tau} = g_{\text{drag}}, \tag{14}$$

$$\frac{v^{n+1} - v^{n+1/2}}{\tau} = g. \tag{15}$$

Здесь $v^{n+1/2}$ — промежуточное значение скорсти тела. Будем называть схему (12)–(13) схемой с прямым порядком операторов, а схему (14)–(15) — с обратным порядком операторов.

1.4.1 Метод регуляризации

Метод регуляризации с прямым порядком операторов имеет вид:

$$\begin{cases} \dfrac{v^{n+1/2}-v^n}{\tau} = g^n, \\ \dfrac{v^{n+1}-v^{n+1/2}}{\tau} = \dfrac{u^n - v^{n+1/2}}{t_{\text{stop}}+\tau}, \end{cases} \tag{16}$$

с обратным порядком операторов:

$$\begin{cases} \dfrac{v^{n+1/2}-v^n}{\tau} = \dfrac{u^n - v^n}{t_{\text{stop}}+\tau}, \\ \dfrac{v^{n+1}-v^{n+1/2}}{\tau} = g^n. \end{cases} \tag{17}$$

Метод регуляризации в сочетании со схемой расщепления используется, например, в работе [8].

1.4.2 Квазианалитическое интегрирование

Метод квазианалитического интегрирования с прямым порядком операторов имеет вид:

$$\begin{cases} \dfrac{v^{n+1/2}-v^n}{\tau} = g^n, \\ v^{n+1} = u^n + (v^{n+1/2} - u^n)\mathrm{e}^{-\dfrac{\tau}{t_{\text{stop}}}}, \end{cases} \tag{18}$$

с обратным порядком операторов:

$$\begin{cases} v^{n+1/2} = u^n + (v^n - u^n)\mathrm{e}^{-\dfrac{\tau}{t_{\text{stop}}}}, \\ \dfrac{v^{n+1}-v^{n+1/2}}{\tau} = g^n, \end{cases} \tag{19}$$

Метод квазианалитического интегрирования в сочетании с методом расщепления используется, например, в работе [5].

2 Модельное уравнение, точное аналитическое решение

Рассмотрим медленную миграцию пылинки к протозвезде в протопланетном газовом диске, давление в котором убывает по радиусу. Пусть газовый диск близок к равновесию, тогда его радиальная скорость близка к нулю, а азимутальная u_φ близка к Кеплеровой скорости $v_{\text{K}} = \sqrt{\dfrac{GM}{r}}$, но не достигает ее.

Пусть пылевая частица движется по своей орбите со скоростью v_φ. Будем считать, что гравитационное поле, действующее на частицу, создается только протозвездой, но не диском. Тогда частица испытывает радиальное ускорение $g = \dfrac{v_\varphi^2}{r} - \dfrac{MG}{r^2}$. Если движение таково, что радиальная скорость частицы много меньше Кеплеровой, тогда ускорение, в общем случае зависящее от радиуса, может быть рассмотрено как постоянное. Это приводит к модели прямолинейного движения тела под действием постоянного ускорения и трения о газ, который движется с постоянной скоростью u. Отметим, что такое приближение является упрощенной моделью и не описывает преобразования азимутальной компоненты скорости в радиальную, но представляет из себя нетривиальный тест для методов интегрирования (10), (16–19).

$$\begin{cases} \dfrac{dv}{dt} = g + \dfrac{u-v}{t_{\text{stop}}}, \\ v|_{t=0} = v_0. \end{cases} \tag{20}$$

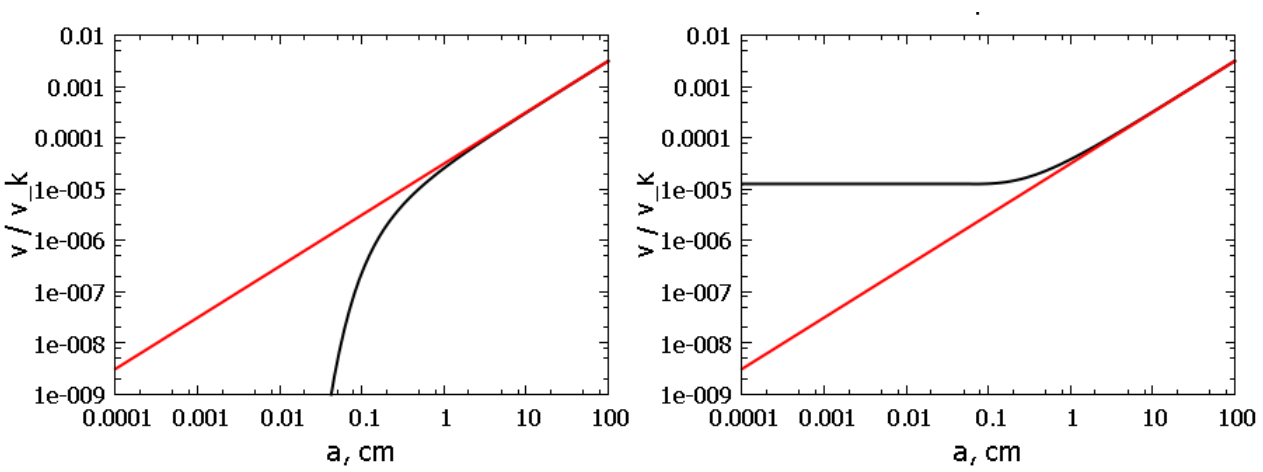


Рис. 1: Отклонение численного решения задачи (20) от аналитического. Слева — квазианалитическое интегрирование с прямым порядком операторов (18), справа — квазианалитическое приближение с обратным порядком операторов (19), метод регуляризации с обратным порядком операторов (17). Черная линия — численное решение, серая (красная) линия — аналитическое решение.

В нашем случае v — радиальная скорость мигрирующей пылинки, g — постоянное радиальное ускорение пылинки, u — радиальная скорость газа. Аналитическое решение поставленной задачи имеет вид:

$$v = (gt_{\text{stop}} + u) + (v_0 - gt_{\text{stop}} - u)\mathrm{e}^{-\dfrac{t}{t_{\text{stop}}}}. \tag{21}$$

Видно, что при $t \gg t_{\text{stop}}$ $v \to (gt_{\text{stop}} + u)$, что совпадает с терминальной скоростью, выраженной условием (9).

3 Результаты тестирования методов

Возьмем 100 пылевых частиц размером от 1 мкм до 1 м и расположим их на расстоянии $r = 20$ АЕ от протозвезды массы $M = 1M_\odot$. Для простоты будем считать, что $u = 0$, также положим, что $\Sigma(20\text{АЕ}) = 100$ г см$^{-2}$. Пусть $g = -0.001\dfrac{v_{\text{K}}^2}{r}$, $v_0 = 0.01v_{\text{K}}$.

Для каждой из частиц будем проводить интегрирование задачи (20) на протяжении 1000 оборотов, то есть на временном интервале $[0; T] = [0; 2000\pi\Omega_{\text{K}}^{-1}]$, используя временной шаг τ, определенный соотношением (7). Для всего диапазона размеров частиц $T \gg t_{\text{stop}}$, поэтому данный тест позволяет оценить, насколько полученное в расчете стационарное значение скорости будет близко к аналитическому значению (21).

Мы получили, что метод регуляризации с прямым порядком операторов (16) и схема смешанного временного слоя без использования расщепления (10) воспроизводит скорость радиальной миграции близкую к аналитическому значению для всех рассмотренных значений t_{stop}. На рис. 1 приведено отношение модуля вычисленной скорости v к Кеплеровой скорости v_{K} на радиусе 20 АЕ. Метод регуляризации с обратным порядком операторов многократно завышает скорость радиальной миграции для частиц менее 1 см с $t_{\text{stop}} < \tau$. Из правой панели рис. 1 следует, что при использовании схемы (17) все тела менее 1 см будут испытывать одинаковое влияние силы трения и двигаться в диске как сантиметровые. Квазианалитическое интегрирование с прямым порядком операторов (18), напротив, существенно занижает скорость миграции для тел размером менее 1 см, практически жестко привязывая их движение к газу. Квазианалитическое интегрирование с обратным порядком операторов (19) дает тот же счетный артефакт, что и метод регуляризации с обратным порядком операторов (17) — искусственное завышение темпа миграции маленьких тел. Отметим, что для схемы (11) данный тест не является содержательным, поскольку для случая, когда $g = const$, численное решение в точности совпадает с аналитическим.

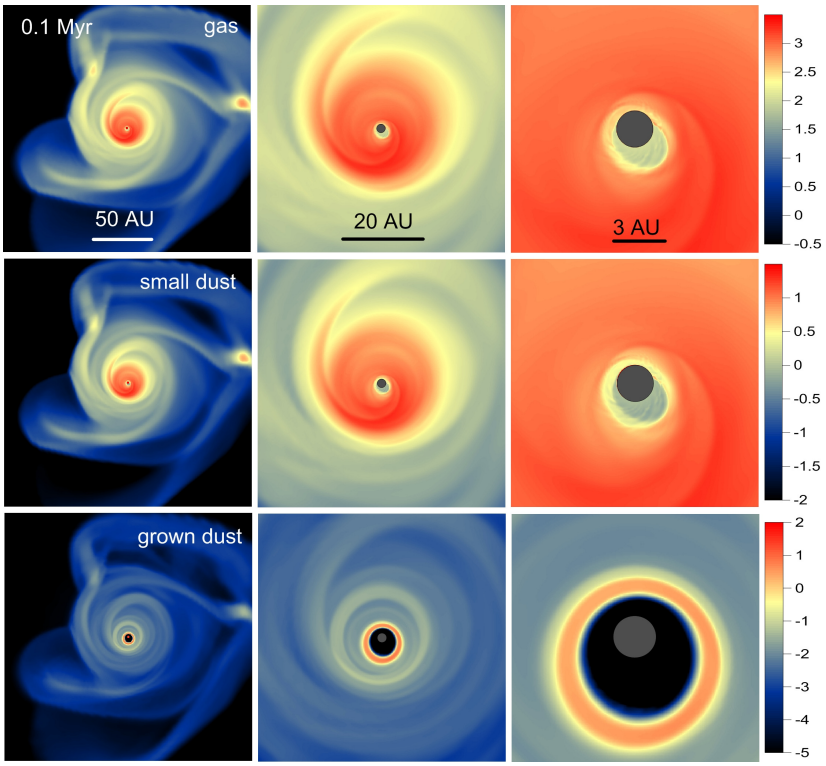


Рис. 2: Логарифм поверхностной плотности газа (верхний ряд), мелкой пыли (средний ряд) и растущей пыли (нижний ряд) в граммах на сантиметр квадратный в момент времени 100 тысяч лет после формирования диска. Слева направо приведены иллюстрации с увеличение масштаба.

4 Работоспособность рассматриваемых методов при моделировании динамики околозвездного газопылевого диска

В качестве иллюстрации рабоспособности рассматриваемых методов мы приведем результаты моделирования динамики околозвездного газопылевого диска с учетом комплекса физических процессов: вязкого транспорта, приводящего к аккрецированию вещества из газа на звезду, самогравитации газовой и пылевой компоненты диска, процессов нагрева и охлаждения газа, роста пыли. Начальный радиус диска составляет 150 астрономических единиц (на графиках масштаб обозначен на английском языке — AU). Подробное описание численной модели газовой компоненты диска представлено в работе [6]. Численная модель динамики и роста пыли описана в [7]. Расчет выполнен с использованием схемы смешанного временного слоя (10). На рис. 2 приведена поверхностная плотность газа (верхний ряд), вмороженной мелкой пыли (средний ряд) и дрейфующей растущей пыли (нижний ряд) в граммах на сантиметр квадратный (логарифм). Видно, что во внутренней области диска образуется плотное кольцо из выросшей пыли, которое отсутствует в газе и подсистеме мелкой пыли. Появление такого кольца связано с укрупнением пыли и увеличением темпа ее радиальной миграции. Миграция пыли останавливается только во внутренней части диска, где происходит изменение вязкости газа (так называемая мертвая зона) и резко возрастает градиент давления. Образование плотного кольца из выросшей твердой фазы может инициировать формирование планет земной группы и пояса астероидов.

Заключение

В работе рассмотрены методы интегрирования уравнений движения твердых тел в газопылевом околозвездном диске. Рассматривался случай, когда тела взаимодействуют с газом в режиме Эпштейна (свободномолекулярного обтекания). Методы сравнивались с точки зрения их применимости для расчета тел произвольного размера (от 1 мкм до ста метров).

1. При необходимости решать уравнения движения тел с произвольным значением числа Стокса существует несколько устойчивых и экономичных схем, близких по своим вычислительным затратам. Мы показали, что схема смешанного временного слоя (10), метод регуляризации с прямым порядком операторов (16), квазианалитическое интегрирование (11) точно воспроизводят изменении углового момента твердых тел независимо от их размера. Все эти методы позволяют интегрировать уравнения движения тел с шагом по времени, который определяется условием Куранта для решения уравнений газовой динамики. Эти методы являются оптимальными для обеспечения точности расчетов за минимальное количество арифметических операций.

2. Для устойчивых экономичных схем (10), (16) и (11) расщепление по физическим процессам, которое часто используется в астрофизических кодах, приводит к существенному изменению фактической точности алгоритма для малых тел $t_{\text{stop}} < \tau$. К такому же результату приводит изменение порядка операторов в методе расщепления. Выявить фактическую точность схемы позволяет анализ погрешности решения на линейной задаче (20) и соответствующий численный тест.

Приведены результаты расчета динамики двухфазного самогравитирующего диска с использованием схемы смешанного временного слоя.

Список литературы

[1] X.N. Bai, J.M. Stone (2010) Particle-gas Dynamics with Athena: Method and Convergence, ApJL vol.190, 297–310.

[2] S.H. Cha, S. Nayakshin (2011) A numerical simulation of a 'Super-Earth' core delivery from 100 to 8 AU, MNRAS vol.415, 3319–3334.

[3] T.J. Haworth, J.D. Ilee, D.H. Forgan, S. Facchini, D.J. Price, D.M. Boneberg, R.A. Booth, C.J. Clarke, J.F. Gonzalez, M.A. Hutchison, I. Kamp, G. Laibe, W. Lyra, F. Meru, S. Mohanty, O. Panić, K. Rice, T. Suzuki, R. Teague, C. Walsh, P. Woitke, ... (2016) Grand Challenges in Protoplanetary Disc Modelling, PASA vol.33

[4] G. Laibe, D.J. Price (2014) Dust and gas mixtures with multiple grain species — a one-fluid approach, MNRAS vol.444, 1940–1956.

[5] P. Lorén-Aguilar, M.R. Bate (2014) Two-fluid dust and gas mixtures in smoothed particle hydrodynamics: a semi-implicit approach, MNRAS vol.443, 927–945.

[6] Vorobyov E.I., Basu S. Variable Protostellar Accretion with Episodic Bursts (2015) The Astrophysical Journal. Vol. 805, 17.

[7] Vorobyov E.I., Akimkin V.V., Stoyanovskaya O.P., Pavlyuchenkov Y.N., Liu H.B. The early evolution of viscous and self-gravitating circumstellar disks with dust component, A & A, submitted.

[8] Z. Zhu, R.P. Nelson, R. Dong, C.Espaillat (2012) Dust Filtration by Planet-induced Gap Edges: Implications for Transitional Disks, ApJ vol.755

[9] Стояновская О.П., Снытников В.Н., Воробьев Э.И. (2017) Анализ методов расчета траекторий пылевых частиц в газопылевом околозвездном диске, Астрономический журнал, Т.94, № 12, С. 1–17.

Стояновская Ольга Петровна — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН; Новосибирского государственного университета;
e-mail: stop@catalysis.ru;
Снытников Валерий Николаевич — к.ф.-м.н., ст.науч.сотр. Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН; Новосибирского государственного университета;
e-mail: snyt@catalysis.ru;
Воробьев Эдуард Игоревич — к.ф.-м.н., вед.науч.сотр. Южного федерального университета;
e-mail: eivorobev@sfedu.ru;
Тамара Валерьевна Маркелова — вед. инж. Института катализа им. Г.К. Борескова СО РАН;
e-mail: matamara@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

О ЛОКАЛЬНОМ ПОИСКЕ В ЗАДАЧЕ С D.C. ОГРАНИЧЕНИЯМИ

А. С. Стрекаловский, И. М. Минарченко

Институт динамики систем и теории управления СО РАН, 664033, Иркутск

УДК 519.853.4

Рассматривается невыпуклая задача оптимизации, в которой целевая функция и ограничения-неравенства заданы d.c. функциями. С помощью точного штрафа данная задача сводится к задаче без невыпуклых ограничений, целевая функция которой, в свою очередь, также является d.c. функцией. Для решения оштрафованной задачи предлагается специальный метод локального поиска, основанный на частичной линеаризации (по базовой невыпуклости) и представляющий собой последовательное решение линеаризованных выпуклых задач. Исследованы вопросы сходимости данного метода. В частности, показано, что предельная точка генерируемой методом последовательности является ККТ-решением исходной задачи в том случае, если она удовлетворяет соответствующим ограничениям-неравенствам. Проведено предварительное численное тестирование метода на тестовых задачах из открытых источников.

Ключевые слова: d.c. функция, невыпуклая оптимизация, точный штраф, локальный поиск.

Введение

В последние два десятилетия метод точного штрафа [1, 2] набирает популярность благодаря своей эффективности в решении сложных практических задач. Однако помимо проблемы выбора подходящего значения штрафного параметра существует другая сложность, вызванная невыпуклостью оштрафованной задачи в случае, если исходная задача также является невыпуклой. Как известно, классические методы оптимизации не гарантируют нахождение глобального решения в невыпуклых задачах. Более того, даже поиск стационарной точки (точки Каруша-Куна-Таккера) в невыпуклых задачах бывает затруднён [3, 4].

В рамках разрабатываемой Теории глобального поиска (см., например, [5]) предлагается специальный метод локального поиска для оштрафованной задачи, заключающийся в частичной линеаризации (по базовой невыпуклости) оштрафованной целевой функции. Метод представляет собой последовательное решение серии выпуклых задач оптимизации. В работе исследуется сходимость метода, а также связь между множителями Лагранжа исходной задачи с ограничениями-неравенствами и множителями Лагранжа линеаризованной задачи. Также представлены первые результаты численного тестирования разработанного метода.

1 Постановка задачи

Рассматривается задача

$$(\mathcal{P}): \quad \left.\begin{array}{c} f_0(x) = g_0(x) - h_0(x) \downarrow \min\limits_x, \quad x \in S, \\ f_i(x) = g_i(x) - h_i(x) \le 0, \;\; i \in I = \{1, \ldots, m\}, \end{array}\right\} \tag{1}$$

где функции $g_i(\cdot)$, $h_i(\cdot)$, $i \in \{0\} \cup I$, выпуклы на $\mathbb{R}^n$ и дифференцируемы на открытом множестве $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Таким образом $f_i(\cdot)$, $i \in \{0\} \cup I$, являются d.c. функциями, представимыми в виде разности двух выпуклых функций [6, 7, 8, 9, 10, 11]. Будем полагать, что $S \subset \mathbb{R}^n$ выпуклое множество, при этом выполнено соотношение

$$S \subset \operatorname{int}[\operatorname{dom} g_i] \cap \operatorname{int}[\operatorname{dom} h_i] \subset \Omega \qquad \forall i \in I \cup \{0\},$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (код проекта 15-11-20015).

где $\operatorname{int} C$ и $\operatorname{dom}\varphi$ обозначают внутренность множества C и область определения функции φ, $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$, $\operatorname{dom}\varphi = \{x \mid \varphi(x) < \infty\}$ соответственно [9]. Предполагается также, что допустимое множество $\mathcal{F} = \{x \in S \mid f_i(x) \le 0,\ i \in I\}$ в задаче $(\mathcal{P})$ непусто, а оптимальное значение — конечно:

$$\mathcal{V}(\mathcal{P}) = \inf\{f_0, \mathcal{F}\} = \inf_x\{f_0(x) \mid x \in S,\ f_i(x) \le 0,\ i \in I\} > -\infty.$$

2 Метод локального поиска

Введём в рассмотрение функцию штрафа вида

$$W(x) = \max\{0, f_1(x), \ldots, f_m(x)\}$$

и рассмотрим, наряду с задачей $(\mathcal{P})$, оштрафованную задачу без невыпуклых ограничений-неравенств:

$$(\mathcal{P}_\sigma): \qquad \Theta_\sigma(x) = f_0(x) + \sigma W(x) \downarrow \min, \quad x \in S,$$

для некоторого $\sigma \ge 0$. Соотношение задач $(\mathcal{P})$ и $(\mathcal{P}_\sigma)$ связано с понятием точного штрафа [7, 8, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18]. Известно, что если $z \in Sol(\mathcal{P}_\sigma)$ и $z \in \mathcal{F}$, то $z \in Sol(\mathcal{P})$. Иными словами, точная штрафная функция позволяет перейти от задачи с невыпуклыми ограничениями $(\mathcal{P})$ к задаче минимизации на выпуклом множестве $(\mathcal{P}_\sigma)$ при некотором $\sigma \ge \sigma_* \ge 0$.

Покажем, что задача $(\mathcal{P}_\sigma)$ является задачей d.c. минимизации, т.е. целевая функция $\Theta_\sigma(x)$ представима в виде разности двух выпуклых функций. Действительно, имеем:

$$\Theta_\sigma(x) = G_\sigma(x) - H_\sigma(x), \qquad H_\sigma(x) = h_0(x) + \sigma\sum_{i\in I} h_i(x),$$

$$G_\sigma(x) = g_0(x) + \sigma\max\left\{\sum_{j\in I} h_j(x); \max_{i\in I}\left[g_i(x) + \sum_{j\in I}^{j\ne i} h_j(x)\right]\right\}. \tag{2}$$

Нетрудно видеть, что $H_\sigma(\cdot)$ и $G_\sigma(\cdot)$ — выпуклые функции. Тогда для поиска стационарной точки в задаче $(\mathcal{P}_\sigma)$ может быть применён специальный метод локального поиска [19], основанный на частичной линеаризации целевой функции по базовой невыпуклости.

Пусть задано начальное приближение $x^0 \in S$ и текущая точка $x^k \in S$. Значение параметра штрафа $\sigma > 0$ фиксировано. Тогда следующее приближение $x^{k+1} \in S$ выбирается таким, чтобы оно удовлетворяло неравенству

$$G_\sigma(x^{k+1}) - \langle \nabla H_\sigma(x^k), x^{k+1}\rangle - \delta_k \le \inf_x\{G_\sigma(x) - \langle \nabla H_\sigma(x^k), x\rangle \mid x \in S\}, \tag{3}$$

где $\delta_k > 0$, $k = 0, 1, 2, \ldots$ — точность решения следующей линеаризованной задачи:

$$(\mathcal{P}_\sigma L_k): \qquad \Phi_{\sigma k}(x) = G_\sigma(x) - \langle \nabla H_\sigma(x^k), x\rangle \downarrow \min_x, \quad x \in S. \tag{4}$$

Задача $(\mathcal{P}_\sigma L_k)$ является выпуклой, а потому может быть решена соответствующими классическими методами оптимизации [7, 8, 10] и оптимизационными пакетами программ. Напомним, любая стационарная точка выпуклой задачи является в ней точкой глобального оптимума. Будем полагать, что последовательность $\{\delta_k\}$ удовлетворяет соотношениям вида

$$\delta_k \ge 0, \quad k = 0, 1, 2, \ldots \quad \sum_{k=0}^{\infty} \delta_k < +\infty. \tag{5}$$

Положим, целевая функция $f_0(\cdot)$ задачи $(\mathcal{P})$ ограничена снизу на S, т.е.

$$(\mathcal{H}_0): \qquad \inf_x\{f_0(x) \mid x \in S\} > -\infty. \tag{6}$$

Тогда, нетрудно видеть, целевая функция $\theta_\sigma(\cdot)$ задачи $(\mathcal{P}_\sigma)$ удовлетворяет аналогичному условию: $\inf_x\{\theta_\sigma(x) \mid x \in S\} > -\infty$. Введём обозначение $\mathcal{V}_k = \mathcal{V}(\mathcal{P}_\sigma L_k) = \inf_x\{\Phi_{\sigma k}(x) \mid x \in S\}$. Имеет место следующий результат о сходимости предлагаемого метода.

Предложение 1. *Пусть* $(\mathcal{H}_0)$–(6) *выполнено. Тогда последовательность* $\{x^k\} \subset S$, *порождаемая методом* (3), (5), *удовлетворяет следующим условиям.*
(А) Последовательности $\{\theta_{\sigma k}\}$ *и* $\{\Delta\Phi_{\sigma k}\}$, *где* $\theta_{\sigma k} = \theta_\sigma(x^k)$,
$\Delta\Phi_{\sigma k} = \Phi_{\sigma k}(x^k) - \Phi_{\sigma k}(x^{k+1}) \triangleq G_\sigma(x^k) - G_\sigma(x^{k+1}) - \langle \nabla H_\sigma(x^k), x^k - x^{k+1}\rangle$, *сходятся так, что*

$$\lim_{k\to\infty} \theta_{\sigma k} = \theta_{\sigma *} \geq \mathcal{V}(\mathcal{P}_\sigma) = \inf_x\{\theta_\sigma(x) \mid x \in S\}, \tag{7}$$

$$\lim_{k\to\infty} \Delta\Phi_{\sigma k} = 0; \tag{8}$$

$$(Б): \quad \lim_{k\to\infty} \inf_x\{G_\sigma(x) - G_\sigma(x^{k+1}) + \langle \nabla H_\sigma(x^k), x^{k+1} - x\rangle | x \in S\} = \lim_{k\to\infty}\{\mathcal{V}_k - \Phi_{\sigma k}(x^{k+1})\} = 0. \tag{9}$$

Доказательство. (А) Из (3) имеем

$$-\delta_k \leq \inf_x\{G_\sigma(x) - G_\sigma(x^{k+1}) + \langle \nabla H_\sigma(x^k), x^{k+1} - x\rangle \mid x \in S\} \leq$$
$$\leq G_\sigma(x^k) - G_\sigma(x^{k+1}) + \langle \nabla H_\sigma(x^k), x^{k+1} - x^k\rangle, \tag{10}$$

и, с учётом выпуклости $H_\sigma(\cdot)$, получаем

$$-\delta_k \leq G_\sigma(x^k) - G_\sigma(x^{k+1}) + H_\sigma(x^{k+1}) - H_\sigma(x^k) = \theta_\sigma(x^k) - \theta_\sigma(x^{k+1}). \tag{11}$$

В частности, имеем

$$\theta_\sigma(x^{k+1}) \leq \theta_\sigma(x^k) + \delta_k, \quad k = 0, 1, 2, ... \tag{12}$$

Последнее означает, что последовательность $\{\theta_{\sigma k}\}$ почти монотонно убывающая [8, 20]. Следовательно, неравенство (12) с учётом (5) доказывает выполнение (7) [21]. Более того, из (10) и (11) следует

$$-\delta_k \leq \Delta\Phi_{\sigma k} = \Phi_{\sigma k}(x^k) - \Phi_{\sigma k}(x^{k+1}) \leq \theta_\sigma(x^k) - \theta_\sigma(x^{k+1}),$$

что влечёт (8) в силу (5) и (7).

(Б) Соотношение (9) может быть доказано путём перехода к пределу в (10)–(11) и с учётом (5) и (7). □

Лемма 1. *Пусть последовательность* $\{x^k\}$, *порождаемая методом* (3), (5) *сходится:*

$$\lim_{k\to\infty} x^k = x_*.$$

Тогда последовательность $\{\mathcal{V}_k = \mathcal{V}(\mathcal{P}_\sigma L_k)\}$ *сходится:*

$$\lim_{k\to\infty} \mathcal{V}_k = \mathcal{V}_*,$$

как и последовательность $\{\Phi_{\sigma k}(x^{k+1})\}$ *значений целевых функций* $\Phi_{\sigma k}(\cdot)$ *задач* $(\mathcal{P}_\sigma L_k)$ *в точке* x^{k+1} :

$$\lim_{k\to\infty} \Phi_{\sigma k}(x^{k+1}) \triangleq \Phi_{\sigma *}. \tag{13}$$

Теорема 1. *Пусть последовательность* $\{x^k\}$, *порождаемая методом* (3), (5) *сходится к* $x_* \in S$. *Тогда предельная точка* x_* *является решением следующей линеаризованной задачи:*

$$(\mathcal{P}_\sigma L_*): \ \Phi_{\sigma *}(x) = G_\sigma(x) - \langle \nabla H_\sigma(x_*), x\rangle \downarrow \min_x, \quad x \in S. \tag{14}$$

Доказательство. Из (9), (12) и (13) нетрудно видеть (при $k \to \infty$), что

$$\mathcal{V}_* = \Phi_{\sigma *} \triangleq G_\sigma(x_*) - \langle \nabla H_\sigma(x_*), x_*\rangle \tag{15}$$

в силу непрерывности $G_\sigma(\cdot), \nabla H_\sigma(\cdot)$ и скалярного произведения $\langle \cdot, \cdot\rangle$. Более того, с учётом неравенства

$$\mathcal{V}_k \leq \Phi_{\sigma k}(x) \triangleq G_\sigma(x) - \langle \nabla H_\sigma(x^k), x\rangle \quad \forall x \in S, \quad k = 0, 1, 2, ...$$

мы получаем (при $k \to \infty$) соотношение

$$\mathcal{V}_* \leq \Phi_{\sigma *}(x) = G_\sigma(x) - \langle \nabla H_\sigma(x_*), x\rangle \quad \forall x \in S$$

которое вместе с (15) завершает доказательство. □

Замечание 1. *(Критерий останова). Из соотношений* (10), (11) *следует, что одно из неравенств*

$$\theta_\sigma(x^k) - \theta_\sigma(x^{k+1}) \le \frac{\tau}{2}, \tag{16}$$

$$\Phi_\sigma(x^k) - \Phi_\sigma(x^{k+1}) \triangleq G_\sigma(x^k) - G_\sigma(x^{k+1}) - \langle \nabla H_\sigma(x^k), x^k - x^{k+1}\rangle \le \frac{\tau}{2} \tag{16'}$$

может быть использовано в качестве критерия останова метода (3), (5).

3 Множители Лагранжа

Метод локального поиска (3), (5) заключается в последовательном решении линеаризованных задач вида $(\mathcal{P}_\sigma L_k)$. Целевая функция такой задачи не является дифференцируемой, однако может быть построена эквивалентная задача, лишенная данного недостатка.

Для простоты изложения положим $S = \mathbb{R}^n$. Предельная точка x_* последовательности $\{x^k\}$, порождаемой методом локального поиска, в силу теоремы 1 является решением линеаризованной задачи $(\mathcal{P}_\sigma L_*)$-(14), где G_σ — негладкая функция (см. (2)). В свою очередь, задача $(\mathcal{P}_\sigma L_*)$ оказывается эквивалентной задаче

$$(\mathcal{P}_\sigma L_*(t))\colon \quad \left.\begin{array}{c} g_0(x) - \langle \nabla H_\sigma(x_*), x\rangle + \sigma t \downarrow \min\limits_{(x,t)}, \\ g_i(x) + \sum\limits_{j\in I}^{j\ne i} h_j(x) \le t, \quad i \in I, \\ \sum\limits_{i\in I} h_i(x) \le t, \quad t \in \mathbb{R}, \quad x \in \mathbb{R}^n, \end{array}\right\} \tag{17}$$

в том смысле, что $x_* \in Sol(\mathcal{P}_\sigma L_*)$ тогда и только тогда, когда пара (x_*, t_*) является решением задачи $(\mathcal{P}_\sigma L_*(t))$–(17), где

$$t_* = \max\Big\{\sum_{j\in I} h_j(x_*); g_i(x_*) + \sum_{j\in I}^{j\ne i} h_j(x_*), i \in I\Big\}.$$

Отметим, что задача $(\mathcal{P}_\sigma L_*(t))$ выпукла. Кроме этого, для неё всегда выполнено условие Слейтера [6, 7, 21], следовательно, можно положить $\mu_0 = 1$ в функции Лагранжа $\mathcal{L}(x, t; \mu)$ задачи $(\mathcal{P}_\sigma L_*(t))$:

$$\mathcal{L}(x,t;\mu_1,\dots,\mu_m,\mu_{m+1}) = g_0(x) + \sigma t - \langle \nabla h_0(x_*) + \sigma \sum_{i\in I} \nabla h_i(x_*), x\rangle + \\ + \sum_{i\in I} \mu_i \Big[g_(x) + \sum_{j\in I}^{j\ne i} h_j(x) - t\Big] + \mu_{m+1}\Big(\sum_{i\in I} h_i(x) - t\Big).$$

Тогда система Каруша-Куна-Таккера для $(\mathcal{P}_\sigma L_*(t))$ примет вид: $\exists(\mu_1,\dots,\mu_m,\mu_{m+1}) \in \mathbb{R}^{m+1}_+$,

$$\mu_i\Big[g_i(x_*) + \sum_{j\in I}^{j\ne i} h_j(x_*) - t_*\Big] = 0, \quad i = 1,\dots,m, \qquad \mu_{m+1}\Big[\sum_{i\in I} h_i(x_*) - t_*\Big] = 0,$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(t)}{\partial t} = \sigma - \sum_{i\in I}\mu_i - \mu_{m+1} = 0, \quad \text{т. е.} \quad \sum_{i\in I}\mu_i + \mu_{m+1} = \sigma, \tag{18}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(t)}{\partial x} = \nabla g_0(x_*) - \nabla h_0(x_*) - \sigma \sum_{i\in I} \nabla h_i(x_*) + \\ + \sum_{i\in I} \mu_i \Big[\nabla g_i(x_*) + \sum_{j\in I}^{j\ne i} \nabla h_j(x_*)\Big] + \mu_{m+1} \sum_{i\in I} \nabla h_i(x_*) = 0_n \in \mathbb{R}^n. \tag{19}$$

Учитывая $\nabla f_i(\cdot) = \nabla g_i(\cdot) - \nabla h_i(\cdot)$, $i \in I \cup \{0\}$ и (18), из (19) будем иметь:

$$0_n = \nabla f_0(x_*) + \sum_{i\in I} \mu_i \nabla f_i(x_*).$$

Отсюда следует, что равенство $\frac{\partial \mathcal{L}(x_*,\lambda)}{\partial x} = 0$ в ККТ-системе исходной задачи $(\mathcal{P})$ с функцией Лагранжа $\mathcal{L}(x,\lambda) = f_0(x) + \sum\limits_{i\in I} \lambda_i f_i(x)$ выполнено при

$$\lambda_i = \mu_i, \quad i \in I = \{1,\dots,m\}. \tag{20}$$

Нетрудно убедиться, что условия дополняющей нежёсткости для задачи $(\mathcal{P})$:

$$\lambda_i f_i(x_*) = 0, \quad i \in I,$$

выполнены при λ_i, удовлетворяющих (20), если x_* допустима в $(\mathcal{P})$. Таким образом, доказана следующая теорема.

Теорема 2. *Пусть предельная точка x_* последовательности $\{x^k\}$, порождённой методом (3), (5), допустима в задаче $(\mathcal{P})$, т.е. $f_i(x_*) \le 0, \quad i \in I$. Тогда x_* является ККТ-точкой в исходной задаче $(\mathcal{P})$ с множителями Лагранжа λ_i, $i \in I$, равными соответствующим множителям Лагранжа μ_i, $i \in I$, вспомогательной задачи $(\mathcal{P}_\sigma L_*(t))$.*

4 Численное тестирование

Тестирование производилось на задачах с невыпуклой квадратичной целевой функцией и невыпуклыми квадратичными ограничениями-неравенствами. В настоящей статье представлены результаты для двух задач. В каждой из них разложение функций на разность двух выпуклых осуществлялось на основе свойства диагонального доминирования следующим образом. Пусть $C = (c_{ij})$ — симметричная матрица. Определим матрицы $A_1 = (a_{ij}^{(1)})$, $A_2 = (a_{ij}^{(2)})$:

$$a_{ij}^{(1)} = \begin{cases} c_{ij}, & c_{ij} \ge 0, \\ 0, & c_{ij} < 0, \end{cases} \qquad a_{ij}^{(2)} = \begin{cases} 0, & c_{ij} \ge 0, \\ -c_{ij}, & c_{ij} < 0, \end{cases}$$

и диагональную матрицу $\Lambda_1 = (\lambda_{ii}^{(1)})$ для $\chi \ge 0$:

$$\lambda_{ii}^{(1)} = \begin{cases} 0, & a_{ii}^{(1)} > \gamma_i^{(1)}, \\ \gamma_i^{(1)} - a_{ii}^{(1)} + \chi, & a_{ii}^{(1)} \le \gamma_i^{(1)}. \end{cases} \qquad \gamma_i^{(1)} = \sum_{i\ne j} a_{ij}^{(1)}.$$

Также определим $B = (b_{ij})$ и диагональную матрицу $\Lambda_2 = (\lambda_{ii}^{(2)})$ как

$$B = A_2 + \Lambda_1, \qquad \lambda_{ii}^{(2)} = \begin{cases} 0, & b_{ii} > \gamma_i^{(2)}, \\ \gamma_i^{(2)} - b_{ii} + \chi, & b_{ii} \le \gamma_i^{(2)}. \end{cases} \qquad \gamma_i^{(2)} = \sum_{i\ne j} b_{ij}.$$

Тогда $C = C_1 - C_2, \quad C_1 = A_1 + \Lambda_1 + \Lambda_2 \succeq 0, \quad C_2 = A_2 + \Lambda_1 + \Lambda_2 \succeq 0.$

Подбор параметра штрафа во время работы локального поиска производился следующим образом. Выбрать начальное значение $\sigma := \sigma_0 > 0$. Если для некоторой итерации k локального поиска выполняется критерий останова (16'), при этом дополнительный критерий, отвечающий за допустимость приближения,

$$W(x^{k+1}) < \rho \tag{21}$$

не выполнен, то параметр штрафа увеличить на фиксированную величину: $\sigma := \sigma + \Delta\sigma$, и продолжить итерации локального поиска в соответствии с (3). Таким образом, локальный поиск останавливается при одновременном соблюдении (16') и (21). Во всех случаях было установлено: $\sigma_0 = 0.5$, $\Delta\sigma = 0.5$, $\delta_k = \delta = 10^{-7}$, $k = 0,1,\dots, \quad \tau = 10^{-5}$, $\rho = 10^{-6}$, $\chi = 0$. Начальные приближения генерировались случайно, в том числе из недопустимой области.

Таблица 1: Результаты работы локального поиска в задаче `mistake`

x^0	$W(x^0)$	$W(z)$	$f_0(x^0)$	$f_0(z)$	$f_0(z)-f_*$	PL	$Time$	σ	$\sigma\uparrow$	$\|\bar\mu\|_1$
1	711.9189	0.0000	20.6545	−0.9992	0.0008	82	7.90	0.5	0	0.5
2	1715.7567	0.0000	14.0779	−1.0000	0.0000	18	1.99	0.5	0	0.5
3	810.2510	0.0000	−5.5734	−0.9322	0.0678	242	17.56	0.5	0	0.1
4	193.7901	0.0000	2.4729	−0.9996	0.0004	248	16.11	0.5	0	0.5
5	812.2301	0.0000	−43.3341	−0.9999	0.0001	41	4.96	0.5	0	0.0
6	215.7258	0.0000	−66.3796	−0.9996	0.0004	65	4.73	0.5	0	0.5
7	573.7562	0.0000	50.3123	−0.9996	0.0004	118	9.77	0.5	0	0.5
8	603.5587	0.0000	−40.8561	−0.9999	0.0001	30	3.57	0.5	0	0.0
9	682.6736	0.0000	−95.4730	−0.9996	0.0004	156	12.86	0.5	0	0.0
10	428.2287	0.0000	28.2430	−1.0000	0.0000	25	2.69	0.5	0	0.5
						103	8.21			

Пример 1. Задача `mistake` из библиотеки `COCONUT` [22]

$$f_0(x) = -0.5(x_1x_4 - x_2x_3 + x_3x_9 - x_5x_9 + x_5x_8 - x_6x_7) \downarrow \min_x, \quad x \in S,$$
$$f_1(x) = x_7^2 + x_8x_9 \le 1, \qquad f_2(x) = x_2x_3 - x_1x_4 \le 0,$$
$$f_3(x) = -x_8x_9 \le 0, \quad f_4(x) = -x_5x_9 \le 0, \quad f_5(x) = x_6x_7 - x_5x_8 \le 0,$$
$$S = \{x \in \mathbb{R}^9 \mid x_3^2 + x_4^2 \le 1, \qquad x_5^2 + x_6^2 \le 1, \qquad x_9^2 \le 1,$$
$$x_1^2 + (x_2 - x_9)^2 \le 1, \qquad (x_1 - x_5)^2 + (x_2 - x_6)^2 \le 1,$$
$$(x_1 - x_7)^2 + (x_2 - x_8)^2 \le 1, \qquad (x_3 - x_7)^2 + (x_4 - x_8)^2 \le 1,$$
$$(x_3 - x_5)^2 + (x_4 - x_6)^2 \le 1, \qquad x_9 \ge 0\}.$$

Наилучшее известное решение $x_* = (0.7575, 0.7958, 0.3433, 0.8463, 0.9961, 0.888,\ 0.6688, 1.7918, 0.1429)$, $f_* = f_0(x_*) = -1$. Результаты расчётов представлены в табл. 1. Здесь z обозначает точку, полученную в результате работы метода, PL — количество решённых линеаризованных задач (количество итераций метода), $Time$ — время счёта в секундах, σ — параметр штрафа, полученный в конце работы метода, $\sigma\uparrow$ — количество увеличений штрафного параметра на $\Delta\sigma$, $\bar\mu$ — вектор множителей Лагранжа в точке z, соответствующих невыпуклым ограничениям, $\bar\mu \in \mathbb{R}^m$. Остальные обозначения соответствуют обозначениям в статье. Одна строка таблицы соответствует запуску метода из одной начальной точки. В последней строке содержатся средние величины для соответствующих столбцов.

Пример 2. Задача `hs108` из библиотеки `COCONUT` [22]

$$f_0(x) = -0.5(x_1x_4 - x_2x_3 + x_3x_9 - x_5x_9 + x_5x_8 - x_6x_7) \downarrow \min_x, \quad x \in S,$$
$$f_1(x) = x_2x_3 - x_1x_4 \le 0, \qquad f_2(x) = -x_3x_9 \le 0,$$
$$f_3(x) = x_5x_9 \le 0, \qquad f_4(x) = x_6x_7 - x_5x_8 \le 0,$$
$$S = \{x \in \mathbb{R}^9 \mid x_3^2 + x_4^2 \le 1, \qquad x_5^2 + x_6^2 \le 1, \qquad x_9^2 \le 1,$$
$$x_1^2 + (x_2 - x_9)^2 \le 1, \qquad (x_1 - x_5)^2 + (x_2 - x_6)^2 \le 1,$$
$$(x_1 - x_7)^2 + (x_2 - x_8)^2 \le 1, \qquad (x_3 - x_7)^2 + (x_4 - x_8)^2 \le 1,$$
$$(x_3 - x_5)^2 + (x_4 - x_6)^2 \le 1, \qquad x_7^2 + (x_8 - x_9)^2 \le 1, \qquad x_9 \ge 0\}.$$

Наилучшее известное решение $x_* = (0.9238, 0.3828, 0.1304, 0.9915, 0.9238, 0.3828, 0.1304, 0.9915, 0)$, $f_* = f_0(x_*) = -0.866025$. Результаты расчётов представлены в табл. 2.

5 Заключение

В работе рассмотрена невыпуклая задача оптимизации с целевой функцией и ограничениями-неравенствами, заданными d.c. функциями. С помощью точного штрафа задача сведена к вспомогательной задаче без огра-

Таблица 2: Результаты работы локального поиска в задаче `hs108`

x^0	$W(x^0)$	$W(z)$	$f_0(x^0)$	$f_0(z)$	$f_0(z) - f_*$	PL	$Time$	σ	$\sigma\uparrow$	$\|\bar{\mu}\|_1$
1	763.7086	0.0000	20.6545	−0.8660	0.0000	26	4.63	0.5	0	0.5
2	602.1930	0.0000	14.0779	−0.8660	0.0000	48	4.67	0.5	0	0.0
3	863.9341	0.0000	−5.5734	−0.8660	0.0000	61	5.92	0.5	0	0.5
4	144.1759	0.0000	2.4729	−0.8660	0.0001	70	5.65	0.5	0	0.5
5	812.2301	0.0000	−43.3341	−0.8660	0.0000	23	2.08	0.5	0	0.0
6	28.6549	0.0000	−66.3796	−0.8660	0.0000	18	1.38	0.5	0	0.5
7	573.7562	0.0000	50.3123	−0.4999	0.3661	35	4.18	0.5	0	0.0
8	48.1934	0.0000	−40.8561	−0.6748	0.1913	129	12.61	0.5	0	0.0
9	0.0000	0.0000	−95.4730	−0.8660	0.0000	51	5.12	0.5	0	0.5
10	377.9148	0.0000	28.2430	−0.8660	0.0000	30	2.78	0.5	0	0.0
						49	4.90			

ничений. Показано, что целевая функция вспомогательной задачи также является d.c. функцией. Для решения вспомогательной (оштрафованной) задачи предложен метод локального поиска, основанный на последовательном решении частично линеаризованных оштрафованных задач. Доказано, что предельная точка метода является ККТ-точкой в исходной задаче с ограничениями-неравенствами и, кроме того, является решением линеаризованной задачи, линеаризованной в этой же точке. Проведён численный эксперимент с фиксированным штрафным параметром, обеспечивающим допустимость в исходной задаче полученного решения линеаризованной задачи. Результаты вычислительного эксперимента демонстрируют сравнительную эффективность разработанного метода локального поиска.

Список литературы

[1] Ерёмин И. И. Метод штрафов в выпуклом программировании // Докл. АН СССР. 1967. Т. 173, № 4. С. 748–751.

[2] Zangwill W. Non-linear Programming via Penalty Functions // Management Science. 1967. V. 13. P. 344–358.

[3] Byrd R., Marazzi M., Nocedal J. On the Convergence of Newton Iterations to Non-Stationary Points // Mathematical Programming, Ser. A. 2004. V. 99. Iss. 1. P. 127–148.

[4] Mascarenhas W. On the Divergence of Line Search Methods // Comput. Appl. Math. 2007. V. 26. Iss. 1. P. 129–169.

[5] Strekalovsky A. On Solving Optimization Problems with Hidden Nonconvex Structures. In: Rassias T., Floudas C., Butenko S. (Eds.) Optimization in Science and Engineering. New York: Springer, 2014. P. 465–502.

[6] Nocedal J., Wright S. Numerical Optimization. New York: Springer, 2006.

[7] Bonnans J.-F., Gilbert J., Lemarechal C., Sagastizabal C. Numerical Optimization. Theoretical and Practical Aspects. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2006.

[8] Izmailov A., Solodov M. Newton-Type Methods for Optimization and Variational Problems. New York: Springer, 2014.

[9] Hiriart-Urruty J.-B., Lemarechal C. Convex Analysis and Minimization Algorithms. Berlin: Springer-Verlag, 1993.

[10] Tuy H. Convex Analysis and Global Optimization. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1998.

[11] Horst R., Tuy H. Global Optimization: Deterministic Approaches. Berlin: Springer-Verlag, 1996.

[12] Burke J. An Exact Penalization Viewpoint of Constrained Optimization // SIAM Journal on Control and Optimization. 1991. V. 29. Iss. 4. P. 968–998.

[13] Byrd R., Nocedal J., Waltz R. Steering Exact Penalty Methods for Nonlinear Programming // Optimization Methods & Software. 2008. V. 23. Iss. 2. P. 197–213.

[14] Kruger A. Nonlinear Metric Subregularity // J. Optim. Theory Appl. 2016. V. 171. Iss. 3. P. 820–855.

[15] Kruger A. Error Bounds and Metric Subregularity // Optimization. 2015. V. 64. Iss. 1. P. 49–79.

[16] Kruger A., Minchenko L., Outrata J. On Relaxing the Mangasarian-Fromovitz Constraint Qualification // Positivity. 2014. V. 18. Iss. 1. P. 171–189.

[17] Di Pillo G., Grippo L. Exact Penalty Functions in Constrained Optimization // SIAM J. Control Optim. 1989. V. 27. P. 1333–1360.

[18] Han S., Mangasarian O. Exact Penalty Functions in Nonlinear Programming // Math. Prog. 1979. V. 17. Iss. 3. P. 251–269.

[19] Strekalovsky A. On Local Search in D.C. Optimization Problems // Applied Mathematics and Computation. 2015. V. 255. P. 73–83.

[20] Strekalovsky A., Orlov A., Malyshev A. On Computational Search for Optimistic Solutions in Bilevel Problems // Journal of Global Optimization. 2010. V. 48. Iss. 1. P. 159–172.

[21] Васильев Ф. П. Методы оптимизации. Москва: Факториал Пресс, 2002.

[22] The COCONUT Benchmark. http://www.mat.univie.ac.at/ neum/glopt/coconut/ Benchmark/Benchmark.html. Дата обращения: 2017-02-28.

Александр Сергеевич Стрекаловский — д.ф.-м.н., проф., зав. лабораторией Института динамики систем и теории управления СО РАН;
e-mail: strekal@icc.ru;
Илья Михайлович Минарченко — программист Института динамики систем и теории управления СО РАН;
e-mail: eq.progr@gmail.com.
Дата поступления — 1 июня 2017 г.

АЛГОРИТМЫ ЧИСЛЕННОГО ПРЯМОГО ТРЁХМЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАДАЧ МАГНИТОРАЗВЕДКИ

И. В. Суродина[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*
[2] *Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.632.4+550.832.7

В работе рассмотрены параллельные алгоритмы для реализации на графических процессорах прямой трёхмерной задачи магниторазведки.
Традиционно задачи магнитостатики решаются с помощью метода интегральных уравнений, что вполне оправдано для моделей с простыми объектами. Для сложных моделей с произвольной формой исследуемых объектов проще использовать конечно-разностный метод решения.
В работе рассмотрен конечно-разностный алгоритм решения уравнения Пуассона, реализованный на графических процессорах. Используется итерационный метод решения полученных систем линейных уравнений с оригинальным предобуславливателем. Все алгоритмы полностью параллельны. Проведённые первые тесты показывают хорошую точность и быстроту расчётов.
Ключевые слова: уравнение Пуассона, моделирование, методы Крыловских пространств, предобуславливатель

Введение

Основы для решения прямой задачи магниторазведки изложены в работе [1]. Как известно, магнитное поле описывается двумя основными характеристиками: напряжённостью $\vec{H}$ и индукцией $\vec{B}$, между которыми в системе СИ существует следующее локальное соотношение:

$$\vec{B}(a) = \mu_0[\vec{H}(a) + \vec{I}(a)], \tag{1}$$

где μ_0 — магнитная постоянная, $\vec{I}$ — намагниченность в рассматриваемой точке a. Из (1) следует, что всюду, куда может быть помещён датчик магнитометра (в немагнитной среде), справедливо уравнение $\vec{B}(a) = \mu_0\vec{H}(a)$. Намагниченность вещества сложным образом зависит от его магнитных свойств и намагничивающего поля, что характеризуется петлёй гистерезиса. Магниторазведка изучает слабые магнитные поля — нормальное поле примерно 50 мкТл. Поэтому в магниторазведке применяют упрощенную модель намагничения: считают горные породы и руды "идеальным ферромагнетиком". Это даёт возможность связать намагниченность с магнитными свойствами

$$\vec{I} = \kappa\vec{H} + \vec{I}_n. \tag{2}$$

Здесь κ — безразмерная магнитная восприимчивость, I_n — вектор естественной остаточной намагниченности. Подстановка (2) в (1) даёт в любой точке пространства

$$\vec{B} = \mu_0[(1+\kappa)\vec{H} + \vec{I}_n] \tag{3}$$

Принято считать величину $(1+\kappa) = \mu$ относительной магнитной проницаемостью вещества. В этих обозначения получим

$$\vec{B} = \mu_0[(\mu\vec{H} + \vec{I}_n] \tag{4}$$

Как известно из теории физических полей, векторы $\vec{B}$ и $\vec{H}$ удовлетворяют дифференциальным уравнениям, являющимся частным случаем уравнений Максвелла:

$$rot\vec{H}(a) = 0;\ div\vec{B}(a) = 0. \tag{5}$$

Как установлено в курсе теории поля, из этих уравнений следует, что на границах тел непрерывны тангенциальная компонента напряжённости и нормальная компонента индукции магнитного поля. Нормальная компонента напряжённости на границе тела испытывает разрыв, равный нормальной компоненте намагниченности в данной точке. Эти соотношения являются исходными при решении прямой задачи магниторазведки.

Из первого уравнения (5) следует возможность введения скалярного магнитного потенциала

$$\vec{H}(a) = -grad\ U(a). \tag{6}$$

Подстановка (4) во второе уравнение (5) с учетом соотношения (6) даёт следующее дифференциальное уравнение

$$div\ (\mu\ grad\ U) = div\ \vec{I}_n. \tag{7}$$

На границах тел потенциал удовлетворяет двум граничным условиям. Первое условие непрерывности потенциала на границе следует из непрерывности тангенциальной компоненты напряжённости. Имеем $U_i = U_e$, где U_i — потенциал внутри тела, а U_e — потенциал вне тела. Но потенциалы, как и поля, складываются из потенциалов первичного и вторичного полей: $U = U^{prim} + U^{sec}$. Поэтому считаем, что на границе непрерывен вторичный потенциал и граничное условие принимает вид

$$U_i^{prim} = U_e^{sec}. \tag{8}$$

Второе граничное условие вытекает из непрерывности нормальных компонент вектора индукции и в соответствии с этим имеет вид:

$$\frac{\partial U^{prim}}{\partial n} + \frac{\partial U_e^{sec}}{\partial n} = \mu(\frac{\partial U^{prim}}{\partial n} + \frac{\partial U_i^{sec}}{\partial n}) \tag{9}$$

Традиционно прямая задача магниторазведки сводится к нахождению внешних и внутренних потенциалов для любого оюъекта. Эти потенциалы удовлетворяют уравнению (7) и граничным условиям (8) и (9)

Если остаточная намагниченность равна нулю, то имеем следующее уравнение

$$div\ grad\ U = -div\ \vec{I}, \tag{10}$$

где

$$\vec{I} = \frac{\kappa B_e}{\mu_0(1 + \kappa N)}, \tag{11}$$

N — коэффициент размагничивания, связанный с формой объектов. Если форма объектов очень сложна, найти N затруднительно, но известно некоторое распределение κ в пространстве, то упрощенно считаем $\vec{I} = \kappa\vec{H}$.

Наша задача состояла в создании быстрой программы, работающей с любыми объектами, которые могут иметь очень сложные формы. Поэтому был выбран конечно-разностный способ решения.

1 Постановка прямой задачи магнитостатики

Исходя из вышеизложенного, стартовым будем считать уравнение (7) или (10). Будем рассматривать область, которая целиком включает моделируемые объекты. Более того, границы области должны быть достаточно удалены, чтобы влияние рассматриваемых объектов на границе было ничтожным. Таким образом, имеем задачу Дирихле для уравнения Пуассона. Далее используем уже накопленный опыт решения такого сорта задач [3], [7]. Дискретизация уравнения (7) или (10) конечно-разностным методом на неравномерной сетке с использованием однородной консервативной схемы [4], [5] и последующая его симметризация [6] приводит к системе линейных алгебраических уравнений

$$Ax = F, \tag{12}$$

где A действительная, симметричная, сильно разреженная, положительно определенная матрица со слабым диагональным преобладанием. В отличие от работ [3], [7], где задача решалась для аномального электрического потенциала, в данной постановке ищем решение в виде полного магнитного потенциала. Правая часть уравнений (7) или (10) представляет собой дивергенцию либо остаточной намагниченности, либо полной намагниченности. Поэтому следует обращать особое внимание на построение сетки, которая должна адекватно описывать границы рассматриваемых объектов.

2 Метод решения

Для решения систем линейных уравнений (12) был выбран итерационный метод сопряжённых градиентов (CG), поскольку в данном случае мы имеем разреженные, симметричные матрицы больших размеров. Все операции в формулах для метода CG являются матрично-векторными и хорошо распараллеливаются на GPU. Но без эффективного предобуславливателя скорость сходимости данного метода будет очень низкой. Такая реализация метода на GPU зачастую будет проигрывать по времени алгоритму с предобуславливателем на центральном процессоре. Специально для данного типа матриц был предложен алгоритм построения целого класса предобуславливателей [2], требующий минимальных временных ресурсов и ресурсов глобальной памяти на GPU. Как показано в работе [7] на примере решения двумерных и трёхмерных задач бокового каротажного зондирования, предобуславливатель, построенный нами на основе алгоритма Хотеллинга–Шульца имеет многие преимущества перед предобуславливателем, содержащемся в стандартной библиотеке CUSPARSE CUDA NVIDIA.
Во-первых, предобуславливатель, использующий только первый шаг алгоритма Хотеллинга не требует вообще никаких затрат на построение (при предварительном масштабировании системы уравнений).
Во-вторых, все операции в PCG (в том числе для предобуславливателей, использующих несколько шагов метода Хотеллинга) остаются матрично-векторными.
В-третьих, и это немаловажно, данный алгоритм очень прост в реализации на GPU.

3 Тестирование

Для тестирования использовались следующие модели.

1. **Модель 1** (представлена Василевским А.Н) Рассмотрим шар, имеющий радиус $R = 1000$м, находящийся в центре некоторой области. Необходимо рассчитать компоненты магнитного поля Hx, Hy, Hz на высоте 50 метров над шаром. Были рассмотрены 2 варианта.

а. $Ix = Iy = 0$; $Iz = 1$ СИ.

б. $Ix = Iy = Iz = 0.5774$ СИ.

Для этой простой модели известны аналитические решения, с которыми и было проведено сравнение полученных решений. На рисунке 1 приведены компоненты Hx, Hy, Hz, рассчитанные по трёхмерной программе и точные (аналитически) вычисленные для модели 1а. Для наглядности значения выданы при $z = 50$ в плоскости (X, Y) при $x = 0$ и $x = y$. Из рисунка видно, что в целом рассчитанные и аналитические значения довольно близки. Графики рассчитанных компонент Hx, Hy практически совпадают с графиками аналитическими. Немного хуже вычислена компонента Hz. Задача так подобрать сетку, чтобы получить наиболее близкое к точному решению не ставилась. Важно было, чтобы алгоритм работал в целом правильно.

На рисунке 2 приведены компоненты Hx, Hy, Hz, рассчитанные по трёхмерной программе и аналитически вычисленные для модели 1б. Графики компонент Hx, Hy, рассчитанных аналитически и по 3-хмерной программе совпадают, и Hz имеет гораздо меньшую погрешность, чем в модели 1а.

2. **Модель 2** (Представлена Савлуком А.В). На некоторой (неизвестной) глубине находится бесконечный цилиндр радиуса 25 метров, расположенный вертикально (ось цилиндра совпадает с осью Z). Магнитная восприимчивость цилиндра составляет от 400–800 единиц. На расстоянии 625 метров слева от цилиндра располагается сторонний объект, имеющий форму параллелепипеда размерами 50 метров по оси X, 300 метров по оси Y и бесконечного по оси Z. Магнитная восприимчивость этого стороннего объекта составляет 700–1500 единиц. Внешнее магнитное поле Земли: Hz=57375 нТл, $Hy = 1/6Hz$, $Hx = 0$. Требуется рассчитать модуль поля H на высоте 2м, 30 метров и 100 метров (в соответствии с данными наземной съёмки, проведённой человеком с магнитометром; данными, полученными летающим беспилотником и самолётом, рис. 3). Вычисленные значения сравнивались с реальными данными. В этом тесте важно было показать решение на

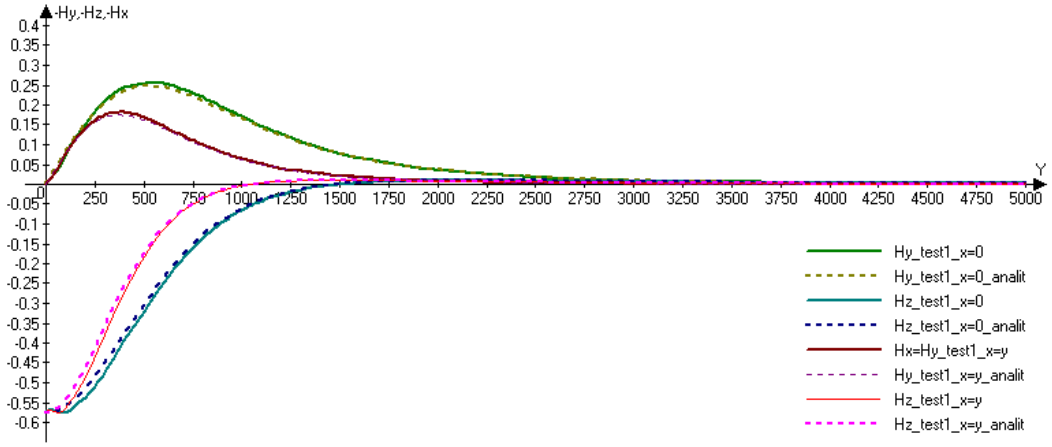


Рис. 1: Модель 1a

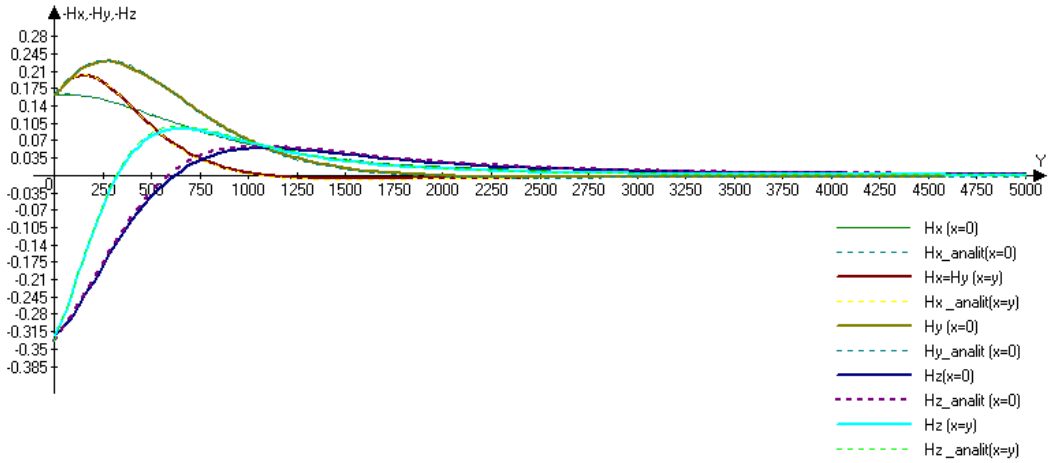


Рис. 2: Модель 1b

качественном уровне, так как конкретных значений измерений предоставлено не было. Были рассчитаны модели, имеющие различные положения цилиндра ($\kappa = 400$)и объекта ($\kappa = 700$) по глубине. Вначале варьировалось положение цилиндра по глубине: 10, 15 и 20 метров, сторонний объект располагался на глубине 10 м. Результаты расчётов на высоте 2, 30 и 100 метров приведены на рисунке 4. После анализа результатов расчётов и сравнения их с реальными данными (графиками) было установлено, что наиболее вероятная глубина залегания цилиндра составляет 15 метров. Далее варьировалась глубина залегания стороннего объекта. Результаты расчётов приведены на рисунке 5.

Численно установлено, что наиболее вероятная глубина залегания стороннего объекта составляет более 100 метров, если его магнитная восприимчивость $\kappa = 700$. На основании вышеизложенного, можно утверждать, что на качественном уровне трёхмерная программа расчётов прошла проверку и для этой модели.

Заключение

Создана программа расчёта компонент магнитного поля для задач магнитостатики. Реализованные алгоритмы полностью параллельны. Для оперативного решения прямой задачи может быть использован ноутбук с вычислительной или игровой картой нового поколения компании NVIDIA. Данная программа будет особенно полезна в тех случаях, когда реальные моделируемые объекты имеют сложную форму, структуру и плохо описываются набором простейших фигур.

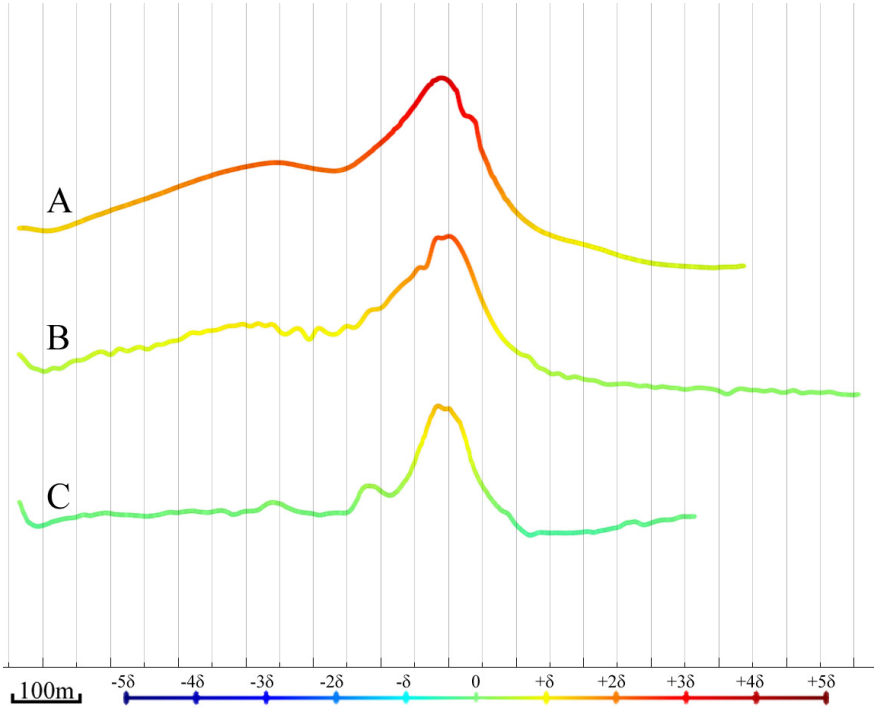


Рис. 3: Реальные данные, измеренные на высоте 2м (A), 30м (B), 100 метров (C)

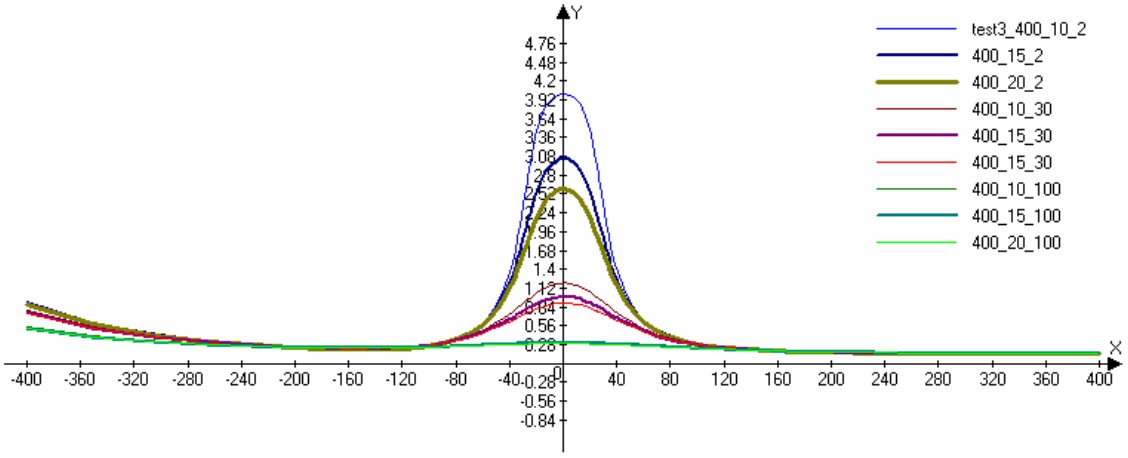


Рис. 4: Расчётные данные, полученные при моделировании цилиндра ($\kappa = 400$), залегающего на глубинах 10, 15 и 20 метров

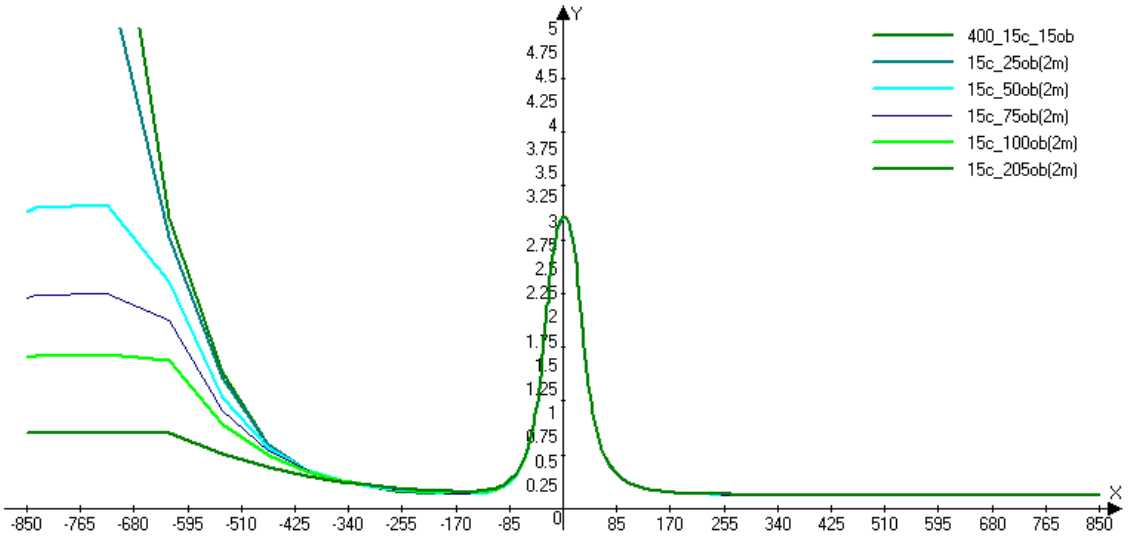


Рис. 5: Расчётные данные на высоте 2 метра, полученные при моделировании цилиндра ($\kappa = 400$), залегающего на глубинах 15 метров и вариации глубины стороннего объекта ($\kappa = 700$)

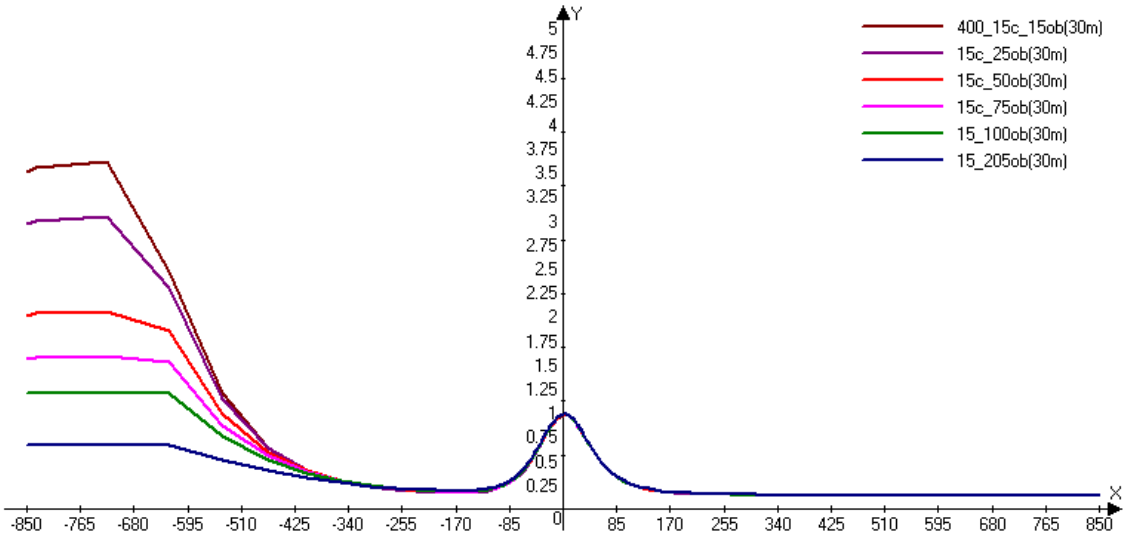


Рис. 6: Расчётные данные на высоте 30 метров, полученные при моделировании цилиндра (κ =400), залегающего на глубинах 15 метров и вариации глубины стороннего объекта ($\kappa = 700$)

Список литературы

[1] Блох Ю.И. Интерпретация гравитационных и магнитных аномалий.

[2] Labutin I.B,Surodina I.V Algorithm for Sparse Approximate Inverse Preconditioners in Conjugate Gradient Method // Reliable Computing (Interval Computations) Journal http://interval.louisiana.edu/reliable-computing-journal/tables-of-contents.#Volume 19

[3] Дашевский Ю.А., Суродина И.В., Эпов М.И. Трёхмерное математическое моделирование системы мониторинга электрических свойств скважинного флюида // Международная конференция "Математические методы в геофизике Новосибирск, 2003. — Ч.1, С. 268–272.

[4] Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1979, 655с

[5] Самарский А.А, Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений, М.: Наука,1978, 592с.

[6] Кузнецов Ю.И., Агапитова Н.С. Математические основы моделирования на ЭВМ.— Ю.—Сахалинск: Из-во ЮСИЭПИ, 2003, 214с.

[7] Суродина И.В. Параллельные алгоритмы для решения прямых задач электрического каротажа на графических процессорах // Мат. заметки СВФУ, Том 22, № 2 (86) Апрель–июнь, 2015. С. 51–61

Ирина Владимировна Суродина — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: sur@ommfao1.sscc.ru.
Дата поступления — 29 мая 2017 г.

О РЕШЕНИИ НЕКОРРЕКТНО ПОСТАВЛЕННОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Е. В. Табаринцева

Южно-Уральский государственный университет, 454080, Челябинск

УДК 517.948

Рассматривается некорректно поставленная задача Коши для дифференциально-операторного уравнения второго порядка в гильбертовом пространстве. Получены двусторонние оценки модуля непрерывности для данной задачи. Устойчивые приближенные решения задачи строятся с помощью метода квазиобращения и метода вспомогательных граничных условий. Получены точные по порядку оценки погрешности рассмотренных методов на одном из классов равномерной регуляризации. В качестве примеров применения полученных общих результатов рассмотрены обратная граничная задача для нелинейного параболического уравнения с условиями периодичности и граничная обратная задача для нелинейного параболического уравнения без начальных условий. Приводятся примеры численного решения граничных обратных задач.

Ключевые слова: обратная задача, нелинейное дифференциальное уравнение, метод приближенного решения, модуль непрерывности обратного оператора.

Введение

В настоящей работе рассматривается некорректно поставленная задача Коши для дифференциально-операторного уравнения второго порядка в гильбертовом пространсте. Приближенное решение строится методом вспомогательных граничных условий, который состоит в замене неустойчивой исходной задачи устойчивой задачей с “малым” параметром в граничных условиях и методом квазиобращения, который состоит в замене неустойчивой исходной задачи задачей для уравнения с «малым» параметром. Получена точная по порядку оценка погрешности построенного приближенного решения на одном из классов корректности обратной граничной задачи.

Для исследования рассмотренного метода приближенного решения на оптимальность основную роль играет модуль непрерывности обратного оператора, техника вычисления которого которого хорошо известна для широкого класса линейных задач ([2]), но недостаточно разработана в нелинейном случае.

В настоящей работе получены двусторонние оценки норм решений нелинейной задачи через нормы решений соответствующей линейной задачи, что позволяет получить двусторонние оценки модуля непрерывности для нелинейной обратной задачи.

Доказана оптимальность по порядку метода вспомогательных граничных условий с выбором параметра регуляризации по схеме М.М. Лаврентьева на рассмотренном классе корректности.

В качестве примера применения полученных результатов рассматриваются граничная обратная задача для нелинейного параболического уравнения на конечном промежутке времени и граничная обратная задача для нелинейного параболического уравнения без начальных условий.

Вопросы теплообмена имеют особое значение в таких областях техники, как авиационная и ракетно-космическая техника, энергетика, металлургия. При этом большое значение имеют экспериментальные исследования, стендовая и натурная отработка тепловых режимов, создание эффективных методов диагностики и идентификации теплообменных процессов по результатам экспериментов и испытаний. В основу этих методов могут быть положены решения обратных задач теплообмена, причем в ряде случаев обратные задачи являются практически единственным средством получения необходимых результатов. Методы обратных

Работа выполнена при поддержке Правительства РФ (Постановление №211 от 16.03.2013 г.), соглашение № 02.A03.21.0011

задач обладают высокой информативностью и позволяют проводить экспериментальные исследования в условиях, максимально приближенных к натурным.

Диагностика и идентификация процессов теплообмена могут быть связаны с решением обратных задач различных типов, однако, граничные обратные задачи — это один из наиболее важных и распространенных в тепловом моделировании классов задач. Граничные обратные задачи представляют и методический интерес, т.к. задачи данного типа, по сравнению с коэффициентными и геометрическими задачами, как правило, имеют большую склонность к искажению результатов, связанную с некорректностью постановок, априорная информация о точном решении граничных обратных задач бывает ограниченной ([3]). При исследовании тепловых процессов высокой интенсивности особое значение имеет учет эффектов, связанных с нелинейностью процесса .

1 Постановка задачи

Пусть H — гильбертово пространство над полем комплексных чисел, $A : H \to H$ — линейный неограниченный самосопряженный оператор с областью определения, плотной в H. Рассмотрим задачу вычисления эоемента $h = u(l)$, $h \in H$, где $u(x)$ удовлетворяет условиям

$$u''_{xx} = iAu + f(u); \quad u_x(0) = 0; \quad u(0) = \varphi. \tag{1}$$

Здесь $\varphi \in H$ — заданный элемент, — отображение, удовлетворяющее условию Липшица.

$$\|f(u) - f(v)\|_H \le L\|u - v\|_H,$$

где L — постоянная.

Задача (1) поставлена некорректно Пусть вместо точного условия $\varphi \in H$ известны $\delta-$ приближения φ_δ и уровень погрешности $\delta > 0$ такие, что $\|\varphi_\delta - \varphi\| < \delta$. Требуется по исходным данным задачи построить приближенное решение и оценить его уклонение от точного решения.

1.1 Исследование «прямой» задачи.

Рассмотрим «прямую» задачу, соответствующую задаче (1), т.е. задачу вычисления элемента $\varphi \in H$, $\varphi = u(0)$, где $u(x)$ является решением краевой задачи для уравнения второго порядка, т.е. удовлетворяет условиям

$$u''_{xx} = iAu + f(u); \quad u_x(0) = 0; \quad u(l) = h. \tag{2}$$

Теорема 1. *Пусть отображение $f : H \to H$ удовлетворяет условию Липшица с постоянной $L < 1$. Тогда задача (2) имеет ежинственное решение для любого элемента $h \in D(A)$.*

Наряду с задачей (2) рассмотрим соответствующую линейную задачу, т.е. задачу вычисления элемента $\psi \in H$, $\psi = v(0)$, где $v(x)$ является решением краевой задачи для уравнения второго порядка, т.е. удовлетворяет условиям

$$v''_{xx} = iAv; \quad v_x(0) = 0; \quad v(l) = h. \tag{3}$$

Для норм решений линейной и нелинейной краевых задач выполняется следующая лемма.

Лемма 1. *Пусть $h_1, h_2 \in H$, $\varphi_1 = u_1(0)$, $\varphi_2 = u_2(0)$, $\psi_1 = v_1(0)$. $\psi_2 = v_2(0)$, где*

$u_1(x)$, $u_2(x)$ — соответствующие решения задачи (2), $v_1(x)$, $v_2(x)$ — решения задачи (3). Тогда выполняются неравенства

$$e^{-Ll}\|\psi_1 - \psi_2\| \le \|\varphi_1 - \varphi_2\| \le e^{Lle^{Ll}}\|\psi_1 - \psi_2\|.$$

2 Исследование обратной задачи.

Пусть $M \subset H$ — компактное множество.

Предположим, что для заданного элемента $\varphi \in H$ существует точное решение $h \in H$ нелинейной обратной задачи (1), принадлежащее множеству M, но элемент $\varphi(t)$ нам не известен, а известен элемент $\varphi_\delta \in H$ такой, что $\|\varphi - \varphi_\delta\| < \delta$. Требуется по исходным данным задачи определить приближенное решение h_δ граничной обратной задачи и оценить его уклонение от точного решения.

Наряду с нелинейной обратной задачей рассмотрим обратную задачу для соответствующего линейного уравнения, т.е. задачу вычисления эоемента $h = v(l)$, $h \in H$. где $v(x)$ удовлетворяет условиям

$$v''_{xx} = iAv; \quad v_x(0) = 0; \quad v(0) = \psi. \tag{4}$$

Рассмотрим величины:
$\omega(M,\delta) = \sup\{\|h_1 - h_2\| : h_1, h_2 \in M, \|\varphi_1 - \varphi_2\| \le \delta\}$ — модуль непрерывности для нелинейной обратной задачи,
$\hat{\omega}(M,\delta) = \sup\{\|h_1 - h_2\| : h_1, h_2 \in M, \|\psi_1 - \psi_2\| \le \delta\}$ — модуль непрерывности для линейной обратной задачи.
Справедлива следующая теорема.

Теорема 2. *Существует $\delta_0 > 0$, такое, что для всех $0 < \delta < \delta_0$ выполняются неравенства*

$$\hat{\omega}(M, e^{-Ll}\delta) \le \omega(M,\delta) \le \hat{\omega}(M, e^{Lle^{Ll}}\delta).$$

3 Метод квазиобращения

Вместо неустойчивой задачи (1) рассмотрим задачу с малым параметром — задачу восстановления элемента $h_\delta^\varepsilon = u_\delta^\varepsilon(l)$, где $h_\delta^\varepsilon \in H$, $u_\delta^\varepsilon(x)$ удовлетворяет условиям

$$\frac{d^2u_\delta^\varepsilon}{dx^2} = iAu_\delta^\varepsilon - \varepsilon A^2 u_\delta^\varepsilon + f(u_\delta^\varepsilon); \quad \frac{du_\delta^\varepsilon}{dx}(0) = 0; \quad u_\delta^\varepsilon(0) = \varphi_\delta. \tag{5}$$

В качестве приближенного решения задачи (1) будем рассматривать элемент

$$h_\delta^\varepsilon = u_\delta^\varepsilon(l),$$

где $u_\delta^\varepsilon(x)$ — решение задачи (5) при подходящем выборе зависимости $\epsilon = \epsilon(\delta)$.

4 Оценка погрешности метода квазиобращения

Пусть $h \in H$ — точное решение задачи (1). В качестве характеристики точности приближеного решения задачи (1), вычисленного с помощью метода квазиобращения (5),на множестве M, рассмотрим величину

$$\Delta = \sup\{\|h_\delta^\varepsilon - h\| : h \in M; \|\varphi - \varphi_\delta\| \le \delta\}.$$

Здесь зависимость ε от δ выбирается по схеме М.М. Лаврентьева. Используем очевидную оценку

$$\Delta \le \Delta_1 + \Delta_2,$$

где

$$\Delta_2 = \sup_{\|\varphi - \varphi_\delta\| \le \delta} \|h_\delta^\varepsilon - h_\varepsilon\|;$$

$$\Delta_1 = \sup_{h \in M} \|h_\varepsilon - h\|.$$

Здесь $h_\varepsilon = u_\epsilon(l)$, где $u_\epsilon(x)$ — решение вспомогательной задачи (5) при точно заданном φ.

Имеем оценки

$$\Delta_2(\epsilon,\delta) \le e^{Ll}e^{\frac{L}{4\epsilon}}\delta \tag{6}$$

$$\Delta_1 \le Ce^{C_1 l}\varepsilon. \tag{7}$$

Выберем зависимость $\varepsilon = \varepsilon(\delta)$ из условия

$$\varepsilon \simeq \frac{1}{\ln^2(r/\delta)},$$

при $\delta \to 0$. Следовательно, при $\delta \to 0$

$$\Delta \simeq \frac{1}{\ln^2(r/\delta)}.$$

5 Метод вспомогательных граничных условий

Вместо неустойчивой задачи (1) рассмотрим задачу с малым параметром — задачу восстановления элемента $h_\delta^\varepsilon = u_\delta^\varepsilon(l)$, где $u_\delta^\varepsilon(x)$ удовлетворяет условиям

$$\frac{d^2u_\delta^\varepsilon}{dx^2} = iAu_\delta^\varepsilon + f(u_\delta^\varepsilon),\ (0 < x < l) \tag{8}$$

$$\frac{du_\delta^\varepsilon}{dx}(0) = 0;\quad u_\delta^\varepsilon(0) + \varepsilon u_\delta^\varepsilon(l) = \varphi_\delta. \tag{9}$$

В качестве приближенного решения задачи (1) будем рассматривать элемент

$$h_\delta^\varepsilon = u_\delta^\varepsilon(l),$$

где $u_\delta^\varepsilon(x)$ — решение задачи (8)–(9) при подходящем выборе зависимости $\varepsilon. = \varepsilon(\delta)$.

6 Оценка погрешности метода вспомогательных граничных условий

Пусть $h(t)$ — точное решение задачи (1). В качестве характеристики точности приближеного решения задачи (15), вычисленного с помощью метода вспомогательных граничных условий, на классе M, рассмотрим величину

$$\Delta = \sup\{\|h_\delta^\varepsilon - h\| : h \in M; \|\varphi - \varphi_\delta\| \le \delta\}.$$

Здесь зависимость ε от δ выбирается по схеме М.М. Лаврентьева Используем очевидную оценку

$$\Delta \le \Delta_1 + \Delta_2,$$

где

$$\Delta_2 = \sup_{\|\varphi-\varphi_\delta\|\le\delta} \|h_\delta^\varepsilon - h^\varepsilon\|;$$

$$\Delta_1 = \sup_{h\in M} \|h_\varepsilon - h\|.$$

Здесь h_ε — решение вспомогательной задачи (8) при точно заданном граничном условии.

Обозначим

$$\varepsilon_l = \frac{1}{\operatorname{ch}\pi(2l+1)},$$

При $\varepsilon > 0$, $\varepsilon \ne \varepsilon_l$ имеем оценки

$$\Delta_2(\varepsilon,\delta) \le \frac{2e^{Ll}}{C\varepsilon}\delta \tag{10}$$

$$\Delta_1(\varepsilon) \le re^{Ll}\frac{2l^2}{C(\ln(C+1)\varepsilon)^2}. \tag{11}$$

Выберем зависимость $\varepsilon = \varepsilon(\delta)$ по схеме М.М. Лаврентьева, т.е. зависимость $\varepsilon = \varepsilon(\delta)$ выбирается из условий

$$\frac{1}{\varepsilon}\delta = re^{Ll}\frac{l^2}{(\ln(C+1)\varepsilon)^2} \tag{12}$$

$$|\varepsilon - \varepsilon_l| > C\varepsilon. \tag{13}$$

Имеем равенство

$$\delta = \frac{l^2\varepsilon}{(\ln(C+1)\varepsilon)^2)}.$$

Следовательно, $\ln\varepsilon(\delta) \simeq \ln\delta$ при $\delta \to 0$. При таком выборе параметра регуляризации из полученной оценки для $\Delta(\varepsilon(\delta),\delta)$ следует что, существуют числа $C_1 > 0$, $\delta_1 > 0$, такие, что для всех $\delta < \delta_1$, таких что для соответствующих значений ε, удовлетворяющих условию (12) , выполняется неравенство (13) , справедлива оценка

$$\Delta(\varepsilon(\delta),\delta) \le \frac{C}{\ln^2(r/\delta)}. \tag{14}$$

7 Примеры

Пример 1. *(граничная обратная задача без начальных условий)*

Рассмотрим граничную обратную задачу без начальных условий, т.е. задачу восстановления функции $h(t) = u(l,t)$ (граничного условия), где $h(t) \in L_2(-\infty,\infty)$,

$$u(x,t) \in C([0;l];W_2^{1,0}(-\infty;\infty]) \cap C^2((0;l);W_2^{1,0}(-\infty;\infty)),$$

удовлетворяет условиям

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u),\ (0 < x < l) \tag{15}$$

$$u_x(0,t) = 0;\quad u(0,t) = \varphi(t). \tag{16}$$

Здесь $\varphi(t) \in L_2(-\infty,\infty)$ — заданная функция, $f : L_2(-\infty,\infty) \to L_2(-\infty,\infty)$ — отображение, удовлетворяющее условию Липшица

$$\|f(u_1) - f(u_2)\|_{L_2(-\infty,\infty)} \le L\|u_1 - u_2\|_{L_2(-\infty,\infty)}.$$

Задача (15)–(16) имеет вид (1), где A — линейный оператор в $L_2(-\infty,\infty)$, действующий по правилу

$$Au = u_t'; D(A) = \{u \in L_2(-\infty,\infty) : u_t' \in L_2(-\infty,\infty)\}.$$

Пример 2. *(граничная обратная задача на конечном промежутке времени)*

Рассмотрим граничную обратную задачу на конечном промежутке времени, т.е. задачу восстановления функции $h(t) = u(l,t)$ (граничного условия), где $h(t) \in L_2[0,T]$,

$$u(x,t) \in C([0;l];W_2^{1,0}[0,T]) \cap C^2((0;l);W_2^{1,0}[0,T],$$

удовлетворяет условиям

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u),\ (0 < x < l) \tag{17}$$

$$u_x(0,t) = 0;\quad u(0,t) = \varphi(t).; u(x,0) = u(x,T) = 0. \tag{18}$$

Здесь $\varphi(t) \in L_2[0,T]$ — заданная функция, $f : L_2[0,T] \to L_2[0,T]$ — отображение, удовлетворяющее условию Липшица

$$\|f(u_1) - f(u_2)\|_{L_2[0,T]} \le L\|u_1 - u_2\|_{L_2[0,T]}.$$

Задача (16) имеет вид (1), где A — линейный оператор в $L_2[0,T]$, действующий по правилу

$$Au = u_t'; D(A) = \{u \in L_2[0,T] : u_t' \in L_2[0,T]\ u(0) = u(T) = 0\}$$

(оператор, имеющий самосопряженные расширения).

8 Численное решение обратной граничной задачи

На рис. 1 представлены результаты численного решения обратной граничной задачи для параболического уравнения методом вспомогательных граничных условий. Для конечно-разностной аппроксимации регуляризованной задачи использовалась стандартная неявная разностная схема [7]. Приближенное решение построено для задачи с возмущенными исходными данными.

Заключение

В работе получены следующие результаты: получены двусторонние оценки модуля непрерывности для неустойчивой задачи Коши для нелинейного дифференциального уравнения второго порядка через модуль непрерывности соответствующей линейной задачи; получены точные по порядку оценки погрешности метода вспомогательных граничных условий и метода квазиобращения на одном из классов равномерной регуляризации нелинейной задачи, доказана оптимальность по порядку рассмотренных методов приближенного решения.

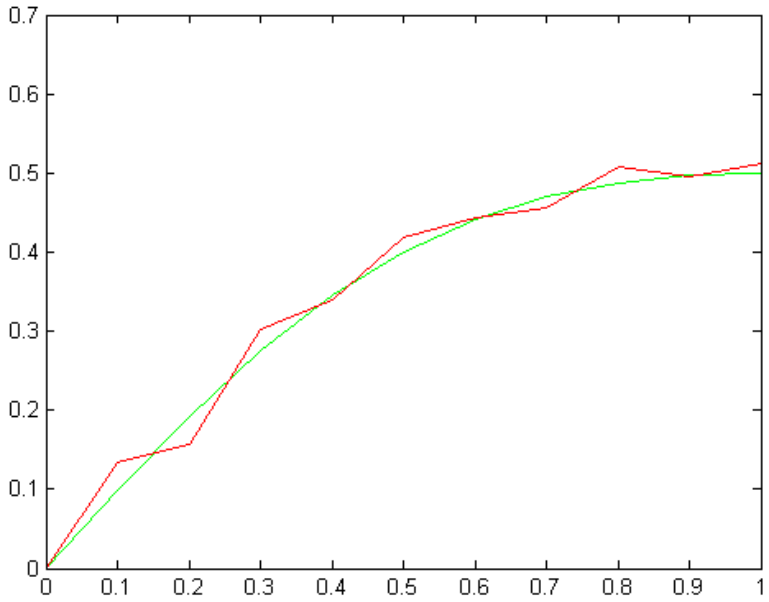


Рис. 1: Результаты численного решения

Список литературы

[1] Иванов В.К., Васин В.В., Танана В.П. Теория линейных некорректно поставленных задач и ее приложения. М.: Наука, 1978. 208 с.

[2] Иванов В.К., Королюк Т.И. Об оценке погрешности при решении линейных некорректных задач // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1969. Т. 9, №о 1. С. 30–41.

[3] Алифанов О.М., Артюхин Е.А., Румянцев С.В. Экстремальные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1988.

[4] Танана В.П. Оптимальные по порядку методы решения нелинейных некорректно поставленных задач// Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1976. Т. 39, № 5. С. 503–507.

[5] Тихонов А.Н., Леонов А.С., Ягола А.Г. Нелинейные некорректные задачи. М.: Наука, 1995. 312 с.

[6] Васин В.В., Агеев А.Л. Некорректные задачи с априорной информацией. Екатеринбург.: Наука, 1993. 262 с.

[7] Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989

Елена Владимировна Табаринцева — к.ф.-м.н., доцент
Южно-Уральского государственного университета
e-mail: tabarintcevaev@susu.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

К ИССЛЕДОВАНИЮ ПОВЕДЕНИЯ СОСТАВНЫХ ПОКРЫТИЙ ПРИ ВИБРАЦИОННЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

И. С. Телятников

Южный научный центр Российской академии наук, 344006, Ростов-на-Дону

УДК 539.3

Работа посвящена исследованию взаимодействия двумерных пластин на деформируемом трехмерном основании, моделирующих литосферные плиты, контактирующие вдоль прямолинейного разлома. Задачи о вибрационных и статических воздействиях на упругую среду с составным покрытием сводятся к решению систем нагруженных уравнений Винера–Хопфа для Фурье-образов амплитуд контактных напряжений между подложкой и покрытием. Разработанный метод позволяет определить основные характеристики напряженно-деформированного состояния рассматриваемой блочной структуры при различных условиях контакта пластин на разломе.

Ключевые слова: разлом, составное покрытие, деформируемое основание, факторизационные методы.

Введение

Разработка новых методов прогноза региональной сейсмичности требует изучения медленной подготовки сейсмического события, проявляющейся в изменении напряженно-деформированного состояния геологических структур. Работа посвящена исследованию взаимодействия двумерных пластин на деформируемом трехмерном основании, моделирующих литосферные плиты, контактирующие вдоль прямолинейного разлома.

Рассматривается краевая задача для разноразмерной блочной структуры — пластины с осредненными по толщине свойствами на трехмерной деформируемой подожке. Предположим, что пластина состоит из отдельных фрагментов, контактирующих между собой и возможно содержащих дефекты типа трещин. Подобная структура, включающая горизонтально ориентированные блоки — пластины Кирхгофа с разломами произвольной геометрии на упругом основании, может служить моделью литосферной плиты.

1 Модель

В работе исследована задача об установившихся с частотой ω колебаниях составного покрытия, а также задача статического взаимодействия двух полуограниченных пластин на поверхности упругой среды под действием поверхностной нагрузки вида $\mathbf{t}(x_1, x_2)\exp(-i\omega t)$, $\mathbf{t} = \{t_1, t_2, t_3\}$, заданной в некоторой ограниченной области $(x_1, x_2) \in \Omega$, а также задача статического взаимодействия пластин.

Координатная плоскость x_1Ox_2 связана со срединной поверхностью покрытия, в качестве которого рассматриваются две протяженные деформируемые пластины, граничащие вдоль оси Ox_2, с усредненными по толщине параметрами. Контакт между покрытием и подложкой считается идеальным.

В принятой модели покрытия дифференциальные уравнения в частных производных, описывающие движение пластин [1], заданы в соответствующих полуплоскостях

$$\mathbf{R}_j\left(\partial x_1, \partial x_2\right)\mathbf{u}_j\left(x_1, x_2\right) - \mathbf{E}_j\mathbf{g}_j\left(x_1, x_2\right) = \mathbf{b}_j\left(x_1, x_2\right), \quad x_1 \in \Omega_j, \tag{1}$$

где $-\infty < x_2 < +\infty$, $\Omega_1 = \{x_1 :\ x_1 > 0\}$, $\Omega_2 = \{x_1 :\ x_1 < 0\}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 16-31-00067_мол, 16-41-230184_р).

Здесь и далее использованы следующие обозначения: $\mathbf{u}_j = \{u_{j1}, u_{j2}, u_{j3}\}$ $(j = 1, 2)$ — вектор амплитуд смещений j-й пластины, $u_{j,1}(x_1, x_2)$, $u_{j,2}(x_1, x_2)$ — смещения по координатам плоскости x_1Ox_2, $u_{j,3}(x_1, x_2)$ — прогиб срединной поверхности. $\mathbf{R}_j(\partial x_1, \partial x_2)$ — матричные дифференциальные операторы с компонентами:

$$R_{11}^j = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \varepsilon_{j1}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \varepsilon_{j4}, \quad R_{22}^j = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \varepsilon_{j1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \varepsilon_{j4}, \quad R_{33}^j = \varepsilon_{j3}\left(\frac{\partial^4}{\partial x_1^4} + 2\frac{\partial^4}{\partial x_1^2\partial x_2^2} + \frac{\partial^4}{\partial x_2^4}\right) - \varepsilon_{j4},$$

$$R_{12}^j = R_{21}^j = \varepsilon_{j2}\frac{\partial^2}{\partial x_1\partial x_2}, \quad R_{13}^j = R_{23}^j = R_{31}^j = R_{32}^j = 0;$$

$$\varepsilon_{j1} = 0,5\,(1-\nu_j), \quad \varepsilon_{j2} = 0,5\,(1+\nu_j), \quad \varepsilon_{j3} = \frac{h_j^2}{12}, \quad \varepsilon_{j4} = \frac{\omega^2\rho_j\left(1-\nu_j^2\right)}{E_j}, \quad \varepsilon_{j5} = \frac{1-\nu_j^2}{E_j h_j};$$

$$\mathbf{b}_j = -\varepsilon_{j5}\mathbf{t}_j, \quad \mathbf{t}_j = \{t_{j1}, t_{j2}, t_{j3}\};$$

$\mathbf{E}_j = \left\|e_{ik}^j\right\|_{i,k=1}^3$ — диагональные матрицы, $e_{ik}^j = 0$, $i \neq k$, $e_{11}^j = e_{22}^j = -e_{33}^j = -\varepsilon_{j5}$; $\mathbf{t}_j$ — вектор внешней поверхностной нагрузки, $\mathbf{g}_j = \{g_{j1}, g_{j2}, g_{j3}\}$ — вектор действующих со стороны подложки напряжений; ν_j, E_j, ρ_j — соответственно коэффициент Пуассона, модуль Юнга и плотность j-й пластины. Временной множитель $\exp(-i\omega t)$ здесь и далее опущен

Статическому случаю взаимодействия покрытия и подложки соответствуют уравнения

$$\mathbf{R}_{0j}(\partial x_1, \partial x_2)\,\mathbf{u}_j(x_1, x_2) - \mathbf{E}_j\mathbf{g}_j(x_1, x_2) = \mathbf{b}_j(x_1, x_2), \quad \mathbf{x} \in \Omega_j, \tag{2}$$

где

$$R_{11}^{0,j} = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \varepsilon_{j1}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}, \quad R_{22}^{0,j} = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \varepsilon_{j1}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}, \quad R_{33}^{0,j} = \varepsilon_{j3}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + 2\frac{\partial^4}{\partial x_1^2\partial x_2^2} + \frac{\partial^4}{\partial x_2^4}\right), \quad R_{kl}^{0,j} = R_{kl}^j \quad (k \neq l).$$

В качестве упругой подложки может быть выбран слой, пакет слоев, полупространство (однородное или слоистое) и т.д. Для деформируемого основания могут быть построены интегральные соотношения, связывающие амплитуды перемещений и напряжений между подложкой и покрытием ($x_3 = 0$)

$$\mathbf{u} = \frac{1}{4\pi^2}\int\limits_{\sigma_1}\int\limits_{\sigma_2}\mathbf{K}(\alpha_1, \alpha_2)\,\mathbf{G}(\alpha_1, \alpha_2)\exp\left(-i\left(\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2\right)\right)\mathrm{d}\alpha_1\mathrm{d}\alpha_2, \tag{3}$$

где $\mathbf{K}(\alpha_1, \alpha_2)$ — матрица Грина упругого слоя, $\mathbf{G}$=$\mathrm{V}_2\mathbf{g}$, V_2 — двумерный оператор преобразования Фурье. Форма контуров σ_1, σ_2 для случая установившихся колебаний определяется принципом предельного поглощения [2], для статической задачи они совпадают с вещественной осью. Матрицы Грина статических и динамических задач приведены в [2, 3, и др.].

В области соприкосновения составляющих покрытия ($x_1 = 0$) при $-\infty < x_2 < +\infty$ формулируются граничные условия, общий вид которых задается соотношением

$$\mathbf{L}_1(\partial x_1, \partial x_2)\,\mathbf{u}(x_1, x_2)|_{x_1=0+0} + \mathbf{L}_2(\partial x_1, \partial x_2)\,\mathbf{u}(x_1, x_2)|_{x_1=0-0} = \mathbf{f}(x_2). \tag{4}$$

Характер взаимодействия пластин в области их контакта определяет вид дифференциальных операторов $\mathbf{L}_k(\partial x_1, \partial x_2)$ $(k = 1, 2)$ и функции $\mathbf{f}(x_2)$. С учетом гипотезы прямых нормалей для каждой точки на стыковки $x_1 = 0$, $-\infty < x_2 < +\infty$ требуется выполнение четырех граничных условий [1], поэтому в общем виде $\mathbf{L}_k$ можно представить как матричные операторы. Условие идеального контакта пластин и подложки определяется равенствами $\mathbf{u}_j(x_1, x_2) = \mathbf{u}(x_1, x_2)$, $\mathbf{g}_j(x_1, x_2) = \mathbf{g}(x_1, x_2)$ при $x_1 \in \Omega_j$, $x_2 \in R$ $(j = 1, 2)$.

2 Метод

Несмотря на универсальность топологического метода блочного элемента [4], для случая прямолинейных и плоских границ, когда краевые задачи для двух полуограниченных пластин на трехмерным основании рассматриваются в качестве моделей разноразмерной блочной структуры под действием локализованной поверхностной нагрузки (гармонической или стационарной), можно использовать упрощенный метод. В отличие от приведенного в [5], далее на примере скалярного случая вертикальных воздействий использован подход, не требующий преобразования дифференциального оператора системы.

Воспользовавшись в (1) преобразованием Фурье по переменной x_2, получим

$$R_{33}^{j}\left(\partial x_1, -i\alpha_2\right)\bar{u}_{j3}\left(x_1,\alpha_2\right)-\varepsilon_{j5}\bar{g}_{j3}\left(x_1,\alpha_2\right)=\bar{b}_{j3}\left(x_1,\alpha_2\right),\quad x_1\in\Omega_j, \tag{5}$$

где черта соответствует образам Фурье по переменной x_2 описанных ранее функций.

Аналогично для (2) будем иметь

$$R_{33}^{0,j}\left(\partial x_1, -i\alpha_2\right)\bar{u}_{j3}\left(x_1,\alpha_2\right)-\varepsilon_{j5}\bar{g}_{j3}\left(x_1,\alpha_2\right)=\bar{b}_{j3}\left(x_1,\alpha_2\right),\quad x_1\in\Omega_j.$$

Решения (5), ограниченные в соответствующих полуплоскостях и удовлетворяющие условию принципа предельного поглощения, примут вид

$$\bar{u}_{j3}\left(x_1,\alpha_2\right)=C_{j1}e^{\mp q_{j1}x_1}+C_{j2}e^{\pm iq_{j2}x_1}+V^{-1}\left(x_1\right)\left[\left(R_{33}^{j}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)\right)^{-1}\left(\varepsilon_{j5}G_{j3}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)+B_{j3}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)\right)\right], \tag{6}$$

$$\pm x_1>0,$$

где V^{-1} — оператор обращения Фурье, C_{jk} — произвольные коэффициенты; q_{j1}, iq_{j2} — корни уравнений $\varepsilon_{j3}\left(\xi^2-\alpha_2^2\right)^2-\varepsilon_{j4}=0$, $\operatorname{Re}q_{jk}>0$ $(j,k=1,2)$.

Для статического случая ограниченные в соответствующих полуплоскостях решения (5) примут представление

$$\bar{u}_{j3}^{0}\left(x_1,\alpha_2\right)=\left(C_{j1}+C_{j2}x_1\right)e^{\mp\lambda x_1}+V^{-1}\left(x_1\right)\left[\left(R_{33}^{0,j}\left(-i\alpha_1,-i\alpha_2\right)\right)^{-1}\left(\varepsilon_{j5}G_{j3}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)+B_{j3}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)\right)\right], \tag{7}$$

$$\pm x_1>0,\quad \lambda=\left|\alpha_2\right|.$$

Верхний знак в этажных символах «$\pm$», «$\mp$» формул (6), (7) и далее соответствует значению $j=1$, нижний — $j=2$.

Применяя к полученным выражениям для трансформант амплитуд вертикальных смещений (6), (7) преобразование Фурье по соответствующим полупрямым, получим

$$U_{j3}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)=\frac{\varepsilon_{j5}G_{j3}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)+B_{j3}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)}{R_{33}^{j}}+Q_j\left(\alpha_1,\alpha_2\right),$$

$$Q_j\left(\alpha_1,\alpha_2\right)=\frac{\pm iC_{j1}}{\alpha_1\pm iq_{j1}}+\frac{\pm iC_{j2}}{\alpha_1\pm q_{j2}}\mp$$
$$\mp\frac{1}{2\left(q_{j1}^2+q_{j2}^2\right)\varepsilon_{j3}}\left[\frac{\varepsilon_{j5}G_{j3}\left(\pm q_{j2},\alpha_2\right)}{q_{j2}\left(\alpha_1\mp q_{j2}\right)}+\frac{i\varepsilon_{j5}G_{j3}\left(\pm iq_{j1},\alpha_2\right)}{q_{j1}\left(\alpha_1\mp iq_{j1}\right)}+\frac{B_{j3}\left(\pm q_{j2},\alpha_2\right)}{q_{j2}\left(\alpha_1\mp q_{j2}\right)}+\frac{iB_{j3}\left(\pm iq_{j1},\alpha_2\right)}{q_{j1}\left(\alpha_1\mp iq_{j1}\right)}\right].$$

Для статического случая

$$U_{j3}^{0}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)=\frac{\varepsilon_{j5}G_{j3}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)+B_{j3}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)}{R_{33}^{0,j}}+Q_j^{0}\left(\alpha_1,\alpha_2\right),$$

$$Q_j^{0}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)=\frac{\pm iC_{j1}}{\alpha_1\pm i\lambda}-\frac{\pm C_{j2}}{\left(\alpha_1\pm i\lambda\right)^2}+$$
$$+\frac{1}{4\lambda^2\varepsilon_{j3}}\left[\frac{\varepsilon_{j5}G'_{j\alpha_1}\left(\pm i\lambda,\alpha_2\right)}{\left(\alpha_1\mp i\lambda\right)}\pm\frac{i\varepsilon_{j5}G_j\left(\pm i\lambda,\alpha_2\right)\left(\alpha_1\mp i2\lambda\right)}{\lambda\left(\alpha_1\mp i\lambda\right)^2}+\frac{B'_{j\alpha_1}\left(\pm i\lambda,\alpha_2\right)}{\left(\alpha_1\mp i\lambda\right)}\pm\frac{iB_j\left(\pm i\lambda,\alpha_2\right)\left(\alpha_1\mp i2\lambda\right)}{\lambda\left(\alpha_1\mp i\lambda\right)^2}\right],$$

где

$$\Psi'_{j\alpha_1}\left(\pm i\lambda,\alpha_2\right)=\left.\frac{d\Psi_j\left(\alpha_1,\alpha_2\right)}{d\alpha_1}\right|_{\alpha_1=\pm i\lambda}\qquad\left(\Psi=G_{3j},B_{3j}\right).$$

Условия сопряжения пластин с подложкой в преобразованиях Фурье принимают следующий вид:

$$U_3\left(\alpha_1,\alpha_2\right)=U_{13}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)+U_{23}\left(\alpha_1,\alpha_2\right),\quad G_3\left(\alpha_1,\alpha_2\right)=G_{13}\left(\alpha_1,\alpha_2\right)+G_{23}\left(\alpha_1,\alpha_2\right).$$

Из уравнения (3), соотношений для трансформант Фурье амплитуд напряжений и условий сопряжения пластин и подложки после ряда преобразований приходим к уравнению

$$K_1(\alpha_1,\alpha_2)\,G_{13}^{+}(\alpha_1,\alpha_2)=K_2(\alpha_1,\alpha_2)\,G_{23}^{-}(\alpha_1,\alpha_2)+F(\alpha_1,\alpha_2), \tag{8}$$

где $G_{13}^{+}(\alpha_1,\alpha_2)=G_{13}(\alpha_1,\alpha_2)$, $G_{23}^{-}(\alpha_1,\alpha_2)=G_{23}(\alpha_1,\alpha_2)$.

Для случая установившихся колебаний в (8)

$$K_j(\alpha_1,\alpha_2)=\pm\left(K_{33}(\alpha_1,\alpha_2)-\varepsilon_{j5}\left(R_{33}^{j}\right)^{-1}\right), \tag{9}$$

$$F(\alpha_1,\alpha_2)=\sum_{j=1}^{2}\left[B_{j3}(\alpha_1,\alpha_2)\left(R_{33}^{j}\right)^{-1}+Q_j(\alpha_1,\alpha_2)\right]. \tag{10}$$

Для статического случая в соотношениях (9), (10) K_{33} соответствует элементу матрицы Грина статической задачи, R_{33}^{j}, Q_j заменятся соответственно на $R_{33}^{0,j}$ и Q_j^0.

Таким образом, задачи сводятся к решению систем нагруженных уравнений Винера – Хопфа для Фурье-образов амплитуд контактных напряжений между подложкой и покрытием в связи с наличием неизвестных $G_{j3}(\pm q_{j2})$, $G_{j3}(\pm iq_{j1})$ (для установившегося режима колебаний), $G_{j3}(\pm i\lambda,\alpha_2)$, $G'_{j3\alpha_1}(\pm i\lambda,\alpha_2)$, нуждающихся в дополнительном определении.

Факторизовав $K(\alpha_1,\alpha_2)=K_1^{-1}(\alpha_1,\alpha_2)\,K_2(\alpha_1,\alpha_2)$ в виде произведения $K=K_+K_-$ и реализовав для (8) алгоритм решения функциональных уравнений Винера – Хопфа, приходим к представлениям

$$G_{13}^{+}(\alpha_1,\alpha_2)=K_+\left\{K_+^{-1}K_1^{-1}F(\alpha_1,\alpha_2)\right\}^{+},\quad G_{23}^{-}(\alpha_1,\alpha_2)=-K_-^{-1}\left\{K_+^{-1}K_1^{-1}F(\alpha_1,\alpha_2)\right\}^{-}.$$

Полагая последовательно в первом соотношении $\alpha_1=q_{12}$ и $\alpha_1=iq_{11}$, а во втором — $\alpha_1=-q_{22}$, $\alpha_1=-iq_{21}$ [6], получим систему алгебраических уравнений для определения $G_{j3}(\pm q_{j2})$, $G_{j3}(\pm iq_{j1})$, после решения которой найденные значения вносятся в правые части соотношений для трансформант Фурье амплитуд напряжений, последние в свою очередь подставляются в (6).

Та же схема для случая статического взаимодействия пластин с подложкой, требует дополнительно дифференцирования полученных соотношений по параметру α_1, после чего описанная подстановка в исходные и полученные в результате дифференцирования уравнения приводит к системе линейных алгебраических уравнений для определения неизвестных $G_{j3}(\pm i\lambda,\alpha_2)$, $G'_{j3\alpha_1}(\pm i\lambda,\alpha_2)$.

Представления трансформант Фурье (по x_2) амплитуд перемещений пластин (5) содержат неизвестные константы, определяемые из граничных условий в области контакта пластин после применения к (4) преобразования Фурье по x_2

$$L_{1k}(\partial x_1,-i\alpha_2)\,\bar{u}_3(0+0,\alpha_2)+L_{2k}(\partial x_1,-i\alpha_2)\,\bar{u}_3(0-0,\alpha_2)=\bar{f}_k(\alpha_2),\quad k=\overline{1,4}.$$

Для определения оригиналов амплитуд смещений поверхности покрытия к выражению $\bar{u}_3(x_1,\alpha_2)$ применяется обратное преобразование $\mathrm{V}_{1,2}^{-1}$ Фурье по α_2

$$u_3(x_1,x_2)=\mathrm{V}_{1,2}^{-1}\bar{u}_3(x_1,\alpha_2).$$

Заключение

Полученные соотношения открывают возможность изучения влияния различных граничных условий в области контакта составляющих покрытия на напряженно-деформированное состояние системы покрытие/подложка. Разработанный метод позволяет определить основные характеристики напряженно-деформированного состояния рассматриваемой блочной структуры при различных условиях контакта пластин на разломе. Кроме того, теоретические результаты могут быть использованы при тестировании типов разломов литосферных структур для рационального планирования экспериментов с применением вибросейсмических источников, в частности передвижных, производящих моносигналы на заданных частотах, принимаемые на различных расстояниях, для идентификации разлома по дефекту приходящего сигнала.

Список литературы

[1] Вольмир А.С. Нелинейная динамика пластинок и оболочек. М.: Наука, 1972. 432 с.

[2] Ворович И.И., Бабешко В.А., Пряхина О.Д. Динамика массивных тел и резонансные явления в деформируемых средах. М.: Научный мир, 1999. 248 с.

[3] Ворович И.И., Александров В.М., Бабешко В.А. Неклассические смешанные задачи теории упругости. М.: Наука, 1974. 456 с.

[4] Бабешко В.А., Бабешко О.М., Евдокимова О.В. Блочные элементы в теории плит сложной формы // Известия РАН. МТТ. 2012. № 5. С. 92–97.

[5] Колесников М.Н., Телятников И.С. К методам исследования разломов в условиях вибрационных воздействий // Научный журнал КубГАУ. 2016. № 121 (07). Электронное издание http://ej.kubagro.ru/2016/07/pdf/33.pdf.

[6] Телятников И.С. К моделям и методам изучения взаимодействия литосферных структур в области разломов // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества (ЧЭС). 2016. № 2. С. 78–89.

Илья Сергеевич Телятников — канд. физ.-мат. наук, младший научный сотрудник
Южного научного центра Российской академии наук;
e-mail: ilux_t@list.ru.
Дата поступления — 12 мая 2017 г.

ФОРМУЛЫ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ ФУНКЦИЙ С БОЛЬШИМИ ГРАДИЕНТАМИ

С. В. Тиховская, А. И. Задорин

Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, Омский филиал, 644099, Омск

УДК 519.65

Решению сингулярно возмущенных задач с возмущающим параметром ε соответствуют функции с большими градиентами. При интерполяции функций широко применяется интерполяция на основе многочленов Лагранжа на равномерной сетке. Тем не менее, известно, что для функций с большими градиентами использование такого типа интерполяции приводит к неравномерным по ε оценкам и погрешностям порядка $O(1)$. Добиться равномерных по ε оценок можно либо используя полиномиальную интерполяцию на кусочно-равномерной сетке Шишкина, либо построить на равномерной сетке интерполяционную формулу, точную на погранслойной составляющей. В данной работе на основе разработанных ранее формул интерполяции исследованы формулы численного дифференцирования, точные на погранслойной составляющей, для функций с большими градиентами, и получены равномерные по ε оценки погрешности. Приведены результаты численных экспериментов, подтверждающие теоретические результаты.

Ключевые слова: функция одной переменной, погранслойная составляющая, формулы численного дифференцирования, ε-равномерные оценки погрешности.

Введение

Известно, что решение сингулярно возмущенных краевых задач имеют большие градиенты в области пограничного слоя [1, 2]. Применение классических разностных схем для численного решения сингулярно возмущенных задач может приводить к существенным погрешностям [3–8]. Разработано два основных подхода к построению разностных схем, сходящихся равномерно по малому параметру ε: применение схем экспоненциальной подгонки [3] и сгущение сетки в пограничном слое [4, 5].

Если функция имеет большие градиенты в области пограничного слоя, то применение к ней классических интерполяционных формул и формул численного дифференцирования так же может приводить к существенным погрешностям [9–13]. В [9] исследованы вопросы интерполяции и численного дифференцирования функции одной переменной с погранслойной составляющей, соответствующей экспоненциальному пограничному слою. Построена формула для вычисления первой производной функции по значениям этой функции в двух соседних узлах. Формула построена так, чтобы она была точной на погранслойной составляющей экспоненциального вида. Доказано, что относительная погрешность построенной формулы порядка $O(h)$, где h — шаг сетки. В то же время доказано и численно подтверждено, что погрешность классической формулы при $\varepsilon = h$ порядка $O(1)$. В [10] построенная формула для производной обобщена на случай, когда функция имеет вид:

$$u(x) = p(x) + \gamma\Phi(x), \quad x \in [0, 1], \tag{1}$$

где функция $u(x)$ является достаточно гладкой, погранслойная составляющая $\Phi(x)$ известна, является достаточно гладкой, ее производные не являются равномерно ограниченными, регулярная составляющая $p(x)$ ограничена вместе с производными до некоторого порядка, постоянная γ не задана.

Представление (1) справедливо для решения сингулярно-возмущенной краевой задачи:

$$\varepsilon u''(x) + a_1(x)u'(x) - a_2(x)u(x) = f(x), \qquad u(0) = A, \quad u(1) = B, \tag{2}$$

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 15-01-06584, 16-01-00727).

где $a_1(x) \geqslant \alpha > 0$, $a_2(x) \geqslant 0$, $\varepsilon \in (0,1]$, функции a_1, a_2, f — достаточно гладкие, α отделено от нуля. Согласно [1], при малых значениях параметра ε решение задачи (2) имеет экспоненциальный пограничный слой у границы интервала $x = 0$ и для функции $u(x)$ справедливо представление (1). Если задать

$$\Phi(x) = e^{-a_0 x/\varepsilon}, \quad a_0 = a_1(0), \quad \gamma = -\varepsilon u'(0)/a_0,$$

то выполнятся оценки $|p'(x)| \leqslant C_0$, $|\gamma| \leqslant C_0$. Производные составляющей $\Phi(x)$ неограниченно растут с уменьшением ε.

В [11] построена формула численного дифференцирования с произвольно заданным числом узлов k, точная на погранслойной составляющей $\Phi(x)$, когда функция имеет вид (1). Но в [11] нет оценок погрешности построенной формулы, равномерной по погранслойным изменениям дифференцируемой функции.

Целью данной работы является обоснование разностных формул для вычисления первой и второй производных функций с большими градиентами в экспоненциальном пограничном слое. Исследуемые формулы соответствуют [11] и являются точными на погранслойной составляющей.

Обозначения. Под C будем подразумевать положительную постоянную, не зависящую от параметра ε и шага сетки. Обозначим $\|f\| = \max\limits_x |f(x)|$.

1 Постановка задачи

Пусть Ω^h — равномерная сетка исходного интервала:

$$\Omega^h = \{x_n : \ x_n = nh, \ n = 0, 1, \ldots, N, \ x_0 = 0, x_N = 1\}.$$

Предполагаем, что функция $u(x)$ вида (1) задана в узлах сетки, $u_n = u(x_n)$, $n = 0, 1, \ldots, N$.

В [11] построена формула численного дифференцирования функции вида (1) с погранслойной составляющей, точная на $\Phi(x)$. Формула для вычисления j-ой производной функции $u(x)$ на интервале $[x_m, x_{m+k-1}]$ по значениям функции в k узлах $x_m, x_{m+1}, \ldots, x_{m+k-1}$ имеет вид:

$$L^{(j)}_{\Phi,k}(u,x) = L^{(j)}_{k-1}(u,x) + \frac{[x_m, x_{m+1}, \ldots, x_{m+k-1}]u}{[x_m, x_{m+1}, \ldots, x_{m+k-1}]\Phi} \left(\Phi^{(j)}(x) - L^{(j)}_{k-1}(\Phi, x)\right), \qquad j \geqslant 0, \tag{3}$$

где $L_{k-1}(u,x) = L_{k-1}(u, x_m, x_{m+1}, \ldots, x_{m+k-2}, x)$ — интерполяционный многочлен Лагранжа по значениям функции $u(x)$ в $(k-1)$ узлах $x_m, x_{m+1}, \ldots, x_{m+k-2}$ и $[x_m, x_{m+1}, \ldots, x_{m+k-1}]u$ — разделенная разность функции $u(x)$.

Оценим погрешность формулы (3) в случае экспоненциального пограничного слоя [1], когда $\Phi(x) = e^{-x/\varepsilon}$.

Отметим, что когда дифференцируемая функция $u(x)$ имеет равномерно ограниченные производные, классическая формула $L^{(j)}_k(u,x)$ для вычисления производных [14] и предложенная формула (3) имеют погрешность одного порядка.

2 Разностные формулы для первой производной

Рассмотрим классическую формулу для вычисления первой производной по трем узлам:

$$u'(x) \approx L'_3(u,x) = \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h} + \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2}(x - x_n), \qquad x \in [x_{n-1}, x_{n+1}]. \tag{4}$$

Можно показать, что при $\varepsilon = h$ относительная погрешность формулы (4) может быть порядка $O(1)$.

Выпишем формулу (3) при $k = 3$, $j = 1$

$$L'_{\Phi,3}(u,x) = \frac{u_n - u_{n-1}}{h} + \frac{u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}}{\Phi_{n-1} - 2\Phi_n + \Phi_{n+1}} \left(\Phi'(x) - \frac{\Phi_n - \Phi_{n-1}}{h}\right), \qquad x \in [x_{n-1}, x_{n+1}]. \tag{5}$$

Предполагаем, что $\Phi''(x) \neq 0$, $x \in [x_{n-1}, x_{n+1}]$, тогда формула (5) определена корректно.

Теорема 1. *Пусть $\Phi(x) = e^{-x/\varepsilon}$. Тогда для некоторой постоянной C*

$$\varepsilon |L'_{\Phi,3}(u,x) - u'(x)| \leqslant Ch \min\{h, \varepsilon\} \left(\|p''\| + \varepsilon \|p'''\|\right), \quad x \in [x_{n-1}, x_{n+1}].$$

3 Разностные формулы для второй производной

3.1 Разностная формула с тремя узлами для второй производной

Рассмотрим классическую формулу для вычисления второй производной по трем узлам:

$$u''(x) \approx L_3''(u,x) = \frac{u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}}{h^2}, \qquad x \in [x_{n-1}, x_{n+1}]. \tag{6}$$

Пусть $u(x) = e^{-x/\varepsilon}$. Тогда в случае $\varepsilon = h$ справедливо:

$$\varepsilon^2 \left|(u_0 - 2u_1 + u_2)/h^2 - u''(0)\right| = \left|(1 - 2e^{-1} + e^{-2}) - 1\right| \approx 0.6.$$

Получаем, что при малых значениях ε относительная погрешность формулы (6) может быть значительной и не зависит от h.

Выпишем формулу (3) при $k = 3$, $j = 2$

$$L_{\Phi,3}''(u,x) = \frac{u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}}{\Phi_{n-1} - 2\Phi_n + \Phi_{n+1}} \Phi''(x), \qquad x \in [x_{n-1}, x_{n+1}]. \tag{7}$$

Предполагаем, что $\Phi''(x) \neq 0$, $x \in [x_{n-1}, x_{n+1}]$, тогда формула (7) определена корректно.

Теорема 2. *Пусть* $\Phi(x) = e^{-x/\varepsilon}$. *Тогда для некоторой постоянной* C

$$\varepsilon^2 |L_{\Phi,3}''(u,x) - u''(x)| \leqslant Ch\left(\varepsilon^2 \|p'''\| + (h+\varepsilon)\|p''\|\right), \quad x \in [x_{n-1}, x_{n+1}],$$

$$\begin{aligned}
&\varepsilon^2 |L_{\Phi,3}''(u,x_{n-1}) - u''(x_{n-1})| \leqslant 3Ch \max\{h,\varepsilon\}\left(\varepsilon\|p'''\| + \|p''\|\right), \\
&\varepsilon^2 |L_{\Phi,3}''(u,x_n) - u''(x_n)| \leqslant C \min\{h^2, \varepsilon^2\}\|p''''\|, \\
&\varepsilon^2 |L_{\Phi,3}''(u,x_{n+1}) - u''(x_{n+1})| \leqslant C\varepsilon \min\{h,\varepsilon\}\left(\varepsilon\|p'''| + \|p''|\right).
\end{aligned}$$

3.2 Разностная формула с четырьмя узлами для второй производной

Рассмотрим классическую формулу для вычисления второй производной по четырем узлам:

$$u''(x) \approx L_4''(u,x) = \frac{u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}}{h^2} + \frac{u_{n+2} - 3u_{n+1} + 3u_n - u_{n-1}}{h^3}(x - x_n), \quad [x_{n-1}, x_{n+2}]. \tag{8}$$

Можно показать, что при $\varepsilon = h$ относительная погрешность формулы (8) может быть порядка $O(1)$.

Выпишем формулу (3) при $k = 4$, $j = 2$ на интервале $[x_{n-1}, x_{n+2}]$:

$$L_{\Phi,4}''(u,x) = \frac{u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}}{h^2} + \frac{u_{n+2} - 3u_{n+1} + 3u_n - u_{n-1}}{\Phi_{n+2} - 3\Phi_{n+1} + 3\Phi_n - \Phi_{n-1}} \left(\Phi''(x) - \frac{\Phi_{n-1} - 2\Phi_n + \Phi_{n+1}}{h^2}\right). \tag{9}$$

Предполагаем, что $\Phi'''(x) \neq 0$, $x \in [x_{n-1}, x_{n+2}]$, тогда формула (9) определена корректно.

Теорема 3. *Пусть* $\Phi(x) = e^{-x/\varepsilon}$. *Тогда для некоторой постоянной* C

$$\varepsilon^2 |L_{\Phi,4}''(u,x) - u''(x)| \leqslant Ch^2\left(\varepsilon^2 \|p^{(4)}\| + (h+\varepsilon)\|p^{(3)}\|\right), \quad x \in [x_{n-1}, x_{n+2}].$$

4 Численные эксперименты

Рассмотрим функцию:

$$u(x) = cos\,(\pi x/2) + e^{-x/\varepsilon}, \quad x \in [0,1].$$

Определим норму погрешности в узле x_{n-1} следующей формулой:

$$\Delta_{N,k,n-1}^{(j)} = \max_{i=0,\,k-1,\,\ldots,\,N-k+1} |L_{\Phi,k}^{(j)}(u,x_i) - u(x_i)|.$$

Аналогично определим норму погрешности в узлах x_{n+1}, x_{n+2}.

Определим норму погрешности в точке $x \in [x_{n-1}; x_{n+k-2}]$ следующей формулой:

$$\Delta_{N,k}^{(j)} = \max_{\substack{l=i+j/4,\,\ldots,\,i+k-5/4 \\ j=1,\,\ldots,\,4(k-1)-1,\ j\neq 4,8 \\ i=0,\,k-1,\,\ldots,\,N-k+1}} |L_{\Phi,k}^{(j)}(u,x_l) - u(x_l)|,$$

где $x_{l+1/2} = (x_l + x_{l+1})/2$, $x_{l+1/4} = (x_l + x_{l+1/2})/2$, $x_{l+3/4} = (x_{l+1/2} + x_{l+1})/2$.

4.1 Разностная формула с тремя узлами для первой производной

В табл. 1 при различных ε и N приведены нормы погрешностей $\Delta^{(1)}_{N,3,n-1}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа) в узле x_{n-1}.

Таблица 1: Норма погрешности $\Delta^{(1)}_{N,3,n-1}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа)

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$1.13e{-3}$	$2.85e{-4}$	$7.13e{-5}$	$4.46e{-6}$	$2.79e{-7}$
2^{-5}	$1.68e{-1}$	$5.82e{-2}$	$1.73e{-2}$	$1.24e{-3}$	$8.04e{-5}$
2^{-6}	$3.81e{-1}$	$1.68e{-1}$	$5.82e{-2}$	$4.75e{-3}$	$3.18e{-4}$
2^{-7}	$6.34e{-1}$	$3.81e{-1}$	$1.68e{-1}$	$1.73e{-2}$	$1.24e{-3}$
2^{-9}	$9.06e{-1}$	$8.13e{-1}$	$6.34e{-1}$	$1.68e{-1}$	$1.73e{-2}$
2^{-11}	$9.77e{-1}$	$9.53e{-1}$	$9.06e{-1}$	$6.34e{-1}$	$1.68e{-1}$
2^{-13}	$9.94e{-1}$	$9.88e{-1}$	$9.77e{-1}$	$9.06e{-1}$	$6.34e{-1}$
2^{-15}	$9.99e{-1}$	$9.97e{-1}$	$9.94e{-1}$	$9.77e{-1}$	$9.06e{-1}$

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$1.22e{-3}$	$3.10e{-4}$	$7.82e{-5}$	$4.92e{-6}$	$3.08e{-7}$
2^{-5}	$1.01e{-3}$	$2.26e{-4}$	$5.34e{-5}$	$3.19e{-6}$	$1.97e{-7}$
2^{-6}	$1.22e{-3}$	$2.53e{-4}$	$5.66e{-5}$	$3.24e{-6}$	$1.98e{-7}$
2^{-7}	$1.58e{-3}$	$3.07e{-4}$	$6.33e{-5}$	$3.34e{-6}$	$1.99e{-7}$
2^{-9}	$2.18e{-3}$	$4.90e{-4}$	$9.91e{-5}$	$3.96e{-6}$	$2.09e{-7}$
2^{-11}	$2.35e{-3}$	$5.74e{-4}$	$1.36e{-4}$	$6.19e{-6}$	$2.48e{-7}$
2^{-13}	$2.39e{-3}$	$5.95e{-4}$	$1.47e{-4}$	$8.53e{-6}$	$3.87e{-7}$
2^{-15}	$2.40e{-3}$	$6.00e{-4}$	$1.50e{-4}$	$9.19e{-6}$	$5.33e{-7}$

В табл. 2 при различных ε и N приведены нормы погрешностей $\Delta^{(1)}_{N,3,n+1}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа) в узле x_{n+1}.

Таблица 2: Норма погрешности $\Delta^{(1)}_{N,3,n+1}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа)

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$1.14e{-3}$	$2.85e{-4}$	$7.13e{-5}$	$4.46e{-6}$	$2.79e{-7}$
2^{-5}	$1.03e{-1}$	$4.54e{-2}$	$9.28e{-3}$	$6.45e{-4}$	$4.01e{-5}$
2^{-6}	$1.47e{-1}$	$1.03e{-1}$	$4.54e{-2}$	$2.70e{-3}$	$1.68e{-4}$
2^{-7}	$1.16e{-1}$	$1.47e{-1}$	$1.03e{-1}$	$9.28e{-3}$	$6.45e{-4}$
2^{-9}	$3.12e{-2}$	$6.24e{-2}$	$1.16e{-1}$	$1.03e{-1}$	$9.28e{-3}$
2^{-11}	$7.81e{-3}$	$1.56e{-2}$	$3.12e{-2}$	$1.16e{-1}$	$1.03e{-1}$
2^{-13}	$1.95e{-3}$	$3.91e{-3}$	$7.81e{-3}$	$3.12e{-2}$	$1.16e{-1}$
2^{-15}	$4.88e{-4}$	$9.77e{-4}$	$1.95e{-3}$	$7.81e{-3}$	$3.12e{-2}$

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$1.22e{-3}$	$3.10e{-4}$	$7.82e{-5}$	$4.92e{-6}$	$3.08e{-7}$
2^{-5}	$6.15e{-4}$	$1.76e{-4}$	$4.71e{-5}$	$3.09e{-6}$	$1.95e{-7}$
2^{-6}	$4.71e{-4}$	$1.54e{-4}$	$4.41e{-5}$	$3.04e{-6}$	$1.95e{-7}$
2^{-7}	$2.90e{-4}$	$1.18e{-4}$	$3.86e{-5}$	$2.94e{-6}$	$1.93e{-7}$
2^{-9}	$7.50e{-5}$	$3.76e{-5}$	$1.82e{-5}$	$2.42e{-6}$	$1.84e{-7}$
2^{-11}	$1.88e{-5}$	$9.40e{-6}$	$4.71e{-6}$	$1.14e{-6}$	$2.47e{-7}$
2^{-13}	$4.69e{-6}$	$2.35e{-6}$	$1.18e{-6}$	$2.94e{-7}$	$7.28e{-8}$
2^{-15}	$1.17e{-6}$	$5.88e{-7}$	$2.94e{-7}$	$7.35e{-8}$	$1.84e{-8}$

В табл. 3 при различных ε и N приведены нормы погрешностей $\Delta^{(1)}_{N,3}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа).

Таблица 3: Норма погрешности $\Delta^{(1)}_{N,3}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа)

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$4.62e{-4}$	$1.16e{-4}$	$2.90e{-5}$	$1.81e{-6}$	$1.13e{-7}$
2^{-5}	$5.99e{-2}$	$2.22e{-2}$	$6.84e{-3}$	$5.01e{-4}$	$3.26e{-5}$
2^{-6}	$1.16e{-1}$	$5.99e{-2}$	$2.22e{-2}$	$1.90e{-3}$	$1.29e{-4}$
2^{-7}	$1.35e{-1}$	$1.16e{-1}$	$5.99e{-2}$	$6.84e{-3}$	$5.01e{-4}$
2^{-9}	$6.22e{-2}$	$1.07e{-1}$	$1.35e{-1}$	$5.99e{-2}$	$6.84e{-3}$
2^{-11}	$1.95e{-2}$	$3.87e{-2}$	$6.22e{-2}$	$1.35e{-1}$	$5.99e{-2}$
2^{-13}	$4.88e{-3}$	$9.77e{-3}$	$1.95e{-2}$	$6.22e{-2}$	$1.35e{-1}$
2^{-15}	$1.22e{-3}$	$2.44e{-3}$	$4.88e{-3}$	$1.95e{-2}$	$6.22e{-2}$

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$4.96e{-4}$	$1.26e{-4}$	$3.18e{-5}$	$2.00e{-6}$	$1.25e{-7}$
2^{-5}	$3.60e{-4}$	$8.64e{-5}$	$2.10e{-5}$	$1.29e{-6}$	$7.98e{-8}$
2^{-6}	$3.72e{-4}$	$9.02e{-5}$	$2.16e{-5}$	$1.30e{-6}$	$8.00e{-8}$
2^{-7}	$3.38e{-4}$	$9.32e{-5}$	$2.26e{-5}$	$1.32e{-6}$	$8.03e{-8}$
2^{-9}	$1.50e{-4}$	$6.43e{-5}$	$2.12e{-5}$	$1.41e{-6}$	$8.22e{-8}$
2^{-11}	$4.70e{-5}$	$2.33e{-5}$	$9.36e{-6}$	$2.47e{-6}$	$4.95e{-7}$
2^{-13}	$1.18e{-5}$	$5.88e{-6}$	$2.94e{-6}$	$5.85e{-7}$	$1.82e{-7}$
2^{-15}	$2.94e{-6}$	$1.47e{-6}$	$7.35e{-7}$	$1.84e{-7}$	$3.66e{-8}$

Из таблиц 1–3 следует, что полученные в теореме 1 оценки подтверждаются.

4.2 Разностная формула с тремя узлами для второй производной

В табл. 4 при различных ε и N приведены нормы погрешностей $\Delta^{(2)}_{N,3,n-1}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа) в узле x_{n-1}.

Таблица 4: Норма погрешности $\Delta^{(2)}_{N,3,n-1}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа)

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$1.09e{-1}$	$5.46e{-2}$	$2.74e{-2}$	$6.85e{-3}$	$1.71e{-3}$
2^{-5}	$6.00e{-1}$	$3.81e{-1}$	$2.17e{-1}$	$6.03e{-2}$	$1.55e{-2}$
2^{-6}	$8.13e{-1}$	$6.00e{-1}$	$3.81e{-1}$	$1.16e{-1}$	$3.07e{-2}$
2^{-7}	$9.40e{-1}$	$8.13e{-1}$	$6.00e{-1}$	$2.17e{-1}$	$6.03e{-2}$
2^{-9}	$9.96e{-1}$	$9.84e{-1}$	$9.40e{-1}$	$6.00e{-1}$	$2.17e{-1}$
2^{-11}	$1.00e{+0}$	$9.99e{-1}$	$9.96e{-1}$	$9.40e{-1}$	$6.00e{-1}$
2^{-13}	$1.00e{+0}$	$1.00e{+0}$	$1.00e{+0}$	$9.96e{-1}$	$9.40e{-1}$
2^{-15}	$1.00e{+0}$	$1.00e{+0}$	$1.00e{+0}$	$1.00e{+0}$	$9.96e{-1}$

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$1.17e{-1}$	$5.96e{-2}$	$3.00e{-2}$	$7.56e{-3}$	$1.89e{-3}$
2^{-5}	$3.61e{-3}$	$1.48e{-3}$	$6.68e{-4}$	$1.55e{-4}$	$3.79e{-5}$
2^{-6}	$2.62e{-3}$	$9.05e{-4}$	$3.70e{-4}$	$7.93e{-5}$	$1.91e{-5}$
2^{-7}	$2.35e{-3}$	$6.55e{-4}$	$2.26e{-4}$	$4.18e{-5}$	$9.66e{-6}$
2^{-9}	$2.40e{-3}$	$5.93e{-4}$	$1.47e{-4}$	$1.41e{-5}$	$2.61e{-6}$
2^{-11}	$2.41e{-3}$	$6.02e{-4}$	$1.50e{-4}$	$9.18e{-6}$	$8.84e{-7}$
2^{-13}	$2.41e{-3}$	$6.02e{-4}$	$1.51e{-4}$	$9.38e{-6}$	$5.74e{-7}$
2^{-15}	$2.41e{-3}$	$6.02e{-4}$	$1.51e{-4}$	$9.41e{-6}$	$5.86e{-7}$

В табл. 5 при различных ε и N приведены нормы погрешностей $\Delta^{(2)}_{N,3,n+1}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа) в узле x_{n+1}.

Таблица 5: Норма погрешности $\Delta^{(2)}_{N,3,n+1}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа)

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$1.09e{-1}$	$5.47e{-2}$	$2.74e{-2}$	$6.85e{-3}$	$1.71e{-3}$
2^{-5}	$2.64e{-1}$	$2.51e{-1}$	$1.76e{-1}$	$5.72e{-2}$	$1.53e{-2}$
2^{-6}	$1.69e{-1}$	$2.64e{-1}$	$2.51e{-1}$	$1.05e{-1}$	$2.99e{-2}$
2^{-7}	$5.99e{-2}$	$1.69e{-1}$	$2.64e{-1}$	$1.76e{-1}$	$5.72e{-2}$
2^{-9}	$3.91e{-3}$	$1.56e{-2}$	$5.99e{-2}$	$2.64e{-1}$	$1.76e{-1}$
2^{-11}	$2.44e{-4}$	$9.77e{-4}$	$3.91e{-3}$	$5.99e{-2}$	$2.64e{-1}$
2^{-13}	$1.53e{-5}$	$6.10e{-5}$	$2.44e{-4}$	$3.91e{-3}$	$5.99e{-2}$
2^{-15}	$9.54e{-7}$	$3.81e{-6}$	$1.53e{-5}$	$2.44e{-4}$	$3.91e{-3}$

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$1.17e{-1}$	$5.96e{-2}$	$3.00e{-2}$	$7.56e{-3}$	$1.89e{-3}$
2^{-5}	$1.58e{-3}$	$9.76e{-4}$	$5.42e{-4}$	$1.47e{-4}$	$3.74e{-5}$
2^{-6}	$5.41e{-4}$	$3.98e{-4}$	$2.44e{-4}$	$7.15e{-5}$	$1.86e{-5}$
2^{-7}	$1.49e{-4}$	$1.36e{-4}$	$9.96e{-5}$	$3.39e{-5}$	$9.17e{-6}$
2^{-9}	$9.37e{-6}$	$9.40e{-6}$	$9.36e{-6}$	$6.22e{-6}$	$2.12e{-6}$
2^{-11}	$5.85e{-7}$	$5.88e{-7}$	$5.88e{-7}$	$5.85e{-7}$	$4.95e{-7}$
2^{-13}	$3.66e{-8}$	$3.67e{-8}$	$3.68e{-8}$	$3.68e{-8}$	$3.66e{-8}$
2^{-15}	$2.29e{-9}$	$2.30e{-9}$	$2.30e{-9}$	$2.30e{-9}$	$2.30e{-9}$

В табл. 6 при различных ε и N приведены нормы погрешностей $\Delta^{(2)}_{N,3}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа).

Таблица 6: Норма погрешности $\Delta^{(2)}_{N,3}$ классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа)

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$8.19e{-2}$	$4.10e{-2}$	$2.05e{-2}$	$5.14e{-3}$	$1.28e{-3}$
2^{-5}	$1.21e{+1}$	$8.42e{+0}$	$5.01e{+0}$	$1.43e{+0}$	$3.71e{-1}$
2^{-6}	$2.69e{+1}$	$2.43e{+1}$	$1.68e{+1}$	$5.48e{+0}$	$1.47e{+0}$
2^{-7}	$3.94e{+1}$	$5.37e{+1}$	$4.85e{+1}$	$2.00e{+1}$	$5.73e{+0}$
2^{-9}	$7.38e{+0}$	$6.13e{+1}$	$1.58e{+2}$	$1.94e{+2}$	$8.02e{+1}$
2^{-11}	$5.00e{-1}$	$2.00e{+0}$	$2.95e{+1}$	$6.30e{+2}$	$7.77e{+2}$
2^{-13}	$1.25e{-1}$	$5.00e{-1}$	$2.00e{+0}$	$1.18e{+2}$	$2.52e{+3}$
2^{-15}	$3.13e{-2}$	$1.25e{-1}$	$5.00e{-1}$	$8.00e{+0}$	$4.72e{+2}$

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$8.80e{-2}$	$4.47e{-2}$	$2.25e{-2}$	$5.67e{-3}$	$1.42e{-3}$
2^{-5}	$7.30e{-2}$	$3.27e{-2}$	$1.54e{-2}$	$3.67e{-3}$	$9.07e{-4}$
2^{-6}	$8.64e{-2}$	$3.66e{-2}$	$1.64e{-2}$	$3.73e{-3}$	$9.11e{-4}$
2^{-7}	$9.83e{-2}$	$4.33e{-2}$	$1.83e{-2}$	$3.85e{-3}$	$9.19e{-4}$
2^{-9}	$1.77e{-2}$	$3.69e{-2}$	$2.46e{-2}$	$4.57e{-3}$	$9.64e{-4}$
2^{-11}	$1.20e{-3}$	$1.20e{-3}$	$4.44e{-3}$	$6.15e{-3}$	$1.14e{-3}$
2^{-13}	$3.01e{-4}$	$3.01e{-4}$	$3.01e{-4}$	$1.11e{-3}$	$1.54e{-3}$
2^{-15}	$7.53e{-5}$	$7.53e{-5}$	$7.53e{-5}$	$7.53e{-5}$	$2.78e{-4}$

Из таблиц 4–6 следует, что полученные в теореме 2 оценки подтверждаются.

4.3 Разностная формула с четырьмя узлами для второй производной

В табл. 7 при различных ε и N приведены нормы погрешностей классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа) в узле x_{n-1}.

Таблица 7: Норма погрешности классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа)

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$6.31e{-3}$	$1.58e{-3}$	$3.96e{-4}$	$2.48e{-5}$	$1.55e{-6}$
2^{-5}	$3.48e{-1}$	$1.37e{-1}$	$4.40e{-2}$	$3.35e{-3}$	$2.20e{-4}$
2^{-6}	$6.51e{-1}$	$3.48e{-1}$	$1.37e{-1}$	$1.25e{-2}$	$8.65e{-4}$
2^{-7}	$8.81e{-1}$	$6.51e{-1}$	$3.48e{-1}$	$4.40e{-2}$	$3.35e{-3}$
2^{-9}	$9.92e{-1}$	$9.69e{-1}$	$8.81e{-1}$	$3.48e{-1}$	$4.40e{-2}$
2^{-11}	$1.00e{+0}$	$9.98e{-1}$	$9.92e{-1}$	$8.81e{-1}$	$3.48e{-1}$
2^{-13}	$1.00e{+0}$	$1.00e{+0}$	$1.00e{+0}$	$9.92e{-1}$	$8.81e{-1}$
2^{-15}	$1.00e{+0}$	$1.00e{+0}$	$1.00e{+0}$	$1.00e{+0}$	$9.92e{-1}$

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$6.53e{-3}$	$1.62e{-3}$	$4.05e{-4}$	$2.53e{-5}$	$1.58e{-6}$
2^{-5}	$1.63e{-4}$	$3.33e{-5}$	$7.52e{-6}$	$4.35e{-7}$	$2.67e{-8}$
2^{-6}	$1.19e{-4}$	$2.04e{-5}$	$4.16e{-6}$	$2.23e{-7}$	$1.34e{-8}$
2^{-7}	$1.10e{-4}$	$1.49e{-5}$	$2.55e{-6}$	$1.17e{-7}$	$6.79e{-9}$
2^{-9}	$1.17e{-4}$	$1.43e{-5}$	$1.72e{-6}$	$3.98e{-8}$	$1.83e{-9}$
2^{-11}	$5.83e{-5}$	$7.74e{-6}$	$9.91e{-7}$	$1.44e{-8}$	$3.38e{-10}$
2^{-13}	$8.70e{-6}$	$1.63e{-6}$	$2.37e{-7}$	$4.07e{-9}$	$5.93e{-11}$
2^{-15}	$8.70e{-6}$	$5.44e{-7}$	$3.40e{-8}$	$9.30e{-10}$	$1.60e{-11}$

В табл. 8 при различных ε и N приведены нормы погрешностей классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа) в узле x_{n+2}.

Таблица 8: Норма погрешности классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа)

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$6.27e{-3}$	$1.58e{-3}$	$3.96e{-4}$	$2.48e{-5}$	$1.55e{-6}$
2^{-5}	$1.55e{-1}$	$9.12e{-2}$	$3.58e{-2}$	$3.18e{-3}$	$2.17e{-4}$
2^{-6}	$1.39e{-1}$	$1.55e{-1}$	$9.12e{-2}$	$1.13e{-2}$	$8.43e{-4}$
2^{-7}	$5.80e{-2}$	$1.39e{-1}$	$1.55e{-1}$	$3.58e{-2}$	$3.18e{-3}$
2^{-9}	$3.91e{-3}$	$1.56e{-2}$	$5.80e{-2}$	$1.55e{-1}$	$3.58e{-2}$
2^{-11}	$2.44e{-4}$	$9.77e{-4}$	$3.91e{-3}$	$5.80e{-2}$	$1.55e{-1}$
2^{-13}	$1.53e{-5}$	$6.10e{-5}$	$2.44e{-4}$	$3.91e{-3}$	$5.80e{-2}$
2^{-15}	$9.54e{-7}$	$3.81e{-6}$	$1.53e{-5}$	$2.44e{-4}$	$3.91e{-3}$

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$6.37e{-3}$	$1.60e{-3}$	$4.02e{-4}$	$2.52e{-5}$	$1.59e{-6}$
2^{-5}	$7.27e{-5}$	$2.22e{-5}$	$6.13e{-6}$	$4.13e{-7}$	$2.63e{-8}$
2^{-6}	$2.54e{-5}$	$9.09e{-6}$	$2.77e{-6}$	$2.01e{-7}$	$1.31e{-8}$
2^{-7}	$7.25e{-6}$	$3.17e{-6}$	$1.14e{-6}$	$9.56e{-8}$	$6.45e{-9}$
2^{-9}	$4.62e{-7}$	$2.31e{-7}$	$1.13e{-7}$	$1.78e{-8}$	$1.49e{-9}$
2^{-11}	$1.53e{-8}$	$7.85e{-9}$	$3.97e{-9}$	$9.86e{-10}$	$2.44e{-10}$
2^{-13}	$2.14e{-10}$	$1.20e{-10}$	$6.30e{-11}$	$1.64e{-11}$	$4.06e{-12}$
2^{-15}	$1.33e{-11}$	$3.34e{-12}$	$8.36e{-13}$	$2.47e{-13}$	$6.41e{-14}$

В табл. 9 при различных ε и N приведены нормы погрешностей классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа).

Таблица 9: Норма погрешности классической формулы интерполяции (слева) и предложенной формулы (справа)

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$3.94e{-3}$	$9.88e{-4}$	$2.48e{-4}$	$1.55e{-5}$	$9.71e{-7}$
2^{-5}	$6.07e{+0}$	$2.58e{+0}$	$8.53e{-1}$	$6.64e{-2}$	$4.39e{-3}$
2^{-6}	$1.91e{+1}$	$1.21e{+1}$	$5.15e{+0}$	$4.94e{-1}$	$3.45e{-2}$
2^{-7}	$3.37e{+1}$	$3.82e{+1}$	$2.43e{+1}$	$3.41e{+0}$	$2.66e{-1}$
2^{-9}	$5.88e{+0}$	$5.53e{+1}$	$1.35e{+2}$	$9.72e{+1}$	$1.37e{+1}$
2^{-11}	$8.75e{-1}$	$3.00e{+0}$	$2.35e{+1}$	$5.39e{+2}$	$3.89e{+2}$
2^{-13}	$2.19e{-1}$	$8.75e{-1}$	$3.50e{+0}$	$9.40e{+1}$	$2.16e{+3}$
2^{-15}	$5.47e{-2}$	$2.19e{-1}$	$8.75e{-1}$	$1.40e{+1}$	$3.76e{+2}$

ε	N				
	32	64	128	512	2048
1	$4.07e{-3}$	$1.01e{-3}$	$2.53e{-4}$	$1.58e{-5}$	$9.96e{-7}$
2^{-5}	$2.85e{-3}$	$6.26e{-4}$	$1.46e{-4}$	$8.64e{-6}$	$5.33e{-7}$
2^{-6}	$3.49e{-3}$	$7.11e{-4}$	$1.56e{-4}$	$8.79e{-6}$	$5.35e{-7}$
2^{-7}	$4.21e{-3}$	$8.73e{-4}$	$1.78e{-4}$	$9.11e{-6}$	$5.39e{-7}$
2^{-9}	$6.95e{-4}$	$8.18e{-4}$	$2.63e{-4}$	$1.11e{-5}$	$5.69e{-7}$
2^{-11}	$4.95e{-5}$	$2.31e{-5}$	$2.36e{-5}$	$8.83e{-6}$	$7.50e{-7}$
2^{-13}	$1.49e{-6}$	$1.32e{-6}$	$8.05e{-7}$	$3.88e{-7}$	$1.45e{-7}$
2^{-15}	$3.72e{-7}$	$9.31e{-8}$	$2.33e{-8}$	$1.26e{-8}$	$6.08e{-9}$

Из таблиц 7–9 следует, что полученные в теореме 3 оценки подтверждаются.

Заключение

Исследованы разностные формулы для первой производной по трем узлам и для второй производной по трем и четырем узлам. Получены равномерные по ε оценки, которые подтверждаются численными экспериментами.

Список литературы

[1] Miller J. J. H., O'Riordan E., and Shishkin G. I. Fitted Numerical Methods for Singular Perturbation Problems: Error Estimates in the Maximum Norm for Linear Problems in One and Two Dimensions (Revised Edition). Singapore: World Scientific, 2012.

[2] Shishkin G. I., Shishkina L. P.: Difference Methods for Singular Perturbation Problems. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, 2009.

[3] Ильин А. М. Разностная схема для дифференциального уравнения с малым параметром при старшей производной // Математические заметки. 1969. Т. 6, № 2. С. 237–248.

[4] Бахвалов Н. С. К оптимизации методов решения краевых задач при наличии пограничного слоя // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. 1969. Т. 9, № 4. С. 841–890.

[5] Шишкин Г. И. Сеточные аппроксимации сингулярно возмущенных эллиптических и параболических уравнений. Екатеринбург: УрО РАН, 1992.

[6] Задорин А. И., Тиховская С. В. Разностная схема на равномерной сетке для сингулярно возмущенной задачи Коши // Вестник НГУ. Серия: Математика, механика, информатика. 2011. Т. 11, № 3. С. 114–122.

[7] Задорин А. И., Тиховская С. В. Анализ разностной схемы для сингулярно возмущенной задачи Коши на сгущающейся сетке // Сиб. журн. вычисл. математики. 2011. Т. 14, № 1. С. 47–57.

[8] Tikhovskaya S. V., Zadorin A. I. A two-grid method with Richardson extrapolation for a semilinear convection-diffusion problem // Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences. AIP Conference Proceedings. 2015. V. 1684. P. 090007-1-090007-8.

[9] Задорин А. И. Метод интерполяции для задачи с пограничным слоем // Сиб. журн. вычисл. математики. Новосибирск, 2007. Т. 10, № 3. С. 267–275.

[10] Задорин А. И., Задорин Н. А. Сплайн-интерполяция на равномерной сетке функции с погранслойной составляющей // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2010. Т. 50, № 2. С. 221–233.

[11] Zadorin A. I., Zadorin N. A. Interpolation formula for functions with a boundary layer component and its application to derivatives calculation // Siberian Electronic Mathematical Reports. 2012. V. 9. P. 445-455.

[12] Zadorin A. I. Interpolation Formulas for Functions with Large Gradients in the Boundary Layer and their Application // Моделирование и анализ информационных систем. 2016. Т. 23. № 3. С. 377–384.

[13] Tikhovskaya S. V., Zadorin A. I. Analysis of polynomial interpolation of the function of two variables with large gradients in the parabolic boundary layers // Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences. AIP Conference Proceedings. 2016. V. 1773. P. 100008-1-100008-9.

[14] Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. Москва: Наука, 1975.

Светлана Валерьевна Тиховская — к.ф.-м.н., науч. сотр. Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН;
e-mail: s.tihovskaya@yandex.ru;
Александр Иванович Задорин — д.ф.-м.н., зав. лабораторией Омского филиала Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН;
e-mail: zadorin@ofim.oscsbras.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

МАСШТАБИРОВАНИЕ КВАДРАТНЫХ РЕШЕТОК С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНО ШИРОКИМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ КОНДАКТАНСОВ СВЯЗЕЙ

О. А. Ткаченко[1], В. А. Ткаченко[1,2]

[1] *Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 004.942:537.311.322-0.22.532:537.29+538.911:530.145

Методом конечного скейлинга исследованы небольшие квадратные решетки случайных сопротивлений. Распределения кондактансов связей $g_i(x_i)$, где $x_i \in [0,1]$ — случайные числа, i — номер связи, включают экспоненциально широкое $g_i = \exp(-kx_i)$ и комбинированное: в виде константы, переходящей в экспоненту при $x_i > x_0$. Наиболее интересные случаи относятся к $0.4 < x_0 < 0.5$, допускающие численные расчеты с $k = 100 - 200$. Комбинированные распределения возникают в полупроводниковых решетках антиточек, в которых часть связей открыта для прохождения электронов, а часть находится в туннельном режиме. Выяснено, что при $x_0 = 0$ средние по реализациям беспорядка проводимость и сопротивление квадратной решетки ведут себя при малых линейных размерах L пропорционально L^{-n} с разными показателями n. При $x_0 \neq 0$ эти зависимости становятся более сложными, как в случайных решетках с тремя типами локальных сопротивлений. Результаты объясняются в рамках концепции критических подсеток и критического элемента решетки.

Ключевые слова: квадратная решетка, экспоненциальное распределение, конечный скейлинг, законы Кирхгофа, метод Монте-Карло, перколяция, критический индекс проводимости, численное моделирование.

Введение

Решетки с экспоненциально широкими распределениями сопротивлений связей являются базовыми моделями многих разупорядоченных естественных [1, 2] и искусственных [3, 4, 5] систем, а конечный скейлинг (масштабирование) является одним из основных способов численного изучения беспорядка [6, 7, 8, 9, 10]. Этот метод подразумевает расчеты характеристик небольших систем с усреднением по реализациям беспорядка и изменением линейного размера систем L, например, зависимостей проводимости $\langle G\rangle(L)$. Решетки описываются распределениями кондактансов связей $g_i = F(x_i)$, где i — номер связи, $x_i \in [0,1]$ — случайные равномерно распределенные числа.

Ранее данным методом исследовались системы на пороге перколяции для нахождения критических, в том числе неуниверсальных, индексов проводимости t, отвечающих масштабно-инвариантному поведению (скейлингу) $\langle G\rangle(L) \propto L^{-t/\nu}$ [6] при $L < R$, где $\nu = 4/3$ — универсальный критический индекс перколяционного радиуса корреляции R в 2D системах. Дополнительно к средней проводимости вычислялось среднее сопротивление $\langle 1/G\rangle(L)$ перколирующих систем [6, 10]. Для квадратных решеток с бинарным распределением связей было найдено, что среднее сопротивление ведет себя как $L^{t/\nu}$, $t = 1.3$, т.е. противоположно поведению средней проводимости. То же самое сообщалось о перколяции в случае степенного распределения кондактанса связей, когда критический индекс проводимости становился неуниверсальным ($t > 1.3$) [6]. Однако в [7] отмечено, что расчет $\langle 1/G\rangle(L)$ не надежен из-за наличия в степенном распределении сколь угодно малых кондактансов связей $g_i \neq 0$.

Хотя в решетках с экспоненциальным разбросом кондактансов $F(x) = \exp(-kx)$ с $x \in [0,1]$ и $k \gg 1$ все связи являются проводящими, для вычисления проводимости использовалась теория перколяции. По этой теории для каждой реализации беспорядка, задаваемой вектором $\{x_i\}$, существует критический элемент i_c, отвечающий небольшому изменению кондактанса решетки при удалении связей с $x_i > x_c = x(i_c)$.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 14-22-00143).

Но если удалить в том числе и критический элемент $x_i \geq x_c$, то кондактанс решетки обратится в ноль [1]. Таким образом, кондактанс всей решетки с точностью до коэффициента определяется кондактансом критической связи $g_c = g(x_c)$. Кроме того, было показано, что среда с экспоненциально широким разбросом характеризуется конечной длиной корреляции, которую мы будем называть по аналогии с работой [8] длиной беспорядка $L_D = bk^\nu$, $\nu = 4/3$. При $L \gg L_D$ флуктуации проводимости уменьшаются $k\delta x_c \ll 1$, и кондактанс решетки перестает зависеть от реализации беспорядка, приближаясь к макроскопической проводимости: $G \to G_e$. В настоящей работе мы рассматриваем только задачу связей на квадратной решетках, в этом случае $G_e = \exp(-0.5k)$. Выход на константу G_e аналогичен поведению кондактанса обычных решеток с бинарным распределением локальных кондактансов типа 0-1, когда концентрация проводящих связей p больше пороговой и радиус корреляции R имеет уже конечное значение: $R = l_0/|p - 0.5|^\nu$, $L \gg R$.

В работе [8], где исследовались квадратные решетки с экспоненциальным распределением кондактансов связей, было найдено, что при $L < L_D$ распределение сопротивления решеток похоже на лог-нормальное, и выписана простая формула для зависимости моментов этого распределения от (L, k). Согласно этой формуле $\langle G(L/L_D)\rangle/G_e = G_e/\langle G(L/L_D)\rangle$, т.е. средняя проводимость и среднее сопротивление с изменением L ведут себя одинаково. Это предсказание не проверялось, и численно эти зависимости не сравнивались.

В настоящей работе методом конечного скейлинга мы ищем поведение $\langle G\rangle(L)$ и $\langle 1/G\rangle(L)$ в случае экспоненциальных и комбинированных распределений вида: $F = 1$ при $0 \leq x < x_0 < 0.5$ и $F = \exp(k(x_0 - x))$ при $x_0 < x < 1$. В случае $x_0 > 0$ часть связей $0 < x < x_0$ находится в открытом режиме, а остальные в туннельном. Такие распределения с $k \gg 1$ имитируют, например, квадратные решетки антиточек в полупроводниковом двумерном электронном газе [4, 5]. Реализации беспорядка (вектор $\{x_i\}$) выбираются методом Монте-Карло, а значения G находятся решением уравнений Кирхгофа. Выясняется, что в случае экспоненциального распределения ($x_0 = 0$) $\langle G\rangle(L)$ и $\langle 1/G\rangle(L)$ при малых $L < L_0$ становятся степенными функциями, с показателями $-n$, где, соответственно, $n \approx k/5$ и $n \approx k/6$. Переход от $x_0 = 0$ к $x_0 \approx 0.4$ расширяет диапазон допустимых в численных расчетах значений k с 50 до 200. При больших k отрезок $L < L_D$ имеет два участка, на которых $\langle G\rangle(L)$ приближается степенными функциями с немного разными n. Найденное поведение при малых L проверяется модельным расчетом $\langle g(x_c)\rangle(L)$ и $\langle 1/g(x_c)\rangle(L)$, где x_c — критический элемент, отвечающий обращению кондактанса решетки G в ноль после разрыва всех связей с $x_i \geq x_c$. Для этой проверки используется распределение $P(x_c)$, одинаковое для всех распределений кондактансов связей. Расчетом $\langle 1/g(x_c)\rangle(L)$ прогнозируется поведение среднего сопротивления решетки $\langle 1/G\rangle(L)$, когда последнее не удается вычислить из-за сильных флуктуаций g_i и G при больших k.

1 Методы моделирования и тестовые расчеты

Основой универсального моделирования 2D решеток сопротивлений является использование законов Кирхгофа для расчета полного тока I, когда известны все кондактансы межузельных связей g_i (i — номер связи) и малое напряжение V, которое приложено к противоположным сторонам решетки. Наша решетка представляет собой матрицу из L строк и $L + 1$ столбцов. Потенциалы 0 и V задаются в узлах первого и последнего ($L + 1$-ого) столбцах. Очевидно, при $g_i = g$ кондактанс (проводимость) решетки $G \equiv I/V$ совпадает с g при любом $L > 1$. Мы изменяем размер решетки, начиная с $L = 4$. Решетки со случайным разбросом g_i описываются распределениями $g_i = F(x_i)$, где $x_i \in [0, 1]$ — случайные равномерно распределенные числа, $F(x)$ — заданная функция. Мы считаем, что максимальные значения F порядка 1, минимальные значения локальных кондактансов ограничиваем снизу значением 10^{-15} (расчеты с двойной точностью), полагая, что все связи, хотя бы слабо, но проводят. Такой подход позволяет определять достаточно надежно среднюю проводимость решеток, поскольку самые низкие проводимости практически не дают вклада. Обратная ситуация возникает при определении среднего сопротивления, которое можно получить без обрезания связей лишь для $k \leq 35$.

Ясно, что при любых, но особенно при малых L, проводимость решетки $G = I/V$, найденная решением уравнений Кирхгофа, сильно зависит от реализаций беспорядка, задаваемых вектором случайных чисел $\{x_i\}$. Тем не менее, усредненная по множеству этих векторов проводимость $\langle G\rangle$ при фиксированном L становится закономерной величиной, ее можно считать средним свойством квадратных фрагментов одинакового размера макроскопически однородной бесконечной решетки. Это свойство уже не зависит от выбора случайных значений x_i, но зависит от L и вида функции $F(x)$. На практике перебор векторов $\{x_i\}$ методом Монте-Карло дает лишь репрезентативную выборку из бесконечного числа возможностей. «Непроводящие» конфигурации при нахождении $\langle G\rangle$ отбрасываются (для решеток на пороге перколяции доля таких конфигураций близка к половине).

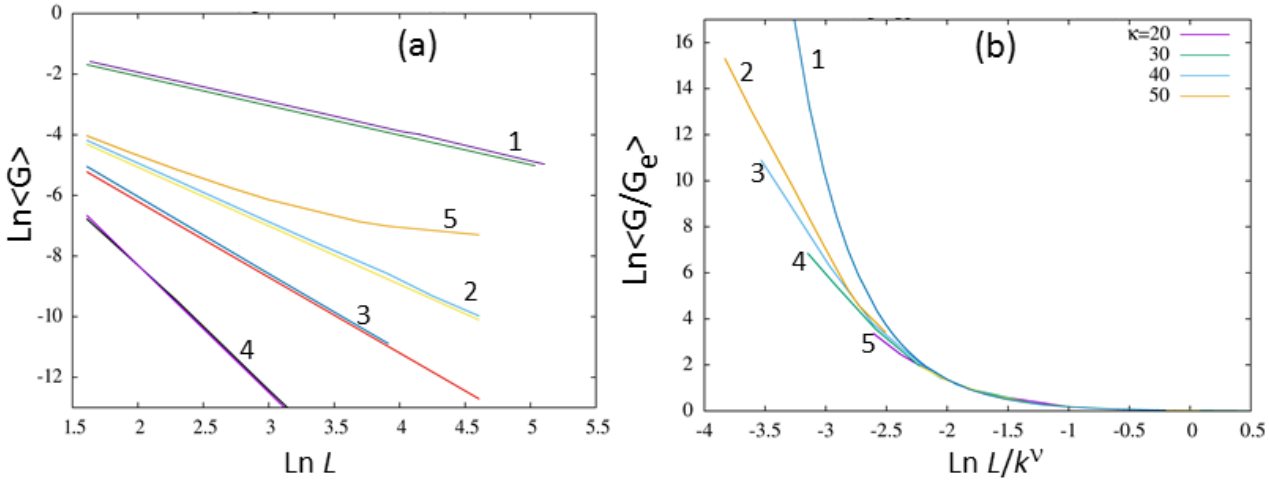


Рис. 1: (a) — Зависимости средней проводимости квадратных решеток при перколяции в случаях бинарного (линия 1) и степенных (линии 2-5) распределений кондактансов связей в решетках: линиям 2–4, отвечают m =2.5, 3.5 и 6. Для этих случаев рядом с вычисленными линиями даны прямые $\ln G = (-t/\nu)\ln L + const$. Линия 5 отвечает $R \approx 30$. (b) — Зависимости $\langle G/G_e\rangle(L/k^\nu)$ для квадратных решеток в случае экспоненциального распределения $F(x) = \exp(-kx)$. Линии 2-5 — расчет для указанных k, линия 1 — теоретическая кривая для лог-нормального распределения сопротивления решеток (см. текст).

1.1 Участки масштабно-инвариантного поведения $\langle G\rangle(L)$ при $L < R$ и $L < L_D$

Мы тестируем наш подход и программы, моделируя перколяцию в решетках с бинарным, либо степенными распределениями ($F(x) = 1$, либо $F = [2(0.5 - x)]^m$ при $x < 0.5$, иначе $F(x) = 0$). Результат показан на рис. 1a. Из него видно, что вычисленные зависимости $\langle G\rangle(L)$ в двойном логарифмическом масштабе являются прямыми линиями с наклоном $-n = -t/\nu$. Для бинарного распределения $n = 0.98$ и $t = 1.3$ — универсальное значение критического индекса проводимости для перколирующих 2D систем. Для степенного распределения с $m = 2.5$ критический индекс проводимсти имеет неуниверсальное значение: $n = 1.934$ и $t = 2.58$, что совпадает с результатом из [6]. Для $m = 3.5$ и для $m = 6$ мы получили значения $t = 2.5\nu = 3.3$ и $t = 4.2\nu = 5.6$, соответственно. Для сравнения показана кривая проводимости для $m = 2.5$ при отходе от порога перколяции, когда интервал $F(x) \neq 0$ расширен до 0.54 и радиус корреляции вместо $R = \infty$ по оценке стал $R \approx 30$. Видно, что при больших $L > R$ проводимость $\langle G\rangle$ выходит на постоянное значение, а при малых стремится к степенной функции с прежним показателем $n = 1.934$. Изгиб кривой в двойном логарифмическом масштабе наблюдается в переходной области, когда размер решетки становится близким к R.

На рис. 1b показан результат проверки формулы $\ln\langle G/G_e\rangle = \mu^2/2$, $\mu \equiv bk^\nu/L$, $b \approx 0.2$, полученной в [8] для экспоненциальных распределений $F(x) = \exp(-kx)$. Фактически, это формула для минус 1-го (и 1-го) моментов от $P(\rho)$ в предположении, что распределение удельного сопротивления решеток ρ по случайным реализациям беспорядка является при таких $F(x)$ лог-нормальным: $P(\rho) = (\sqrt{2\pi}\mu\rho)^{-1}\exp(-\ln^2(G_e\rho/2\mu^2)$. Интегрирование по ρ для простоты проводилось от 0 до ∞ [8]. Из рис. 1 видно, что эта формула (линия 1) хорошо работает, когда $\ln\langle G/G_e\rangle < 2$ и $L > L_D = bk^\nu$, но при малых L линия 1 отрывается вверх от численных расчетов, и лучше работает приближение степенными зависимостями $\langle G\rangle(L) \propto L^{-n}$, причем $n \approx k/5$. На интервале $k \in [20, 50]$ значение n меняется от 4 до 10. Мы усматриваем здесь аналогию с поведением линий на рис. 1a для степенного распределения, причем длина беспорядка L_D на рис. 1b играет такую же роль, как конечный радиус корреляции R в случае линии 5 на рис. 1a.

Заметим, что участки степенной зависимости на рис. 1b являются короткими и даже при $k = 50$ размеры решетки не превышают $L_D = 37$. При $k < 15$ этот участок пропадает из-за малости $L_D \approx 7$, а моделировать решетки с $F(x) = \exp(-kx)$ при $k > 50$ не удается из-за слишком малых значений g_i и G, физически значимая часть которых обрезается.

Далее проверяется, насколько устойчивым и закономерным является обнаруженное нами степенное поведение $\langle G\rangle(L)$. Прежде всего, на рис. 2a мы показываем, что решетки с обрезанным при $x > 0.5$ экспоненциальным распределением (на пороге перколяции) ведут себя при малых L точно так же, как и необрезанные.

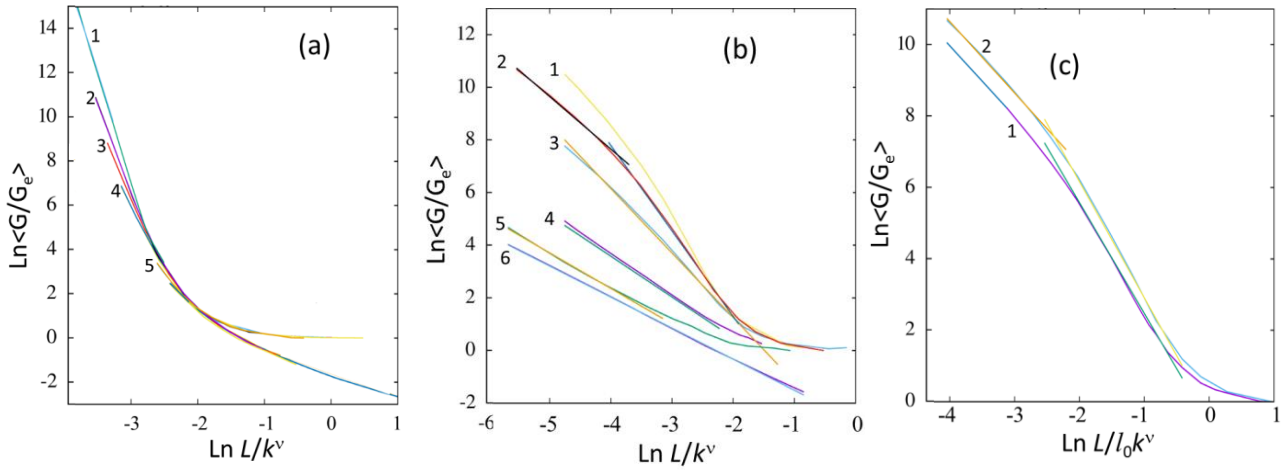


Рис. 2: (a) — Зависимости $\langle G/G_e\rangle(L/k^\nu)$ для квадратных решеток в случаях $F(x) = \exp(-kx)$, $x \in [0,1]$ и обрезанного ($F(x) = 0$ при $x > 0.5$) распределений. Номерам 1–5 отвечают, соответственно, k =50, 40, 35, 30, 20. Случай $k = 35$ добавлен к тому, что было на рис. 1b. (b) — Зависимости $\langle G/G_e\rangle(L/k^\nu)$ для комбинированных распределений: $x_0 = 0.37$, $k = 100$ (линия 1), $x_0 = 0.43$, $k = 180$ (линия 2), $x_0 = 0.4$, $k = 100$ (линия 3), $x_0 = 0.43$, $k = 100$ (линия 4), $x_0 = 0.47$, $k = 200$ (линия 5), линия 6 отвечает обрезанному распределению с $x_0 = 0.47$, $k = 200$. Рядом с линиями проведены подгоночные степенные зависимости. (c) — Зависимости $\langle G/G_e\rangle(L/L_D)$ для комбинированного (линия 2, $x_0 = 0.43$, $k = 180$) и одного из экспериментальных (линия 1) распределений кондактансов связей, отвечающего подгонке к эксперименту [5]. В данном случае G_e есть усредненная по реализациям проводимость для наибольшего значения L. Подгоночные линии L^{-n} показывают скачок наклона в точке $L \approx 20$.

Видно, что линии в двойном логарифмическом масштабе при больших $L > L_D$ становятся прямыми и имеют одинаковый наклон, отвечающий $n \approx 1$. Эти линии были совмещены друг с другом простым вертикальным сдвигом. Наклон $n \approx 1$ типичен для решеток случайных сопротивлений с концентрацией проводящих связей 0.5, отвечающей порогу перколяции. При $L \le L_D$ эти линии разошлись из-за различия k, но совпали с соответствующими линиями необрезанной решетки, выходящими на $\langle G/G_e\rangle = 1$ при $L \gg L_D$.

В случае обрезанного распределения перколяционный радиус корреляциии $R = \infty$ и в пределе больших $L > L_D$ выполняется $\langle G\rangle \propto L^{-t/\nu}$, где $t \approx \nu$, т.е. здесь критический индекс проводимости имеет почти универсальное значение, как при бинарном и некоторых степенных распределениях кондактансов связей с $m < 2.5$. При малых $L < L_D$ наблюдается поведение $\langle G\rangle \propto L^{-n}$, где $n \approx k/5$, т.е. меняется от 4 до 10, но на кривых при $L \approx L_D$ есть изгиб, после которого $n \approx 1$. О похожем поведении $\langle G\rangle(L)$ сообщалось в работе [9], посвященной моделированию проводимости полимеров. Цепочки длиной $2 \le n \le 6$ размещались по связям квадратной решетки, причем их кондактанс был равен 1. Часть связей между ними имели низкую проводимость $g_i = \alpha \ll 1$, например, $\alpha = 10^{-5}$. Остальные связи с $x_i > 0.5$ считались непроводящими. С изменением L на зависимости $\ln\langle G\rangle(\ln L)$ появлялся излом при $L \approx L_D$. Длина беспорядка L_D определялась долей связей с единичным кондактансом. При $L > L_D$ значение $n \approx 1$ отвечало почти универсальному t. Более быстрому росту проводимости в области $L < L_D$ уделено мало внимания, но по нашей оценке наибольший показатель n в этой области был ~ 3. Подобно нашему случаю, в такой перколирующей системе есть два характерных размера — радиус корреляции $R = \infty$, который определяется лишь геометрией кластеров из проводящих связей, и длина беспорядка L_D, определяемая видом распределения $F(x)$. Соответственно, для каждой кривой $\langle G\rangle(L)$ есть два значения критического индекса проводимости — универсальное и неуниверсальное.

На рис. 2b показан результат расчета для комбинированных распределений $F = 1$ при $0 \le x < x_0 < 0.5$ и $F = \exp(k(x_0 - x))$ при $x_0 < x < 1$, $k \gg 1$. При $x_0 \ge 0.4$ показатель экспоненты k можно было увеличить до 200. При этом прогнозируемое $L_D \equiv 0.2k^\nu$ возрастало в несколько раз.

Реальность прогноза L_D на основе лишь значения k подтверждена тем, что переходное поведение на рис. 1b, 2a,b оказалось в одном и том же месте $\ln L/k^\nu \approx -2$. При этом на кривых 1, 2 из рис. 2b при $\ln L/k^\nu \approx -4$ заметен небольшой изгиб между двумя прямыми, приближающими ход $\ln\langle G\rangle(\ln L)$. Это связано с тем, что есть еще одна длина корреляции L_{D1}, связанная с долей единичных кондактансов связей. Таким

образом, есть две длины беспорядка, которые могут либо сильно различаться, либо быть сопоставимыми. Изгиба нет для линий с номерами 3–6, участки степенного поведения являются достаточно длинными. По аналогии с поведением перколирующих систем на рис. 1a мы будем говорить о наблюдении в этих случаях неуниверсальных критических индексов проводимости. В целом на рис. 2b наклоны $-n$ приближающих прямых уменьшаются с 4 до 1.2 с ростом номера линии от 1 до 6. Последняя линия отвечает обрезанному распределению $F(x) = 0$ при $x > 0.5$. На ней не виден изгиб при $\ln L/k^\nu \approx -2$, который всегда был при обрезании чисто экспоненциальных распределений. Это объясняется близостью данного обрезанного комбинированного распределения к бинарному. Тем не менее, критический индекс проводимости 1.6 значительно отличается от универсального 1.3. Например, в [9] анализировался случай распределений, в котором проводящие связи имели два очень разных значения контактансов (1 и 10^{-5}). Когда доля высоких контактансов (аналог нашего x_0) увеличивалась, критический индекс проводимости менялся от 1.3 до 1.5 [9].

На рис. 2c мы сравниваем случай комбинированного распределения — кривая 2 с тем же номером, как на рис. 2b, и кривая 1, отвечающая реалистическому распределению кондактансов связей в системе антиточек, состоящему из двух экспонент — медленной и быстрой [5]. Видно, что ход зависимостей $\langle G\rangle(L)$ в этих случаях практически одинаковый. Интересно, что максимальное значение $n \approx 3$ для приближающей зависимости L^{-n} в этих случаях дает по формуле $n = t/\nu$ значение $t \approx 4$. Это близко к экспериментальному значению $\beta = 4$ при степенной подгонке затворной зависимости измеренной проводимости большой решетки антиточек 500×300 узлов [5]. Пока не ясно, насколько случайным или закономерным может быть это совпадение.

1.2 Конечный скейлинг сопротивления и распределение критических x_c

Как известно, картины тока в решетке с экспоненциально большим разбросом сопротивлений связей состоят, подобно решеткам на пороге перколяции, из хорошо выраженных одномерных путей [1, 8, 10, 11]. При небольших L для каждой реализации беспорядка такой путь единственный, хотя является извилистым в своей основной части и разветвленным на входе-выходе решетки. При большом разбросе кондактансов связей проводимость решетки, очевидно, определяется узким местом — элементом с наименьшим кондактансом g_c в неразветвленной части токового пути: $G \approx g_c$ [1]. Соответственно, удельное сопротивление есть $1/G \approx 1/g_c$. Совсем другая ситуация возникает в случае бинарного распределения связей с кондактансами 1, либо 0: сопротивление решетки определяется длиной l этой части извилистого пути (последовательное сопротивление связей, или $1/G \approx l$). Соответственно, проводимость есть $G \approx l^{-1}$. В данном случае методом конечного скейлинга с отбрасыванием непроводящих конфигураций $\{x_i\}$ легко находится $\langle 1/G\rangle \approx \langle l\rangle$. Очевидно, при перколяции $\langle l\rangle$ увеличивается с ростом L, и в расчетах получается поведение $\langle 1/G\rangle \propto L^{t/\nu}$, которое противоположно поведению $\langle G\rangle \propto L^{-t/\nu}$ [6]. Интересно сравнить средние кондактас и сопротивление в решетках с экспоненциально широким распределением $F(x)$. Очевидно, что при расчете $\langle 1/G\rangle(L)$ доминирует вклад малых кондактансов, при этом выборка $\{x_i\}$, реализуемая методом Монте-Карло, может оказаться недостаточно репрезентативной, поскольку события получения очень больших $1/G$ следуют редко, но ведут к большим флуктуациям на зависимости $\langle 1/G\rangle(L)$. Данная трудность не возникает при расчете $\langle G\rangle(L)$ из-за малого вклада слабо проводящих решеток в среднюю проводимость. Мы проверили указанные факты, варьируя в расчетах по Кирхгофу число реализаций беспорядка и обрезающее значение проводимости связей в решетках в диапазоне $10^{-15} - 5 \cdot 10^{-13}$. В итоге было найдено, что расчет $\langle 1/G\rangle(L)$ является надежным, когда минимальные кондактансы связей в распределении $F(x)$ еще не достигают этих предельных значений. На рис. 1a сплошной и пунктирными линиями с общим номером 1 показан результат расчета $\langle G_e/G\rangle(L)$ и $\langle G/G_e\rangle(L)$ для $F(x) = \exp(-35x)$. Видно, что при малых L эти линии хорошо приближаются степенными зависимостями со слегка разными показателями степени. Меньший показатель получился для $\langle G_e/G\rangle(L)$. Мы проверили, что с ростом L эти линии переходят в общую асимптотику $\langle G_e/G\rangle = \ln\langle G/G_e\rangle = \mu^2/2$, $\mu \equiv bk^\nu/L$, $b \approx 0.2$, полученную в [8]. На рис. 3b сплошной линией 1 и пунктирной линией 2 показан результат расчета $\langle G_e/G\rangle(L)$ и $\langle G/G_e\rangle(L)$ для комбинированного распределения $F(x) = 1$ при $x_0 < 0.43$ и $F(x) = \exp(-40(x_0 - x))$. В данном случае G_e определялась как проводимость в пределе большого $L = 500$. Для указанных параметров сопротивление (линия 1) идет гораздо выше проводимости (линия 2), и среднее сопротивление ведет себя при малых L как степенная функция с большим показателем степени.

Чтобы выяснить, насколько закономерным является поведение, которое показано для двух конкретных пар x_0 и k, мы нашли для каждой реализации беспорядка, т.е. вектора $\{x_i\}$, критическую связь, которая определяет проводимость решетки. Напомним, что в теории перколяции поиск предусматривал упорядочение всех связей в порядке убыли ассоциированных с ними значений x_i, удаление всех связей, а затем последовательное восстановление в установленном порядке, начиная с самой проводящей и заканчивая той, при добавлении которой решетка впервые становится проводящей [1]. Завершающий элемент называется

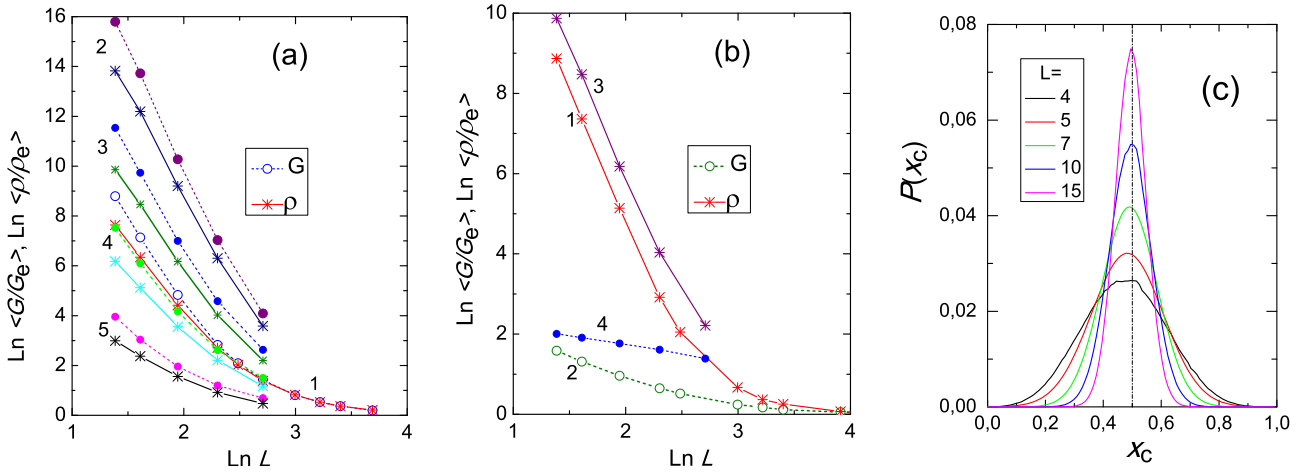


Рис. 3: (a,b) — Зависимости средних удельных сопротивлений (сплошные линии) и средних проводимостей (пунктир) для экспоненциального (a) и комбинированного (b) распределения $F(x)$. Длинные линии 1 в случае $x_0 = 0$, $k = 35$ (a) и 1,2 в случае $x_0 = 0.43$, $k = 40$ — расчет по Кирхгофу; короткие – результат усреднения по реализациям беспорядка проводимости и сопротивления критического элемента решеток. Линии 2–5 в (a) даны для $k = 50, 40, 30, 20$. (c) — Вычисленные универсальные распределения критических $P(x_c)$ для указанных L.

критическим, а отношение числа восстановленных связей к их полному числу в решетке называется критической долей проводящих связей p_c. Для поиска x_c мы реализовали альтернативный алгоритм на основе решения уравнений Кирхгофа и вычисления локального тепловыделения $Q_i \equiv I_i \cdot \Delta V_i$, например, в случае $F(x) = \exp(-kx)$ с умеренным $k = 30$. При этом проводилось упорядочение всех связей по убыли Q_i, т.е. связям присваивались дополнительные номера i_Q. Поскольку при экспоненциально большом разбросе g_i наблюдается точечное тепловыделение [11], довольно часто i_c соответствовал максимальному Q_i. Это проверялось тем, что при удалении всех связей с $x_i \geq x_{i_Q}$ решетка теряла проводимость, но при добавлении элемента с данным Q_i у нее появлялась проводимость соизмеримая с g_{i_Q} и с проводимостью полной решетки G. Если первый элемент из упорядоченного списка Q_i не выдерживал этой проверки, то таким же образом испытывался следующий, и т.д. В итоге находилось критическое значение x_c. Перебором реализаций беспорядка для данного $F(x)$ мы нашли распределение $P(x_c)$ для ряда значений L (рис. 3c) и проверили его универсальность на других распределениях кондактанса связей с монотонно убывающими $F(x)$. Выяснено, что с хорошей точностью $P(x_c)$ является функцией Гаусса, среднеквадратичное отклонение $W \propto L^{-1/\nu}$ и $\langle x_c \rangle$ заметно меньше 0.5 при малых L. Похожим является поведение универсального распределения $P(p_c)$ в теории перколяции, $\langle p_c(L) \rangle > 0.5$ [1].

С помощью найденных $P(x_c)$ вычислены $\langle g(x_c)/G_e \rangle(L)$ и $\langle G_e/g(x_c) \rangle(L)$ для $F(x) = \exp(-kx)$ в случаях $k = 50, 40, 30, 20$. Они показаны на рис. 3a парами пунктирных и сплошных линий за номером от 2 до 5. Видно, что эти линии хорошо приближаются степенными функциями, и соответствующие показатели степени есть $k/5$ и $k/6$, что является проявлением слабой асимметрии $P(x_c)$). Наблюдается неплохое согласие этих показателей с теми, что демонстрирует поведение $\langle G/G_e \rangle(L)$ и $\langle G_e/G \rangle(L)$ при расчете по Кирхгофу (пара линий с общим номером 1 на рис. 3a). С помощью тех же $P(x_c)$ вычислены $\langle g(x_c)/G_e \rangle(L)$ и $\langle G_e/g(x_c) \rangle(L)$ в случае комбинированного распределения $F = 1$ при $x_0 = 0.43$ и $k = 40$. Видно, что результат для среднего сопротивления критических элементов (линия 3) хорошо согласуется с поведением $\langle G_e/G \rangle(L)$, и есть лишь согласие по порядку величины между $\langle g(x_c)/G_e \rangle(L)$ (линия 4) и $\langle G \rangle(L)$ (Рис. 3b). Это связано с тем, что вклад области $x < x_0$ в $\langle G_e/g(x_c) \rangle(L)$ пренебрежимо мал, и соответствующий показатель степени получился практически таким же $k/6$, который был в случае чисто экспоненциального распределения с тем же значением $k = 40$. Напротив, показатель степени для поведения $\langle g(x_c) \rangle(L)$ ниже, чем в случае $\langle G \rangle(L)$, поскольку при расчете этого поведения доминирует область $x < x_0$, где $F(x) = 1$, но кондактанс полной решетки уже значительно меньше проводимости критического элемента. Данный пример показывает, что прогноз проводимости решетки с помощью $P(x_c)$ оправдан лишь при достаточной быстрой убыли $F(x)$, начиная с $x = 0$.

Отметим, что расчет $\langle g(x_c) \rangle(L)$ по $P(x_c)$ дает и для степенных распределений $F(x)$ с $m = 2.5, 3.5, 6$

зависимости L^{-n} с теми же значениями n, как для линий 2–4 на рис. 1а. Это еще раз подсказывает, что экспоненциальные и комбинированные $F(x)$ предлагают новые варианты неуниверсальности критического индекса проводимости.

Заключение

Методом конечного скейлинга исследовано поведение средних по реализациям беспорядка проводимости и удельного сопротивления квадратных решеток с экспоненциально большим разбросом кондактансов связей. Найдено, что при малых размерах решеток L это поведение хорошо приближается степенными зависимостями L^{-n}. Разными способами мы проследили связь обнаруженных зависимостей с явлением перколяции и неуниверсальностью критического индекса проводимости. Расчеты выполнялись с использованием ресурсов Сибирского суперкомпьютерного центра, что поддержано грантом Президента РФ (НШ-10211.2016.8). Мы благодарны А.А. Снарскому и И.В. Безсуднову за обсуждение, а также Д.Г. Бакшееву за помощь в решении задачи.

Список литературы

[1] Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979.

[2] Balberg I. Tunneling and Nonuniversal Conductivity in Composite Materials// Phys. Rev. Lett. l987. V 59. P. 1305-1309; Toker D., Azulay D., Shimoni N., Balberg I., Millo O. Tunneling and percolation in metal-insulator composite materials// Phys. Rev. B. 2003. V 68, P. 041403.

[3] Yakimov A.I., Adkins C.J., Boucher R., Dvurechenskii A.V., Nikiforov A.I., Pchelyakov O.P., Biskupski G. Hopping conduction and field effect in Si modulation-doped structures with embedded Ge quantum dots // Phys. Rev. B. 1999. V 59, P. 12598–12603.

[4] Квон З.Д. Квантовый транспорт в решетках связанных электронных биллиардов// Письма в ЖЭТФ. 2002. Т. 76, С. 619; Dorn A., Ihn T., Ensslin K., Wegscheider W., Bichler M. Electronic transport through a quantum dot network// Phys. Rev. B. 2004. V. 70, P. 205306.

[5] Ткаченко В.А., Ткаченко О.А, Миньков Г.М., Шерстобитов А.А. Перколяция и электрон-электронное взаимодействие в решетке антиточек// Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 104, С. 501–506.

[6] Sen P.N., Roberts J.N., Halperin B.I. Nonuniversal critical exponents for transport in percolating systems with a distribution of bond strengths// Phys. Rev. B. 1985. V. 32, P. 3306.

[7] Octavio M., Lobb C.J. Nonuniversality in two-dimensional percolating systems with a broad distribution of bond conductances// Phys. Rev. B. 1991. V. 43, P. 8233.

[8] Strelniker Y.M., Havlin S., Berkovits R., Frydman A. Resistance distribution in the hopping percolation model// Phys. Rev. E. 2005. V. 72, P. 016121.

[9] Andrade J. S., Ito N., Shibusa Y. Percolation transition in conducting polymer networks// Phys. Rev. B. 1996. V. 54, P. 3910.

[10] Снарский А.А., Безсуднов И.В., Севрюков В.А. Процессы переноса в макроскопических неупорядоченных средах: от теории среднего поля до перколяции: Москва: URSS, 2007.

[11] Ткаченко О.А, Ткаченко В.А. Суперкомпьютерное моделирование полупроводниковых квантовых наносистем// Вычислительные методы и программирование. 2012. Т. 13, С. 253–262.

Ольга Александровна Ткаченко — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института физики полупроводников СО РАН;
e-mail: otkach@isp.nsc.ru;
Виталий Анатольевич Ткаченко — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института физики полупроводников СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: vtkach@isp.nsc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ПРОВЕРКА ПОЛУЧЕНИЯ РЕГУЛЯРНОЙ НАНОРЕШЕТКИ СЛУЧАЙНЫХ СОПРОТИВЛЕНИЙ

В. А. Ткаченко[1,2], О. А. Ткаченко[1]

[1] *Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 004.942+537.311.322-0.22.532+537.213+537.312.7+537.313

Промоделирована недавно сформированная квадратная решетка из отверстий (антиточек) в плотном низкоподвижном двумерном электронном газе. Для небольших фрагментов структуры выполнены расчеты трехмерной электростатики и двумерного транспорта с учетом особенностей изготовления полупроводниковой структуры, технологического и примесного беспорядка. Показано, что профиль электростатического потенциала представляет собой сеть озер, соединенных между собой узкими каналами с кондактансами g_i. Часть этих каналов открыта для прохождения электронов, а часть находится в туннельном режиме $g_i < e^2/h$. На основании этих расчетов построена модель, с помощью которой определялись кондактансы каналов (межузельных связей) в зависимости от температуры T и затворного напряжения V_g. Численным решением системы уравнений Кирхгофа находился кондактанс всей решетки $\sigma(T, V_g)$, который подбором параметров подгонялся к измеренной зависимости. Тем самым решена обратная задача по восстановлению неизвестного распределения кондактансов связей $g_i(T, V_g)$. Показано, что в туннельном режиме проводимость ведет себя в полном согласии с теорией перколяции: $\sigma(T, V_g) = A \cdot (p - 0.5)^t$, где $p(T, V_g)$ — доля проводящих связей. Найденный критический индекс t менялся от стандартного значения 1.3 при $T = 1.4$ K до 3 при более высоких T.

Ключевые слова: нанорешетка, проводимость, уравнения Кирхгофа, обратная задача, распределение кондактансов связей, перколяция, критический индекс проводимости.

Введение

Теории перколяции, т.е. протекания в случайных лабиринтах, которая имеет множество приложений в разных областях науки и техники, исполнилось 60 лет [1]. Решетки случайных сопротивлений, связывающих соседние регулярно расположенные узлы, служат удобными моделями реальных разупорядоченных систем [2, 3, 4]. Транспорт в таких решетках в пределе низкой проводимости описывается теорией перколяции с ее закономерностями, выведенными аналитически, а в более общем случае – численным решением уравнений Кирхгофа. Исследования проводимости некоторых твердотельных материалов и ультра-тонких слоев показывает, что это среды с экспоненциально широким разбросом сопротивлений и неизвестной сложной топологией естественного беспорядка. Более контролируемыми являются искусственные двумерные материалы, изготавливаемые методом нанолитографии. Например, можно получать квадратные решетки электростатических антиточек (малых отверстий) разных периодов и размеров в двумерном электронном газе (ДЭГ) полупроводниковой гетероструктуры [5]. В этом случае основным управляющим параметром является напряжение V_g на затворе, которое меняет плотность ДЭГ и высоты барьеров между соседними антиточками. Наблюдаемые зависимости вида $\sigma \propto (V_g - V_g^*)^\beta$, где V_g^* — пороговое значение появления проводимости, интерпретировались как свидетельство перколяции. При этом предполагалось, что напряжение на затворе линейным образом связано с долей проводящих каналов p. Ранее такие эксперименты делались с решетками антиточек малого субмикронного периода в ДЭГ низкой плотности и большой подвижности. При этом σ падало ниже кванта проводимости e^2/h на порядок и использовались лишь температуры T ниже ~ 0.1 K, а β оказались близки к стандартному значению 1.3 для 2D перколирующих систем [5]. Однако, несмотря на регулярность решеток антиточек, еще нельзя утверждать, что транспорт в этих системах будет адекватно

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 14-22-00143).

моделироваться классическим протеканием через решетку случайных сопротивлений. Так, при низких T в транспорте на размерах больше периода переплетаются явления туннелирования, квантового рассеяния, электрон-электронного взаимодействия, дискретной перезарядки кулоновских островов, классической баллистики и нелокальности сопротивлений [5]. Сочетания разных явлений интересны для исследования, но не позволяют описать систему как решетку со статическими химпотенциалами узлов и фиксированными кондактансами связей, т.е. системой уравнений Кирхгофа. Недавно мы нашли решетку электростатических антиточек, для которой такая имитация оказалась оправданной, благодаря необычному сочетанию искусственных вертикальных и латеральных размеров в твердотельной структуре [6]. Мы проверили регулярность решетки сопротивлений, используя несколько взаимодополняющих подходов к моделированию решетки на микро-, и макроуровнях, в том числе, подгоночным решением обратной задачи на восстановление распределения коэффициентов в уравнениях Кирхгофа из измерений проводимости решетки. Важно, что поведение распределений в пределе низкой проводимости позволило найти существенно нелинейную зависимость доли проводящих связей $p(V_g, T)$ в пределе низкой проводимости решетки σ и проверить предсказания теории перколяции относительно значений пороговой доли связей p_c и критического индекса проводимости t, отвечающего основной формуле теории перколяции $\sigma \propto (p - p_c)^t$. В настоящей работе по сравнению с [6] мы переносим акцент с физики на надежность моделирования реальной структуры.

1 Твердотельная структура и экспериментальный результат

Изучаемая структура схематически показана на рис.1. Основой структуры служит полупроводник из плоских слоев GaAs и AlGaAs, созданный молекулярно-лучевой эпитаксией на подложке GaAs (рис. 1a). Двумерный электронный газ в изучаемом случае находится на большой глубине (200 нм) от поверхности в тонком (8 нм) слое GaAs. Электроны в нем являются результатом ухода от донорных атомов Si из двух атомно-тонких (δ-легированных) слоев, расположенных всего в 6 нм от ДЭГ. Эта близость обеспечивает большую плотность, но низкую подвижность ДЭГ (из-за сильного рассеяния на примесных флуктуациях потенциала). Электронной литографией и реактивно-ионным травлением на поверхности полупроводника был создан искусственный рельеф — квадратная решетка цилиндрических углублений диаметром 700 нм и значительной глубины (100 нм), расположенных с шагом 1000 нм и случайными отклонениями от вершин квадрата до 50 нм (рис. 1b). Данный рельеф заполнен сплошным слоем металла (Al)– он служит затворным электродом, на который подается отрицательное напряжение V_g относительно ДЭГ, отталкивающее электроны [7]. При $V_g \approx -2$ Вольта под цилиндрами возникают отверстия в ДЭГ — антиточки, но в цен-

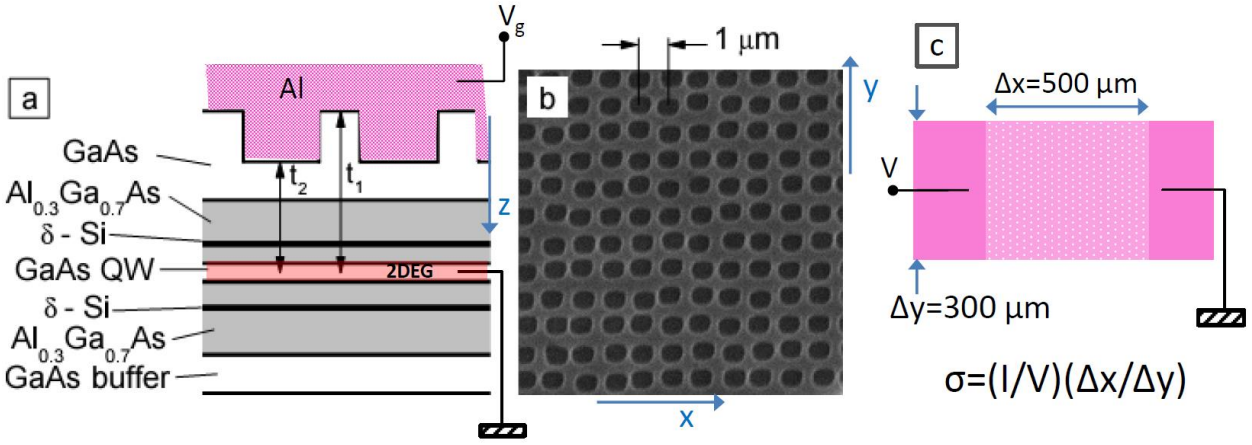


Рис. 1: Схематическое изображение структуры: (a) — вертикальный разрез структуры, между ДЭГ и слоем Al приложено затворное напряжение V_g; (b) — микрография фрагмента поверхности GaAs перед напылением металла, (c) — вид сверху на всю полоску ДЭГ с решеткой антиточек, к которой приложено тянущее напряжение V. Построено по данным из работы [7].

тре полостей между четырьмя соседними антиточками расстояние до металла гораздо больше, и V_g слабо влияет на электронную плотность. Решетка антиточек заполняет прямоугольник 500×300 мкм^2, который

по длинным сторонам граничит с изолятором, а по коротким — с двумя морями ДЭГ — электрическими контактами к решетке (рис. 1c). Между контактами вводится малое тянущее напряжение V и измеряется полный ток I через решетку, т.е. ее проводимость $\sigma = \alpha I/V$ ($\alpha = 1/0.6$ определяется отношением ширины решетки Δy к ее длине Δx).

Основной экспериментальный результат из работы [6] представлен на рис. 2. При переходе к $V_g \approx -3$ В проводимость σ понижается до кванта e^2/h(рис. 2a). При дальнейшем уменьшении значения V_g [6] измеренная проводимость σ демонстрирует падение до $10^{-5}e^2/h$ при температурах от $T = 1.3$ K до 77 K (рис. 2b,c). Доводом в пользу перколяции служит наблюдение простого поведения $\sigma(V_g) \approx A(V_g - V_g^*(T))^\beta$ (рис. 2a), но $\beta = 4$, вместо стандартного значения критического индекса проводимости $t = 1.3$ в 2D решетках. Исходные зависимости $\sigma(V_g)$ и $\sigma(T)$ показаны точками на рис. 2b,c.

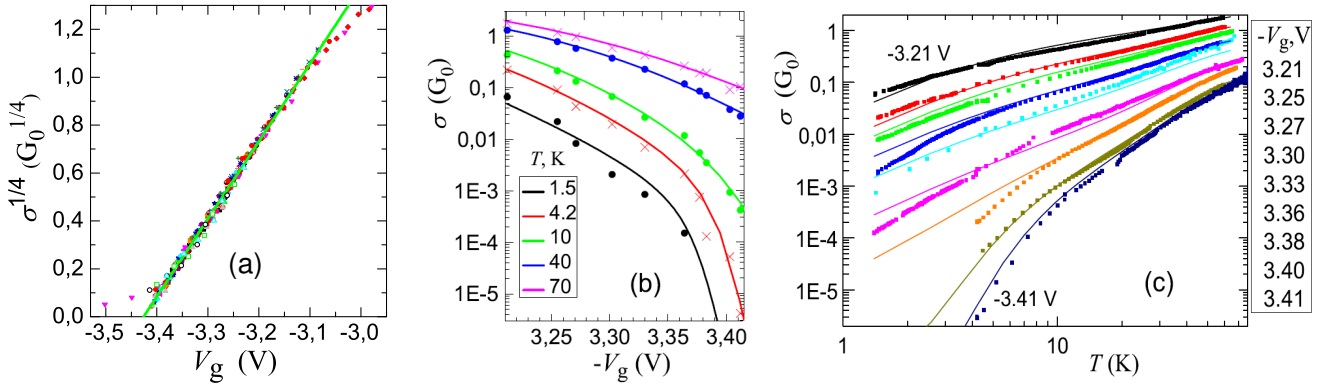


Рис. 2: (a) — Горизонтальным сдвигом совмещены измеренные зависимости $\sigma(V_g)$ (точки) для разных $1.4 < T < 77$ K из (b) и двух образцов. Прямая линия — результат эмпирической подгонки. (c) — измеренные $\sigma(T)$ (точки) при разных V_g. Сплошные кривые — расчет по Кирхгофу.

В данном случае нет теоретически обоснованной формулы, описывающей все поведение при разных T и V_g целиком. Хорошее согласие с экспериментом дает лишь численное моделирование структуры (сплошные линии на рис. 2b,c), о котором сказано ниже.

2 Моделирование системы и численные методы

2.1 Расчет 3D электростатики

Мы выполняем моделирование изучаемой системы на микро- и макроуровнях. Первое подразумевает расчет 3D электростатики небольших фрагментов структуры методом Пуассона-Томаса-Ферми в пределе нулевого тянущего напряжения. Потенциал находился решением 3D уравнения Пуассона

$$\nabla(\epsilon(\mathbf{r})\nabla U(\mathbf{r})) = e\rho(\mathbf{r})/\epsilon_0, \tag{1}$$

где $U(\mathbf{r}) = -e\varphi(\mathbf{r})$ — потенциал дна зоны проводимости в GaAs, φ — электростатический потенциал, $e > 0$ — элементарный заряд, $\epsilon(\mathbf{r})\epsilon_0$ — диэлектрическая проницаемость, $\rho(\mathbf{r})$ — зарядовая плотность, которая самосогласованно находится вместе с $U(\mathbf{r})$.

В ДЭГ $\rho = -en(\mathbf{r})$, где $n(\mathbf{r}) = |\Psi(z)|^2 n_{2D}(x, y)$ — объемная концентрация электронов, выраженная через двумерную плотность в ДЭГ и волновую функцию нижнего уровня с энергией E_0 в тонкой квантовой яме по z. В подходе Томаса-Ферми при заданной T плотность ДЭГ вычисляется в локальном приближении с квазиклассической плотностью 2D состояний:

$$n_{2D}(x, y) = (m^*/\pi\hbar^2)k_B T \ln[1 + \exp((E_F - U_{eff})/k_B T)], \tag{2}$$

где m^* — эффективная масса электрона в GaAs, $U_{eff} = U(z_{QW}, x, y) + E_0$, z_{QW} — положение центра квантовой ямы по z. Уравнение Пуассона решается итерациями циклическим методом Чебышева. Этот подход к моделированию 3D электростатики проверен сравнением со многими экспериментами на разных полупроводниковых наноструктурах с ДЭГ [8, 9, 10]. В данном случае характерное поведение потенциала показано

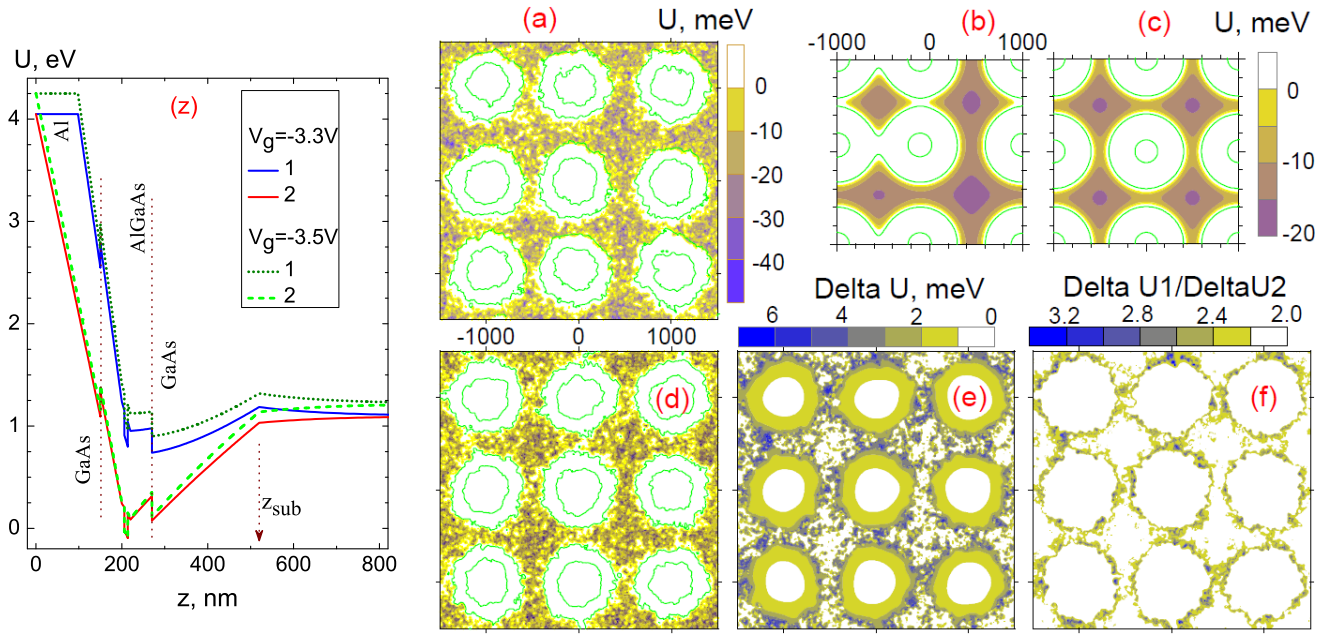


Рис. 3: Примеры поведения потенциала. (z) — Зависимости по z для центра электронного озера (нижние кривые) и для центра антиточки (верхние кривые). Остальные панели — зависимости от (x,y) в ДЭГ в диапазоне V_g от -3.4 В до -3.2 В, две изолинии на (a–d) отвечают $U = 50$ и 500 мэВ: здесь $U = U(z_{QW}, x, y) + E_0$. (a,b) — Имитация технологического беспорядка сдвигом одного горизонтального и одного вертикального рядов антиточек на 50 нм при идеальном расположении в (c,d), в (a) учтен примесный беспорядок. (d,e,f) — Учет лишь примесного беспорядка, в (b,c) им пренебрегается. (a–d,f) — $T = 4.2$K, (e) — $\Delta U = U(60K) - U(4.2K)$, (f) — $\Delta U_1 = U(V_g - 0.1V) - U(V_g)$, $\Delta U_2 = U(V_g - 0.05V) - U(V_g)$.

на рис. 3 ($E_F = 0$ в ДЭГ). Реальная геометрия структуры учитывалась условием на 3D границе металл-полупроводник $U_M = -eV_g + E_g/2$, где $E_g = 1.5$ эВ — ширина запрещенной зоны в GaAs, а также условиями непрерывности нормальной компоненты электрической индукции на гетерограницах GaAs/AlGaAs и условием вмороженности локализованного заряда на границе с подложкой z_{sub} (рис. 3z). Этот отрицательный заряд, определяющий скачок производной dU/dz, был вычислен при $V_g = 0$ по условию $U(z_{sub}) = E_g/2$. Система в целом нейтральна, и положительный заряд слоев легирования имитировался резко неоднородной зависимостью $\rho(x, y)$ из-за случайно расположения ионизованных атомов Si. Сравнением случаев постоянной и неоднородной $\rho(x, y)$ выяснено, что естественный примесный беспорядок играет большую роль. Во-первых, из-за него все каналы между электронными озерами расширяются (рис. 3a,d), поэтому учет технологического беспорядка (рис. 3a) (вариации положения центров вытравленных цилиндров) не разрывает полностью эти каналы. Если же технологический беспорядок учитывался без примесного (рис. 3b), то часть каналов разрывалась. Во-вторых, учет примесного беспорядка дает большие частые флуктуации 2D потенциала и изрезанные ими границы антиточек (рис. 3a,d). Узкие пики этого потенциала над уровнем Ферми присутствуют не только в каналах между электронными озерами, но и в самих озерах. Диффузное рассеяние на этих флуктуациях и границах ведет к малой длине l свободного пробега электрона (по оценке из измерений $l = 30 - 60$ нм). Длительному удержанию в ромбоподобных озерах способствуют высокие узкие пики, которые часто сливаются в тонкий туннельный барьер в межантиточечных сужениях (микроконтактах). В электронной системе нет четких границ между озерами и микроконтактами. Но качественное различие между ними проявляется в том, что 2D потенциал, измеряемый от общего уровня Ферми $E_F = 0$, нелинейно зависит от T и V_g на границах антиточек и в микроконтактах — местах сближениях этих границ, но не внутри озер и антиточек (рис. 3e,f). В данной системе не обнаружено магнитотранспортных резонансов, отвечающих баллистическому обходу электрона вокруг антиточки через четыре сужения в ДЭГ [7]. Благодаря малой длине свободного пробега электрон, влетевший в очередное из четырех электронных озер, окружающих антиточку, успевает полностью релаксировать, прежде чем покинет данное озеро. Следовательно, эффекты нелокальности сопротивления связей между озерами подавлены. Кроме того, характерный размер

озера 1 мкм превышает критический для эффектов дискретной зарядки этих озер при $T \geq 1.4$ K, т.е. каждому озеру можно приписать статический химпотенциал $\mu_n(V_g, T, V)$ [6]. При нулевом тянущем напряжении V электрический ток в решетке отсутствует, а все $\mu_n(V_g, T, 0)$ одинаковы и совпадают с уровнем Ферми E_F.

2.2 Моделирование 2D квантового транспорта в микроконтактах решетки

Следующим шагом в микроуровневом моделировании структуры является изучение двумерного квантового транспорта через микроконтакт при заданном очень малом различии химпотенциалов соединяемых электронных озер. Если пренебречь потерей фазы волновой функции электрона при его пролете через микроконтакт, то моделирование транспорта в подходе Ландауэра сводится к расчету зависимости от энергии электрона полного коэффициента прохождения $\sum_i D_i(E)$ — суммы по всем номерам мод i поперечного квантования в подводящем канале. Пример вычисленных $\sum_i D_i(E)$ показан на рис. 4a. По аналогии с [11] микроконтакт предполагался встроенным без разрывов 2D потенциала в соответствующий многомодовый канал, продолжающий потенциал однородно в обе стороны от сужения, начиная от поперечных сечений, которые считались расположенными в центрах соединяемых озер. Это означает пренебрежение обратным когерентным рассеянием волн, уходящих от сужения за эти сечения, что оправдано из-за быстрой релаксации баллистического электрона в озерах.

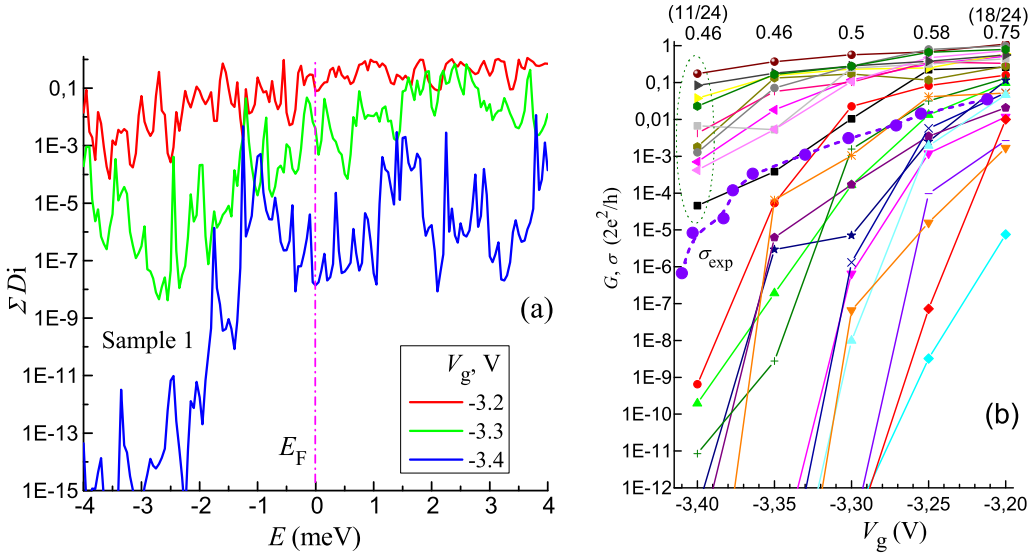


Рис. 4: (a) — Пример зависимости полного коэффициента прохождения $\sum_i D_i(E)$ для одного из микроконтактов при разных V_g. (b) — Зависимости кондактансов $g_{nm}(V_g)$ (точки) для 24 микроконтактов из рис. 3a,d и измеренная $\sigma(V_g)$ при $T = 4.2$ K. Сверху доля случаев с $g_{nm} > \sigma$.

Кондактанс микроконтакта вычислялся по формуле Ландауэра

$$g = (2e^2/h) \int \sum_i D_i(E) F(E - E_F)\, dE, \tag{3}$$

где $F(\epsilon) = 4k_BT/\operatorname{ch}^2(\epsilon/2k_BT)$ учитывает разброс по энергиям электрона в распределении Ферми. Ее работоспособность при описании экспериментов с разными квантовыми наноструктурами неоднократно проверена [8, 9, 10]. В данном случае по этой формуле для некоторых V_g и T определялся кондактанс каждого из 24 микроконтактов при разных реализациях примесного беспорядка из рис. 3a,d. Найденные кондактансы показаны на рис. 4b. Из-за сильного рассеяния электрона на примесных флуктуациях и усреднения $\sum_i D_i(E)$ по распределению Ферми эти кондактансы меньше, чем квант $2e^2/h$, хотя в выборке присутствуют открытые микроконтакты. Этим расчетом найдено, что возле порога измеренной проводимости решетки σ примерно половина микроконтактов имеет кондактанс выше/ниже, чем σ (рис. 4b), что соответствует предсказанию для квадратных решеток сопротивлений, имеющих экспоненциально сильный разброс [4].

2.3 Решетка случайных сопротивлений: решение уравнений Кирхгофа и перколяция

Законы Кирхгофа, записанные для решетки сопротивлений, связывают разность химпотенциалов в соседних узлах m, n или падение тянущего напряжения на каждой межузельной связи с кондактансом этой связи и током через связь:

$$\mu_m(V_g,T,V) - \mu_n(V_g,T,V) = I_{mn}(V_g,T,V)/g_{mn}(V_g,T). \quad (4)$$

Кроме того, сумма втекающих в узел токов с учетом знака равна нулю, а химпотенциалы на крайних справа и слева рядах узлов определяются тянущим напряжением на решетке V. В нашем случае технически трудно выполнить реалистическое моделирование каждой связи полной решетки 300×500 узлов для широкого набора значений V_g, T. Поэтому кондактансы связей g_{mn} находились по формуле Ландауэра для упрощенных моделей потенциала в микроконтактах и нормировались на квант проводимости $2e^2/h$. При условии $g_{mn} < 10^{-15}$ они принимались равными 10^{-15} (расчеты с двойной точностью). Значения некоторых параметров, характеризующих потенциал, могли свободно варьироваться в физически допустимых пределах. Для разных упрощений реального потенциала мы методом проб и ошибок искали значения этих параметров, надеясь получить решением уравнений Кирхгофа проводимость решетки близкую к измеренной $\sigma(V_g,T)$. Заметим, что это не получилось с помощью наиболее простых моделей квазиодномерного потенциала микроконтакта в ДЭГ, например, седлового $U(x,y) = (m/2)(-\omega_x^2 \cdot x^2 + \omega_y^2 \cdot y^2)$. При упрощении реального 2D потенциала с примесными флуктуациями до квазиодномерного важно было найти простейшую имитацию влияния этих флуктуаций на кондактанс микроконтакта. Прежде всего (рис. 4a) они давали межмодовое смешивание, что вело к сильному обратному рассеянию электрона даже при его классически разрешенном прохождении через микроконтакт, а в туннельном режиме контактанс микроконтактов оставался вполне измеримым на значительном интервале V_g. Физически адекватную имитацию подсказывает наличие в некоторых случаях тонких барьерных стенок разделяющих соседние электронные озера (рис. 3a,d). Основой двух найденных успешных моделей с составным продольным потенциалом (узкий барьер на фоне широкого) были следующие допущения:

- рельеф 2D потенциала $E_0(x,y)$ во всей системе задан простыми формулами, как сумма антиточечных аксиально-симметричных потенциалов $U(r,V_g)$ — они определяют глубину ямы в электронных озерах (здесь беспорядком пренебрегается) и высоту широкого барьера между озерами V_{mn}, а дистанция между соседними антиточками варьируется случайным образом в пределах ± 50 нм от средней, что задает беспорядок в V_{mn};
- поверх широкого барьера высоты V_{mn} для учета влияния примесного флуктуационного потенциала и эффектов электрон-электронного взаимодействия [6] задается узкий параболический барьер по x с параметрами $\hbar\omega_x$ и $V_0(1 + aT^{-1/2})$, квант поперечного движения $\hbar\omega_y$ принят одинаковым;
- в первой модели из условий независимости полного числа электронов от T, емкости центра электронного озера от V_g найдено положение уровня Ферми $E_F(V_g,T)$ [9];
- во второй модели положение E_F считалось фиксированным, но учтено, что высота барьеров при больших T увеличивается, а зависимости V_{mn} и V_0 от V_g не являются линейными [6].

При подгонке вычисленной проводимости к измеренной некоторые значения параметров в этих двух моделях получились различными, особенно это относится к высоте широкого барьера, которая в первой модели оказалась меньше, чем во второй, но качество подгонки проводимости решетки было почти одинаковым. Численные (модель 2) и измеренные кривые показаны рис. 2b,c. Видно, что все вычисленные кривые при общем для них (оптимальном) наборе значений параметров модели хорошо идут по экспериментальным. То же самое относилось и к первой модели (рис. 10 из [9]). Важно, что найденные распределения кондактансов связей при данных V_g, T оказались в двух моделях сходными. Примеры соответствующих зависимостей для второй модели показаны на рис. 5x (для первой модели рис. 21 [10]). Упорядоченные по величине кондактансы g_{mn} в зависимости от величины $x = N/N_{tot}$, где N — номер связи в порядке понижения кондактанса, являются довольно простыми кривыми. При низких T распределение $g_{mn}(x)$ на отрезках $(0,x_0)$, $(x_0,1)$, где $x_0(V_g) < 0.5$, можно приблизить экспонентами $\exp(-k_1 x)$ и $\exp(-k_1 x_0 - k_2(x - x_0))$ с $k_2(T) >> k_1(T)$. Заметим, что x_0 отвечает совпадению уровня Ферми с высотой широкого барьера V_{mn} при средней дистанции между антиточками. Фактически подгонкой мы решали не только обратную задачу на восстановление коэффициентов в уравнениях Кирхгофа, но и задачу на восстановление неизвестных значений и функций в формуле Ландауэра, определяющей кондактанс туннельных микроконтактов решетки.

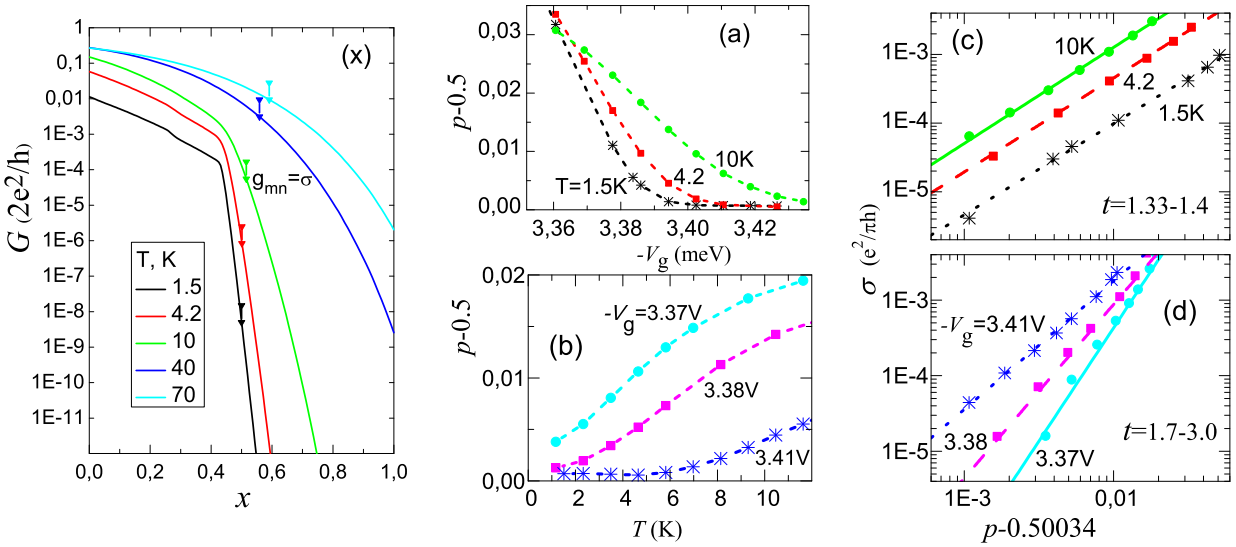


Рис. 5: (x) — Распределения кондактансов микроконтактов $g_{mn}(x)$ для разных T, $x = N/N_{tot}$, N — номер микроконтакта в порядке убыли g_{mn}. Стрелки указывают на значения $p = x$, при которых $g_{mn} = \sigma$. (a,b) — Зависимости доли проводящих связей $p(V_g)$ при разных T и $p(T)$ при разных V_g. (c,d) — Зависимости вычисленной $\sigma(p)$ при разных T и разных V_g. Указаны значения t, отвечающие наклонам прямых.

Мы нашли, что результаты решения первой задачи относительно устойчивы, а у второй задачи существенно зависят от модели. Тем не менее, без поиска упрощенных, но физически адекватных моделей квантового микроконтакта, решение первой задачи являлось бы феноменологией, которая далека от реальности.

В рамках второй модели микроконтактов мы довели расчеты транспорта в реальной решетке 300×500 узлов до вычисления доли проводящих связей p (рис. 5x). При повышенных σ распределение $g_{mn}(x)$ является плавным и не очень широким, в этом случае четкое деление связей на проводящие/непроводящие не имеет смысла. Однако при низких σ долю проводящих связей $p(T, V_g)$ можно найти по условию $g_{mn}(x) > \sigma$. Данное условие согласуется с применением теории перколяции к решеткам с экспоненциально широким распределением $g_{mn}(x)$. Согласно этой теории, существует критический элемент с номером N_c, что для всех $N > N_c$ можно положить $g_{mn} = 0$, не меняя существенно проводимость решетки, а удаление и этого элемента зануляет проводимость [4]. Из-за зависимостей $x_0(V_g)$ и $k_2(T)$ условие $g_{mn}(x) > \sigma$ преодолевается все большим числом связей с повышением T или уменьшением обедняющего $-V_g$ (рис. 5a,b). При наиболее низких σ найденное значение p оказалось с большой точностью равным порогу перколяции $p_c = 0.5$ в квадратных решетках, как и должно быть согласно предсказанию для больших решеток с экспоненциально широким разбросом кондактанса связей [4]. Найдено, что если $V_g \to V_g^*$, то $p \to 0.5 + \delta$, где δ очень малая ($3 \cdot 10^{-4}$) поправка, которая возникает при перколяции для конкретной реализации беспорядка из-за конечного размера решетки. В таком случае проводимость ведет себя как $\sigma = A(p - 0.5 - \delta)^t$. Оказалось, что критический индекс проводимости t близок к стандартному значению 1.3 при фиксированных низких T, когда p меняется вместе с V_g (рис. 5c). Однако t не является универсальным [12], и в данном случае зависит от выбора фиксированного V_g возле порога, когда p меняется вместе с T (рис. 5d). Непостоянство t и отличие от $\beta = 4$ объясняется нелинейностью и различием зависимостей $p(V_g)$ при разных низких T (рис. 5a,b). Видно, что в этих зависимостях при полиномиальном приближении исчезает линейный член в пределе $p \to 0.5 + \delta$. Поэтому эмпирическая зависимость $\sigma \approx B(V_g - V_g^*(T))^\beta$ имеет другую степень, нежели вычисленная $\sigma = A(p - p_c)^t$.

Есть еще важные различия этих зависимостей. Первая из них охватывает всю моделируемую в рамках законов Кирхгофа область шириной 0.2 В по V_g, пять порядков от e^2/h по σ и $1.4 < T < 77$ К (рис. 2a). В то же время область применимости теории перколяции, которая показана на рис. 5a–d, ограничена условием $\delta p = p/p_c - 1 << 1$. В нашем случае $\delta p < 0.1$. Мы проверили, что за пределами этой области расчеты из уравнений Кирхгофа согласуются с приближением эффективной среды, по которому σ_e находится из условия на среднюю величину $\langle(\sigma_e - g_{mn})/(a\sigma_e + g_{mn})\rangle = 0$, где $a = 1$ соответствует случаю 4-х ближайших соседей.

Заключение

С помощью нескольких взаимодополняющих моделей и теории перколяции проверено, что экспериментально изученная решетка антиточек в двумерном электронном газе большой плотности и низкой подвижности является квадратной решеткой случайных сопротивлений. Ее узлы — это электронные озера в каждой элементарной ячейке, имеющие при заданном тянущем напряжении статические химпотенциалы, а связи — микроконтакты между соседними озерами, характеризуемые квантовомеханическим кондактансом независимо друг от друга.

Мы признательны Г.М. Минькову и А.А. Шерстобитову за обсуждение и возможность использования экспериментальных данных, а также Д.Г. Бакшееву за помощь в расчетах. Часть расчетов выполнена на кластере НКС-30Т Сибирского суперкомпьютерного центра и поддержана грантом Президента РФ (НШ-10211.2016.8).

Список литературы

[1] Broadbent S.R., Hammersley J.M. Percolation processes I. Crystals and mazes// Proc. Camb. Phil. Soc. 1957. Vol. 53. P. 629-641.

[2] Kirkpatrick S. Percolation and Conduction// Rev. Mod. Phys. 1974. Vol. 45. P.574-588.

[3] Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка (Библиотечка «Квант», вып.19) М.: Наука, 1982, 176.

[4] Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979.

[5] Квон З.Д. Квантовый транспорт в решетках связанных электронных биллиардов// Письма в ЖЭТФ. 2002. Т. 76, С. 619; Dorn A., Ihn T., Ensslin K., Wegscheider W., Bichler M. Electronic transport through a quantum dot network// Phys. Rev. B. 2004. V. 70, P. 205306.

[6] Ткаченко В.А., Ткаченко О.А, Миньков Г.М., Шерстобитов А.А. Перколяция и электрон-электронное взаимодействие в решетке антиточек// Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 104, С. 501–506.

[7] Minkov G.M., Sherstobitov A.A., Germanenko A.V., Rut O.E. Weak localization in $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ heterostructures with electrostatically induced random antidot array// Phys. Rev. B. 2008. V. 78, P. 195319.

[8] Ткаченко О.А., Ткаченко В.А., Квон З.Д., Латышев А.В., Асеев А.Л. Интроскопия квантовых наноэлектронных устройств //Российские нанотехнологии. 2010. Т.5. С.117-127.

[9] Ткаченко О.А, Ткаченко В.А. Суперкомпьютерное моделирование полупроводниковых квантовых наносистем// Вычислительные методы и программирование. 2012. Т. 13, С. 253–262.

[10] Ткаченко В.А., Ткаченко О.А. От субмикронных квантовых проводников к графеноподобной решетке: эксперименты и моделирование// Труды первой ежегодной национальной конференции по нанотехнологиям, наноматериалам и микросисиемной технике. Novosibirsk State Technical University. 2016. P.67–80, ISBN 978-5-7782-2849-8.

[11] Ткаченко В.А., Быков А.А., Бакшеев Д.Г., Ткаченко О.А., Литвин Л.В., Латышев А.В., Гаврилова Т.А., Асеев А.Л., Портал Ж.К. Одноэлектронная зарядка треугольных квантовых точек кольцевого интерферометра// ЖЭТФ. 2003. Т. 124, С.351.

[12] Sen P.N., Roberts J.N., Halperin B.I. Nonuniversal critical exponents for transport in percolating systems with a distribution of bond strengths// Phys. Rev. B. 1985. V. 32, P. 3306.

Виталий Анатольевич Ткаченко — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института физики полупроводников СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: vtkach@isp.nsc.ru;
Ольга Александровна Ткаченко — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института физики полупроводников СО РАН;
e-mail: otkach@isp.nsc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ПРОГНОЗ ЗАТВОРНО-УПРАВЛЯЕМОГО ПОВЕДЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ИСКУССТВЕННОГО ГРАФЕНА

О. А. Ткаченко[1], В. А. Ткаченко[1,2]

[1] *Институт физики полупроводников им. А.В.Ржанова СО РАН, 630090, Новосибирск*
[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 004.942:537.311.322-0.22.532:537.29+538.911:530.145

Дан численный прогноз затворно-управляемого поведения оптимизированной трехмерной структуры металл-изолятор-металл-GaAs/AlGaAs с графеноподобной решеткой антиточек, которая может стать первой реализацией электростатического двумерного кристалла. Самосогласованным решением задач трехмерной электростатики и двумерной квантовой механики в приближении Пуассона-Хартри показано, что интервалы по затворному напряжению, отвечающие прохождению плоских зон, растягиваются, а запрещенной зоны сжимаются практически в точку. Обычная связь полной, геометрической и квантовой емкости нарушается из-за неоднородности электрических полей. Емкость в зависимости от затворного напряжения демонстрирует узкие провалы и пики, коррелирующие с щелями и минизонами. Дираковские особенности в плотности состояний остаются хорошо выраженными и сохраняют на затворной зависимости характерный V-образный вид, что важно для идентификации в эксперименте.

Ключевые слова: графеноподобная решетка, численное моделирование, приближение Хартри, затворные характеристики, плотность состояний, квантовая емкость.

Введение

Принципиальная возможность создания полупроводниковых двумерных сверхрешеток обсуждается уже четверть века, но, несмотря на множество экспериментов, высококачественный 2D периодический потенциал, который дал бы минизонные эффекты, еще не получен (ссылки в [1, 2]). Для преодоления технологических и физических препятствий требовалось опережающее реалистическое моделирование, а оно сделано лишь совсем недавно в связи с ростом интереса к графеноподобным системам. На основе суперкомпьютерных расчетов предложена оптимальная 3D твердотельная структура с затворно-индуцированной графеноподобной решеткой антиточек, которая может стать первой реализацией электростатического 2D кристалла [2]. В приближениях Хартри для оптимизированной структуры со строгим порядком и Томаса-Ферми с учетом слабого остаточного беспорядка получены подобные зависимости плотности состояний от энергии. Последние содержали искомые минизоны, минищель и V-образную бесщелевую дираковскую особенность, но зависимости *от энергии* электрона в данном диапазоне (∼1 мэВ) — это совсем не то, что можно легко измерить.

Чтобы поставить успешный эксперимент, необходим еще прогноз поведения зависимостей от *управляющего напряжения* на затворном электроде, которые можно измерить, почти не возмущая электронную систему. В данной работе мы численно исследуем, как зависят зонный спектр, число электронов в элементарной ячейке, плотность состояний на уровне Ферми и емкость графеноподобной электронной системы от затворного напряжения. Пренебрегая беспорядком, мы сопоставляем методы Томаса-Ферми (Т-Ф) и Хартри. При таком условии было найдено [2], что в окрестности экспериментально интересной второй дираковской точки эти методы дают очень похожие 2D потенциалы и зависимости плотности состояний от энергии электрона. Однако при одном и том же затворном напряжении метод Т-Ф дает немного меньшую по сравнению с методом Хартри 2D плотность электронов, и зонный спектр в приближении Т-Ф слегка сдвинут вверх по энергии относительно спектра по Хартри. Здесь мы показываем, что этот сдвиг существенно зависит от напряжения на затворе и может менять знак. Это связано с тем, что затворные зависимости особенностей

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 14-22-00143).

плотности состояний являются плавными в приближении Т-Ф, но демонстрируют резко неравномерный ход в приближении Хартри. Так, интервал напряжений, отвечающий прохождению плоских зон, найденных по Хартри, растягивается из-за пиннинга (фиксации) на уровне Ферми. В то же время интервал напряжений, отвечающий межминизонной щели, схлопывается, а дираковские особенности сужаются. На шкале напряжений пропорции меняются в соответствии с плотностью состояний, и относительная ширина щелей и дираковских особенностей оказывается во много раз меньше, чем на энергетическом спектре. Соответственно, возникают узкие провалы полной емкости в щели и в дираковских особенностях. В провалах эта емкость оказывается гораздо меньше геометрической и определяется в основном квантовой емкостью системы. Тем не менее, простая связь полной, геометрической и квантовой емкостей в этих провалах теряется, поскольку изучаемая электронная система является существенно неоднородной, в отличие от полупроводникового двумерного электронного газа (ДЭГ) [3, 4, 5], углеродной нанотрубки [6] и графена [7], где эта связь хорошо работала.

1 Моделируемая твердотельная структура

В нашей модели предполагается, что электронная система создается двумя затворами в нелегированной гетероструктуре с квантовой ямой AlGaAs/GaAs/AlGaAs [2]. Отсутствие легирования является условием подавления наиболее опасных (примесных) флуктуаций потенциала [8, 9]. Нижний из металлических затворов имеет треугольную решетку круглых отверстий. Элементарная ячейка такой латерально периодической решетки является ромбом (рис. 1). Возможность формирования почти периодического рельефа нанолитографией показана в [10]. Между затворами и на свободной от металла поверхности полупроводника находится тонкий слой диэлектрика. Постоянство его толщины обеспечивается методом атомно-слоевого нанесения. Предполагается, что на перфорированный затвор подается притягивающее напряжение. Оно формирует

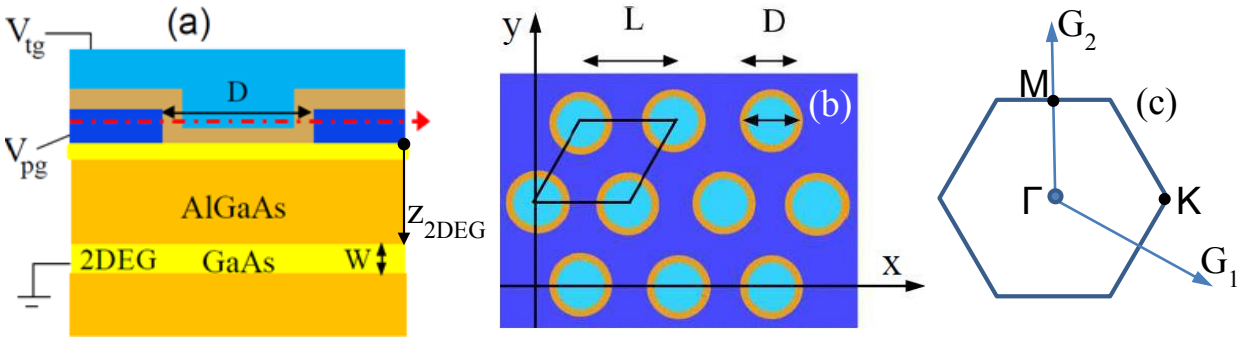


Рис. 1: (a,b) — Схематическое изображение структуры в разрезе по вертикали и в плоскости обозначенной штрих-пунктирной стрелкой. К затвору на поверхности полупроводника приложено напряжение V_{pg}, а к верхнему затвору — V_{tg}. Ромб в (b) — элементарная ячейка решетки. (c) — Изображение зоны Бриллюэна.

электронную решетку в квантовой яме, расположенной ниже на z_{2DEG}, чем поверхность полупроводника. На сплошной верхний затвор подается отталкивающее напряжение. Силовые линии электрического поля от этого затвора, проходя через отверстия в нижнем затворе, формируют антиточки – относительно небольшие электростатические барьеры в ДЭГ. Ниже расчеты выполнены для следующих параметров: период решетки $L = 130$ нм, диаметр отверстий в затворе $D = 60$ нм, расстояние между затворами или толщина диэлектрика $d = 5$ нм, толщина перфорированного затвора $h = 20$ нм и расстояние от поверхности полупроводника до границы двумерного газа $z_{2DEG} = 37$ нм. Оптимизация параметров структуры проведена в [2]. Там же проверено, что существенные отклонения от этих параметров разрушают минизоны при реалистическом уровне ошибок ($<$3 нм) в диаметре и расположении отверстий. То же самое происходит в случае использования квантовых точек вместо антиточек, даже при полной оптимизации структуры [11, 12]. Следовательно, кроме указанного варианта параметров, пока не видно возможностей создания полупроводникового искусственного графена. Затворные зависимости для него мы будем вычислять в предположении гексагональной симметрии структуры, поскольку учет беспорядка резко осложняет применение метода Хартри.

2 Методы моделирования

Поведение электрического потенциала $\phi(x,y,z)$ вне металла подчиняется 3D-уравнению Пуассона: $\nabla\epsilon\nabla\phi = en/\epsilon_0$, где $n(x,y,z)$ — объемная концентрация электронов в двумерном газе, ϵ — диэлектрическая проницаемость материала, ϵ_0 — электрическая постоянная, e — элементарный заряд ($e>0$). В уравнении Пуассона удобно перейти к потенциальной энергии электрона $U=-e\phi$: $\nabla\epsilon\nabla U = -n(\boldsymbol{r})e^2/\epsilon_0$. Мы считаем, что U совпадает с дном зоны проводимости в GaAs, а уровень Ферми в нижнем затворе совпадает с центром запрещенной зоны поверхностного защитного слоя GaAs. Следовательно, необходимо подать критическое напряжение на этот затвор ($eV^*_{pg} > E_g/2 = 0.75$ eV), отвечающее появлению затворно-индуцированного ДЭГ [8]. На верхний затвор, напротив, подается отталкивающее напряжение $eV_{tg} < E_g/2$. Соответственно, потенциалы на двух затворах задаются как $U_{pg} = -eV_{pg} + E_g/2$, $U_{tg} = -eV_{tg} + E_g/2$. На боковых плоских поверхностях, ограничивающих область расчетов, ставятся периодические гранусловия. Нулевыми предполагаются производные потенциала U по нормали к нижней плоской границе области расчетов (условие нейтральности структуры). Условие на границе полупроводник-диэлектрик состоит в непрерывности нормальной компоненты вектора электрической индукции. В подходе Т-Ф электронная концентрация в уравнении Пуассона вычисляется в локальном приближении по двумерной квазиклассической плотности состояний:

$$n(\boldsymbol{r}) = \Psi(z)^2 n_{2D}(\boldsymbol{\rho}) = \Psi(z)^2 \frac{m^*}{\pi\hbar^2}\left[E_F - U_{\text{eff}}(\boldsymbol{\rho})\right]. \tag{1}$$

Здесь $\Psi(z)$ — волновая функция основного состояния в квантовой яме по z, $\boldsymbol{\rho} = (x,y)$, E_F — уровень Ферми в ДЭГ, U_{eff} — эффективный самосогласованный потенциал, $m^* = 0.067m_e$ — эффективная масса электрона в GaAs. Для удобства расчетов мы считали, что ДЭГ находится в квантовой яме толщиной 16 нм. Уровень в такой яме находится на высоте 0.02 эВ от дна ямы. Соответственно, эффективный потенциал есть $U_{\text{eff}} = U(x,y,z_{2DEG}) + 0.02$ эВ.

По данному U_{eff} решалось 2D уравнение Шредингера для электронов, в том числе, в подходе Хартри при самосогласованных расчетах потенциала и зонного спектра:

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m^*} + U_{\text{eff}}(\boldsymbol{\rho})\right)\psi(\boldsymbol{\rho}) = E\psi(\boldsymbol{\rho}) \tag{2}$$

где $\boldsymbol{p} = (p_x, p_y)$ — оператор импульса. Базовые вектора в зоне Бриллюэна приняты следующими: $\boldsymbol{G}_1 = \frac{2\pi}{L}(1, -1/\sqrt{3})$, $\boldsymbol{G}_2 = \frac{2\pi}{L}(0, 2/\sqrt{3})$, $\boldsymbol{G}_3 = \boldsymbol{G}_1 + \boldsymbol{G}_2$, L — период.

Для решения уравнения (2) мы подставляем волновую функцию ψ в форме

$$\psi^Z_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{m,n} c^Z_{m,n}(\boldsymbol{k})\psi_{m,n}(\boldsymbol{\rho}), \quad \psi_{m,n}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{\sqrt{S}}\exp\{i(\boldsymbol{k} + m\boldsymbol{G}_1 + n\boldsymbol{G}_2)\cdot\boldsymbol{\rho}\}, \tag{3}$$

где S — площадь элементарной ячейки образца. Волновые функции нормируются как $\int_S d\boldsymbol{\rho}\,\psi^*_{m',n'}(\boldsymbol{\rho})\psi_{m,n}(\boldsymbol{\rho}) = \delta_{m',m}\delta_{n',n}$, $\int_S d\boldsymbol{\rho}\left(\psi^{Z'}_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{\rho})\right)^*\psi^Z_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{\rho}) = \delta_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}\delta_{Z',Z}$. Умножая уравнение (2) на $\psi^*_{m',n'}(\boldsymbol{\rho})$ и выполняя интегрирование по $\boldsymbol{\rho}$, получаем уравнение в импульсном представлении:

$$\frac{\hbar^2(\boldsymbol{k} + m\boldsymbol{G}_1 + n\boldsymbol{G}_2)^2}{2m}c^Z_{m,n}(\boldsymbol{k}) + \sum_{m',n'} U_{(m,n),(m',n')}c^Z_{m',n'}(\boldsymbol{k}) = E^Z(\boldsymbol{k})c^Z_{m,n}(\boldsymbol{k}), \tag{4}$$

где Z — номер зоны и

$$U_{(m,n),(m',n')} = \int d^2\rho\,\psi^*_{m,n}(\boldsymbol{\rho})U_{\text{eff}}(\boldsymbol{\rho})\psi_{m',n'}(\boldsymbol{\rho}). \tag{5}$$

Линейная система уравнений (4) решается как задача на собственные значения численно. Таким образом, по найденным $U_{(m,n),(m',n')}$ и для дискретного набора волновых чисел $\boldsymbol{k}$ вычисляется зонный спектр $E^Z(\boldsymbol{k})$. В методе Хартри 2D концентрация электронов находится численным интегрированием по подзонам, частично или полностью занятым электронами:

$$n_{2D}(\boldsymbol{\rho}) = 2\sum_{E^Z<E_F}\int\frac{d^2k}{(2\pi)^2}|\psi^Z_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{\rho})|^2. \tag{6}$$

Эта модель является адаптацией полуаналитического подхода Хартри, описанного в [2], к реалистическому моделированию структуры.

3 Результаты

На рис. 2a,b показан пример зонной структуры, вычисленной по формулам (2)–(5) для потенциалов, полученных в подходе Хартри с использованием (6), либо в приближении Т-Ф с использованием (1). Жирными точками отмечены положения энергии электрона в Γ и K точках зоны Бриллюэна, за поведением которых мы следим при изменении V_{pg} и фиксированном V_{tg} (рис. 2c,d). Номера j и j' отвечают дну и потолку каждой минизоны. Кривые с $j = 1', 2$, $j = 4', 5$ отвечают первой и второй дираковским точкам, а случаи $j = 3$, $j = 3'$ отвечают, соответственно, K- и Γ-точкам в узкой третьей минизоне, которые разделены примерно на 0.1 мэВ.

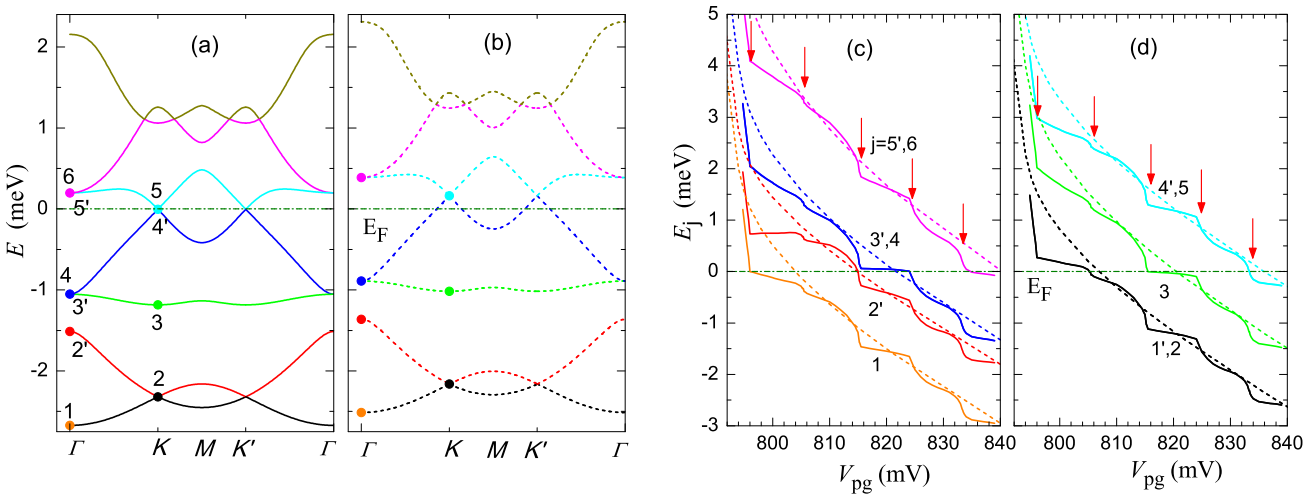


Рис. 2: (a,b) –Зонный спектр решетки при оптимальных напряжениях ($V_{pg} = 0.833$ В, $V_{tg} = 0.48$ В), отвечающих наибольшей ширине второй дираковской особенности и ее совмещению с уровнем Ферми $E_F = 0$. Сплошные линии — расчет по Хартри, пунктир — по потенциалу Томаса-Ферми. Кружочками и номерами отмечены нижние (j) и верхние (j') края зон, зависимость которых от V_{pg} показана на (c) для Γ-точек и на (d) для K-точек зоны Бриллюэна. Стрелки указывают положение изломов на кривых, вычисленных по Хартри.

Кривые $E_j(V_{pg})$, найденные по Хартри, имеют резкий излом в момент появления электронов в двумерном газе ($E_1 = E_F$) и далее имеют ступенчатый вид. Плоские участки по напряжению связаны с пиннингом зон с высокой плотностью состояний на уровне Ферми. Это особенно относится к третьей подзоне. Интересно, что щель между второй и третьей зонами в зависимостях по затвору отсутствует: при $V_{pg} = 0.815$ В потолок второй зоны (Γ-точка) еще чуть выше уровня Ферми, а при $V_{pg} = 0.8155$ В дно третьей зоны (K-точка) уже ушло под уровень Ферми, из-за этого кривые $2'$ и $3'$ не идут параллельно, а почти касаются друг друга в этом месте. При этом эффективный потенциал, как и зонный спектр, углубляется скачком примерно на 0.35 мэВ, что отвечает ширине запрещенной зоны. Отношение этого углубления к соответствующему изменению $e\Delta V_{pg}$ с хорошей точностью равно единице и совпадает с $-dE_j/edV_{pg}$ на участке $V_{pg} < 0.796$ В, где еще не было электронов в решетке. Это совпадение связано с тем, что фактически в щели можно решать уравнение Лапласа вместо уравнения Пуассона, поскольку плотность электронов в ДЭГ не меняется, а заряды на затворах лишь слегка перераспределяется.

Разумеется, никаких особенностей по затворному напряжению не может быть при расчете по Томасу-Ферми, поскольку при вычислении потенциала используется квазиклассическая 2D плотность состояний (нет самосогласованного решения задач 3D электростатики и 2D квантовой механики). В этом расчете любые характеристики энергетического спектра, в том числе щели, практически в той же форме проявляются и на затворных зависимостях. Отметим, что при появлении электронов в плоскости ДЭГ экранировка меняется резче в подходе Хартри, чем по Томасу-Ферми. Различие методов проявляется еще и в том, что плотность, определяемая по формуле (1), становится ненулевой при $V_{pg} = 0.793$ В, т.е. электроны в плоскости ДЭГ появляются раньше, чем по Хартри (рис. 3a). Но Γ-точка первой подзоны, рассчитанной по эффективному потенциалу, пересекает уровень Ферми при $V_{pg} = 0.804$ В, т.е. позже, чем по Хартри (рис. 2c).

Интересно, что на всем интервале изменения V_{pg} высоты барьеров эффективного потенциала $U_{\text{eff}} - E_F$

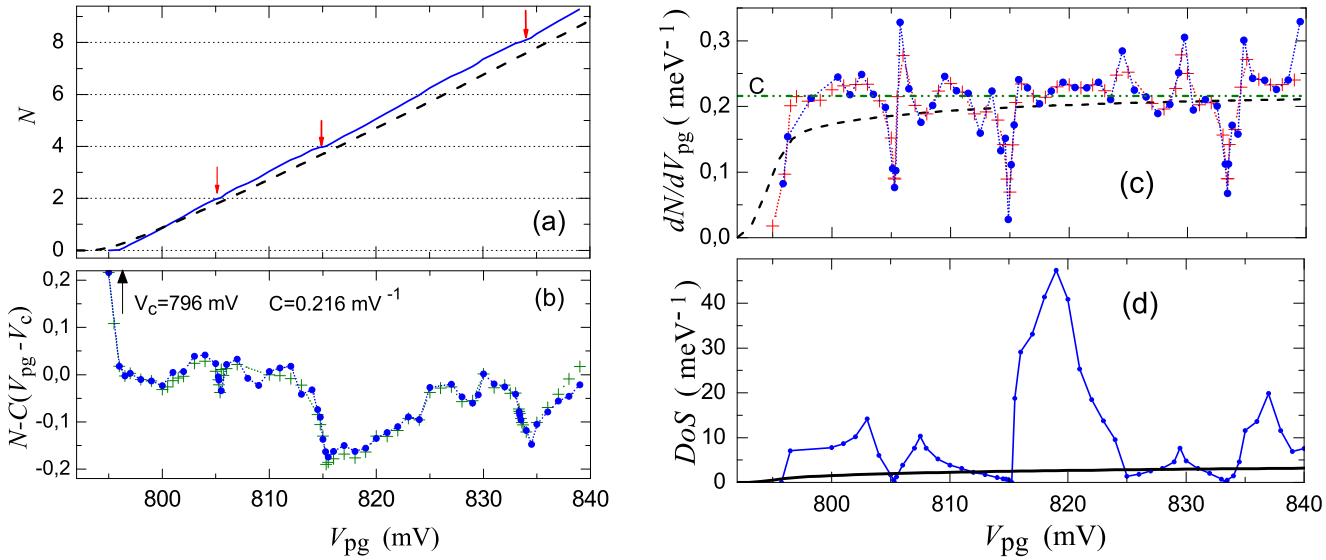


Рис. 3: (a) — Зависимость числа электронов в элементарной ячейке решетки от V_{pg} при $V_{tg} = 0.48$ В. Сплошная линия — расчет по Хартри, пунктир — по потенциалу Т-Ф. (b) — Отклонение $N(V_{pg})$ в приближении Хартри от наиболее близкой прямой линии $C(V_{pg} - V_c)$. Точки и крестики отвечают двум вариантам дискретизации плотности в подходе Хартри. (c) — Два варианта численной производной dN/dV_{pg} для одной из кривых, показанных в (b); емкость dN/dV_{pg} в приближении Т-Ф (пунктир) и коэффициент C (штрих-пунктир). (d) — Плотность одночастичных состояний dn/dE на уровне Ферми в приближениях Хартри (тонкая линия) и Т-Ф (толстая линия) в зависимости от V_{pg}.

в области антиточек существенно меняются (с 23 meV до 14 meV), хотя напряжение на верхнем затворе V_{tg} является постоянным. Это объясняется перераспределением зарядов между затворами и изменением условий экранировки окружающим барьеры двумерным газом при увеличении его плотности. Высота барьеров практически одинакова в двух подходах.

На рисунке 3 мы показываем, как зависят число электронов в элементарной ячейке N, емкость dN/dV_{pg} и плотность состояний dn/dE на уровне Ферми от V_{pg}. Отметим, что на краях минизон N является целым. Зависимость $N(V_{pg})$ приближенно может быть представлена прямой линией $C(V_{pg} - V_c)$ при $V_{pg} > V_c$ и нулем при $V_{pg} < V_c$, где V_c — пороговое значение (рис. 3a). На разности $N(V_{pg}) - C(V_{pg} - V_c)$ хорошо видны особенности, отвечающие, например, началу заполнения первой минизоны ($N = 0$), совпадению первой и второй дираковских точек с уровнем Ферми ($N = 2$, $N = 8$), а также щели между второй и третьей минизонами ($N = 4$) (рис. 3b). Эти же особенности проявляются в электрической емкости, которая с точностью до множителя e есть dN/dV_{pg}. Наблюдаются узкие глубокие провалы в щели и дираковских точках, а также менее выраженные особенности, которые воспроизводятся при разных вариантах численной реализации формул (2)–(6) и численного дифференцирования $N(V_{pg})$ (рис. 3c). Мы показываем, что эти особенности по положению совпадают с особенностями на графике зависимости от V_{pg} такой величины, как плотность одночастичных состояний $DoS = dn(E)/dE$ на уровне Ферми (рис. 3d). Например, при $V_{pg} = 0.829$ В есть узкий пик в dN/dV_{pg} и в $DoS(V_{pg})$, причем последний отвечает прохождению уровня энергии в M-точке зоны Бриллюэна через уровень Ферми. Поскольку $n(E)$ есть число электронов с энергией ниже E в элементарной ячейке, имеется некоторое подобие формы $DoS(V_{pg})$ и кривых dn/dE, вычисленных для фиксированных V_{pg} (пример на рис. 3e). На двух графиках имеются дираковские точки и пары связанных с ними M-точек. Основное различие состоит в схлопывании щели между второй и третьей минизонами и резком увеличении ширины третьей минизоны на кривой $DoS(V_{pg})$. Заметим, что площади под кривыми dn/dE на рис. 3e определяют число электронов в элементарной ячейке и мало различаются (на 8% на рис. 3a).

При расчете по Томасу-Ферми зависимость $N(V_{pg})$ является гладкой кривой, которая при $N > 2$ лежит немного ниже кривой, полученной по методу Хартри (рис. 3a). Она асимптотически стремится к прямой линии с указанным выше наклоном C. Соответственно, монотонными являются зависимости $dN/dV_{pg}(V_{pg})$, а также квазиклассические плотности состояний $dn/dE(V_{pg})$ на уровне Ферми и dn/dE при фиксированном V_{pg} (пунктир на рис. 3c и толстые линии на рис. 3d,e).

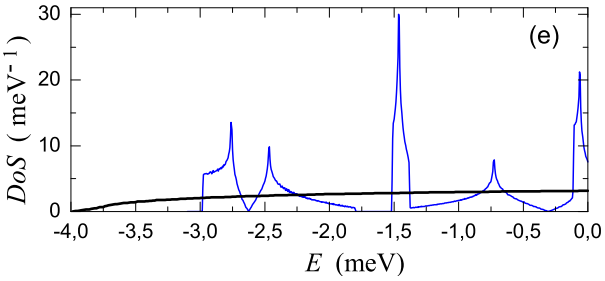


Рис. 4: (e) — Одночастичная плотность состояний dn/dE как функция E при $E < E_F = 0$ и $V_{pg} = 0.84$ В в приближениях Хартри (тонкая линия) и Т-Ф (толстая линия)

Таким образом, в расчете по Хартри возникают осцилляции емкости, которые отсутствуют в приближении Т-Ф. Они аналогичны оболочечным осцилляциям емкости атомно-масштабных систем [13] и квантовых точек [14], а также узким провалам емкости в экспериментах с затворно управляемыми низкоразмерными системами. Провалы отвечали щелям между уровнями Ландау (либо Зеемана) для ДЭГ в сильном магнитном поле [4, 5], межзонной щели в углеродной наностубке [6], а также дираковской точке в графене [7]. Причем в [5] щель имела такую же ширину ($<$0.5 мэВ), как особенности спектра в изученной нами системе. Этом смысле экспериментальные методы ее исследования уже имеются.

Заметим, что во всех этих случаях провалы емкости объяснялись с позиций простой связи полной, геометрической и квантовой емкости [3]: $1/C_{tot} = 1/C_G + 1/C_Q$, причем C_G бралась такой же, как для классических конденсаторов той же геометрии, а квантовая емкость C_Q заменялась одночастичной плотностью состояний на уровне Ферми. Мы проверили, что в нашем случае при расчете по Томасу-Ферми разность $(dN/dV_{pg})^{-1} - (dn/dE(V_{pg}))^{-1}$ действительно слабо зависит от V_{pg}, и отсюда нашли, что $C_G/e \approx 0.225$ мВ$^{-1}$. Из рис. 3c,d видно, что при расчете по Хартри то же самое значение C_G/e получается в промежутках между тремя провалами емкости, т.е. участках,где dn/dE на уровне Ферми велико. Однако, когда $dn/dE \to 0$, разность $(dN/dV_{pg})^{-1} - (dn/dE(V_{pg}))^{-1}$ резко меняется. Мы объясняем непостоянство этой разности тем, что в данном случае, в отличие от нанотрубки и графена, моделируется резко неоднородная система, в которой расстояние от затворов до ДЭГ меньше периода решетки и диаметра антиточек. Поэтому кулоновское взаимодействие электронов в ДЭГ с зарядами затвора оказывается столь же существенным, как в плоскости ДЭГ, и в такой системе не удается простой формулой $1/C_{tot} = 1/C_G + 1/C_Q$ отделить геометрическую емкость от квантовой.

Заключение

В данной работе продолжено численное изучение графеноподобной решетки антиточек в ДЭГ структуры GaAs/AlGaAs, имеющей оптимальные параметры для сохранения второй дираковской особенности от разрушения остаточным беспорядком [2]. На этом примере впервые для полупроводникового искусственного 2D квантового кристалла исследовано поведение электронной системы при непрерывном изменении напряжения на затворе, управляющем концентрацией электронов. В подходе Хартри найдены наиболее важные эффекты кулоновского взаимодействия — глубокие узкие провалы полной емкости, отвечающие дираковским точкам и межминизонной щели. Выяснено, что простая связь между полной, геометрической и квантовой емкостью нарушается из-за того, что постоянная решетки больше расстояния между электронной системой и затворами. Обнаружено, что дираковские особенности на затворной зависимости плотности состояний существенно шире, чем провалы полной емкости. Сопоставление особенностей емкости и плотности состояний в эксперименте может служить идентификации дираковской особенности и проверке получения квантового кристалла. Данный пример показывает, что можно реалистическим численным моделированием не только объяснять экспериментально обнаруженные эффекты [8, 12], но также планировать изготовление образцов и детально предсказывать результаты измерений, что необычно для физики и технологии квантовых наноструктур.

Расчеты выполнялись с использованием ресурсов МСЦ РАН при поддержке грантом Президента РФ (НШ-10211.2016.8). Мы благодарны З.Д. Квону, А.Г. Погосову, М.В. Буданцеву, A.R. Hamilton и O. Klochan за стимулирующие обсуждения, а также О.П. Сушкову, И.С. Терехову и Д.Г. Бакшееву за помощь в решении задачи.

Список литературы

[1] Ткаченко О.А., Ткаченко В.А. Полупроводниковый искусственный графен: эффекты в слабых магнитных полях// Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 99, С. 231–236.

[2] Tkachenko O.A., Tkachenko V.A., Terekhov I.S., Sushkov O.P. Effects of Coulomb screening and disorder on an artificial graphene based on nanopatterned semiconductor// 2D Materials. 2015. V. 2, P. 014010.

[3] Luryi S. Quantum capacitance devices// Appl. Phys. Lett. 1988. V. 52, P. 501.

[4] Dolgopolov V.T., Shashkin A.A., Aristov A.V., Schmerek D., Hansen W., Kotthaus J.P. Direct Measurements of the Spin Gap in the Two-Dimensional Electron Gas of AlGaAs-GaAs Heterojunctions// Phys. Rev. Lett. 1997. V. 79, P. 729.

[5] Khrapai V.S., Shashkin A.A., Trokina M.G., Dolgopolov V.T., Pellegrini V., Beltram F., Biasiol G., Sorba L. Filling factor dependence of the fractional quantum Hall effect gap// Phys. Rev. Lett. 2008. V. 100, P. 196805.

[6] Ilani S., Donev L.A.K., Kindermann M., McEuen P.L. Measurement of the quantum capacitance of interacting electrons in carbon nanotubes// Nature Phys. 2006. V. 2, P. 687.

[7] Ponomarenko L.A., Yang R., Gorbachev R.V., Blake P., Mayorov A.S., Novoselov K.S., Katsnelson M.I., Geim A.K. Density of States and Zero Landau Level Probed through Capacitance of Graphene// Phys. Rev. Lett. 2010. V. 105, P. 136801.

[8] Tkachenko O.A., Tkachenko V.A., Baksheyev D.G., Pyshkin K.S., Harrell R.H., Linfield E.H., Ritchie D.A., Ford C.J.B. Electrostatic potential and quantum transport in a one-dimensional channel of an induced two-dimensional electron gas// J. Appl. Phys. 2001. V. 89, P. 4993.

[9] Peters S., Tiemann L., Reichl C., Wegscheider W. Gating versus doping: Quality parameters of two-dimensional electron systems in undoped and doped GaAs/AlGaAs heterostructures// Phys. Rev. B. 2016. V. 94, P. 045304; Lu T.M., Laroche D., Huang S.-H., Chuang Y., Li J.-Y., Liu C.W. High-mobility capacitively-induced two-dimensional electrons in a lateral superlattice potential Sci. Rep. 2016. V. 6, P. 20967.

[10] Dias N.L., Garg A., Reddy U., Choi U., Coleman J. J. Highly uniform periodic inverse quantum dots arrays// Appl. Phys. Lett. 2012. V. 100, P. 121115; Scarabelli D., Wang S., Kuznetsova Y.Y., Pfeiffer L.N., West K., Gardner G.C., Manfra M.J., Pellegrini V., Pinczuk A., Wind S.J. Fabrication of Artificial Graphene in a GaAs Quantum Heterostructure// J. Vac. Sci. Technol. B. 2015. V. 33, P. 06FG03.

[11] Ткаченко О.А., Ткаченко В.А. Чувствительность к беспорядку графеноподобных решеток квантовых точек и антиточек в двумерном электронном газе// Вестн. Новосиб. гос.ун-та: Серия: Физика. 2016. Т. 11, С. 80–87;

[12] Ткаченко В.А., Ткаченко О.А. От субмикронных квантовых проводников к графеноподобной решетке: эксперименты и моделирование// Труды первой ежегодной национальной конференции по нанотехнологиям, наноматериалам и микросисиемной технике. Novosibirsk State Technical University. 2016. P. 67–80, ISBN 978-5-7782-2849-8.

[13] Iafrate G.J., Hess K., Krieger J.B., Macucci M. Capacitive nature of atomic-sized structures// Phys. Rev. B. 1995. V. 52, P. 10737.

[14] Bednarek S., Szafran B., Adamowski J. Many-electron artificial atoms// Phys. Rev. B. 1999. V. 59, P. 13036.

Ольга Александровна Ткаченко — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института физики полупроводников СО РАН;
e-mail: otkach@isp.nsc.ru;
Виталий Анатольевич Ткаченко — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института физики полупроводников СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: vtkach@isp.nsc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

МЕТОД ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛНЕНИЯ МОДЕЛЕЙ С МАССИРОВАННЫМ ПОТОКОМ СОБЫТИЙ

К. В. Ткачёв

Институт Вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.876.5

На основе экспериментальных данных было выявлено, что при использовании различных алгоритмов управления можно существенно сократить время выполнения модели и количество затрачиваемой памяти, увеличить отзывчивость модели для управляющих событий. Используя новый предложенный варианта «календаря событий», можно значительно сократить время, необходимое для проверки модели на работоспособность. Использование агента во время исполнения, позволит нам наблюдать, как меняется сама модель и её поведение.
Ключевые слова: Имитационное моделирование, исполнение больших программ, агент, календарь событий, процессорное время, наблюдаемые параметры.

Введение

Развитие имитационного моделирования как метода научного исследования применяется, с середины прошлого века. Современные информационные технологии сделали возможным моделирование больших систем, состоящих из многих компонентов, реагирующих на множество различных событий. Рассмотрим одно из направлений развития распределенного имитационного моделирования. Это цельные системы моделирования [4].

Для создания новых высокоэффективных “цельных” систем моделирования, в которых поддерживается параллельное дискретно-событийное моделирование (PDES-Parallel Discrete Event Simulation) используют сопутствующие языки, библиотеки и инструментальные средства. Примерами этого подхода служат такие системы как TeD/GTW, SPEEDES, Task-Kit и др. [1]. В России тоже ведутся работы над подобными системами (Мера (Новосибирск), Диана (МГУ)).

Для синхронизации событий в имитационной модели требуется наличие календаря событий, другими словами, упорядоченного по неубыванию списка уведомлений о будущих событиях.

Календарь событий один из самых главных элементов имитационной модели, предназначенный для управления процессом появления событий в системе с целью обеспечения необходимой причинно-следственной связи между ними. Основные функции календаря событий [2]:

- Ранжирование по времени запланированных событий, т.е. составление упорядоченной временной последовательности с учётом вида события и обработчика, в котором оно будет обрабатываться.
- Запуск обработчика в момент наступления соответствующего события.
- Хранение и передача информации о обработчиках в нужные моменты времени.

При большой размерности модели возникает проблема увеличения длины этого списка и, соответственно, увеличению затрат на его обработку. В этом случае затраты начинают преобладать над затратами на отображение поведения системы [3].

Рассмотрим два способа сокращения времени моделирования.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке проекта Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта № 17-07-00775 А) и проекта программы фундаментальных исследований президиума РАН.

1 Методы

В этой статье будут предложены несколько вариантов оптимизации. Первым вариантом является разделение календаря на две части, на отвечающую за «важные» события и за остальные события. Основываясь на предыдущих исследованиях, разделим события на влияющие на логику поведения модели и неоказывающие особого влияния. Информацию о важных событиях необходимо хранить и восстанавливать, а события, поток которых носит чисто случайных характер, можно не хранить, а просто генерировать датчиком случайных чисел [5].

Основным плюсом нового варианта является то, что при исполнении только первой части календаря с большой долей вероятности можем утверждать, что модель работоспособна и правильно функционирует. При этом, степень игнорирования определяется экспериментально для каждой конкретной модели и зависит от интенсивности потоков событий различных классов. При использовании «нового» календаря событий существует вероятность выйти за пределы допустимой погрешности. Из этого и вытекает необходимость определять степень игнорирования для каждой конкретной модели. Ещё одним плюсом является то, что он позволяет частично избежать проблемы синхронизации при распараллеливании, так как необходимо перестраивать только календарь с важными событиями.

Для подтверждения этой идеи была создана модель, позволяющая тестировать различные алгоритмы управления массированным потоком событий в имитационной модели и анализировать её устойчивости по отношению к потере некоторых событий при сбоях в работе оборудования или системы управления процессами.

Рассмотрим немного изменённую модель. Она представляет собой имитационную модель проведения ремонтных работ в электрических сетях. Событие представляет собой ремонт определенного объекта. Общие характеристики модели:

- Количество объектов ремонта не менее 1000.
- Ремонт требует затрат условных ресурсов.
- Поломка случается через случайное время.
- В наличии 10 ремонтных бригад.
- Некоторые поломки связаны между собой.
- Есть рейтинг важности объектов.
- Есть коэффициент, отвечающий за время (время года, день месяца).

В рассматриваемой модели выбор «важных» событий представлял собой алгоритм анализа системы, зависящий от связанности объектов между собой, от изначального значения важности и от коэффициента времени. В определённые моменты, у некоторых событий меняется статус важности [3].

Первоначально важными событиями были ремонтные работы в муниципальных учреждениях. При дальнейшем исследовании было установлено, что необходимо расширить границу важности, дополнив её объектами, связанными между собой.

Далее, в таблице 1 представлено сравнение старого вида календаря с новым (по процессорному времени, измеряется в секундах). В первом столбце приведён процент количества важных событий от всех. В данном примере отсутствуют связанные события.

В первом столбце таблицы 2 приведён процент количества цепочек от всех троек событий (разбиваются все события на тройки, один раз). Во втором и третьем столбцах указаны процентные соотношения времени и количества ресурсов при запусках с цепочками событий и без. По таблице 2 можно заметить зависимость процессорного времени от количества связанных событий (для нового вида календаря). Проблемой данного примера является то, что связанные события могут находится в разных частях календаря. В этом случае мы встречаем проблемы связанных событий. Увеличение количества таких событий ведет к значительному росту количества запросов необходимых для синхронизации первой части календаря с другой. Решением данной проблемы является объединение таких событий в новый класс событий, входящий в важные события. Начальные данные: N=32768 (объекты), P=16777216 (поломки), W= 838860 (количество «важных» событий). Все значения в таблице были получены экспериментально.

Таблица 1: Сравнение по процессорному времени

Важные события	Старый вариант	Новый вариант
25%	2568.12(сек)	623.78(сек)
75%	2689.26(сек)	1991.16(сек)

Таблица 2: Связанные события

Кол-во цепочек событий	Время моделирования	Затраченные ресурсы
5%	108%	113%
10%	117%	122%
25%	145%	153%

Следующим вариантом оптимизации является создание агента наблюдателя, который будет следить и изменять некоторые параметры. Осуществлять изменения он должен во время выполнения модели (динамически). Назовем их наблюдаемыми и управляемыми параметрами. На рис. 1 изображена схема взаимодействия агента с моделью.



Рис. 1: Схема взаимодействия агента

В рассмотренной модели наблюдаемые параметры:

- Сколько ресурсов и времени необходимо бригаде на данном ремонте.
- Сколько не работает в данный момент объектов.
- Связан ли данный ремонт с другим.
- Время года и день месяца.
- Сколько важных объектов не работает.

Управляемые параметры:

- Граница важности объектов.
- Общая стоимость ремонтных работ за определённый период.

- Допустимое количество неработающих объектов.
- Ограничения времени ремонта.

В таблице 3 указано время моделирования с использованием агента, изменяющего параметры во время выполнения модели с различными ограничениями.

Таблица 3: Условия изменения

Условия изменения	Без агента	С агентом
Изменение времени года	3564,64(сек)	3258,15(сек)
Ограничения ресурсов	3489,87(сек)	2499,69(сек)
Минимизация ущерба	3698,15(сек)	2954,99(сек)

Заключение

Эксперименты показали, что при использовании различных алгоритмов управления можно существенно сократить время выполнения модели, уменьшить количество затрачиваемой памяти и увеличить отзывчивость модели для управляющих событий. Хотя модель предназначена для отладки алгоритмов управления процессом имитации, она достаточно правдоподобна и может использоваться для принятия решений в работе ремонтных бригад.

Благодаря использованию нового варианта «календаря событий», можно значительно сократить время, необходимое для проверки модели на работоспособность. Степень игнорирования определяется экспериментально для каждой конкретной модели и зависит от интенсивности потоков событий различных классов.

Использование агента во время исполнения, позволяет нам наблюдать, как меняется сама модель и её поведение. Изменении некоторых параметров ведет к существенному сокращению времени моделирования.

Список литературы

[1] Fujimoto R. M. Parallel Discrete Event Simulation, Communications of the ACM, Vol. 33, No. 10, 1990 С. 30–53.

[2] Окольнишников В. В. Представление времени в имитационном моделировании //Вычислительные технологии. Сибирское отделение РАН. 2005. № 5. С. 57–80.

[3] Ткачёв К.В. Экспериментальное исследование метода управления массированного потока событий // Материалы 53-й международной научной студенческой конференции. Новосибирский гос. ун-т: Новосибирск, 2015.

[4] Шеннон Р. Имитационное моделирование систем искусство и наука. М.: Мир, 1978.

[5] Korniss, G., Toroczkai, Z., Novotny, M.A., Rikvold, P.A., From Massively Parallel Algorithms and Fluctuating Time Horizons to Nonequilibrium Surface Growth // Physical Review Letters. 84. 2000. P. 1351–1354.

Кирилл Валерьевич Ткачёв — инженер Институт Вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: tkachev@sscc.ru, tkachyovkv@yandex.ru
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ПРОЕКЦИОННЫЕ ОЦЕНКИ МЕТОДА МОНТЕ — КАРЛО ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ УГЛОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛЯРИЗОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Н. В. Трачева[1,2], С. А. Ухинов[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*
[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.245; 519.676

В работе представлен алгоритм метода Монте — Карло для исследования пространственно-угловых характеристик поляризованного излучения, основаный на двумерном проекционном разложении соответствующего углового распределения по ортонормированным с некоторым весом базисным функциям. Приведены результаты численной оценки двумерных угловых распределений интенсивности и степени поляризации излучения, проходящего и отраженного оптически толстым слоем рассеивающего и поглощающего вещества.
Ключевые слова: метод Монте — Карло, статистическое моделирование, перенос излучения, ортогональное разложение, полусферические гармоники, полиномы Якоби.

Введение

При решении ряда задач атмосферной оптики широко используется разложение решения уравнения переноса по сферическим гармоникам (см., например, [1]). Однако в задачах, связанных с переносом излучения с поверхности или на поверхность, когда излучение распространяется в пределах телесного угла, равного 2π, применение сферических функций в чистом виде невозможно. Данная проблема привела к попыткам построения систем полусферических гармоник разного вида (см., например, [2, 3]). В настоящей работе мы используем систему полусферических гармоник, ортогональных с весом $|cos\theta|$ (θ — широта, отсчитываемая от нормали к поверхности), построенную в работе [2]. В работе [4] была показана полнота данной ортогональной системы.

Рассматривается процесс переноса поляризованного изучения в рассеивающей и поглощающей среде. Для описания поляризационных свойств излучения мы используем вектор Стокса $\mathbf{\Phi} = \left(\Phi^{(1)}, \Phi^{(2)}, \Phi^{(3)}, \Phi^{(4)}\right)^T$ в четырехмерном функциональном пространстве, компоненты которого имеют размерность интенсивности и определяют в совокупности интенсивность, степень поляризации, плоскость поляризации и степень эллиптичности излучения (см., например, [5, 6]).

Для стационарных задач компоненты вектор-функций Стокса зависят от пяти переменных: $\mathbf{\Phi} = \mathbf{\Phi}(x)$, $x \in X$, где $X = R \times \Omega, R \subseteq \mathbf{R}^3$ — пространство координат, $\Omega = \{\omega \in \mathbf{R}^3 : |\omega| = 1\}$ — пространство единичных векторов направлений. Математическая модель переноса поляризованного излучения строится на основе феноменологического предположения о том, что в результате рассеяния ассоциируемый с частицей (квантом излучения) вектор Стокса преобразуется заданной матрицей рассеяния (см., например, [5]).

Рассмотривается стационарное интегро-дифференциальное уравнение переноса излучения с поляризацией вида:

$$\omega \nabla \mathbf{\Phi}(r,\omega) + \sigma(r)\mathbf{\Phi}(r,\omega) = \int_\Omega \sigma_s(r) P(\omega', \omega, r)\mathbf{\Phi}(r,\omega')\, d\omega' + \mathbf{I_0}(r,\omega).$$

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 15-01-00894 а, № 16-31-00123 мол_а, № 17-01-00823 а) и Президиума РАН (программа I.33П).

Здесь $\mathbf{\Phi}(r,\omega)$ — вектор-функция интенсивности излучения (потока частиц) в точке r в направлении ω; σ_s — сечение(коэффициент) рассеяния, $\sigma=\sigma_s+\sigma_c$ — полное сечение ослабления, σ_c — сечение поглощения;

$$P(\omega',\omega,r)=L(\pi-i_2)R(\omega',\omega,r)L(-i_1),$$

$R(\omega',\omega,r)$ — матрица рассеяния, $L(i)$ — специальная матрица поворота, i_1 и i_2 — углы между плоскостью рассеяния $\omega\,\omega'$ и плоскостями $\omega'\,s$ и $\omega\,s$ соответственно, s — единичный вектор, определяющий плоскость отсчета параметров электромагнитной волны [7], обычно равный $(0,0,1)$ в плоскопараллельной геометрии среды и $r=|r|$ — в сферической [5], $\mathbf{I_0}$ — вектор-функция плотности распределения источника излучения.

1 Постановка задачи

Рассмотрим перенос частиц через плоский слой $0<z<H$ от расположенного в точке $(0,0,-1)$ источника вида $\mathbf{I_0}(\omega)=\delta(\omega-\mathbf{e}_z)\mathbf{I_0}$, $\mathbf{I_0}=\left(I_0^{(1)},I_0^{(2)},I_0^{(3)},I_0^{(4)}\right)^T$, $I_0^{(1)}\geq 0$, $I_0^{(1)2}\geq I_0^{(2)2}+I_0^{(3)2}+I_0^{(4)2}$.

На внешней границе $z=H$ слоя плотность полного потока излучения (освещенность границы слоя) равна

$$P_H=\int\limits_{\Omega}\Phi^{(1)}(\omega)\,\mu\,d\omega=\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^1\mu\,\Phi^{(1)}(\mu,\varphi)\,d\mu\,d\varphi,$$

где $\mu=\omega_z$, ω — зенитный угол, φ — азимутальный угол.

Угловая плотность $\Phi_s^{(1)}(r,\mu,\varphi)$ распределения по μ и φ потока излучения в точке r равна

$$\Phi_s^{(1)}(r,\mu,\varphi)=|\mu|\,\Phi^{(1)}(r,\mu,\varphi). \tag{1}$$

Построим метод Монте — Карло, позволяющий исследовать угловое распределение интенсивности отраженного и проходящего излучения

$$\Phi_s^{(1)}(r,\mu,\varphi)/P_H,\ \mu\in(0,1),\varphi\in(0,\pi).$$

Другой важной характеристикой частично поляризованного излучения является степень поляризации, определяемая как отношение интенсивности полностью поляризованной компоненты к общей интенсивности излучения

$$p(r,\omega)=\frac{\sqrt{\Phi^{(2)}(r,\omega)^2+\Phi^{(3)}(r,\omega)^2+\Phi^{(4)}(r,\omega)^2}}{\Phi^{(1)}(r,\omega)}. \tag{2}$$

Построим метод Монте — Карло для оценки данной характеристики.

Для этого рассмотрим систему ортонормированных на множестве $(0,1)\times(0,2\pi)$ с весом x функций $\{H_{i,j}(x,y),\ i=0,\dots\infty,j=-i,..,i\}$ в гильбертовом пространстве $\mathcal{L}_{2,x}(\Omega)$ на полусфере единичных направлений Ω, таких, что

$$\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^1 x\,H_{i,k}(x,y)H_{j,l}(x,y)\;dx\;dy=\begin{cases}1, & i=j,k=l\\ 0, & \text{иначе.}\end{cases}$$

Обобщив (1) разложим функцию $\mathbf{\Phi}(x,y)$ по ортонормированному базису $\{H_{i,j}(x,y),\ i=0,...\infty,\ j=-i,..,i\}$ в $\mathcal{L}_{2,x}(\Omega)$:

$$\mathbf{\Phi}_s(x,y)=x\sum_{i=0}^{\infty}\sum_{j=-i}^{i}\boldsymbol{a}_{i,j}H_{i,j}(x,y)$$

где

$$\boldsymbol{a}_{i,j}=\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^1\mathbf{\Phi}_s(x,y)H_{i,j}(x,y)\,dx\,dy.$$

В качестве оценки функции $\mathbf{\Phi}_s(x,y)$ рассмотрим конечную сумму

$$\mathbf{\Phi}_s(x,y)\approx x\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=-i}^{i}\boldsymbol{a}_{i,j}H_{i,j}(x,y)=x\,\mathbf{\Phi}_n(x,y), \tag{3}$$

Ставится задача нахождения коэффициентов $\boldsymbol{a}_{i,j}$ приближения (3) методом численного статистического моделирования (методом Монте — Карло).

2 Алгоритм решения

Построим ортонормированный базис на основе полусферических функций $\{H_{i,j}(\mu,\varphi)\}$ вида

$$H_{0,0}(\mu,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}};$$
$$H_{i,0}(\mu,\varphi) = C_{i,0}J_i(2\mu-1),\ i=1,2,...;$$
$$H_{i,j}(\mu,\varphi) = C_{i,j}J_i^j(2\mu-1)\cos(j\varphi),\ i=1,2,...,j=1,...,i;$$
$$H_{i,-j}(\mu,\varphi) = C_{i,j}J_i^j(2\mu-1)\sin(j\varphi),\ i=1,2,...,j=1,...,i.$$

Здесь J_i — полином Якоби порядка i, а J_i^j — j-ый присоединенный полином Якоби порядка i :

$$J_i(x) = J_i^{(0,1)}(x) = \frac{(-1)^i}{2^i i!}\frac{1}{1+x}\frac{d^i}{dx^i}[(1+x)(1-x^2)^i],$$
$$J_i^j(x) = (1-x^2)^{j/2}\frac{d^j}{dx^j}J_i^{(0,1)}(x).$$

Нормировочные коэффициенты имеют следующий вид:

$$[C_{i,0}]^2 = \frac{i+1}{\pi},$$
$$[C_{i,j}]^2 = \frac{2(i+1)}{\pi\cdot\prod_{k=1}^{j}[(i+1)^2-k^2]}\ \text{ при }\ j\neq 0.$$

Для вычисления коэффициентов $\boldsymbol{a}_{i,j}$ ортогонального разложения (3) применяется весовая векторная оценка метода Монте — Карло $\{\boldsymbol{\xi}_{i,j} = (\xi_{i,j}^{(1)},\xi_{i,j}^{(2)},\xi_{i,j}^{(3)},\xi_{i,j}^{(4)})^T : E\boldsymbol{\xi}_{i,j} = \boldsymbol{a}_{i,j}\}$ "по направлениям"[6]:

$$\boldsymbol{\xi}_{i,j} = \sum_{k=1}^{N_t-1} q_k\mathbf{Q}_{k+1}\,H_{i,j}(\mu_{k+1},\varphi_{k+1})e^{-\frac{\sigma(h-z_k)}{\mu_{k+1}}}\,\Delta_{s,\mu}(z_k,\mu_{k+1}).$$

Здесь $x_k = (z_k,\omega_k)$ — моделируемая цепь Маркова, z_k — z-координата точки столкновения, $z_0 = 0$; ω_k — направление частицы перед столкновением, $\omega_1 = \mathbf{e}_z$; $\mu_k = (\omega_k,\mathbf{e}_z)$;

$$\Delta_{s,\mu}(z_k,\mu_{k+1}) = \begin{cases} 1, & \text{если } z_k < h \text{ и } \mu_{k+1} > 0 \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

то есть $\Delta_{s,\mu}$ — индикатор пересечения направления частицы поверхности $z = h$ после рассеяния в точке $z_k < h$, N_t — случайный номер последнего столкновения. Считается, что вне рассматриваемого слоя $0 < z < H$ сечение $\sigma \equiv \sigma_c > 0$, то есть вне слоя цепь столкновений обрывается с вероятностью единица.
Направление рассеяния ω_k в точке z_{k-1} моделируется согласно элементу R_{11} матрицы рассеяния $R(\omega_{k-1},\omega_k)$. Векторный вес $\mathbf{Q}_k = \left(Q_k^{(1)},Q_k^{(2)},Q_k^{(3)},Q_k^{(4)}\right)^T$ определяется выражениями:

$$\mathbf{Q}_1 = \left(I_0^{(1)},I_0^{(2)},I_0^{(3)},I_0^{(4)}\right)^T,\quad \mathbf{Q}_k = P(\omega_{k-1},\omega_k)\mathbf{Q}_{k-1}/R_{11}(\omega_{k-1},\omega_k),\quad k\geq 2.$$

Значение скалярного веса q_k определяется используемой модификацией метода Монте — Карло моделирования длины пробега и учета поглощения. При использовании модификации "без поглощения", то есть при моделировании длины пробега по экспоненциальному закону с параметром σ и учете поглощения весом в точке столкновения, имеем $q_k = q_{k-1}\cdot\sigma_s/\sigma$, $q'_k = q_{k-1}$, $q_0 = 1$. При моделировании "по рассеянию", то есть при выборе длины пробега l по экспоненциальному закону с параметром σ_s и учете поглощения весом $exp(-\sigma_c\cdot l)$, имеем $q_k = q_{k-1}\cdot exp(-\sigma_c|z_k - z_{k-1}|/|\mu_k|)$, $q'_k = q_{k-1}\cdot exp(-\sigma_c(h-z_{k-1})/\mu_k)$.

Оценка ξ_h полного потока P_h рассеянного излучения (освещенности) на поверхности $z = h$, $0 < h \leq H$ имеет вид:

$$\xi_h = \sum_{k=2}^{N_t} q'_k Q_k^{(1)}\Delta_s(z_{k-1},z_k),\quad E\xi_h = P_h.$$

Рандомизированная проекционная оценка $\tilde{\boldsymbol{\Phi}}_n(x,y)$ функции $\boldsymbol{\Phi}(x,y)$ согласно (3) строится следующим образом:

$$\boldsymbol{\Phi}(x,y) \approx \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=-i}^{i} \boldsymbol{a}_{i,j}H_{i,j}(x,y) = \boldsymbol{\Phi}_n(x,y) \approx \tilde{\boldsymbol{\Phi}}_n(x,y) = \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=-i}^{i} \boldsymbol{\alpha}_{i,j}H_{i,j}(x,y),$$

где

$$\boldsymbol{\alpha}_{i,j} = \mathrm{E}_N\boldsymbol{\xi}_{i,j} \equiv \frac{1}{N}\sum_{m=0}^{N} \boldsymbol{\xi}_{i,j}^{(m)},$$

$$\mathrm{E}\boldsymbol{\alpha}_{i,j} = E\boldsymbol{\xi}_{i,j} = \boldsymbol{a}_{i,j},$$

$$E\tilde{\boldsymbol{\Phi}}_n(x) = \boldsymbol{\Phi}_n(x).$$

Здесь $\boldsymbol{\xi}_{i,j}^{(m)}$ — реализация случайной величины $\boldsymbol{\xi}_{i,j}$ на m-ой траектории.

Дисперсия случайной вектор функции $\tilde{\boldsymbol{\Phi}}_n(x)$ покомпонентно равна

$$D\tilde{\boldsymbol{\Phi}}_n(x,y) = \sum_{i=0}^{n}\sum_{k=-i}^{i}\sum_{j=0}^{n}\sum_{l=-j}^{j} \mathrm{cov}(\boldsymbol{\alpha_{i,k}}, \boldsymbol{\alpha_{j,l}})H_{i,k}(x,y)H_{j,l}(x,y) =$$
$$= \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{n}\sum_{k=-i}^{i}\sum_{j=0}^{n}\sum_{l=-j}^{j} \mathrm{cov}(\boldsymbol{\xi_{i,k}}, \boldsymbol{\xi_{j,l}})H_{i,k}(x,y)H_{j,l}(x,y).$$

Здесь и далее операции D, cov, умножения и возведения в квадрат четырехмерных векторов понимаются покомпонентно. Так $\mathrm{cov}(\boldsymbol{\xi_{i,k}}, \boldsymbol{\xi_{j,l}})$ — покомпонентная ковариация векторных оценок $\boldsymbol{\xi_{i,k}}$ и $\boldsymbol{\xi_{j,l}}$, то есть вектор $\{\mathrm{cov}(\xi_{i,k}^{(s)}, \xi_{j,l}^{(s)})\}$, $s = 1,\ldots,4$, компоненты которого статистически оцениваются по формуле:

$$\mathrm{cov}_N(\boldsymbol{\xi_{i,k}}, \boldsymbol{\xi_{j,l}}) \equiv \frac{1}{N}\sum_{m=0}^{N} \boldsymbol{\xi}_{i,k}^{(m)}\boldsymbol{\xi}_{j,l}^{(m)} - \boldsymbol{\alpha}_{i,k}\,\boldsymbol{\alpha}_{j,l}.$$

Статистическая оценка дисперсии находится по формуле

$$\mathrm{D}_N\boldsymbol{\xi_{i,k}} = \frac{1}{N}\sum_{m=0}^{N} \boldsymbol{\xi}_{i,k}^{(m)\,2} - \boldsymbol{\alpha}_{i,k}^2.$$

Асимптотически несмещенной оценкой углового распределения степени поляризации $p(x)$ на поверхности $z = h$ исходя из (2) будет, очевидно, являться следующее выражение

$$\tilde{p}_n(x) = \frac{\sqrt{(\tilde{\Phi}_n^{(2)}(x))^2 + (\tilde{\Phi}_n^{(3)}(x))^2 + (\tilde{\Phi}_n^{(4)}(x))^2}}{\tilde{\Phi}_n^{(1)}(x)}.$$

Дисперсия $\mathrm{D}_N\tilde{p}_n(x)$ асимптотически при $N \to \infty$ равна

$$\mathrm{D}_N\tilde{p}_n(x) = \frac{1}{g_1^2}\left(\frac{g\,\mathrm{D}_N g_1}{g_1^2} + \frac{g_2^2\,\mathrm{D}_N g_2 + g_3^2\,\mathrm{D}_N g_3 + g_4^2\,\mathrm{D}_N g_4}{g} - \right.$$
$$- 2\frac{\mathrm{cov}_N(g_1,g_2)\,g_2 + \mathrm{cov}_N(g_1,g_3)\,g_3 + \mathrm{cov}_N(g_1,g_4)\,g_4}{g_1} +$$
$$\left. + 2\frac{\mathrm{cov}_N(g_2,g_3)\,g_2g_3 + \mathrm{cov}_N(g_2,g_4)\,g_2g_4 + \mathrm{cov}_N(g_3,g_4)\,g_3g_4}{g}\right) + o(N^{-1}),$$

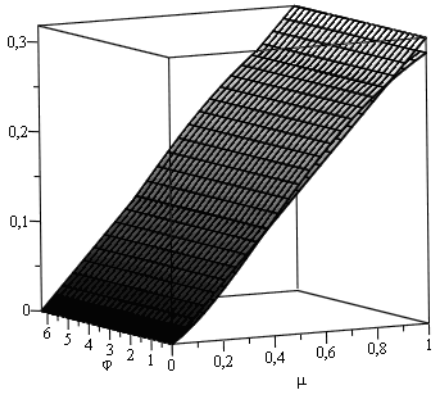
где $g_m = \tilde{\Phi}_n^{(m)}(x)$, $g = g_2^2 + g_3^2 + g_4^2$,

$$\mathrm{cov}_N(g_m, g_t) = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{n}\sum_{k=-i}^{i}\sum_{j=0}^{n}\sum_{l=-j}^{j} \mathrm{cov}_N(\xi_{i,k}^{(m)}, \xi_{j,l}^{(t)})\,H_{i,k}(x,y)H_{j,l}(x,y), \quad m,t = 1,...,4.$$

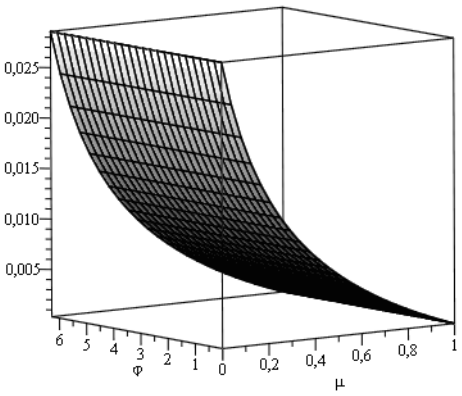
3 Численные результаты

Расчеты проводились для двух типов матриц рассеяния: молекулярной [5] и аэрозольной. Последняя рассчитывалась по теории Ми для следующих параметров аэрозольной среды: коэффициент преломления частиц $n = 1.331 - i1.310^{-4}$ (вода), распределение частиц по размерам логнормально с плотностью $f(r) = \frac{1}{r}\exp\left(-\frac{1}{2\sigma_g^2}\ln^2(\frac{r}{r_g})\right)$, $r \in (0, 10\mu m)$, $r_g = 0.12\mu m$, $\sigma_g = 0.5$, длина волны излучения равна $0.65\mu m$. Средний косинус угла рассеяния $\mu_0 = 0.7292$.

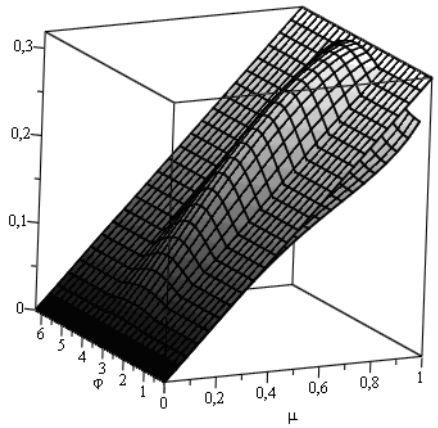
На рисунке 1 приведены полученные угловые распределения функции $\Phi_s^{(1)}(\mu)$, нормированной на полный поток P_H, в сравнении с ламбертовским угловым распределением, равным μ/π, а также степени поляризации $p(\mu)$ излучения, рассеянного вперед и назад слоями оптической толщины $H = 5$, $H = 10$. Источник излучения $\mathbf{I_0} = \big(1, 0, 0, 0\big)^T$.



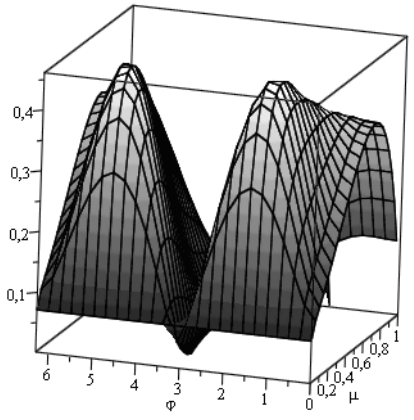
(a)



(b)



(c)



(d)

Рис. 1: **(a)** $\Phi_s^{(1)}(\mu)$. Проходящее излучение. Аэрозольная матрица. Угол падения 0°. $H = 10$; **(b)** $p(\mu)$. Проходящее излучение. Аэрозольная матрица. Угол падения 0°. $H = 10$; **(c)** $\Phi_s^{(1)}(\mu)$. Отраженное излучение. Молекулярная матрица. Угол падения 45°. $H = 5$; **(d)** $\Phi_s^{(1)}(\mu)$. Отраженное излучение. Молекулярная матрица. Угол падения 45°. $H = 5$.

Результаты расчетов согласуются с ранее полученными одномерными оценками угловых распределений интенсивности и степени поляризации, полученными в работе [6].

Заключение

В настоящей работе, на базе двумерного проекционного разложения построен алгоритм метода Монте—Карло для исследования пространственно-угловых характеристик поляризованного излучения. Указанный алгоритм может применятся для изучения как проходящего, так и отраженного излучения, причем, поскольку рассчитываются все компоненты вектора Стокса, возможно провести исследование всех поляризационных характеристик излучения. Получены двумерные угловые распределения интенсивности и степени поляризации излучения, проходящего и отраженного оптически толстым слоем рассеивающего и поглощающего вещества для произвольно падающего излучения. Отметим, что в настоящей статье не отражено решение специфической для метода Монте-Карло задачи среднеквадратической оптимизации рандомизированной проекционной оценки по критерию трудоемкости, т. е. среднего числа вычислительных операций, необходимых для достижения заданной точности. Однако, аналогично рассуждениям из работы [8] можно показать, что по этому критерию рандомизированная проекционная оценка может существенно превосходить оценку типа гистограммы, а также известные в теории методов Монте-Карло “локальные оценки” и “методы сопряженных блужданий”.

Список литературы

[1] Сушкевич Т. А. Математические модели переноса излучения. Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005.

[2] Mahotkin O. A. Analysis of radiative transfer between surfaces by hemispherical harmonics //Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 1996. V. 56, iss. 6, P. 869–879.

[3] Gautron P., Krivanek J., Pattanaik S., Bouatouch K. A Novel Hemispherical Basis for Accurate and Effcient Rendering //Rendering Techniques 2004 (Proceedings of Eurographics Symposium on Rendering). 2004. V. 56, iss. 6, P. 321–330.

[4] Смелов В. В. О полноте системы полусферических гармоник //Сиб.журн. вычисл. матем. 1998. Т. 1, № 4, С. 391–395.

[5] Марчук Г. И., Михайлов Г. А., Назаралиев М. А. и др. Метод Монте—Карло в атмосферной оптике. Новосибирск: Наука, 1976. 284 с.

[6] Tracheva N. V., Ukhinov S. A. Numerical statistical study of the angular distribution of the polarized radiation scattered by medium //Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2017. V. 32, iss. 6, P. 135–146.

[7] Г. ван де Хюлст, Рассеяние света малыми частицами. М.: ИЛ. 1961.

[8] Михайлов Г. А., Трачева Н. В., Ухинов С. А. Рандомизированный проекционный метод для оценки угловых распределений поляризованного излучения на основе численного статистического моделирования //ЖВМиМФ. 2016. Т. 56, № 9, С. 1560—1570.

Наталья Валерьевна Трачева — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
ст. преподаватель Новосибирского государственного университета;
e-mail: tnv@osmf.sscc.ru;
Сергей Анатольевич Ухинов — д.ф.-м.н., вед.науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
проф. Новосибирского государственного университета;
e-mail: sau@sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНССПЕКТРАЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕТА С ВОДНОЙ СРЕДОЙ С УЧЕТОМ ВОЛНЕНИЯ ВОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

О. С. Ухинова

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.245

В работе проведены исследования влияния волнения водной поверхности на трансспектральные процессы (ТП) в водной среде при моделировании методом Монте — Карло. В качестве основной модели ТП была взята четырехкомпонентная модель ВЕО [3]. В качестве модели поверхности морского волнения была взята упрощенная модель Кокса-Манка [2]. Проведены вычисления спектрального состава восходящего потока излучения под границей разделения атмосфера-океан для различных начальных длин волн, различных углов падения и разных моделей границ.

Ключевые слова: статистическое моделирование, трансспектральные процессы, водная поверхность.

Введение

В данной статье с помощью численных экспериментов, проведенных с использованием моделей трансспектральных процессов анализируется влияние комбинационного (рамановского) рассеяния света на молекулах воды, а также флуоресценции хлорофилла (ХЛ) и растворенного органического вещества (РОВ) на спектральный состав света, выходящего из воды. Именно спектральный состав несет основную информацию об оптически активных компонентах (ОАК) природных вод. Исследуются спектральные вариации восходящей яркости, обусловленные отдельным и совместным влиянием упомянутых выше трансспектральных процессов при различных комбинациях ОАК, а именно ХЛ фитопланктона, РОВ и МВ. Также анализируется влияние волновой поверхности на результат моделирования. Модель волновой поверхности взята из работы Кокса — Манка [2].

1 Модель

1.1 Основные уравнения

В качестве основной модели была взята четырехкомпонентная модель ВЕО, подробно описанная в работе [4]. Рассмотрим слой $0 \le z \le H$ трехмерного пространства, заполненный рассеивающим и поглощающим свет веществом. Граница слоя $z = H$ освещается параллельным потоком фотонов $I_\circ$ в направлении $\omega_\circ$. Внутри рассматриваемого слоя расположена граница раздела двух сред, при взаимодействии с которой свет испытывает преломление или отражение. Эта граница представляет собой случайную (вследствие ветрового волнения) поверхность, составленную из набора случайных площадок, центры которых лежат в плоскости $z = h$, а нормали к площадкам s — случайные единичные векторы с плотностью распределения вероятности $p_s(s)$. При попадании на плоскость $z = 0$ свет испытывает отражение. Световой режим в плоскопараллельной системе водоем-атмосфера, освещенной параллельным потоком излучения, описывается известным

интегродифференциальным уравнением переноса с соответствующими краевыми условиями:

$$I(r,\omega) = S(r - t_\circ\omega, \omega)\exp\{-\int_0^{t_\circ}\sigma(r - t'\omega)\,dt\}+ \\ + \int_0^{t_\circ} dt\,\sigma_s(r - t\omega)\exp\{-\int_0^t \sigma(r - t'\omega)\,dt'\}\times \\ \times\frac{1}{2\pi}\int_\Omega d\omega'\,g(r - t\omega, \mu)I(r - t\omega, \omega'). \tag{1}$$

Здесь $I(r,\omega)$ — интенсивность излучения в точке r в направлении ω, $\sigma(r)$ и $\sigma_s(r)$ — коэффициенты ослабления и рассеяния соответственно, $g(r,\mu)$ — индикатриса рассеяния с нормировкой $\int_{-1}^{1} g(r,\mu)\,d\mu = 1$, $t_\circ$ — расстояние от точки r до границы среды в направлении $-\omega$, $\mu = (\omega,\omega')$, Ω — множество всех направлений. Функция $S(r,\omega)$ определяется распределением источников и характером воздействия границ среды на излучение. В данной задаче функция имеет вид:

$$S(r,\omega) = \begin{cases} I_\circ\delta(\omega - \omega_\circ), & \omega\in\Omega_-, z = H; \\ R_h I(r,\omega), & \omega\in\Omega, z = h; \\ R_\circ I(r,\omega), & \omega\in\Omega_+, z = 0, \end{cases} \tag{2}$$

и

$$t_\circ = \begin{cases} (z - H)/(\omega,k), & z\in[h,H], \omega\in\Omega_-; \\ (z - h)/(\omega,k), & z\in[h,H], \omega\in\Omega_+; \\ (z - h)/(\omega,k), & z\in[0,h], \omega\in\Omega_-; \\ z/(\omega,k), & z\in[0,h], \omega\in\Omega_+. \end{cases} \tag{3}$$

Здесь $k = (0,0,1)$, $\Omega_+ = \omega : (\omega,k)\geq 0$, $\Omega_- = \omega : (\omega,k)\leq 0$, $R_\circ$ — линейный интегральный оператор, описывающий закон отражения излучения плоскостью $z = 0$, интегральный оператор R_h описывает воздействие границы раздела вода-воздух на излучение. Будем предполагать, что плоскость $z = 0$ является диффузно отражающей с альбедо A, и свет, приходящий на дно водоема, отражается по закону Ламберта. Для описания воздействия морской поверхности на излучение примем модель, в которой отражение и преломление происходят по законам лучевой оптики на элементарной случайной площадке с нормалью s. В этом случае при попадании луча, имеющего направление ω, на поверхность в некоторой точке r доля излучения $I(r,\omega)\cdot R(\omega,s)$ зеркально отражается в направлении $\omega - 2(\omega,s)s$, а часть излучения $I(r,\omega)\cdot(1 - R(\omega,s))$ преломляется в направлении $\nu(\omega - \gamma s)$, где $R(\omega,s)$ — коэффициент отражения Френеля, $\gamma = (\omega,s) - sign(\omega,s)\sqrt{1/\nu^2 - 1 + (\omega,s)^2}$,

$$\nu = \begin{cases} 1/n, & (\omega,s)\leq 0, \\ n, & (\omega,s) > 0, \end{cases}$$

n — коэффициент преломления воды относительно воздуха. При моделировании наклона морской поверхности предполагалось, что плотность распределения уклонов равна

$$p_s(s) = p(z_u, z_c) = \frac{1}{2\pi\sigma_u\sigma_c}\exp\left(-\frac{z_u^2}{2\sigma_u^2} - \frac{z_c^2}{2\sigma_c^2}\right),$$

где σ_u — дисперсия составляющей наклона вдоль скорости ветра, σ_c — дисперсия составляющей пеперек скорости ветра, при этом, если скорость ветра равна W

$$\sigma_u^2 = 0,003 + 0,00185W \pm 0,0005$$

$$\sigma_c^2 = 0,001 + 0,00316W \pm 0,0005.$$

Т. е. составляющие уклонов независимы имеют нормальное распределение с дисперсией, зависящей от скорости приповерхностного ветра. Также предполагалось, что скорость ветра совпадает с осью x.

1.2 Особенности моделирования

Для учета влияния флуоресценции ОАК и комбинационного рассеяния воды рассмотрим следующие особенности моделирования, обоснования для которых приведены в работе [1]. Статистическое моделирование состоит в реализации цепи случайных событий. В каждом последовательном акте случайного взаимодействия фотона с дискретным центром среды (молекула, частица) его энергия может рассеяться или поглотиться. При этом возможна следующая вероятностная цепочка:
а) вероятность того, что фотон испытает акт рассеяния p_b
б) вероятность того, что фотон поглотится p_a
Для моделирования необходимы следующие спектральные оптические характеристики среды:
$\sigma(r,\lambda) = a(r,\lambda) + b(r,\lambda)$ — коэффициент ослабления среды,
$a(r,\lambda) = a_w(r,\lambda) + a_{chl}(r,\lambda) + a_{doc}(r,\lambda) + a_{sm}(r,\lambda) = \sum_{i=1}^{4} a_i$ — коэффициент поглощения среды,
$b(r,\lambda) = b_w(r,\lambda) + b_{chl}(r,\lambda) + b_{doc}(r,\lambda) + b_{sm}(r,\lambda) = \sum_{i=1}^{4} b_i$ — коэффициент рассеяния среды,
a_i и b_i — соответствующие коэффициенты поглощения и рассеяния i-й компоненты среды.
w — вода, chl — ХЛ (хлорофилл), doc — РОВ (растворимые органические вещества), sm — МВ (минеральные взвеси).
Вводя удельные коэффициенты поглощения и рассеяния a_i^* и b_i^* на длине волны для единичной концентрации i-й компоненты, итоговые свойства можно представить следующим образом:

$$a(r,\lambda) = a^*(r,\lambda)\cdot C, \quad b(r,\lambda) = b^*(r,\lambda)\cdot C,$$

$$a^*(r,\lambda) = [a_w(r,\lambda), a^*_{chl}(r,\lambda), a^*_{doc}(r,\lambda), a^*_{sm}(r,\lambda)]$$
$$b^*(r,\lambda) = [b_w(r,\lambda), b^*_{chl}(r,\lambda), b^*_{doc}(r,\lambda), b^*_{sm}(r,\lambda)]$$

$C = [1, C_{chl}, C_{doc}, C_{sm}]$ — концентрации соответствующих компонент.
Также при моделировании процесса флуоресценции понадобятся такие параметры как квантовые выходы флуоресценции ХЛ (η_{chl}) и РОВ (η_{doc}), параметры функции распределения Гаусса ($\sigma_{chl}, \sigma_{doc}$) с использованием которых аппроксимируется полоса излучения ХЛ и РОВ, а также значение длины волны максимума излучения.
При моделировании комбинационного рассеяния воды понадобится параметр $b_r(r,\lambda)$ — коэффициент рамановского рассеяния.

$$b_w(r,\lambda) = b_{el}(r,\lambda) + b_r(r,\lambda)$$

При моделировании первой фазы возможна следующая вероятностная цепочка:

а) вероятность того, что фотон испытает акт рассеяния равна $p_b(r,\lambda) = b(r,\lambda)/\sigma(r,\lambda)$

б) вероятность того, что произойдет комбинационное рассеяние воды $p_r(r,\lambda) = b_r(r,\lambda)/b(r,\lambda)$

в) вероятность того, что фотон поглотится равна $p_a(r,\lambda) = a(r,\lambda)/\sigma(r,\lambda)$

г) вероятность того, что фотон поглотится ХЛ равна $p_{a_{chl}}(r,\lambda) = a_{chl}(r,\lambda)/\sigma(r,\lambda)$

д) вероятность того, что фотон, поглощенный ХЛ, переизлучится равна η_{chl}

е) вероятность того, что фотон поглотится РОВ равна $p_{a_{doc}}(r,\lambda) = a_{doc}(r,\lambda)/\sigma(r,\lambda)$

ж) вероятность того, что фотон, поглощенный РОВ переизлучится равна η_{doc}.

При реализации событий б), д) или ж) процесс случайного блуждания на длине волны λ останавливается и начинается процесс блуждания фотона с меньшей энергией на длине волны $\lambda' > \lambda$. Новая длина волны выбирается согласно функции распределения Гаусса с соответствующими параметрами для ХЛ и РОВ, для рамановского рассеяния функция распределения по частотам также аппроксимируется функцией Гаусса с максимумом интенсивности $\lambda_{max} = \dfrac{\lambda}{-3357\cdot 10^{-7}\cdot\lambda + 1}$.
Следующей фазой является моделирование перехода $(r,w) \to (r',w')$. Т.е. нахождение нового направления, длины свободного пробега и пересчет координат. При моделировании косинуса угла рассеяния индикатрисы выбирались следующим образом: для флуоресцентного излучения предполагалось, что угловое распределение светового поля под поверхностью воды изотропно, в противоположном случае в качестве индикатрисы

выбиралась реальная заданная таблично кусочно-постоянная функция, являющаяся средневзвешанной индикатрисой, зависящая от длины волны. Водное пространство предполагалось состоящим из нескольких однородных параллельных горизонтальных слоев заданной толщины, в каждом из которых все оптические параметры среды постоянны. В связи с этим предположением и вычислялась длина свободного пробега.
Для учета влияния атмосферы использовалась трехслойная модель безоблачной стандартной атмосферы, предложенная Комиссией по радиации Международной ассоциации метеорологии и физики атмосферы [6].

2 Численный метод

В настоящем исследовании во всех численных экспериментах в качестве основной была использована модель BEO, подробное описание приведено в [3]. Это четырехкомпонентная модель, включающая в себя спектральные значения сечений поглощения и обратного рассеяния для самой воды, фитопланктона ХЛ, МВ и РОВ в спектральном диапазоне 410–690 нм с шагом $\Delta\lambda$=20 нм. С использованием результатов работы [1] спектральный диапазон был расширен в коротковолновую область до 310 нм. Отсюда же была взята оценка величины $b_r(\lambda) = (2.7 \pm 0.2) \cdot 10^{-4}$ м$^{-1}$ при λ=488 нм для моделирования рамановского рассеяния воды, спектральная зависимость $b_r(\lambda)$ от длины волны пропорциональна λ^{-5}. Включение в рассмотрение коротковолнового диапазона спектра падающего потока обусловлено учетом рамановского рассеяния воды, которое сдвигает спектр приблизительно на ∼75 нм. При моделировании флуоресценции в свете совокупных изученных данных полоса испускания была представлена функцией Гаусса с центром (длиной волны максимума) при 685 нм для хлорофилла и 490 нм для РОВ с полушириной $\sigma_{chl} = 25$ и $\sigma_{doc} = 100$ соответственно. Квантовый выход для ХЛ в данных вычислениях принимался равным $\eta_{chl} = 0,03$, хотя, как известно, он зависит от состава фитопланктона. При нахождении значения квантового выхода для РОВ η_{doc} использовались данные таблицы:

λ, нм	310	330	350	370	390	410	430	450	470
$\eta_{doc} \times 10^4$	125	175	230	245	270	260	230	210	0

Таблица 1: Квантовый выход РОВ

3 Результаты

На рис. 1 представлен спектральный состав восходящего излучения при $z = h_-$, вычисленный на одинаковом количестве траекторий $3 \cdot 10^6$, для плоского случая (1) и для случая с учетом волнения при скорости ветра 7 м/с (2), для начальной длины волны λ=450 нм и начальном угле падения 5° над горизонтом и концентрацией РОВ 5 мгС/л и концентрацией ХЛ равной нулю.

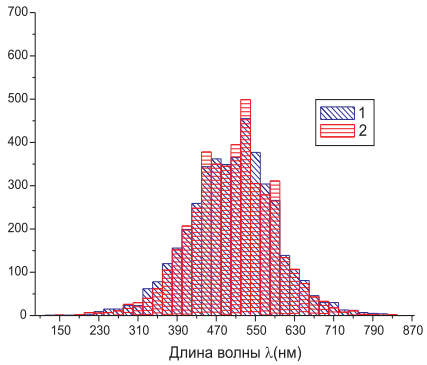


Рис. 1: Спектральный состав восходящего излучения, $\lambda_\circ$=450 нм, C_{doc}=5 мгС/л, C_{chl}=0

На рис. 2 представлен спектральный состав восходящего излучения при $z = h_-$, вычисленный на одинаковом количестве траекторий $3 \cdot 10^6$, для начальной длины волны λ=450 нм, начальном угле падения 5° над горизонтом (слева) и начальном угле падения 30° над горизонтом (справа), концентрацией РОВ 5 мгС/л и концентрацией ХЛ равной 2 мкг/л.

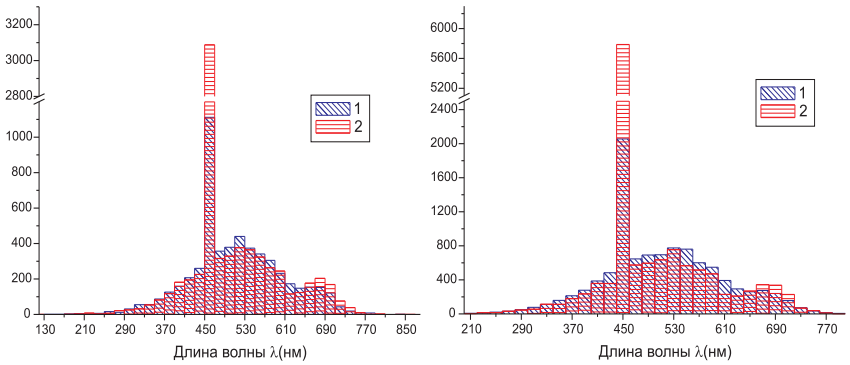


Рис. 2: Спектральный состав восходящего излучения, $\lambda_\circ$=450 нм, C_{doc}=5 мгС/л, C_{chl}=2 мкг/л

На рис. 3 представлен спектральный состав восходящего излучения при $z = h_-$, вычисленный на одинаковом количестве траекторий $3 \cdot 10^6$, для начальной длины волны λ=390 нм, начальном угле падения 5° над горизонтом (слева) и начальном угле падения 30° над горизонтом (справа), концентрацией РОВ 5 мгС/л и концентрацией ХЛ равной 2 мкг/л.
Номера функций соответствуют соответственно плоскому случаю (1) и с учетом волнения водной поверхности (2).

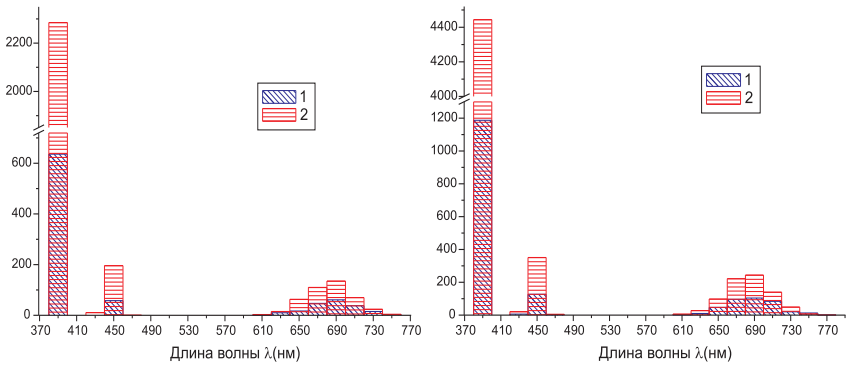


Рис. 3: Спектральный состав восходящего излучения, $\lambda_\circ$=390 нм, C_{doc}=5 мгС/л, C_{chl}=2 мкг/л

На рис. 4 представлены графики коэффициента диффузии водного слоя $R(\lambda, h_-)$, вычисленного непосредственно под границей раздела двух сред, который по определению равен отношению восходящей освещенности $E_{up}(\lambda, h_-)$ к нисходящей $E_d(\lambda, h_-)$. График (a) соответствует случаю $C_{chl} = 0$ мкг/л, а графики (b) и (c) случаю $C_{chl} = 2$ мкг/л, во всех случаях $C_{doc} = 5$ мгС/л, случаи (a) и (b) соответствуют углу падения света 5° над горизонтом, а случай (c) углу падения света 30° над горизонтом. Номера функций также соответствуют плоскому случаю (2) и с учетом волнения (1), графики представлены в логарифмическом масштабе.

Рисунок доказывает, что поскольку графики (b) и (c) совпадают, то $R(\lambda, z)$ не зависит от начального угла падения. График (a) показывает, что при наличии в воде только РОВ (без ХЛ) различие моделей волновой поверхности сказывается слабее.

Заключение

В работе получены следующие результаты. При моделировании имитации поверхности морского волнения очень важен выбор модели. Важным параметром при выборе модели является параметр, называющийся фактором увеличения поглощенного излучения $I_{abs} = (1-\alpha)/(1-R(\beta))$, где α — альбедо случайной поверхности, равное среднему коэффициенту отражения света от поверхности, а $R(\beta)$ — коэффициент Френеля для плоского слоя при заданной высоте Солнца над горизонтом β. В таблице 2 приведены результаты расчетов фактора увеличения поглощенного излучения для трех различных моделей:

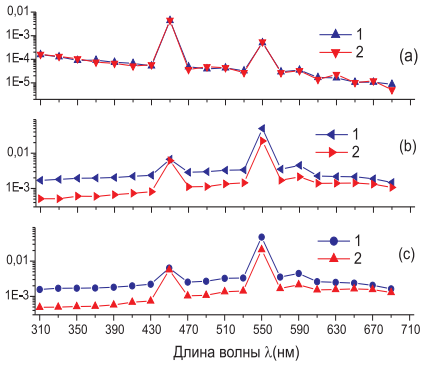


Рис. 4: Коэффициент диффузии, C_{doc}=5 мгС/л, (a) $C_{chl} = 0$, (b) и (c) C_{chl}=2 мкг/л

1) модель, предложенная Каргиным и Пригариным для скорости ветра 7 м/с [5]

2) упрощенная фацетная модель Кокса — Манка для скорости ветра 7 м/с [2]

3) модель синусовой волны $z = A \cdot \sin kx$, где $k = 2\pi/\lambda$ (λ — длина волны) с крутизной волны $4A/\lambda = 0.1$.

Высота Солнца	модель 1	модель 2	модель 3
5°	1,5255	1,6164	1,8851
10°	1,1427	1,0461	1,2402
15°	1,0496	0,9428	1,0735
20°	1,0194	0,9436	1,0217
30°	1,0041	0,9776	1,0007
40°	1,0013	0,9920	0,9993
50°	1,0007	0,9970	0,9997
60°	1,0006	0,9989	1,0001

Таблица 2: Фактор увеличения поглощенного излучения.

Из таблицы следует очевидный вывод, что в этом смысле свойства моделей довольно отличаются. Стоит отметить, что в модели 1 и модели 3 учитывается возможное неоднократное переотражение света от поверхности, а в модели 2 нет. При неоднократном переотражении света средний коэффициент отражения вычислялся в виде произведения коэффициентов отражения при каждом столкновении $\alpha = R_1(s_1) \cdot \ldots R_k(s_k)$, где $R_i(s_i)$ — коэффициент Френеля в i-й точке столкновения с поверхностью, зависящий от нормали к поверхности в данной точке s_i.

Список литературы

[1] Поздняков Д.В., Лясковский А.В., Грассл Х., Петерсон Л. Численное моделирование трансспектральных процессов (ТП) взаимодействия света с водной средой.Воздействие ТП на спектральный состав восходящего излучения. ИССЛЕДОВАНИЕ ЗЕМЛИ ИЗ КОСМОСА, 2000, №5, с. 3–15.

[2] Cox C., Munk W. Measurement of the Roughness of the Sea Surface from Photographs of the Sun's Glitter// Journal of the Optical Society of America. 1954. V. 44, Num. 11, P. 838–850.

[3] Кондратьев К.Я., Поздняков Д.В., Исаков В.Ю. Гидрооптические и радиационные эксперименты на озерах. Л.: Наука, 1990 С.115.

[4] Кондратьев К.Я., Кантер Р.Р., Каргин Б.А., Поздняков Д.В. Численное моделирование в задачах оптического дистанционного зондирования внутренних водоемов. Л.: Наука, 1987 С. 62.

[5] Кантер Р.Р., Пригарин С.М. Численное моделирование морского ветрового волнения для исследования поля отраженного оптического излучения. ВЦ СО АН СССР, Новосибирск, 1989 С. 25.

[6] McClarchey R.E., Bolle H.J., Kondratyev K.Ya. Report of the IAMAP RC WG on standart atmosphere. Boulder (Colorado), 1982 p.20.

Ольга Сергеевна Ухинова — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: olsu@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

О ВАРИАЦИОННОМ ИНТЕРПОЛИРОВАНИИ РЕЗУЛЬТАТОВ РЕШЕНИЯ НЕСКОЛЬКИХ ОПОРНЫХ ЗАДАЧ

В. В. Учайкин[1], В. А. Литвинов[2], Е. В. Кожемякина[1], И. И. Кожемякин[1],

[1] *Ульяновский государственный университет, 432017, Ульяновск*

[2] *Барнаульский юридический институт МВД России, 656038, Барнаул*

УДК 517.97

Известно, что двойственное представление задач (через основную и сопряженную в смысле Лагранжа функции) позволяет сформулировать эффективную версию теории малых возмущений (Л.Н. Усачёв, Г.И. Марчук, В.В. Орлов и др.) [1, 2], однако попытки расширить область применения путём повышения порядка теории возмущений резко усложняют процедуру решения (С.Б. Шихов и др.) [3]. В связи с этим, в ряде работ были предприняты поиски альтернативных подходов. К их числу относится и наш подход, в котором в качестве основной («невозмущённой») задачи предлагается выбирать не одну, а несколько.

В настоящем докладе продолжаются исследования особенностей этого метода, начатые в [4] для однопараметрической задачи. Здесь речь идёт о стационарной диффузии в бесконечной (с поглощением) среде от плоского равномерного в конечном слое источника и исследуется усреднённая по нему концентрация. В этой задаче два параметра (коэффициент диффузии и коэффицент поглощения), образующие систему координат пространства моделей. Рассматривается несколько расположений опорных точек, показываются области ограниченной заданными значениями относительной погрешности. Сопоставление с точными решениями свидетельствует о высокой эффективности предлагаемого метода по сравнению с теорией возмущений.

Ключевые слова: Теория возмущений, сопряжённые функции, вариационный функционал

Введение

Математически, идею исследуемого метода можно представить следующим образом. Рассматривается задача о вычислении значения линейного функционала

$$J = (w, f) \equiv \int w(x) f(x) dx, \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

где f — решение уравнения

$$Lf = s \tag{1}$$

с известным оператором L и известной правой частью $s = s(x)$. В задачах теории переноса функция s характеризует распределение источников в фазовом пространстве, f — создаваемое ими поле, а $w(x)f(x)dx$ — реакцию элемента dx чувствительного объёма детектора на создаваемое в этом элементе поле $f(x)$. Тот же самый функционал может быть представлен и через решение сопряжённого (в лагранжевом смысле) уравнения

$$L^+ f^+ = w \tag{2},$$

при этом линейный функционал примет вид

$$J = (f^+, s) \equiv \int f^+(x) s(x) dx.$$

Оператор L в реальных задачах имеет сложный вид, и процедура решения задачи (1) требует значительных затрат времени, тогда как математическое сопровождение технологического процесса конструирования,

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-01-00556.

изготовления и настройки сложнейших современных устройств нуждается в более оперативных вычислительных средствах.

Одним из таких средств является теория возмущений, в которой вычисления разбиваются на два этапа: вначале находится грубоватое (нулевое) приближение к решению задачи, называемое часто невозмущённым решением,

$$J_0 = (w, f_0) = (f_0^+, s),$$

где f_0 и f_0^+ — решения уравнений (1) и (2) с теми же правыми частями, но с операторами L_0 и L_0^+ соответственно. В рамках этой теории (см. напр. [5]), искомый функционал представляется в виде ряда

$$J = J_0 + (f_0^+, Vf_0) + (f_0^+, VG_0Vf_0) + \ldots, \tag{3}$$

где $V = L_0 - L$ — возмущение управляющего оператора, $G_0 = L^{-1}$ — оператор Грина невозмущённой задачи, а $f_0^+ = G_0^+ w$ — невозмущённая сопряжённая функция (ценность).

1 Вариационное интерполирование

Теория возмущений первого порядка позволяет получить приближённое решение в окрестности единственной опорной точки («нулевого приближения»), однако попытки расширить область применения путём повышения порядка теории возмущений резко усложняют процедуру решения. Вариационное же интерполирование основывается на использовании нескольких опорных точек (в пространстве моделей), для которых известны решения (в двойственном представлении). Искомый же функционал ищется в виде стационарного функционала от линейной комбинации опорных решений.

Вариационный функционал $\mathcal{J}(\phi^+(\cdot), \phi(\cdot))$ обладает следующими свойствами:

1) на функциях f^+ и f, являющихся точными решениями соответствующих уравнений, он дает точное значение величины J;

2) при малых погрешностях в задании этих функций, его значения отличаются от точного на величину высшего порядка малости.

Другими словами, на точном решении задачи, задаваемом парой функций f^+ и f, функционал $\mathcal{J}$ должен быть стационарен: его вариационные производные первого порядка должны обращаться в нуль:

$$\delta\mathcal{J}/\delta f^+(x) = 0,$$

$$\delta\mathcal{J}/\delta f(x) = 0.$$

Простейшим примером такого функционала является билинейный функционал [1]

$$\mathcal{J}(f^+, f) = (w, f) + (f^+, s) - (f^+, Lf), \tag{4}$$

который и используется в настоящей работе.

Отметив опорные операторы и соответствующие им функции индексами, принимающими значения от 1 до n (число опорных операторов) , представим входящие в (4) функции в виде линейных суперпозиций решений опорных задач с теми же самыми правыми частями $s(x)$ и $w(x)$,

$$f^+(x) = \sum_{i=1}^{n} c_i^+ f_i^+(x), \quad f(x) = \sum_{i=1}^{n} c_i f_i(x), \tag{5}$$

а условия стационарности

$$\frac{\partial}{\partial c_i}\mathcal{J}\left(\sum c_i^+ f_i^+, \sum c_i f_i\right) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial c_i^+}\mathcal{J}\left(\sum c_i^+ f_i^+, \sum c_i f_i\right) = 0.$$

Подстановкой (5) приводим их к системе уравнений

$$\sum_{i=1}^{n} L_{ik} c_i^+ = J_k, \quad \sum_{i=1}^{n} L_{ki} c_i = J_k, \quad k = 1, 2, \ldots, n, \tag{6}$$

где $L_{ij} = L_{ij}(L) = (f_i^+, Lf_j)$. Решая систему (6), подставляя результат в аппроксимации (5) и заменяя ими точные функции f^+ и f в вариационном функционале (4), получаем приближённое (*интерполяционное*) значение искомого функционала

$$\tilde{J} = \mathcal{J}\left(\sum_{i=1}^{n} c_i^+ f_i^+(\cdot), \sum_{i=1}^{n} c_i f_i(\cdot)\right).$$

2 Описание задачи

В слое $(-1, 1)$ бесконечной однородной среды с коэффициентом поглощения диффундирующих частиц σ и коэффициентом диффузии d равномерно распределён стационарный источник с плотностью $s = 1/2$ (рис. 1). Процесс описывается уравнением диффузии

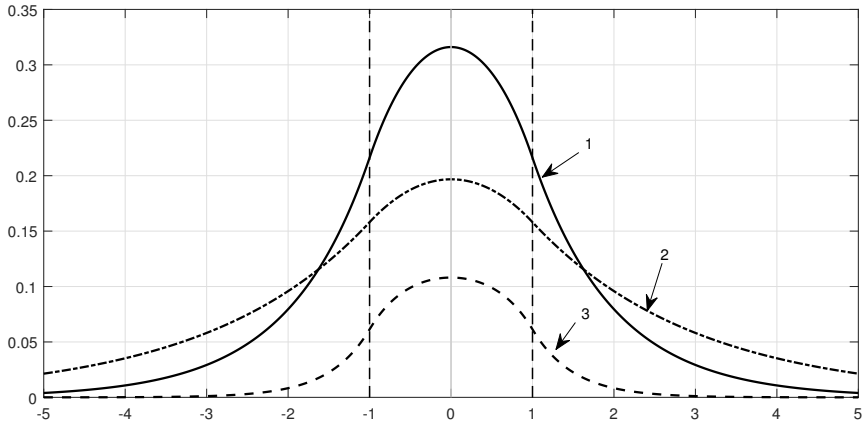


Рис. 1: Значение искомого функционала. 1 — для $(\sigma = 1, d = 1)$, 2 — для $(\sigma = 1, d = 2)$, 3 — для $(\sigma = 2, d = 1)$.

$$-df''(x) + \sigma f(x) = s(x), \quad s(x) = \begin{cases} 1/2, & |x| < 1; \\ 0, & |x| > 1, \end{cases}$$

функция Грина которого имеет вид

$$g(x, x') = \frac{1}{2\sqrt{\sigma d}} e^{-\sqrt{\sigma/d}|x-x'|}, \quad -\infty < x < \infty,$$

позволяющий представить основную и сопряжённую функции задачи в аналитическом виде:

$$f(x) = f^+(x) = \begin{cases} \frac{1}{2\sigma}\left[1 - e^{-\sqrt{\sigma/d}}\ \mathrm{ch}(\sqrt{\sigma/d}\ x)\right], & |x| < 1; \\ \frac{1}{2\sigma} e^{-\sqrt{\sigma/d}\ |x|}\ \mathrm{sh}(\sqrt{\sigma/d}), & |x| > 1. \end{cases}$$

Искомый функционал

$$J = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} f(x)dx = \frac{1}{4\sigma}\left[2 - \sqrt{d/\sigma}\left(1 - e^{-2\sqrt{\sigma/d}}\right)\right]. \tag{7}$$

3 Демонстрация погрешности интерполяции

Перепишем $f(x)$ в экспоненциальной форме:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{4\sigma}\left(\mathrm{e}^{(|x|+1)\sqrt{\sigma/d}} - \mathrm{e}^{(|x|-1)\sqrt{\sigma/d}}\right), & |x| \geq 1, \\ \frac{1}{4\sigma}\left(2 - \mathrm{e}^{-(|x|+1)\sqrt{\sigma/d}} - \mathrm{e}^{(|x|-1),\sqrt{\sigma/d}}\right), & |x| < 1. \end{cases}$$

Для вычисления J необходимо будет вычислить $f''(x)$:

$$f''(x) = \begin{cases} \frac{1}{4\,\sigma}\left(\frac{\sigma}{d}\,\mathrm{e}^{(|x|+1)\sqrt{\sigma/d}} - \frac{\sigma}{d}\,\mathrm{e}^{(|x|-1)\sqrt{\sigma/d}}\right), & |x| \geq 1, \\ \frac{1}{4\,\sigma}\left(-\frac{\sigma}{d}\,\mathrm{e}^{(|x|-1)\sqrt{\sigma/d}} - \frac{\sigma}{d}\,\mathrm{e}^{-(|x|+1)\sqrt{\sigma/d}}\right), & |x| < 1. \end{cases}$$

Для удобства, найдём отношение f'' к f

$$\frac{f''}{f} = \begin{cases} \frac{\sigma}{d}, & |x| \geq 1, \\ \frac{\sigma}{d} - \frac{2\,\sigma}{f\,d}, & |x| < 1. \end{cases}$$

Матричный элемент L_{ij} принимает вид:

$$L_{ij} = (f_i, L\,f_j) = \int_{-\infty}^{\infty} f_i\,L\,f_j\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} f_i\,(-d\,\frac{d^2}{dx^2} + \sigma)\,f_j\,dx =$$

$$= (\sigma - d\,\frac{\sigma_j}{d_j})\int_{-\infty}^{\infty} f_i\,f_j\,dx + \frac{d}{d_j}\int_{-1}^{1} f_i\,dx = (\sigma - d\,\frac{\sigma_j}{d_j})\,J_{ij} + \frac{d}{d_j}\,J_i,$$

где $J_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} f_i\,f_j\,dx$ — интеграл, используемый для вычисления матричного элемента, который имеет вид

$$J_{ij} = \begin{cases} \frac{d_i\,J_i - d_j\,J_j}{d_i\,\sigma_j - d_j\,\sigma_i}, & i \neq j, \\ \frac{3\,J_i}{2\,\sigma_i} - \frac{1-\mathrm{e}^{-2\sqrt{\sigma_i/d_i}}}{4\,\sigma_i}, & i = j. \end{cases}$$

Таким образом, матричный элемент L_{ij} принимает вид:

$$L_{ij} = \frac{d}{d_j}\,(\sigma_i J_{ij} + J_i) + \sigma\,J_{ij},$$

$$J_{ij} = \begin{cases} \frac{d_i\,J_i - d_j\,J_j}{d_i\,\sigma_j - d_j\,\sigma_i}, & i \neq j, \\ \frac{3\,J_i}{2\,\sigma_i} - \frac{1-\mathrm{e}^{-2\sqrt{\sigma_i/d_i}}}{4\,\sigma_i}, & i = j. \end{cases}$$

Линейная зависимость матричных элементов L_{ij} от σ и d приводит к дробно-полиномиальной форме представления зависимости искомого функционала от σ и d, что обычно позволяет получить лучшую точность, чем аппроксимация степенным рядом. Например, в рассматриваемом случае вдоль линии $\sigma/d = \mathrm{const}$ достаточно одной опорной точки, чтобы выражение J_i^2/L_{11} точно соответствовало искомому функционалу.

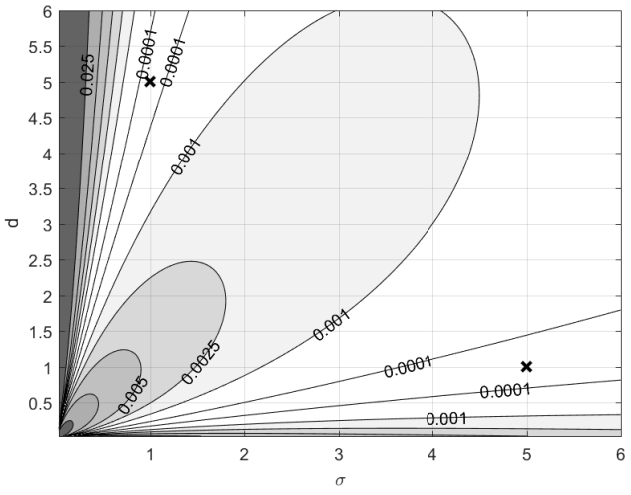


Рис. 2: Погрешность измерений $\varepsilon = \widetilde{J} - J$ для опорных точек $(\sigma = 5, d = 1)$ и $(\sigma = 1, d = 5)$. Крестиками здесь и ниже отмечены опорные точки.

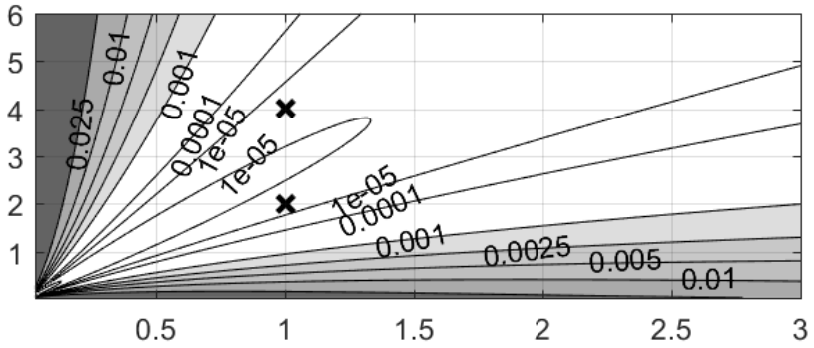


Рис. 3: Погрешность интерполяции $\varepsilon = \widetilde{J} - J$ для опорных точек $(\sigma = 1, d = 2)$ и $(\sigma = 1, d = 4)$.

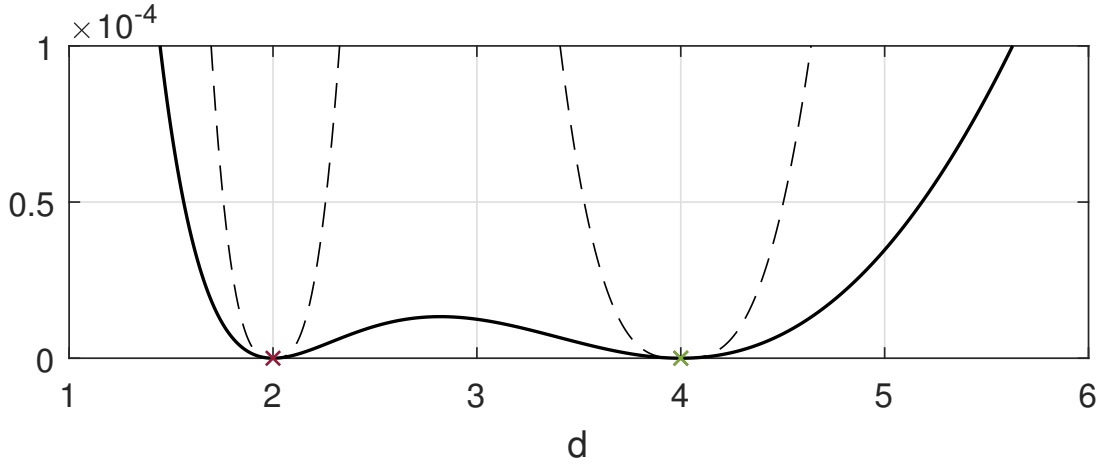


Рис. 4: Погрешность интерполяции $\varepsilon = \widetilde{J} - J$ для опорных точек $(\sigma = 1, d = 2)$ и $(\sigma = 1, d = 4)$ вдоль оси d при $\sigma = 1$. Штриховой линией показана погрешность второго приближения теории возмущений.

На рис. 2 представлена топограмма интерполяционной погрешности $\varepsilon = \widetilde{J} - J$ в случае применения двух опорных операторов с несовпадающими параметрами $(\sigma = 5, d = 1)$ и $(\sigma = 1, d = 5)$. В некоторой окрестности прямых, проходящих через начало координат и опорные точки, аппроксимация оказывается очень точной. Наибольшая погрешность наблюдается, когда хотя бы одна из координат стремится к 0, а также в области между опорными точками. На двух следующих (3 и 4) рисунках приведены результаты расчёта погрешности в случае однопараметрической интерполяции, когда один из параметров двухпараметрической модели совпадает.

4 Заключение

В работе продемонстрировано применение вариационного метода интерполирования к одномерной диффузионной задаче и показана его высокая эффективность. Сложная топография поля погрешностей в многопараметричих задачах (на примере рассмотренной в статье двухпараметрической задачи) указывает на серьёзность проблемы выделения областей повышенной эффективности метода и необходимость разработки методики её определения. Это особенно важно в связи с интенсивным развитием теории решения обратных задач в свете предложенных 40 лет тому назад идей Г.И. Марчука [6]. Необходимо также отметить, что в рассматриваемом примере оператор L был функцией двух переменных, тогда как в более общем (и интересном) случае он может быть функционалом от функций, характеризующих зависимость свойств среды от координат, при этом формальная структура данного метода сохраняется без изменений.

Список литературы

[1] Марчук Г. И., Орлов В. В. К теории сопряжённых функций // Сб. Нейтронная физика. М.: Госатомиздат, 1961. С.30–45.

[2] Усачев Л.Н., Уравнения для ценности нейтронов, кинетика реакторов и теория возмущений // Реактостроение и теория реакторов. М.: Изд-во АН СССР, 1955. С. 251

[3] Шихов С.Б., Шишков Л.К. Теория возмущений высших порядков для решения некоторых задач расчёта реакторов. // Теория и физика реакторов. Сб. статей. Под ред. Л.Н. Юровой. М., Атомиздат, 1967, С. 3–29.

[4] Учайкин В. В. Метод вариационного интерполирования в ядерно-технических расчётах // М.: Атомная энергия. 1989. Том 61, Вып. 1. С. 54–55.

[5] Кольчужкин А.М., Учайкин В. В. Введение в теорию проихожденя частиц через вещество // М.: Атомиздат, 1978.

[6] Марчук Г.И., Методы вычислительной математики//М.: Физматлит, Наука, 1977.

Владимир Васильевич Учайкин — д.ф.-м.н., заведующий кафедрой теоретической физики;
Ульяновский государственный университет;
e-mail: vuchaikin@gmail.com;
Владимир Андреевич Литвинов — начальник кафедры информатики и специальной техники;
Барнаульский юридический институт МВД России;
e-mail: lva201011@yandex.ru;
Елена Владиславовна Кожемякина — старший преподаватель кафедры теоретической физики;
Ульяновский государственный университет;
e-mail: elvk@mail.ru;
Илья Игоревич Кожемякин, магистрант кафедры информационных технологий;
Ульяновский государственный университет;
e-mail: kozhilya@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

УСТОЙЧИВОЕ АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ ВОЛНОВЫХ ПОЛЕЙ В ШАРЕ ПРОИЗВОЛЬНОГО РАЗМЕРА

А. Г. Фатьянов

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 550.344

В работе получено явное выражение для функции Грина в спектральной области для волнового поля в произвольном слоистом шаре. Для раскрытия неопределенностей в функции Грина использована новая асимптотика цилиндрических функций. Это позволило получить устойчивое аналитическое решение для волновых полей в шаре произвольного размера. Приведены результаты расчета волнового поля для Земли с реальными параметрами. Показано, что низкоскоростное внешнее ядро Земли обладает свойствами собирающей линзы. Возникает область фокусировки. Это приводит к формированию мощной волны. Это явление ранее было неизвестно.

Ключевые слова: шар, функция Грина, аналитическое решение, асимптотика, устойчивость, Земля, линза, фокусировка.

Введение

В работе рассматривается задача построения устойчивого аналитического решения для волновых полей в слоистом шаре произвольного размера. Метод построения аналитического решения для волновых полей в шаре давно известен. После известных преобразований Фурье — Лежандра искомая постановка сводится к двухпараметрическому семейству краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений. Решение искомой задачи в каждом сферическом слое находится в виде линейной комбинации функций Бесселя [1]. Далее неизвестные коэффициенты определяются из известных условий сопряжения на границе слоев. В итоге для их определения получается матричная система линейных уравнений. Поскольку функции Бесселя разных типов быстро стремятся к нулю и бесконечности, возникает неустойчивость. Причем чем больше радиус шара в относительных величинах (длинах волн), тем быстрее они возникают. В этой ситуации вычисление на компьютере становится неустойчивым.

Устойчивое аналитическое решение построено на основе сведения краевой задачи к двум задачам Коши. Получено явное решение соответствующего нелинейного уравнения Риккати, что не было известно ранее. Далее для построения решения используется новая асимптотика цилиндрических функций, полученная в [2]. Это дает устойчивое аналитическое решение для волновых полей в неоднородном шаре произвольного размера.

Приведены результаты расчетов волновых полей для Земли с реальными параметрами. Показано, что низкоскоростное внешнее ядро Земли обладает свойствами собирающей линзы. Возникает область фокусировки. Это приводит к формированию мощной волны. Это явление ранее было неизвестно.

1 Постановка задачи

Математическая постановка задачи моделирования волновых полей формулируется в сферической системе координат ($0 \le r \le R_0$, $0 \le \theta \le \pi$, $0 < \phi \le 2\pi$) следующим образом: определить компоненты вектора смещения для неупругой среды, которые удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$\rho\frac{\partial^2 u_r}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial \tau_{r\theta}}{\partial \theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial \tau_{\phi r}}{\partial \phi} + \frac{1}{r}(2\sigma_r - \sigma_\theta - \sigma_\phi + \tau_{r\theta}\cos\theta) + f_r \cdot f(t),$$

$$\rho\frac{\partial^2 u_\theta}{\partial t^2} = \frac{\partial \tau_{r\theta}}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial \sigma_\theta}{\partial \theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial \tau_{\theta\phi}}{\partial \phi} + \frac{1}{r}((\sigma_\theta - \sigma_\phi)\cos\theta + 3\tau_{r\theta}) + f_\theta \cdot f(t), \tag{1}$$

$$\rho\frac{\partial^2 u_\phi}{\partial t^2} = \frac{\partial \tau_{\phi r}}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial \tau_{\theta\phi}}{\partial \theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\sigma_\phi}{\partial \phi} + \frac{1}{r}(2\tau_{\theta\phi}\cos\theta + 3\tau_{\phi r}) + f_\phi \cdot f(t).$$

с начальными условиями при t=0

$$u_r = \frac{\partial u_r}{\partial t} = u_\theta = \frac{\partial u_\theta}{\partial t} = u_\phi = \frac{\partial u_\phi}{\partial t} = 0,$$

и граничными данными при $r = R_0$

$$\sigma_r = \tau_{\theta r} = \tau_{\phi r} \tag{2}$$

Предполагается, что компоненты тензора напряжений связаны с компонентами тензора деформаций (а они с компонентами вектора смещения) известными соотношениями, в которых коэффициенты λ, μ по принципу Вольтерра заменяются интегральными операторами Λ, M, учитывающими влияние упругого последействия.

$$\Lambda < x > \equiv \lambda x(t) - \lambda^1 \int\limits_{-\infty}^{t} h(t-\tau)x(\tau)d\tau, \quad \mathrm{M} < x > \equiv \mu x(t) - \mu^1 \int\limits_{-\infty}^{t} g(t-\tau)x(\tau)d\tau \tag{3}$$

Здесь λ^1, μ^1 — величины, определяющие уровень поглощения. Функции последействия (ядра) $h(\xi), g(\xi)$ определяют спектральный состав поглощения [3]. Среда предполагается кусочно-постоянной по координате r. На границах разрыва параметров ставятся известные условия сопряжения. Компоненты вектора силы $F = (f_r, f_\theta, f_\phi)$ описывают сосредоточенные и распределённые источники различного типа.

2 Построение аналитического решения для слоистого шара

Аналитическое решение для наглядности строится на примере распространения SH волн. Приложим в точке $r = d$, $\theta = 0$ вращательное воздействие в виде момента сил [3]:

$$F = \delta(r-d)\frac{\delta(\theta)}{d^3\sin^2\theta}f(t)e_\phi = f_\phi \cdot f(t)e_\phi \tag{4}$$

В этом случае задача определения вектора смещения в сферической системе координат сводится к нахождению единственной отличной от нуля компоненты вектора смещения $u_\phi(r,\theta,t)$из следующей краевой задачи.

$$\rho\frac{\partial^2 u_\phi}{\partial t^2} = \frac{1}{r^2}\mathrm{M} < \frac{\partial}{\partial\theta}(\frac{\partial u_\phi}{\partial\theta} - u_\phi ctg\theta) > + \frac{\partial}{\partial r}\left[\mathrm{M} < \frac{\partial u_\phi}{\partial r} - \frac{u_\phi}{r} >\right] +$$

$$+\frac{3}{r}\mathrm{M} < \frac{\partial u_\phi}{\partial r} - \frac{u_\phi}{r} > + \frac{2}{r^2}\mathrm{M} < (\frac{\partial u_\phi}{\partial\theta} - u_\phi ctg\theta)ctg\theta > + \rho f_\phi f(t), \tag{5}$$

$$\mathrm{M} < \frac{\partial u_\phi}{\partial r} - \frac{u_\phi}{r} >\Big|_{r=R_0} = 0, \tag{6}$$

$$u_\phi|_{t=0} = \frac{\partial u_\phi}{\partial t}\Big|_{t=0} = 0. \tag{7}$$

На границах разрыва параметров среды ставятся известные условия сопряжения. В случае рассмотрения сейсмологической модели жидкого ядра нужно задать дополнительное граничное условие:

$$\mathrm{M} < \frac{\partial u_\phi}{\partial r} - \frac{u_\phi}{r} >\Big|_{r=R_1} = 0.$$

На первом этапе решение ищется в виде разложения Фурье — Лежандра по переменным (θ, t).

$$u_\phi(r,\theta,t) = \frac{1}{2T}\frac{1}{\sqrt{r}}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty} u(r,k,\omega_n)\exp(i\omega_n t)P_k^1(\cos\theta) \tag{8}$$

Здесь $P_k^1(x)$ — полином Лежандра 1-го рода, $\omega_n = \frac{n\pi}{T}$. В итоге постановка (5)–(7) сведена к двухпараметрическому семейству (k,ω_n) краевых задач в каждом слое $r_{j+1} < r < r_j$ [3]. Для сокращения записи несущественные переменные обозначаются буквой c, а несущественные индексы опускаются.

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{du}{dr} - \frac{(k+0.5)^2}{r^2}u + c\cdot\delta(r-d)F(\omega) = -\frac{\omega^2}{v^2}u \tag{9}$$

$$-\frac{3}{2}\frac{1}{r} + \frac{du}{dr}\,|_{r=R_0} = 0 \tag{10}$$

Здесь $v^2 = (\mu - \mu^1\int\limits_0^T g(t)e^{-i\omega t}dt)/\rho$, $F(\omega)$ — спектр входного сигнала f(t).

Далее строится решение уравнения (9). Для этого вводится вспомогательная функция $\beta(r)$следующим образом:

$$-\frac{3}{2}\frac{1}{r}u + \frac{du}{dr} = \beta(r)\cdot u \tag{11}$$

После подстановки (11) в однородное уравнение (9) получим уравнение на $\beta(r)$.

$$\frac{d\beta}{dr} + \beta^2 + 4\cdot\frac{1}{r}\cdot\beta + \frac{(3/2)^2 - (k+0.5)^2}{r^2} = -\frac{\omega^2}{v^2} \tag{12}$$

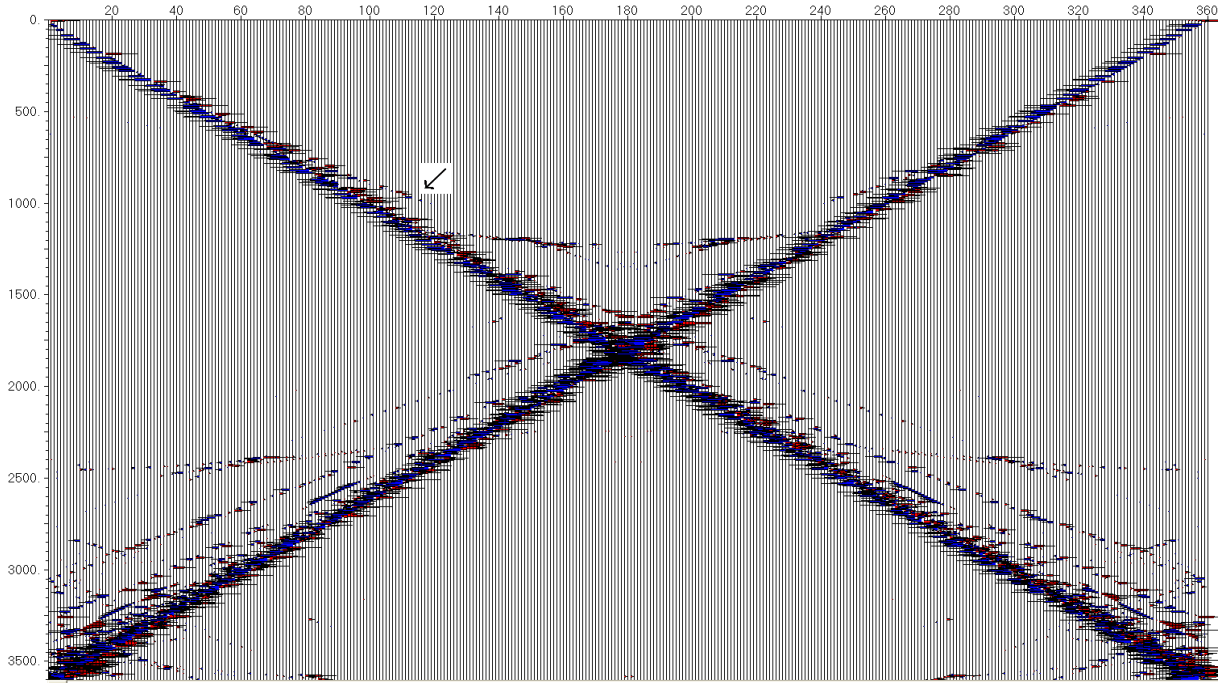


Рис. 1: Волновое поле для Земли. Стрелкой обозначено начало зоны тени для прямой волны.

Получено явное решение для (12) через функции Бесселя полуцелого индекса $J_{k+0.5}(z)$ и $J_{-k-0.5}(z)$. Это не было известно ранее. В итоге получен явный рекуррентный алгоритм нахождения функции $\beta(r)$ для произвольного r.

$$\beta_j = \frac{b_1 d_2 - b_2 d_1}{b_1 J_{-\nu}(a_j r_j) - b_2 J_\nu(a_j r_j)} \tag{13}$$

$$d_1 = (-1.5J_\nu(a_j r_j)/r_j + a_j J'_\nu(a_j r_j), \quad \nu = k + 0.5$$

$$d_2 = (-1.5J_{-\nu}(a_j r_j)/r_j + a_j J'_{-\nu}(a_j r_j), \quad a_j = \omega/v_j$$

$$b_1 = (-1.5J_\nu(a_j r_{j+1})/r_{j+1} + a_j J'_\nu(a_j r_{j+1}) - \beta_{j+1} J_\nu(a_j r_{j+1})$$

$$b_2 = (-1.5J_{-\nu}(a_j r_{j+1})/r_j + a_j J'_{-\nu}(a_j r_{j+1}) - \beta_{j+1} J_{-\nu}(a_j r_{j+1})$$

Рекурсия в (13) начинается от центра шара. При этом $\beta_j = \beta(r_j)$, $\beta_{j+1} = \beta(r_{j+1})$, $\beta|_{r=0} = 0$. Это с учетом условий сопряжения на границах разрыва параметров среды полностью решает искомую задачу для произвольного слоистого шара. При этом $\frac{1}{\beta}$ при $r = R_0$ — есть не что иное, как функция Грина.

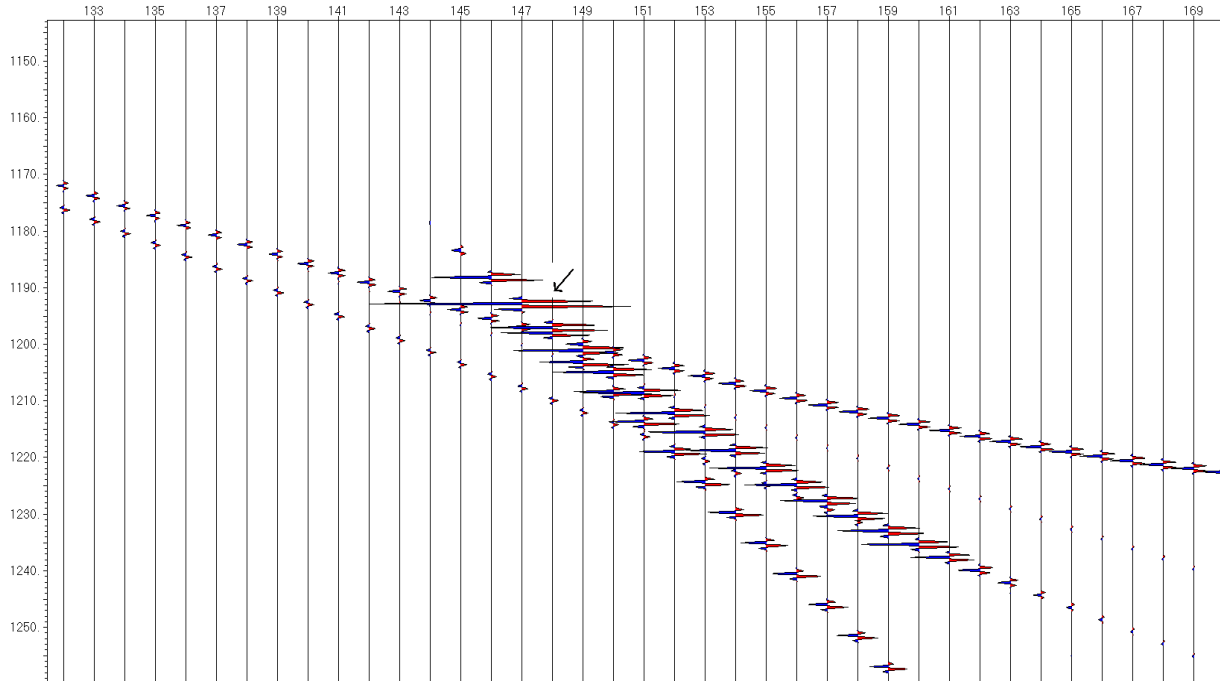


Рис. 2: Фрагмент волнового поля для Земли с первым вступлением. Стрелкой выделено сильное разрастание амплитуды.

3 Построение устойчивого решения

Построенное решение для шара не может непосредственно использоваться для вычислений. В [2] показано, что даже классическое решение для однородного шара [1] не может использоваться для численного решения. Дело в том, что при возрастании индекса бесселевых функций k в аналитическом решении возникают особенности (типа $\frac{0}{0}$ в случае однородного шара). Причем чем больше радиус шара (в относительных величинах) тем быстрее они возникают. Ряд исследователей для преодоления неустойчивости предлагают воспользоваться классической асимптотикой [4]. В [2] показано, что классическая асимптотика приводит к помехе в решении в виде ложной волны. И это в случае однородного шара, где казалось бы все проблемы решены. В [2] получена новая асимптотика бесселевых функций и показано, что её применение устраняет помеху в решении. На основе новой асимптотики раскрыты неопределенности в решении для произвольного слоистого шара. Это позволило получить устойчивое аналитическое решение для шара произвольного размера. С использованием (8) получено решение в физической области.

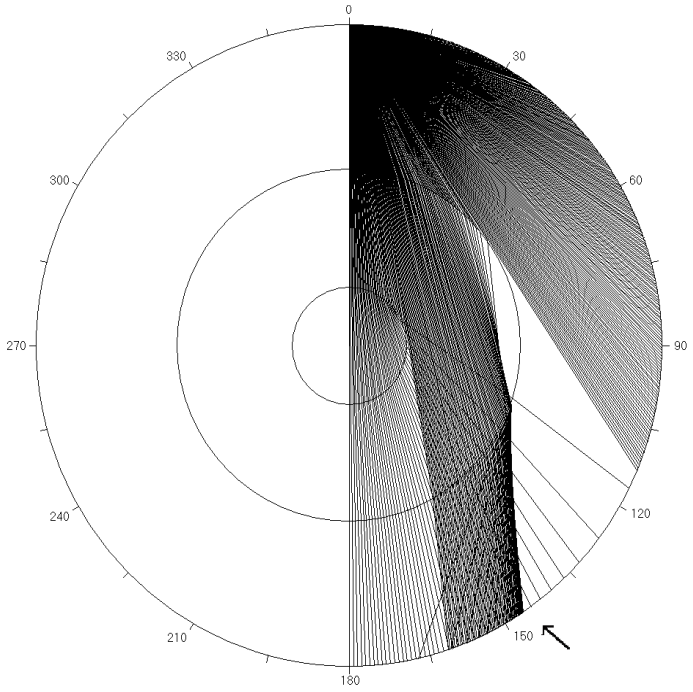


Рис. 3: Лучевая картина для Земли. Стрелкой обозначено место наибольшей фокусировки

4 Волновое поле для Земли с реальными параметрами

По разработанному алгоритму создан программный модуль для расчета волновых полей для тел космических размеров.

На рисунке 1 приведено волновое поле для обобщенной модели Земли, содержащей мантию, внешнее и внутреннее ядро. Размеры взяты реальными величинами. Так радиус Земли равен 6371.2 км. Выдача производится на дневной поверхности через 1 градус. По вертикали выдается время в секундах. Несущая частота взята в 1гц. Количество временных и пространственных частот в двойной сумме (8) — 100000 и 50000. На рисунке 1 стрелкой обозначена зона тени для прямой волны. Она начинается примерно на 118 градусах, что соответствует реальным значениям. На рисунке 2 приведен фрагмент волнового поля из рисунка 1. Он выбран так, чтобы четко выделить первое вступление. Стрелкой выделено сильное разрастание амплитуды непонятной природы. Для выяснения этого эффекта на рисунке 3 приведена лучевая картина для модели Земли. Из рисунка 3 видно, что низкоскоростное внешнее ядро Земли обладает свойствами собирающей линзы. Возникает область фокусировки. Это и приводит к формированию мощной волны. Это явление ранее было неизвестно.

Заключение

В работе получено явное решение в спектральной области для волнового поля в произвольном слоистом шаре, что не было известно ранее. Для построения устойчивого решения в шаре произвольного размера использована новая асимптотика цилиндрических функций. Приведены результаты расчета волнового поля для Земли с реальными параметрами. Выяснилось, что низкоскоростное внешнее ядро Земли обладает свойствами собирающей линзы. Возникает область фокусировки. Это приводит к формированию мощной волны. Это явление ранее было неизвестно.

Список литературы

[1] Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики М.: Наука, 1977, 735 с.

[2] Фатьянов А. Г. Устойчивое аналитическое решение для волновых полей в шаре // Математические заметки СВФУ. 2016. Т. 23, № 3. С. 91–103.

[3] Фатьянов А.Г. Численное моделирование волновых полей в неоднородном неупругом шаре. — Новосибирск. 1981. — 22 с. — (Препринт / АН СССР Сиб Отд-ние ВЦ; 337).

[4] V. A. Korneev and L. R. Johnson, "Scattering of elastic waves by a spherical inclusion. 1. Theory and numerical results," *Geophys. J. Int.*, no. 115, pp. 230–250, 1993.

Алексей Геннадьевич Фатьянов — д.ф.-м.н., зав. лабораторией Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН.
e-mail: fat@nmsf.sscc.ru.
Дата поступления — 3 мая 2017 г.

ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ: МОДЕЛИ И ТЕХНОЛОГИИ

А. М. Федотов[1,3], О. А. Федотова[2,3]

[1] *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*
[2] *Государственная публичная научно-техническая библиотека СО РАН, 630090, Новосибирск*
[3] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 004.62

Одной из основных современных тенденций социально-экономического развития общества является информатизация всех областей человеческой деятельности. Инструментом реализации этого всеобъемлющего процесса являются **информационные системы** — системы сбора, хранения, обработки, преобразования, передачи и обновления информации. Статья посвящена вопросам создания информационных систем, моделям и архитектуре.

Ключевые слова: модель, информационная система, метаданные, данные, информация, знание.

1 Предназначение информационных систем

В зависимости от конкретной области применения информационные системы (ИС) сильно различаются по своим функциям, архитектуре, реализации. Однако можно выделить одно свойство, которое является общим для всех ИС. Так как любая ИС предназначена для сбора, хранения и обработки информации, то в её основе лежит среда хранения и доступа к данным. Среда должна обеспечивать уровень надежности хранения и эффективность доступа, которые соответствуют области применения ИС.

Информационные системы предназначены для

- организации хранения информации (организация хранилищ, поддержка систем хранения данных);
- управления информацией (добавление, модернизация, изменение данных);
- управления доступом к информации (контроль исполнения правил регламентации доступа к данным), идентификация данных;
- поиска информации;
- извлечения информации и предоставления ее пользователю (компьютерному приложению) в необходимом ему виде (формате);
- визуализации (представление) информации в соответствии требованиями пользователя.

Цель работы ИС — обеспечение конечного пользователя необходимой информацией. Как правило, пользователя не интересует, как устроена технологическая «кухня» информационной системы. Более того, чем меньше эта «кухня» заметна, тем лучше построена та или иная ИС. Опыт показал, что использование проверенных временем и практикой типовых решений позволяет обеспечить эту технологическую «прозрачность» [9].

Кельвин Муэрс в [13] отмечал: *«Проектирование действенной информационной системы требует глубокого понимания психологии пользователей и знания их социального контекста. Мы не можем исходить из предположения, что люди хотят получить от нас информацию, даже когда знаем, что они нуждаются в ней. В основе большинства провалившихся веб-сайтов, невостребованных локальных сетей и никому не нужных интерактивных продуктов лежали ошибочные представления о пользователях и неверные модели их поведения при поиске информации. Пользователи — явление сложное. Пользователи — явление социальное. Информация — тоже».*

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки ведущей научной школы РФ № НШ-7214.2016.9.

«Таким образом, я предполагаю,» — писал К. Муэрс — *«что многие люди, возможно, не захотят получать информацию — и будут избегать пользоваться системой именно потому, что она снабжает их информацией. Обладание информацией причиняет беспокойство и создает неудобства. Всем нам знакомо это чувство. Получив информацию, вы должны прочитать ее, а это не всегда просто. Затем вам нужно постараться ее понять. Понимание может выявить, что вы действовали не в том направлении или что ваша работа была бесполезна. Получается, что отсутствие информации создает меньше проблем, чем ее наличие и использование.»*

Востребованность ИС подчиняется двум законам. *Закон первого лица*: «Информационная система любого предприятия работает только в том случае, если ее работа поддержана соответствующими нормативными актами предприятия и с ней работает первое лицо предприятия» и *закон Муэрса* [13]: «Степень использования информации прямо пропорциональна легкости ее получения». Система получения информации окажется невостребованной, если обладание информацией будет вызывать у клиента больше неудобств и беспокойства, чем ее отсутствие [13].

Очевидно, что автоматическая или автоматизированная переработка «информации» возможна лишь при наличии ее описания с помощью некоторого алгоритма, т. е. при наличии формальной модели данных и некоторой системы, которая ее воспринимает. Как отмечал А. А. Ляпунов, «информация всегда относительна, она зависит ... от того, какой информационной системой она воспринимается» [5].

Эффективная работа ИС возможна только тогда, когда мы располагаем «полноценной информацией»: т. е. «информация» должна быть не только полной, достаточной, но и своевременной, точной и непротиворечивой, а «информация», поступающая через различные по своей физической природе каналы, должна быть и согласованной.

2 Определения информационных систем

В этом вопросе нет единого определения. В обиходе **информационными системами** называют различные комплексы программно-аппаратных средств, позволяющие работать с данными, структурированными при помощи той или иной формальной модели.

При этом до сих пор присутствует путаница с понятиями «информационная система» (ИС) и «архитектура ИС»; она вовсе не безобидна и часто мешает на практике четко определить, что же является предметом разработки в конкретном проекте: ИС, только ее КСА (комплекс средств автоматизации) или автоматизированная система (АС) целиком. Для примера приведем два определения из ГОСТ'ов:

Информационная система: Комплекс, состоящий из процессов, технических и программных средств, устройств и персонала, обладающий возможностью удовлетворять установленным потребностям или целям [1];

Информационная система: система, предназначенная для сбора, передачи, обработки, хранения и выдачи информации потребителям и состоящая из следующих основных компонентов: программное обеспечение, информационное обеспечение, технические средства, обслуживающий персонал [2].

Стоит напомнить, что в 1950-е и 1960-е годы в СССР науки *об информации* занимали весьма достойное место, хотя их развитие и было затруднено спецификой социального устройства общества. Произошедший в последующие годы разворот к работе с данными и размытие термина «информатика» привели к тому, что многое из накопленного оказалось если не потерянным, то невостребованным, а культура работы с информацией была утеряна. Сегодня для большинства пользователей важнее потребление информационных сервисов, а не обеспечивающие его технологии.

Деструктивная роль информационного шума «многоязычия» осознана еще в сюжете Вавилонского столпотворения. В отличие от социальной среды, где «языки» наряду с информационной несут и социально-психологическую нагрузку, компьютерную среду нужно избавить от «многоязычия». Полисемия (многозначность представления) — враг информационного обмена, фактор внесения искажения и ошибок (семантического шума) на пути передачи информации. Поэтому устранение многозначности является одним из наиболее важных направлений в разработке формальных подходов представления информации и знаний.

Общество уже преодолело первый кризис «многоязычия» информационных технологий в технической сфере: в конце 1990 годов был принят целый ряд стандартов взаимодействия открытых систем OSI, которые сейчас восприняты всеми производителями компьютерного и телекоммуникационного оборудования.

Но наиболее серьезной проблемой является кризис в сфере представления информации. Важной деструктивной особенностью является отсутствие единых общепринятых определений в сфере информационных технологий, когда речь идет об обработке «информации». Прежде всего, потому что со времен А. Н. Колмо-

горова и Клода Шеннона на инженерном уровне произошло смешение понятий, объединение представлений об информации и данных или сигналах, кодирующих эту информацию, и под «информацией» стали понимать, по существу, наборы данных.

До последнего времени, пока ИС были относительно просты, отсутствие четкого разделения на «данные» и «информацию» не имело практического значения. Но с появлением сложных ИС, где функции распределены между человеком и машиной, а также с развитием таких дисциплин, как поддержка принятия решений и управление знаниями, требуются более точные определения базисных понятий: «данные», «информация» и «знание».

На сегодняшний день имеется два определения ИС (технологическое и инженерное):

Информационная система — это набор технологий, направленных на поддержку жизненного цикла «информации» и включающих три основные составляющие процесса: обработку и управление данными, управление информацией и управление знаниями [6];

Информационная система — это программно-аппаратный комплекс, включающий вычислительное и коммуникационное оборудование, программное и лингвистическое обеспечение, информационные ресурсы, а также обслуживающий (системный) персонал.

Часть реального мира, которая моделируется ИС, называется ее *предметной областью*. Поскольку модель предметной области, поддерживаемая информационной системой, материализуется в форме организованных необходимым образом информационных объектов, она называется *информационной моделью* (см. рис. 1). Информационные объекты характеризуются метаданными (данными об объекте), описывающим реальный объект. Информационные объекты могут иметь информационное содержание (контент).

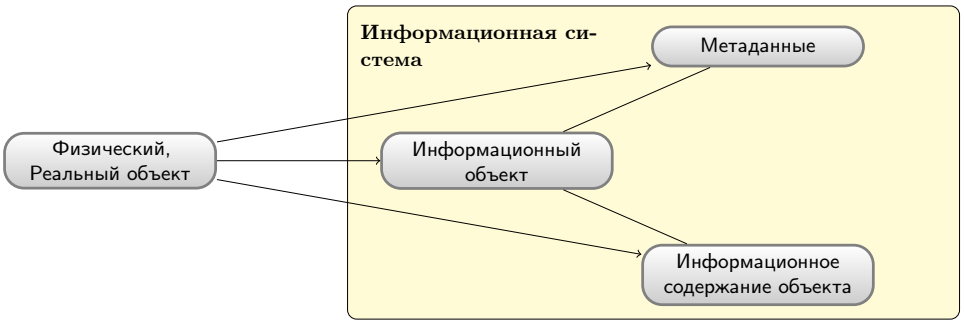


Рис. 1: Информационная модель ИС

Приведенные определения охватывают все классы информационных систем, в частности фактографические системы, которые основаны на технологиях баз данных и оперируют структурированными данными, и документальные системы, оперирующие документами на естественных языках и др.

3 Информационный ресурс

Информационный ресурс — это понятие, включающее любую сущность ИС. В информационном пространстве все сущности (документы, публикации, персоны, события, факты, программы и любые другие сущности реального или виртуального мира) существуют только в форме некоторых информационных объектов. Информационный ресурс — это абстрактное понятие, выражаемое экземплярами одной из своих специализаций. В частности, экземплярами понятия информационного ресурса являются экземпляры информационного объекта любого типа.

Огрубляя сказанное, любая ИС представляет собой систему управления информационными ресурсами с присущими ей функциями (методами), отношениями и связями [9]. Каждый информационный ресурс в соответствии с эталонной моделью (например, OAIS RM [12] или DLRM [10]) (см. рис. 2).

- имеет идентификатор;
- организован в соответствии с описанием ресурса. Ресурс может быть сложным и структурированным, поскольку он, в свою очередь, может состоять из меньших ресурсов и иметь связи с другими ресурсами. С организационной точки зрения, ресурсы могут группироваться в наборы ресурсов, которые рассматриваются как единая сущность;

– может регулироваться функциями, управляющими его жизненным циклом, характеризуется набором присущих ему атрибутов и методов, характеризующих его свойства и связи с другими ресурсами;
– выражается через информационный объект.

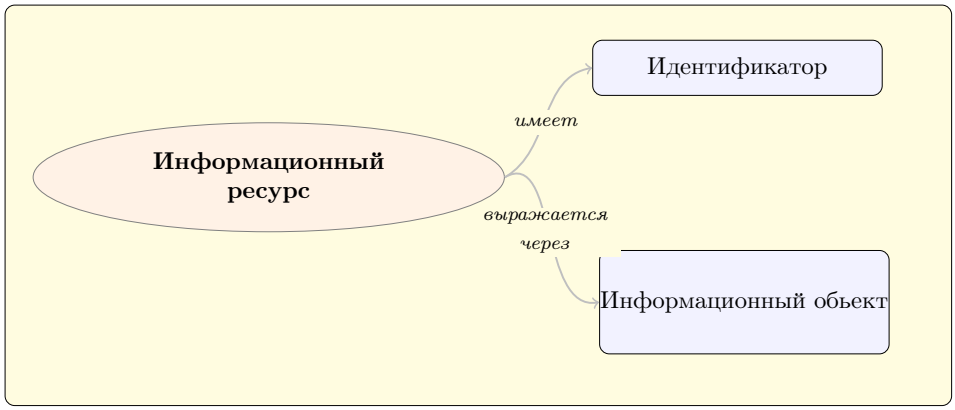


Рис. 2: Определение ресурса в ИС

Реализация информационного ресурса (информационный объект) — это единица информации, представляющая собой уникально именованный набор данных. Каждый информационный ресурс хранится в некотором репозитории как глобально и уникально именуемый набор структурированных данных (сведений о ресурсе, его свойств, атрибутов, методов, связей с другими объектами) и, возможно, содержания, например, одного или более форматов представления ресурса. Эти структурированные данные, описывающие ресурс, а в связи с этим называемые метаданными, используются для получения представления о его свойствах, содержании, структуре, организации поиска, способах использования и т. п
Репозиторий — средство долговременного и надежного хранения информации, предоставляющее некоторый четко специфицированный способ управления ею (схему данных, модель операций), включающий в той или иной мере способы доступа, выборки и манипулирования информационными ресурсами.
Коллекция — это совокупность информационных объектов (информационных ресурсов), объединенных общими свойствами (например, принадлежностью к одному классу объектов, одинаковой структурой, общей тематической направленностью и т. п.).

В ИС каждому ресурсу соответствует информационный объект, который является традиционным «вторичным информационным объектом», содержащим описание первичного ресурса (каталожная запись), т. е. информационный объект — это объект, который хранит информацию о объектах ИС (физических объектах, ресурсах, информационных объектах). Поскольку информационный объект является ресурсом, то он наследует все вышеперечисленные свойства ресурса, т. е. имеет идентификатор (см. рис. 3).

В свою очередь, каждый информационный объект в ИС состоит из следующих объектов:

– *метаданных* — объект, главная цель которого состоит в том, чтобы дать информацию о ресурсе;
– *аннотаций* — объект, главная цель которого состоит в том, чтобы аннотировать ресурс или его часть. Примеры таких аннотаций включают примечания, структурированные комментарии и связи. Объекты аннотации помогают интерпретировать ресурс, содержат детальные объяснения, либо информацию о том, как можно использовать ресурс [9].
– *информационного содержания* — объект, который может отсутствовать и может использоваться самостоятельно, как первичный информационный объект: например, изображение, полный текст и т. д. (первичный ресурс).

Информационный объект — наиболее общее понятие в системе, представляющий произвольную единицу информации в ИС. Информационные объекты также могут быть сложными объектами и могут быть сгруппированы в коллекции информационных объектов, которые, в свою очередь, тоже являются информационными объектами. Коллекции, в свою очередь, тоже являются информационными объектами, они наследуют все аспекты моделирования информационных объектов и средства их обслуживания, например, они могут аннотироваться.

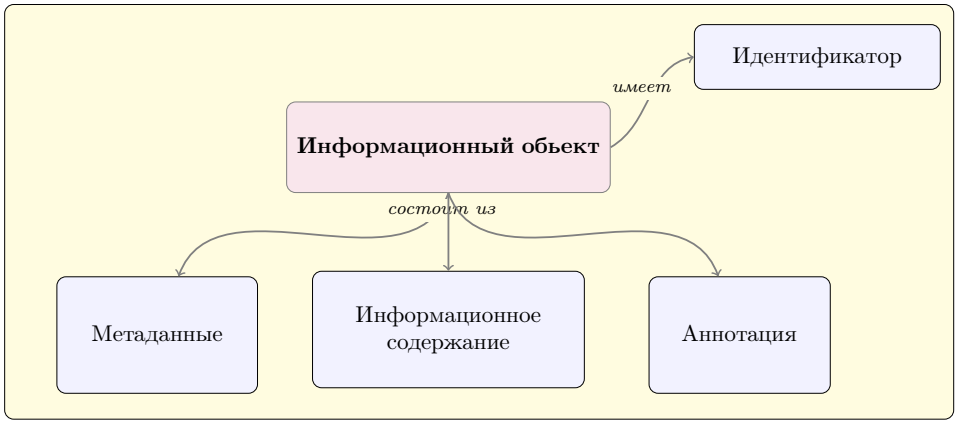


Рис. 3: Модель информационного объекта в ИС

Информационные объекты описывают основные *классы сущностей* научного информационного пространства такие, как публикация, персона, ключевой термин или понятие, словарная статья, факт, функция, организация, пользователь и т. д., а также связи между ними [7, 8].

Одним из фундаментальных понятий в ИС является понятие «документ». Содержание понятия документ многозначно и зависит от того, для каких целей оно используется. Известный бельгийский ученый Поль Отле в начале XX века вводит новое, по сравнению с тем, что было, более широкое понимание понятия «документ». В своем «Трактате о Документации» [14] он определяет это понятие так: *Документ — «материальный объект, содержащий информацию, специально предназначенный для ее передачи в пространстве и времени»*. Важно заметить, что термин «документ» более старый, нежели термин «информация».

В информационной системе *Документ — это целостный информационный объект, представленный в цифровом виде, имеющий некоторый стандартный набор атрибутов и функций и допускающий однозначную идентификацию.*

4 Метаданные

Ключевым моментом в работе с информационными объектами и, в частности, с документами является использование метаданных. Метаданные — структурированная информация, которая описывает, поясняет и указывает местоположение информационного объекта [3]. Метаданные необходимы для решения следующих задач:

- предоставление сведений о документах, для получения представления о их свойствах, содержании, структуре, способах использования и т. д.;
- систематизации информации о документах и ведения каталога системы;
- выбор из множества документов определенного подмножества по формальным признакам и сопоставление документов по формальным признакам;
- внутрисистемные технологические задачи, связанные с обеспечением подготовки документов, размещением документов в информационной среде и т. д.;
- внешние технологические задачи, связанные, прежде всего, с обменом данными с внешними информационными системами.

Метаданные отражают наиболее существенные свойства объекта, имеющие наибольшие значение с точки зрения информационной системы. Метаданные подразделяются на три типа: описательные, структурные и системные.

Описательные метаданные — метаданные которые описывают содержание и свойства информационного ресурса (объекта), например, библиографические данные или аннотация, основная задача которых однозначное представление цифрового объекта для внешнего мира и в различных приложениях.

Структурные метаданные — метаданные которые характеризуют общую структуру информационного ресурса и его компоненты, объем и другие свойства информационного ресурса (объекта);

Системные метаданные (метаданные административные) — служат для обеспечения системы управления информационными ресурсами и администрирования информационных ресурсов, например, даты создания или модификации ресурса, идентификатор владельца и т. п.

Состав имен атрибутов, ограничения, накладываемые на их значения, набор правил, определяющих структурирование атрибутов, их семантику задаются *схемой метаданных*. Правила структурирования метаданных в определенном смысле аналогичны правилам, предлагаемым онтологией для построения отношений между понятиями. Правила, определяющие представление метаданных в информационной системе, а также правила их интерпретации, образуют *формат метаданных*.

Схема метаданных — это набор элементов метаданных, каждый из которых обладает некоторым именем и семантикой, принимает значения с установленной семантикой или значения из *управляемого словаря*, называемым *схемой кодировки*. В соответствии с рекомендациями Dublin Core (DCMI) [11] информационный объект должен обладать базовым набором атрибутов. Набор атрибутов объекта расширяется в зависимости от его класса.

Схема кодировки — система записи или правила анализа значений элементов метаданных. Значение, определенное с помощью схемы кодировки, представляет собой код (символ), выбранный из управляемого (контролируемого) словаря (например, индекс системы классификации или значение из набора предметных рубрик), либо строку определенной структуры (например, `"2000-01-01"` как стандартное обозначение даты).

Управляемый словарь (Controlled Vocabulary — контролируемый, нормативный, авторитетный словарь) — это список предварительно определенных кодов, терминов, слов, фраз или нотаций, предназначенный для обозначения предметных рубрик или состава допустимых значений атрибутов элементов метаданных. Все коды (термины) в словаре должны иметь однозначное определение.

Особым видом метаданных являются метаданные однозначно характеризующие (идентифицирующие) документы, которые необходимы для систематизации документов и для эффективного поиска, получившие название *авторитетных*.

Особым классом метаданных является метаданные, описывающие отношения и связи между информационными ресурсами — документами.

Отношение — связь между экземпляром некоторой сущности и тем, что с ней соотнесено. По Аристотелю «есть то, что оно есть», лишь «в связи с другим или находясь в каком-то ином отношении к другому». Количество типов отношений в информационной системе определяется, исходя из конкретных целей. В реальном мире их число стремится к бесконечности. С позиций удовлетворения информационных потребностей пользователей нас будут интересовать отношения только между документами, например, «Публикация – Публикация», «Публикация – Персона», «Публикация – Словарная статья», «Публикация – Ключевой термин», «Персона – Словарная статья» и так далее. Связи существуют между всеми классами документов.

В зависимости от условий использования отношения между документами подразделяются на следующие типы: тезаурусные отношения, семантические отношения и ассоциативные отношения:

– *тезаурусные отношения:* отношения, применяемые в описании информационно-поисковых тезаурусов — это иерархические отношения и отношение ассоциации. Основным иерархическим отношением — является родовидовое отношение (родитель-потомок, шире-уже, выше-ниже, часть-целое). Основное назначение установления ассоциативных отношений между документами — указание на дополнительные связи [4]. Тезаурусные отношения специфичны для отношений между ключевыми терминами, значительно реже используются при задании отношений между публикациями и словарными статьями.

– *семантические отношения:* именованные отношения между документами, например, «Персона является автором Публикации»; «Публикация посвящена Персоне»; «Публикация посвящена Факту, описанному в Словарной статье».

– *отношения ассоциации:* отношения между двумя документами которые близки по содержанию, например, ключевые слова в описании Публикации, Персоны, Словарной статьи.

В информационной системе возможно два способа реализации связей (отношений) между документами: жесткие и мягкие. Жесткие связи реализуются средствами СУБД путем ссылок на первичные ключи записи. К сожалению, такой тип связи не защищен от нарушения целостности (в случае неправильного изменения или удаления записи). Мягкие связи реализуются через процедуру поиска соответствий. Такой способ установления связей защищен от любых нарушений целостности БД и достаточно удобен пользователям, поскольку для указания на необходимость связи используются наглядные мнемонические определения.

Заключение

На основе представленной модели ИС в ИВТ СО РАН создана Система Управления Информационными Ресурсами (СУИР), на которой реализованы ряд конкретных ИС. Среди них системы по научному наследию: «Электронная библиотека А.А.Ляпунова», информационно-справочные системы «История информатики в лицах», «История вычислительной техники в лицах» и др.

Список литературы

[1] ГОСТ Р ИСО/МЭК 12207-99. Информационная технология. Процессы жизненного цикла программных средств. ГОССТАНДАРТ РОССИИ. Москва, 1999.

[2] ГОСТ 34.003-90. Информационная технология. Комплекс стандартов и руководящих документов на автоматизированные системы. Термины и определения.

[3] Когаловский М. Р. Метаданные, их свойства, функции, классификация и средства представления // Труды 14-й Всероссийской научной конференции «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции» — RCDL2012, Переславль-Залесский, Россия, 15-18 октября 2012 г.

[4] Лукашевич Н. В. Тезаурусы в задачах информационного поиска. М: Издательство МГУ, 2011.

[5] Ляпунов А. А. О соотношении понятий материя, энергия и информация // В кн.: Ляпунов А. А. Проблемы теоретической и прикладной кибернетики. Новосибирск: Наука, 1980. С. 320–323.

[6] Советов Б. Я., Цехановский В. В. Информационные технологии: учебник для вузов. М.: Высшая школа, 2005.

[7] Федотов А. М. Методологии построения распределенных систем // Вычисл. технологии. 2006. Т. 11, Избранные доклады X Российской конференции «Распределенные информационно-вычислительные ресурсы» (DICR-2005), Новосибирск, 6-8 октября 2005 г. С. 3–16.

[8] Шокин Ю. И., Федотов А. М., Жижимов О. Л., Гуськов А. Е., Столяров С. В. Электронные библиотеки — путь интеграции информационных ресурсов Сибирского отделения РАН // Вестник КазНУ, специальный выпуск. — г. Алматы, Казахстан, Казахский национальный университет им. аль-Фараби. 2005. № 2. С. 115–127.

[9] Шокин Ю. И., Федотов А. М., Жижимов О. Л., Федотова О. А. Эволюция информационных систем: от Web-сайтов до систем управления информационными ресурсами // Вестник НГУ Серия: Информационные технологии. 2015. Том 13, вып. № 1. С. 117–134.

[10] D3.2b The Digital Library Reference Model // Funded under the Seventh Framework Programme, ICT Programme — “Cultural Heritage and Technology Enhanced Learning” Project Number: 231551. April 2011. (`http://www.dlorg.eu`) — Full Text: `http://db4.sbras.ru/elbib/data/show_page.phtml?22+269`.

[11] DCMI — Dublin Core Metadata Initiative // (`http://www.dublincore.org/`).

[12] ISO 14721:2012 Reference model for an Open archival information system (RM OAIS) / Recommended Practicle: CCSDS 650.0-M-2 (Magenta Book). June 2012. Available at: `http://public.ccsds.org/publications/archive/650x0m2.pdf`

[13] Mooers C. N. «Mooers» law, or why some retrieval systems are used and other are not // American Documentation. 1960. Vol. 11, No. 3.

[14] Otlet P. Traite de documentation. Bruxelles: Ed. Mundaneum, 1934.

Анатолий Михайлович Федотов — чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., гл. науч. сотр. Института вычислительных технологий СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: fedotov@sbras.ru;
Ольга Анатольевна Федотова — науч. сотр. Государственной публичной научно-технической библиотеки СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: o4f8@mail.ru.

Дата поступления — 30 мая 2017 г.

О СВОЙСТВАХ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ С ДИСПЕРСИЕЙ

З. И. Федотова, О. И. Гусев, Н. Ю. Шокина, Г. С. Хакимзянов

Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 532.59:519.63

Для трех популярных конечно-разностных схем, аппроксимирующих линеаризованную систему нелинейно-дисперсионных уравнений, получены уточненные условия устойчивости, а также описано поведение фазовых ошибок.

Ключевые слова: нелинейно-дисперсионные уравнения, конечно-разностные методы, устойчивость, фазовая ошибка, дисперсия.

Введение

Численное моделирование на основе уравнений мелкой воды является эффективным инструментом решения задач волновой гидродинамики, имеющих практические приложения. В последние полвека существенным дополнением к классическим моделям мелкой воды стали нелинейно-дисперсионные модели, применение которых позволило перейти от изучения очень длинных волн к умеренным и тем самым расширило диапазон описания волновых режимов, включив как процессы в прибрежной зоне, так и учет влияния дисперсии на формирование волн в масштабах океана [1].

До недавнего времени проблемным местом моделирования на основе нелинейно-дисперсионных уравнений оставались пробелы в исследовании свойств конечно-разностных схем [2]. В расчетах обычно выбирались «схемные» параметры по аналогии с известными для бездисперсионного случая. Проведенное нами исследование показало, что разностные схемы для уравнений, включающих дисперсию, обладают рядом специфических свойств. В частности, в условие устойчивости входит новый параметр – отношение «среднего» шага по пространству к толщине слоя жидкости. Полученные формулы позволяют ослабить ограничение на шаг по времени и корректировать его в процессе измельчения пространственной сетки.

Задача, которую решали многие исследователи – обеспечить преобладание физической дисперсии над «схемной». В настоящей работе показано, что влияние «схемной» дисперсии в ряде случаев можно регулировать выбором шагов разностной схемы. Обнаружена специфика двумерного случая, состоящая в «неоднородности» направления изменения фазы волны в отличие от дифференциальных постановок.

1 НЛД-модели и их линеаризованные варианты

Рассмотрим систему уравнений длинноволновой гидродинамики, описывающую течение идеальной несжимаемой жидкости с учетом частотной дисперсии. Предполагается, что слой воды ограничен снизу подвижным дном $z = -h(x, y, t)$, а сверху — свободной границей $z = \eta(x, y, t)$. Искомыми переменными являются полная глубина $H = h + \eta$ и $\boldsymbol{u} = (u, v) = \boldsymbol{u}(x, y, t)$ — средняя по толщине слоя воды скорость трехмерного течения. Запишем соответствующие уравнения следующим образом [1]:

$$H_t + \nabla \cdot (H\boldsymbol{u}) = 0, \tag{1}$$

$$\boldsymbol{u}_t + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} + \frac{\nabla p}{H} = \frac{p_0}{H}\nabla h, \tag{2}$$

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (код проекта 14-17-00219) и гранта ведущих научных школ НШ-7214.2016.9

где p — проинтегрированное по толщине слоя негидростатическое "давление" в НЛД-модели, p_0 — значение "давления" на дне,

$$p = \frac{gH^2}{2} - \varphi, \quad p_0 = gH - \psi, \quad \varphi = \frac{H^3}{3}R_1 + \frac{H^2}{2}R_2, \quad \psi = \frac{H^2}{2}R_1 + HR_2, \tag{3}$$

$$R_1 = D\left(\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right) - \left(\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right)^2, \quad R_2 = D^2h, \quad D = \frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u}\cdot\nabla. \tag{4}$$

К такому виду удается привести известные НЛД-модели Грина — Нагди [3], Железняка — Пелиновского [4], Федотовой — Хакимзянова [5, 6] и другие. Из (1), (2) можно получить целый ряд более простых моделей. Например, упрощая выражение для "давления" путем отбрасывания в p/H, p_0/H членов, имеющих порядок $O(\alpha\mu^2)$, где $\alpha = a_0/h_0$ и $\mu = h_0/L$ — параметры нелинейности и дисперсии (a_0, h_0, L — характерные амплитуда и размеры по глубине и горизонтали, соответственно), приходим к уравнениям типа уравнений Буссинеска [6], которые имеют тот же вид, что и уравнения (1)—(4), но с измененными формулами для вычисления величин φ и ψ — негидростатических добавок к "давлению". Последние, в случае слабонелинейной модели из [6], имеют следующий вид:

$$\varphi = H\left(\frac{h}{3}D\left(h\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right) + \frac{h}{2}D^2h\right), \quad \psi = H\left(\frac{1}{2}D\left(h\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right) + D^2h\right). \tag{5}$$

Первые конечно-разностные схемы для расчета 2D-течений с дисперсией были основаны на аппроксимации слабонелинейной модели Перегрина, выведенной в работе [7] для случая стационарного дна ($h_t \equiv 0$). Уравнение неразрывности этой модели имеет тот же вид (1), что и у полной НЛД-модели, а уравнение движения получается из уравнения (2) при отбрасывании в нем всех нелинейных слагаемых, входящих в дисперсионные члены $(\nabla\varphi)/H$, ψ/H. С учетом формул (5) получаем

$$\boldsymbol{u}_t + (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u} + g\nabla\eta = \left[\frac{h}{2}\nabla\Big(\nabla\cdot(h\boldsymbol{u})\Big) - \frac{h^2}{6}\nabla\left(\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right)\right]_t. \tag{6}$$

Из модели Перегрина (1), (6) можно получить уравнение второго порядка, описывающее распространение квазиодномерных слабонелинейных длинных волн над слабо изменяющимся дном:

$$\eta_{tt} - g\nabla\cdot\left(h\nabla\eta\right) = \frac{1}{3}\nabla\cdot\Big[h\nabla\left(h\eta_{tt}\right)\Big] + \frac{3}{2}g\nabla\cdot\nabla\left(\eta^2\right). \tag{7}$$

Для изучения свойств разностных схем, аппроксимирующих НЛД-уравнения, необходимо привлекать их упрощенные формулировки. Если рассмотреть случай ровного дна $h \equiv h_0$, то самой простой 2D-моделью с дисперсией является скалярное линейное уравнение

$$\eta_{tt} - c_0^2\triangle\eta = \frac{h_0^2}{3}\triangle\eta_{tt}, \tag{8}$$

где $c_0 = \sqrt{gh_0}$, $\Delta = \nabla^2$ — оператор Лапласа. Следующей по простоте моделью является система линейных уравнений Перегрина

$$\eta_t + h_0\nabla\cdot\boldsymbol{u} = 0, \quad \boldsymbol{u}_t + g\nabla\eta = \frac{h_0^2}{3}\nabla\left(\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right)_t, \tag{9}$$

к которой в случае ровного дна при линеаризации в окрестности нулевой скорости приводятся все упомянутые выше системы НЛД-уравнений.

Для исследования свойств выписанных уравнений, а также свойств аппроксимирующих их разностных схем, будем анализировать поведение гармоник

$$\eta(x,y,t) = E_0e^{-i(\omega t - \boldsymbol{kx})}, \quad u(x,y,t) = U_0e^{-i(\omega t - \boldsymbol{kx})}, \quad v(x,y,t) = V_0e^{-i(\omega t - \boldsymbol{kx})}, \tag{10}$$

где E_0, U_0, V_0 — амплитуды гармоник, $\boldsymbol{k} = (k_1, k_2)$ — волновой вектор, $\boldsymbol{x} = (x, y)$, ω — частота. Подставляя гармоники в систему (9), получаем следующие выражения для частот:

$$\omega_1 = 0, \quad \omega_{2,3} = \pm c_0|\,\boldsymbol{k}|\sqrt{1 - \frac{h_0^2|\,\boldsymbol{k}|^2/3}{1 + h_0^2|\,\boldsymbol{k}|^2/3}}. \tag{11}$$

Нетрудно показать, что уравнение (8) имеет две моды, и они совпадают с $\omega_{2,3}$ из (11).

2 О разностных методах для двумерных НЛД-уравнений

Прежде всего отметим, что развитие длинноволновых 2D-моделей с дисперсией было инициировано потребностями инженерной практики в связи с успехами численного моделирования применительно к обустройству морских побережий. Решение задач, связанных с расчетами воздействия волн на защитные сооружения в береговой зоне, на плавучие и полупогруженные тела, моделирование волновых режимов в гаванях и бухтах, и ряд других, связанных с освоением шельфа и прилегающей суши — все это требовало двумерных постановок и учета реального рельефа дна. Область применения длинноволновых моделей нуждалась в расширении, и таким шагом стала работа [7], в которой были получены НЛД-уравнения (1), (6). Разработанные для модифицированных уравнений (1), (6) численные алгоритмы были включены в известные компьютерные системы, предназначенные для решения инженерных задач в прибрежных водах (см., например, [8] и др.). Что касается применяемых конечно-разностных схем, то в статьях излагались только основные идеи вычислительного метода. За рамками оставалось также исследование свойств разностных схем.

Впервые одна из разностных 2D-схем и алгоритм ее реализации описаны в [9]. В этой работе также приведено (без доказательства) условие устойчивости. Похожая разностная схема рассмотрена также в [10]. Построению схем в процитированных работах предшествовала модификация уравнений (1), (6), использующая предположение о потенциальности исходного 3D-течения, из которого вытекает, что $v_x - u_y = O(\mu^2)$. В этом случае для горизонтального дна $h \equiv h_0$ и течения с нулевой фоновой скоростью модель (9) можно записать в следующем виде:

$$\eta_t + h_0 \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0, \quad \boldsymbol{U} + g\nabla\eta = \frac{h_0^2}{3}\Delta\boldsymbol{U}, \quad \boldsymbol{u}_t = \boldsymbol{U}, \tag{12}$$

при этом выражение для частот сохраняет вид (11).

Показанный прием расщепления исходных НЛД-уравнений, а также ряд аналогичных, состоящих в выделении системы обыкновенных уравнений для вектора $\boldsymbol{U}$ [11], были использованы многими авторами. При подходящем способе организации вычислений такой подход позволяет применять широкий спектр методов решения различного порядка точности, в том числе и многошаговые методы, являющиеся модификациями хорошо известных методов Рунге — Кутты, Адамса — Башфорта, Адамса — Мултона (см., например, [12]).

Другой способ решения системы НЛД-уравнений состоит в расщеплении ее на гиперболическую систему уравнений, отличающуюся от уравнений классической модели мелкой воды лишь наличием в правой части уравнений движения дополнительных слагаемых, связанных с дисперсионными добавками, и уравнение эллиптического типа для дисперсионной составляющей φ "давления" p вида (3). На примере линеаризованных НЛД-уравнений это расщепление выглядит следующим образом:

$$\eta_t + h_0 \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0, \quad \boldsymbol{u}_t + g\nabla\eta = \frac{1}{h_0}\nabla\varphi, \quad \triangle\varphi - \frac{\varphi}{\nu} = c_0^2 \triangle\eta, \tag{13}$$

где $\nu = h_0^2/3$. Алгоритм решения можно реализовать в виде явной двухшаговой схемы предиктор-корректор, на каждом шаге которой поочередно решаются задачи, полученные в результате расщепления [13, 14, 15].

3 Исследование базовых свойств разностных схем

Приведем разностную схему из [9, 10] для системы уравнений (12) и исследуем её свойства. Используется прямоугольная равномерная сетка с шагами τ, Δx и Δy, такая, что функция η определена в узлах (x_{j_1}, y_{j_2}), а компоненты скорости — в центрах сторон ячеек: u — в центрах $(x_{j_1+1/2}, y_{j_2})$ горизонтальных сторон ячеек, v — в центрах $(x_{j_1}, y_{j_2+1/2})$ вертикальных сторон. Компоненты вектора $\boldsymbol{U}$ определены в тех же точках, что и компоненты вектора скорости. Сеточные функции разнесены также по времени: значения η определены на временных слоях $t = n\tau$, тогда как u, v, U, V — на слоях $t = (n+1/2)\tau$ $(n = 0, 1, ...)$. Для сокращения записи сеточных функций будем использовать мультииндекс $j = (j_1, j_2)$: $\eta_j^n \equiv \eta_{j_1,j_2}^n$, а также $u_{j_1+1/2}^{n+1/2} \equiv u_{j_1+1/2,j_2}^{n+1/2}$, $v_{j_2+1/2}^{n+1/2} \equiv v_{j_1,j_2+1/2}^{n+1/2}$. Для системы уравнений (12) выпишем схему второго порядка аппроксимации:

$$\eta_{t,j}^n + h_0 \left(u_{\overset{\circ}{x},j}^{n+1/2} + v_{\overset{\circ}{y},j}^{n+1/2} \right) = 0, \tag{14}$$

$$U_{j_1+1/2}^{n+1/2} + g\eta_{\overset{\circ}{x},j_1+1/2}^{n+1} = \frac{h_0^2}{3}\left(U_{\bar{x}x} + U_{\bar{y}y}\right)_{j_1+1/2}^{n+1/2}, \qquad V_{j_2+1/2}^{n+1/2} + g\eta_{\overset{\circ}{y},j_2+1/2}^{n+1} = \frac{h_0^2}{3}\left(V_{\bar{x}x} + V_{\bar{y}y}\right)_{j_2+1/2}^{n+1/2}, \tag{15}$$

$$u^{n+1/2}_{t,j_1+1/2} = U^{n+1/2}_{j_1+1/2}, \qquad v^{n+1/2}_{t,j_2+1/2} = V^{n+1/2}_{j_2+1/2}, \tag{16}$$

используя следующие обозначения:

$$\eta^n_{t,j} = \frac{\eta^{n+1}_j - \eta^n_j}{\tau}, \quad u^{n+1/2}_{t,j_1+1/2} = \frac{u^{n+3/2}_{j_1+1/2} - u^{n+1/2}_{j_1+1/2}}{\tau}, \quad v^{n+1/2}_{t,j_2+1/2} = \frac{v^{n+3/2}_{j_2+1/2} - v^{n+1/2}_{j_2+1/2}}{\tau},$$

$$u^{n+1/2}_{\circ\,x,j} = \frac{u^{n+1/2}_{j_1+1/2} - u^{n+1/2}_{j_1-1/2}}{\Delta x}, \quad v^{n+1/2}_{\circ\,y,j} = \frac{v^{n+1/2}_{j_2+1/2} - v^{n+1/2}_{j_2-1/2}}{\Delta y},$$

$$\eta^{n+1}_{\circ\,x,j_1+1/2} = \frac{\eta^{n+1}_{j_1+1,j_2} - \eta^{n+1}_j}{\Delta x}, \quad \eta^{n+1}_{\circ\,y,j_2+1/2} = \frac{\eta^{n+1}_{j_1,j_2+1} - \eta^{n+1}_j}{\Delta y},$$

$$U^{n+1/2}_{\bar{x}x,j_1+1/2} = \frac{U^{n+1/2}_{\circ\,x,j_1+1,j_2} - U^{n+1/2}_{\circ\,x,j}}{\Delta x}, \quad U^{n+1/2}_{\bar{y}y,j_1+1/2} = \frac{U^{n+1/2}_{j_1+1/2,j_2+1} - 2U^{n+1/2}_{j_1+1/2,j_2} + U^{n+1/2}_{j_1+1/2,j_2-1}}{\Delta y^2},$$

$$V^{n+1/2}_{\bar{x}x,j_2+1/2} = \frac{V^{n+1/2}_{j_1+1,j_2+1/2} - 2V^{n+1/2}_{j_1,j_2+1/2} + V^{n+1/2}_{j_1-1,j_2+1/2}}{\Delta x^2}, \quad V^{n+1/2}_{\bar{y}y,j_2+1/2} = \frac{V^{n+1/2}_{\circ\,y,j_1,j_2+1} - V^{n+1/2}_{\circ\,y,j}}{\Delta y}.$$

Для исследования устойчивости схемы (14)—(16) подставим в разностные уравнения гармоники

$$\eta^n_j = E_0\rho^n e^{i(j_1\xi + j_2\zeta)}, \quad u^{n+1/2}_{j_1+1/2} = U_0\rho^{n+1/2}e^{i((j_1+1/2)\xi + j_2\zeta)}, \quad v^{n+1/2}_{j_2+1/2} = V_0\rho^{n+1/2}e^{i(j_1\xi + (j_2+1/2)\zeta)},$$

$$U^{n+1/2}_{j_1+1/2} = U^*_0\rho^{n+1/2}e^{i((j_1+1/2)\xi + j_2\zeta)}, \quad V^{n+1/2}_{j_2+1/2} = V^*_0\rho^{n+1/2}e^{i(j_1\xi + (j_2+1/2)\zeta)},$$

где $\xi = k_1\Delta x$, $\zeta = k_2\Delta y$. Из уравнений (15) получаем, что величины U^*_0, V^*_0 выражаются через E_0:

$$U^*_0 = -\frac{g\sqrt{\rho}}{1 + b_1 + b_2}\,\frac{2i\sin(\xi/2)}{\Delta x}E_0, \quad V^*_0 = -\frac{g\sqrt{\rho}}{1 + b_1 + b_2}\,\frac{2i\sin(\zeta/2)}{\Delta y}E_0,$$

где использованы обозначения

$$b_1 = \frac{4}{3}\delta_1^2\sin^2\frac{\xi}{2}, \quad b_2 = \frac{4}{3}\delta_2^2\sin^2\frac{\zeta}{2}, \quad \delta_1 = \frac{h_0}{\Delta x}, \quad \delta_2 = \frac{h_0}{\Delta y}.$$

Тогда из уравнений (14), (16) получается однородная линейная система алгебраических уравнений относительно амплитуд E_0, U_0 и V_0. Для существования нетривиального решения определитель этой системы должен обращаться в нуль, что дает кубическое уравнение для множителя перехода ρ. Один из корней этого уравнения равен единице, а два других $\rho_{1,2}$ являются корнями следующего квадратного уравнения:

$$\rho^2 - 2\rho\,(1 - R) + 1 = 0, \tag{17}$$

где

$$R = \frac{2c_0^2}{1 + b_1 + b_2}\Big(æ_1^2\sin^2\frac{\xi}{2} + æ_2^2\sin^2\frac{\zeta}{2}\Big), \qquad æ_1 = \frac{\tau}{\Delta x}, \quad æ_2 = \frac{\tau}{\Delta y}. \tag{18}$$

Необходимое условие устойчивости $|\rho_{1,2}| \le 1$ рассматриваемой схемы эквивалентно условию $R \le 2$ неположительности дискриминанта уравнения (17), а это эквивалентно выполнению неравенства

$$c_0æ \le \sqrt{1 + \frac{4}{3}\delta^2}, \tag{19}$$

где

$$\delta = \frac{h_0}{\Delta_0}, \quad æ = \frac{\tau}{\Delta_0}, \quad \Delta_0 = \frac{\Delta x\cdot\Delta y}{\sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}}. \tag{20}$$

При этом имеем

$$|\rho_{1,2}| \equiv 1. \tag{21}$$

Вид полученного условия устойчивости (19) двумерной схемы аналогичен, с учетом обозначений (20), одномерному случаю [2].

Информацию о дисперсионных свойствах схемы дает поведение ее фазовой ошибки $\Delta\phi = \Phi - \phi$. Здесь $\Phi = \omega\tau$, ω — дисперсионное соотношение математической модели, $\phi = \arg\rho$. Изменение фаз будем рассматривать в виде функций от переменных $\xi, \zeta \in [0,\ \pi]$.

Согласно (11), за один шаг по времени изменение фазы в решении линеаризованной НЛД-модели (12) определяется по формуле

$$\Phi_{\mathrm{NLD}} = \tau\omega_{\mathrm{NLD}} = \frac{c_0|\,\boldsymbol{k}|\tau}{\sqrt{1 + h_0^2|\,\boldsymbol{k}|^2/3}} = \frac{c_0 æ\varsigma}{\sqrt{1 + \delta^2\varsigma^2/3}}, \quad \varsigma = |\,\boldsymbol{k}|\Delta_0. \tag{22}$$

Из формулы (11) следует, что для модели (12) изменение фазы решения можно записать в виде функции от одной переменной $\varsigma \in [0,\ \pi]$. Кроме того, изменение фазы не зависит от направления волнового вектора $\boldsymbol{k}$.

Взяв множитель перехода схемы (14)—(16) со знаком "+", т. е. $\rho = 1 - R + i\sqrt{R(2-R)}$, с учетом (21), получаем формулу изменения фазы $\phi_{\mathrm{sch}} = \arg\rho$ в решении разностной схемы: $\phi_{\mathrm{sch}} = 2\arcsin\sqrt{R/2}$. Рассматривая малые значения ξ, ζ, соответствующие длинным волнам, получаем

$$\phi_{\mathrm{sch}} = c_0 æ\varsigma\left(1 - \frac{\delta^2\varsigma^2}{6} - \frac{æ_1^2\xi^4 + æ_2^2\zeta^4}{24æ^2\varsigma^2}\right) + \frac{c_0^3 æ^3\varsigma^3}{24} + O(\varsigma^4). \tag{23}$$

Из формул (22) и (23) вытекает, что фазовая ошибка определяется выражением

$$\Delta\phi = \frac{c_0}{24}\left(\frac{æ_1^2\xi^4 + æ_2^2\zeta^4}{æ\varsigma} - c_0^2 æ^3\varsigma^3\right) + O(\varsigma^4). \tag{24}$$

Таким образом, дополнительная дисперсия, вносимая разностной схемой, имеет тот же порядок ς^3, что и второй член разложения по ς "физической" дисперсии (дисперсии модели)

$$\Phi_{\mathrm{NLD}} = c_0 æ\varsigma - \frac{c_0 æ\delta^2}{6}\varsigma^3 + O(\varsigma^4). \tag{25}$$

При конечных шагах разностной сетки это может привести к искажению дисперсионной картины течения, описываемого НЛД-моделью.

В [2] показано, что в 1D-случае в области устойчивости некоторых схем имеются значения числа Куранта, для которых влияние схемной дисперсии минимально. Для 2D-схем это свойство нарушается. Например, для произвольного волнового вектора $\boldsymbol{k}$ фазовая ошибка (24) имеет порядок $O(\varsigma^3)$, независимо от числа Куранта $c_0 æ$. Исключение составляют волновые векторы $\boldsymbol{k} = (k_1, 0)$ и $\boldsymbol{k} = (0, k_2)$, для которых фазовая ошибка имеет порядок $O(\varsigma^4)$ при $c_0 æ_1 = 1$ и $c_0 æ_2 = 1$, соответственно. Порядок $O(\varsigma^4)$ достигается также для вектора $\boldsymbol{k}$, компоненты которого согласованы с шагами сетки согласно формуле $k_1\Delta x = k_2\Delta y$. Для того чтобы влияние схемной дисперсии было минимальным, необходимо задать $c_0 æ = 1$.

Разностный метод для решения уравнения (7) основан на расщеплении, приводящем к волновому с "правой частью" и эллиптическому уравнениям. Разностная схема для волнового уравнения является явной трехслойной и использует 5-точечный шаблон для аппроксимации вторых производных по пространственным переменным. Для линеаризованного варианта 2D-модели (7) она принимает вид

$$\eta^n_{\bar{t}t} - c_0^2\big(\eta_{\bar{x}x} + \eta_{\bar{y}y}\big)^n = \frac{h_0^2}{3}\big(\eta_{\bar{x}x} + \eta_{\bar{y}y}\big)^n_{\bar{t}t}. \tag{26}$$

Нетрудно показать, что ее множитель перехода удовлетворяет квадратному уравнению (17). Следовательно, все свойства, полученные выше для разностной схемы (14)—(16), выполняются и для разностной схемы (26).

Наконец, выпишем разностную схему и ее условие устойчивости для расширенной системы уравнений (13). Предполагается, что на n-м слое по времени величины $\boldsymbol{u}^n$ и η^n известны и определены в целочисленных узлах $\boldsymbol{x}_j$, где $j = (j_1, j_2)$ — мультииндекс. Численный алгоритм решения системы (13) основывается на схеме предиктор-корректор. Вначале решается уравнение для φ:

$$\varphi^n_{\bar{x}x,j} + \varphi^n_{\bar{y}y,j} - \frac{\varphi^n_j}{\nu} = c_0^2\Big(\eta^n_{\bar{x}x,j} + \eta^n_{\bar{y}y,j}\Big). \tag{27}$$

Здесь $\eta^n_{\bar{x}x,j}$, $\eta^n_{\bar{y}y,j}$ — вторые разностные производные на трехточечном шаблоне. Полученные значения φ^n используются для вычисления предикторных величин η^*, $\boldsymbol{u}^*$, определенных в центрах ячеек:

$$\frac{\eta^*_{j+1/2} - \eta^n_{j+1/2}}{\tau^*} + h_0\Big(u^n_{\circ\,x,j+1/2} + v^n_{\circ\,y,j+1/2}\Big) = 0, \tag{28}$$

$$\frac{\boldsymbol{u}^*_{j+1/2} - \boldsymbol{u}^n_{j+1/2}}{\tau^*} + g\mathring{\nabla}\eta^n_{j+1/2} = \frac{1}{h_0}\mathring{\nabla}\varphi^n_{j+1/2}, \tag{29}$$

где для сокращения записи использован мультииндекс $j+1/2 = (j_1+1/2, j_2+1/2)$ и обозначения

$$g^n_{j+1/2} = \frac{1}{4}\Big(g^n_{j_1,j_2} + g^n_{j_1+1,j_2} + g^n_{j_1,j_2+1} + g^n_{j_1+1,j_2+1}\Big), \qquad g = \eta, u, v,$$

$$u^n_{\mathring{x},j+1/2} = \frac{1}{2\Delta x}\Big(u^n_{j_1+1,j_2+1} + u^n_{j_1+1,j_2} - u^n_{j_1,j_2+1} - u^n_{j_1,j_2}\Big),$$

$$v^n_{\mathring{y},j+1/2} = \frac{1}{2\Delta y}\Big(v^n_{j_1+1,j_2+1} + v^n_{j_1,j_2+1} - v^n_{j_1+1,j_2} - v^n_{j_1,j_2}\Big),$$

$$\mathring{\nabla}\eta^n_{j+1/2} = \left(\eta^n_{\mathring{x},j+1/2}, \eta^n_{\mathring{y},j+1/2}\right), \quad \mathring{\nabla}\varphi^n_{j+1/2} = \left(\varphi^n_{\mathring{x},j+1/2}, \varphi^n_{\mathring{y},j+1/2}\right).$$

В уравнениях (28), (29) $\tau^* = \tau(1+\theta^n_{j+1/2})/2$, $\theta^n_{j+1/2}$ — схемный параметр, надлежащий выбор которого гарантирует выполнение TVD-свойства для численного решения модельных скалярных уравнений. При теоретическом исследовании рассматриваемой схемы предполагается, что $\theta = \mathrm{const} \geq 0$.

Кроме уравнений (28), (29) на шаге предиктор решается и уравнение относительно сеточной функции $\varphi^*_{j+1/2}$, определенной в центрах ячеек, при этом используются вычисленные ранее значения $\eta^*_{j+1/2}$:

$$\varphi^*_{\bar{x}x,j+1/2} + \varphi^*_{\bar{y}y,j+1/2} - \frac{\varphi^*_{j+1/2}}{\nu} = c_0^2\Big(\eta^*_{\bar{x}x,j+1/2} + \eta^*_{\bar{y}y,j+1/2}\Big). \tag{30}$$

Полученные значения η^*, $\boldsymbol{u}^*$, φ^* используются на шаге корректор:

$$\frac{\eta^{n+1}_j - \eta^n_j}{\tau} + h_0\Big(u^*_{\mathring{x},j} + v^*_{\mathring{y},j}\Big) = 0, \tag{31}$$

$$\frac{\boldsymbol{u}^{n+1}_j - \boldsymbol{u}^n_j}{\tau} + g\mathring{\nabla}\eta^*_j = \frac{1}{h_0}\mathring{\nabla}\varphi^*_j, \tag{32}$$

где

$$u^*_{\mathring{x},j} = \frac{1}{2\Delta x}\Big(u^*_{j_1+1/2,j_2+1/2} - u^*_{j_1-1/2,j_2+1/2} + u^*_{j_1+1/2,j_2-1/2} - u^*_{j_1-1/2,j_2-1/2}\Big),$$

$$v^*_{\mathring{y},j} = \frac{1}{2\Delta y}\Big(v^*_{j_1+1/2,j_2+1/2} - v^*_{j_1+1/2,j_2-1/2} + v^*_{j_1-1/2,j_2+1/2} - v^*_{j_1-1/2,j_2-1/2}\Big),$$

$$\mathring{\nabla}\eta^*_j = \left(\eta^*_{\mathring{x},j}, \eta^*_{\mathring{y},j}\right), \quad \mathring{\nabla}\varphi^*_j = \left(\varphi^*_{\mathring{x},j}, \varphi^*_{\mathring{y},j}\right).$$

Путем довольно громоздких выкладок удалось показать, что необходимое условие устойчивости схемы (27)—(32) можно записать при малых значениях параметра θ в виде ограничения на число Куранта

$$c_0 æ \leq \frac{\min(\Delta x, \Delta y)/\Delta_0 + 2\delta\sqrt{\theta/3}}{1+\theta}, \tag{33}$$

где использованы обозначения (20). Условие (33) является менее ограничительным по сравнением с условием устойчивости

$$c_0 æ \leq \frac{1}{\sqrt{1+\theta}}, \tag{34}$$

аналогичной схемы предиктор-корректор для бездисперсионных уравнений мелкой воды, получающейся из схемы (28), (29), (31), (32) при нулевых правых частях в уравнениях движения (29), (32).

Заключение

Обзор численных методов решения двумерных НЛД-уравнений показал, что в литературе практически отсутствуют работы по теоретическому исследованию конечно-разностных схем. В нашей работе выполнено исследование устойчивости и дисперсионных свойств трех разностных схем. Один из главных выводов исследования состоит в том, что условия устойчивости разностных схем для 2D-уравнений с дисперсией являются более слабыми по сравнению с аналогичными условиями для схем, аппроксимирующих бездисперсионные уравнения мелкой воды. Отмечены специфические свойства фазовых ошибок двумерных разностных схем.

Список литературы

[1] Федотова З. И., Хакимзянов Г. С., Гусев О. И., Шокина Н. Ю. Нелинейно-дисперсионные модели волновой гидродинамики: уравнения и численные алгоритмы. Новосибирск: Наука, 2017.

[2] Федотова З. И., Хакимзянов Г. С., Гусев О. И. История развития и анализ численных методов решения нелинейно-дисперсионных уравнений гидродинамики. I. Одномерные модели // Вычисл. технологии. 2015. Т. 20, № 5. С. 120–156.

[3] Ertekin R. C., Webster W. C., Wehausen J. V. Waves caused by a moving disturbance in a shallow channel of finite width // Journal of Fluid Mechanics. 1986. V. 169. P. 275–292.

[4] Железняк М. И., Пелиновский Е. Н. Физико-математические модели наката цунами на берег // Накат цунами на берег: Сб. науч. тр. / Горький: ИПФ АН СССР, 1985. С. 8–33.

[5] Федотова З. И., Хакимзянов Г. С. Нелинейно-дисперсионные уравнения мелкой воды на нестационарном дне // Вычисл. технологии. 2008. Т. 13, № 4. С. 114–126.

[6] Fedotova Z. I., Khakimzyanov G. S., Dutykh D. On the energy equation of approximate models in the long-wave hydrodynamics // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2014. V. 29, No. 3. P. 167–178.

[7] Peregrine D. H. Long waves on a beach // Journal of Fluid Mechanics. 1967. V. 27, pt 4. P. 815–827.

[8] Abbott M., Petersen H., Skovgaard O. Computations of short waves in shallow water // Coastal Engineering Proceedings. 1978. V. 16. P. 414–433.

[9] Rygg O. B. Nonlinearv refraction-diffraction of surface waves in intermediate and shallow water // Coastal Engineering Journal. 1988. V. 12, No. 3 P. 191–211.

[10] Chubarov L. B., Fedotova Z. I., Shkuropatskii D. A. Investigation of computational models of long surface waves in the problem of interaction of a solitary wave with a conic island // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 1998. V. 13, No. 4. P. 289–306.

[11] Компаниец Л. А. О численных алгоритмах для нелинейно-дисперсионных моделей мелкой воды в двумерном случае // Вычисл. технологии. 1996. Т. 1, № 3. С. 44–56.

[12] Wei G., Kirby J. T., Grilli S. T., Subramanya R. A fully nonlinear Boussinesq model for surface waves. Part 1. Highly nonlinear unsteady waves // Journal of Fluid Mechanics. 1995. V. 294. P. 71–92.

[13] Хакимзянов Г. С., Шокин Ю. И., Барахнин В. Б., Шокина Н. Ю. Численное моделирование течений жидкости с поверхностными волнами. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2001.

[14] Гусев О. И., Шокина Н. Ю., Кутергин В. А., Хакимзянов Г. С. Моделирование поверхностных волн, генерируемых подводным оползнем в водохранилище // Вычисл. технологии. 2013. Т. 18, № 5. С. 74–90.

[15] Гусев О. И. Алгоритм расчета поверхностных волн над подвижным дном в рамках плановой нелинейно-дисперсионной модели // Вычисл. технологии. 2014. Т. 19, № 6. С. 19–40.

Зинаида Ивановна Федотова — к.ф.-м.н., ст. науч. сотр. Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: zf@ict.nsc.ru;
Олег Игоревич Гусев — мл. науч. сотр. Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: gusev_ oleg_ igor@mail.ru;
Нина Юрьевна Шокина — к.ф.-м.н., ст. науч. сотр. Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: nina.shokina@googlemail.com;
Гаяз Салимович Хакимзянов — д.ф.-м.н., вед. науч. сотр. Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: khak@ict.nsc.ru.

Дата поступления — 31 мая 2017

ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ СРЕДСТВА РАЗРАБОТКИ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ПАКЕТОВ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ НА ОСНОВЕ МОДУЛЬНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ

А. Г. Феоктистов, И. А. Сидоров, С. А. Горский

Институт динамики систем и теории управления им. В.М. Матросова СО РАН, 664033, Иркутск

УДК 004.4+519.6

В статье рассматривается актуальная проблема, связанная с разработкой распределенных пакетов прикладных программ (приложений) для решения крупномасштабных научных и прикладных задач. Предлагается новый подход, основанный на интеграции концептуального и модульного программирования в рамках гетерогенной распределенной вычислительной среды. Этот подход включает в себя следующие основные этапы: структурный анализ предметной области и построение ее концептуальной модели, разработка прикладного и настройка системного программного обеспечения пакета, базирующегося на использовании заложенных в модель знаний, выполнение приложений с мультиагентным управлением вычислительными процессами. Концептуальная модель описывает параметры предметной области, операции над полем параметров, программные модули (прикладное программное обеспечение), реализующие операции, вычислительные узлы и другие объекты как предметной области, так и вычислительной среды, включая отношения между объектами. Пользователи формулируют постановки решения задач в виде схем их решения. Понятие схемы решения задачи тесно коррелирует с термином workflow, часто используемым в зарубежной литературе. Системное программное обеспечение включает высокоуровневые средства для управления схемами решения задач как в однородных системах, так и в гетерогенной распределенной вычислительной среде. В рамках предлагаемого подхода представлены два инструментальных комплекса, обеспечивающих различные возможности для создания и применения распределенных пакетов прикладных программ с учетом особенностей их предметных областей.

Ключевые слова: распределенные вычисления, модульное программирование.

Введение

Развитие технологий параллельного программирования привело к существенным изменениям архитектуры пакетов прикладных программ (ППП) [1]. Современные ППП представляют собой распределенные приложения для решения крупномасштабных научных и прикладных задач в гетерогенной распределенной вычислительной среде (ГРВС). Такая среда состоит из вычислительных узлов, объединенных коммуникационной сетью. Вычислительный узел представляет собой программно-аппаратный ресурс, включающий модули оперативной памяти, один или несколько многоядерных процессоров, жесткий диск и системное программное обеспечение (ПО), представляющее собой совокупность программных средств, поддерживающих функционирование узла в рамках среды. ГРВС может включать кластеры, узлы которых имееют различные вычислительные характеристики. Кластеры могут быть географически распределены и принадлежать разным организациям. Как следствие, возникают новые требования к средствам описания и обработки схем решения задач пользователей распределенных ППП (РППП).

В общем случае архитектура среды выполнения РППП включает: его прикладное и программное наполнение; входные языки пакета; бызы знаний и расчетных данных; интерфейсы пользователя; вычислительные ресурсы, в которых будут выполняться модули пакета; промежуточное ПО для поддержки взаимодействия

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (номера проектов 15-29-07955 и 16-07-00931), а также Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации (НШ-8081.2016.9).

между функциональным и системным наполнением пакета и вычислительными ресурсами; средства виртуализации компонентов пакета, обеспечивающие пользователям открытый и прозрачный доступ к этим компонентам.

Можно выделить два основных подхода к организации функционального наполнения пакета и решению прикладных задач в ГРВС. В рамках первого подхода производится синтез абстрактной программы по схеме решения задачи с последующей компиляцией на ее основе параллельной программы, которая выполняется в ГРВС. При втором подходе схема решения задачи выполняется в ГРВС в режиме интерпретации.

Появление развитого базового программного обеспечения [2], реализующего технологии организации расчетов в ГРВС, является основой для массовых параллельных и распределенных приложений. Однако анализ методов и средств организации такого рода вычислений выявил ряд проблем научно-технического характера: разработка распределенных и параллельных приложений выполняется зачастую "точечно", в привязке к узкому классу задач из конкретной предметной области; создаваемые приложения плохо интегрируются, вследствие использования различного промежуточного ПО, форматов данных и протоколов их передачи, а также использования разных моделей программирования приложений, планирования вычислительных процессов и загрузки вычислительных ресурсов; круг потенциальных пользователей таких приложений достаточно ограничен, что обусловлено сложностью их освоения и применения прикладными специалистами для решения своих задач.

В частности, обеспечение эффективного масштабирования потоков заданий, порождаемых РППП, является в настоящее время одним из фундаментальных и практически важных направлений исследований по организации проблемно-ориентированных ГРВС [3]. Необходимость создания масштабируемых РППП возникает при выполнении многовариантных расчетов, решении широкого спектра переборных задач и многих других. Предполагается, что масштабируемое приложение включает набор прикладных программ для параллельного решения задачи с помощью различных вычислительных единиц (например, ядер) разнородных узлов ГРВС и порождает поток заданий для этих прикладных программ. При этом вычислительная нагрузка, связанная с решением задачи, распределяется между вычислительными единицами разнородных узлов ГРВС, а время выполнения потока заданий уменьшается обратно пропорционально числу используемых вычислительных единиц с учетом их производительности в составе конкретного узла ГРВС. Создание системы управления потоками заданий в ГРВС является нетривиальной и весьма актуальной проблемой [4].

В статье рассматриваются два инструментальных комплекса (ИК), предоставляющих различные возможности для создания и применения РППП в среде, организованной на базе ресурсов центра коллективного пользования (ЦКП), с учетом особенностей предметных областей разрабатывамых пакетов.

1 Средства разработки распределенных пакетов прикладных программ

РППП ориентируются, как правило, на класс задач, характеризующихся следующими свойствами: решение задачи требует использования больших объемов вычислительных ресурсов (процессорного времени, оперативной памяти, дискового пространства и других характеристик); возможна декомпозиция общей сложной задачи на более простые (с вычислительной точки зрения) подзадачи; процесс решения общей задачи подразумевает распределенное решение набора ее взаимосвязанных подзадач; не предполагается интенсивного взаимодействия между параллельными вычислительными процессами; задача допускает декомпозицию данных на блоки и независимую параллельную обработку этих блоков. К такому классу относятся, например, задачи с многовариантными расчетами, а также многие переборные задачи.

Известные средства организации распределенных вычислений, например, пакет Globus Toolkit [5], кластерная система HTCondor [6], программный комплекс BOINC [7] или инструментарий X-COM [8], как правило, не в полной мере предоставляют такие возможности гибкого управления вычислительным процессом решения задачи, как экспериментальное прогнозирование времени выполнения, обработка событий, обеспечение надежности и декомпозиция ее подзадач.

Известен широкий спектр средств управления workflow. В их числе известные системы Askalon, Condor DAGMan, Grid Ant, Grid Flow, Karajan, Kepler, Pegasus, Taverna, Triana, UNICORE и другие [9]. Однако анализ функциональных возможностей этих систем показывает, что проблемы формирования и обработки ими масштабируемых потоков заданий для ЦКП не решены в полной мере [10].

Ниже рассматриваются два ИК, базирующихся в отличие от вышеперечисленных средств на использовании концептуальной модели ГРВС, интегрирующей знания как о предметных областях решаемых задач, так

и среде выполнения РППП, а также на применении специализированной системы мета-мониторинга ГРВС.

При разработке и применении РППП в этих ИК предполагается, что узлы ГРВС используют различные программно-аппаратные платформы и операционные системы (ОС). В этой связи, сегменты ГРВС различаются степенью производительности и надежности.

Языковые средства РППП предоставляют возможности для описания концептуальной модели предметной области, ее объектов и основных свойств, формулировки постановок задач, формирования заданий, подготовки исходных данных и других необходимых операций.

2 Концептуальная модель ГРВС

Выбор оптимальной конфигурации вычислительной системы для решения крупномасштабной задачи определяется алгоритмами построения эффективного плана ее решения и назначения подходящих ресурсов. Успешная работа этих алгоритмов во многом зависит от степени полноты информации о специфике решаемой задачи, а также вычислительных характеристиках и правилах использования ресурсов системы. Таким образом, возникает необходимость разработки модели объектно-ориентированной ГРВС, которая бы позволила представить всесторонние знания об этой среде в некотором унифицированном и стандартизированном формате, который может быть использован различными программными комплексами, функционирующими в рамках данной среды.

Концептуальная модель проблемно-ориентированной ГРВС, используемая рассматриваемыми в статье ИК, позволяет осуществить взаимосвязанное представление алгоритмических знаний предметных областей решаемых задач, а также знаний о программно-аппаратной инфраструктуре среды и административных политиках, определенных для ее ресурсов.

Вычислительные знания содержат информацию о прикладных модулях для решения задач, системных модулях и вспомогательных модулях для препроцессорной и постпроцессорной обработки данных. Системные модули обеспечивают планирование вычислений, формирование заданий, распределение ресурсов, мониторинг вычислительных процессов и динамическую декомпозицию задач.

Схемные знания включают множество объектов для описания модульной структуры модели и алгоритмов для исследования проблемной области. Основными объектами предметной области являются параметры и операции.

Продукционные знания определяют правила применения операций и позволяют пользователям выбирать лучшие алгоритмы в текущей вычислительной ситуации. Порядок выполнения продукций определяется их приоритетами.

Знания о программно-аппаратной инфраструктуре представлены характеристиками узлов, каналов связи, сетевых устройств, топологии сети и другими подобными сведениями. Эти характеристики включают в себя также информацию о сбоях программного обеспечения и аппаратных средств.

Знания об административных политиках включают данные о пользователях и их заданиях, системах управления ресурсами и дисциплинах диспетчеризации вычислительных работ.

Модель обеспечивает фундаментальную основу для разработки алгоритмов управления вычислениями в ГРВС, включая алгоритмы классификации заданий, планирования вычислений и распределения ресурсов. Методы и средства ее построения представлены более детально в работе [11].

3 Инструментальный комплекс DISCOMP

ИК DISCOMP [13] предназначен для поддержки основных этапов разработки и применения РППП, характеризующихся перечисленными ниже особенностями.

Функциональное наполнение РППП составляют модули, представленные в виде исполняемых в пакетном режиме программ, реализованных на различных языках программирования (например, C, Fortran, Pascal). Модули размещаются в разных узлах ГРВС, в каждом узле может быть установлено несколько модулей. Допустимо включение в состав функционального наполнения унаследованного ПО, а также нетиражируемых программных комплексов, жестко привязанных к узлам среды. Обмен данными между модулями осуществляется через файлы.

Системная часть РППП включает мультиагентные компоненты ИК DISCOMP для управления распределенными вычислительными процессами и обменом данных. Эти компоненты являются платформонезависимыми и могут функционировать под управлением различных ОС (например, MS Windows, Linux и

Mac OS X). Набор компонентов, включаемых в системную часть пакета, определяется его разработчиком. Особенности функционирования мультиагентной системы для управления распределенными вычислениями приведены в работе [12].

Решение задачи выполняется, как правило, по одной слабо меняющейся схеме, требующей динамического управления процессом вычислений. Схема решения задачи строится в параллельно-ярусной форме на основе процедурной постановки задачи: “зная M выполнить Q”, где M и Q — это соответственно модель ГРВС и множество модулей, необходимых для решения задачи.

Выполнение схемы решения задачи осуществляется в режиме интерпретации. Предварительная классификация заданий по выполнению схем решения задач позволяет оптимально назначать ресурсы модулям.

ИК DISCOMP поддерживает виртуализацию ресурсов ГРВС. Если программно-аппаратные ресурсы какого-либо узла среды не соответствуют требованиям модуля схемы решения задачи, то для выполнения такого модуля может быть запущена виртуальная машина.

Концептуальная модель ГРВС и схемы решения задач описываются в текстовом виде с использованием расширения языка XML. На рис. 1 представлены фрагменты текста описания модуля и его параметров (рис. 1 а), а также постановки задачи (1 б), включающей этот модуль.

```
<!-- секция спецификаций параметров -->
<parameters>
   <param name='list' type='filelist'
          filepattern='list_%1.txt'/>
   <param name='result' type='filelist'
          filepattern='result_%1.txt'/>
</parameters>

<!-- секция спецификаций модулей -->
<modules>
   <module name='solver'>
      <commands os='Linux'>
         <start>./solver</start>
         <stop>./stop.sh</stop>
      </commands>
      <parameters>
         <input>
            <param name='list'/>
         </input>
         <output>
            <param name='result'/>
         </output>
      </parameters>
   </module>
</modules>
```

```
<scheme>
  <stage>
     <listmodule name='solver'
         onFinish='checkResult($el_num)'/>
  </stage>
</scheme>

<control><![CDATA[
  function checkResult (el_num) {
     // получить значение выходного элемента
     // параметра-списка result с порядковым
     // номером el_num
     var res = DiscompAPI.getLPV('result', el_num);
     // если значение элемента содержит подстроку
     // "RESULT FOUND", то остановить вычисления на
     // текущем ярусе и перейти к следующему
     if ( res.match(/RESULT FOUND/gi) ) {
        DiscompAPI.stopStageModules ();
     }
  }
]]></control>
```

Рис. 1: Фрагмент описания модели (1 а) и постановки задачи (1 б)

Языковые средства обеспечивают задание условий обработки событий, возникающих в процессе вычислений. В их числе такие события, как запуск и завершение выполнения модуля или группы модулей, вычисление значений управляющих параметров, приближение характеристик ресурсов узла среды к их критическим значениям, отказ ресурсов узла и другие действия, совершенные в процессе вычислений.

Обработка событий включает:

- диагностику запуска и завершения выполнения модулей;
- рестарт модулей с аварийным завершением их работы;
- выбор новой схемы решения задачи;
- завершение избыточных вычислительных процессов в случае нахождения решения задачи;
- идентификацию и устранение отказов ресурсов узла, а также другие операции, направленные на повышение надежности вычислительного процесса.

Интерпретатор схемы решения задачи получает данные о состоянии вычислительных процессов и ресурсов, необходимые при обработке событий, от специализированной системы метамониторинга [14].

В целом характерными особенностями ИК DISCOMP являются: представление пакетных знаний на языке XML; построение схемы решения задачи на основе процедурной постановки задачи; выполнение вычислительного процесса в режиме интерпретации; предоставление конечному пользователю гибких языковых средств управления процессом вычислений.

4 Инструментальный комплекс Orlando

ИК Orlando [15] предоставляет пользователям графический язык описания предметной области РППП и постановок задач, которые могут формулироваться как в процедурной форме, так и в непроцедурной форме “зная M вычислить Y по X”, где X и Y — это соответсвенно множества исходных и целевых параметров задачи. В последнем случае производится автоматический синтез схемы решения задачи (абстрактной программы). Схема решения задачи, сформированная на основе ее процедурной постановки, может включать управляющие конструкции ветвления, цикла и рекурсии.

Графическое описание предметной области РППП и постановок задач автоматически переводится во внутреннее представление в терминах языка XML. Схема решения задачи выполняется в режиме интерпретации. На рис. 2 приведен пример графического описания схемы решения задачи в ИК Orlando.

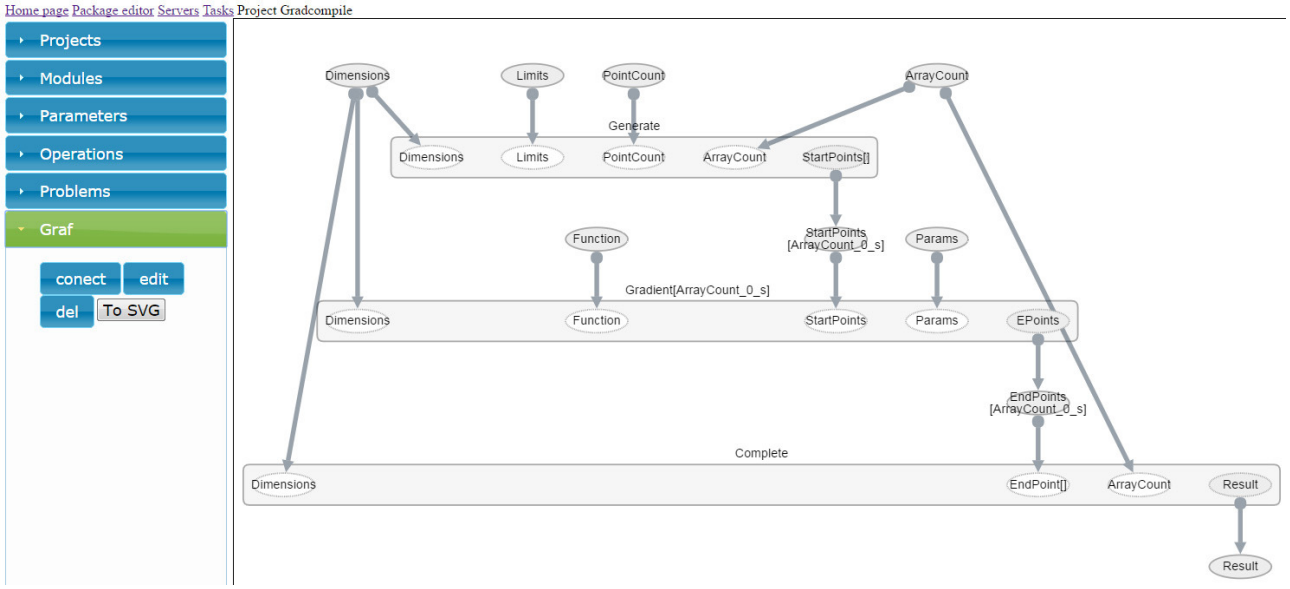


Рис. 2: Описание схемы решения задачи в ИК Orlando

Средства описания концептуальной модели в ИК Orlando позволяют также создавать системные параметры и операции, в том числе представляющие соответственно данные и модули API системы метамониторинга. Это обеспечивает возможность тестового запуска модулей в узлах среды в процессе решения задачи с целью экспериментального прогназирования времени их выполнения и динамического распределения нагрузки между гетерогенными узлами пропорционально их вычислительным характеристикам.

Важной особенностью ИК Orlando является комплексирование разрабатываемых пакетов. Комплексирование обеспечивает возможность использования в процессе создания нового пакета фрагментов описания предметных областей, программных модулей, исходных данных и результатов вычислений, имеющихся в других пакетах. Вследствие этого, сокращаются сроки разработки РППП и проведения вычислительных экспериментов.

5 Применение инструментальных комплексов

Разработанные ИК используются в ЦКП “Иркутский суперкомпьютерный центр СО РАН” [16] в качестве сред разработи РППП для решения научных и прикладных задач из разных предметных областей. В их числе можно выделить задачи построения множеств достижимости управляемых летательных объектов [17], выполнимости булевых формул [18], поиска глобального минимума многоэкстремальных функций [19], исследования биоресурсов озера Байкал [20], обеспечения безопасности энергетических систем [21] и оптимизации складской логистики [22].

Результаты экспериментов, приведенные в вышеперечисленных публикациях, показывают ускорение и эффективность вычислений близкие соответсвенно линейному ускорению и эффективности, равной единице. В разных экспериментах использовалось от 64 до 3500 ядер.

Для ряда задач были проведены модельные эксперименты с использованием ресурсов, включавших до 35000 ядер. Эксперименты показали, что результаты по ускорению и эффективности, аналогичные вышеупомянутым результатам, могут быть достигнуты при росте числа ядер моделируемых ресурсов за счет увеличения размерности задачи или уменьшения допустимой погрешности вычислений, приводящих к увеличению вычислительной нагрузки.

Заключение

В статье представлены высокоуровневые инструментальные средства создания и применения РППП. Методология выполненных работ базируется на комплексном применении методов и средств искусственного интеллекта: баз знаний, концептуального крупноблочного программирования и синтеза программ, мультиагентных технологий, а также методов оценки надежности, планирования и распределения вычислительных ресурсов.

ИК DISCOMP ориентирован преимущественно на подготовленных специалистов, способных самостоятельно описывать предметную область и постановки задач на входном языке программирования. ИК ORLANDO предоставляет пользователям и разработчикам пакетов визуальный графический интерфейс, облегчающий выполнение основных этапов создания и применения РППП.

РППП, разработанные с использованием предложенных инструментальных средств, продемонстрировали эффективность функционирования при решении научных и прикладных задач. Основными преимуществами их применения являются: сокращение времени разработки проблемно-ориентированных сред параллельных и распределенных вычислений; сокращение затрат на создание схем решения задач при проведении широкомасштабных вычислительных экспериментов.

Список литературы

[1] Горбунов-Посадов М.М., Корягин Д.А., Мартынюк В.В. Системное обеспечение пакетов прикладных программ. М.: Наука, 1990.

[2] Шамакина А.В. Обзор технологий распределенных вычислений // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2014. Т. 3, № 3. С. 51–85.

[3] Соколинский Л.Б., Шамакина А.В. Методы управления ресурсами в проблемно-ориентированных вычислительных средах // Программирование. 2016. № 1. С. 26–38.

[4] Топорков В.В., Емельянов Д.М., Потехин П.А. Формирование и планирование пакетов заданий в распределенных вычислительных средах // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2015. Т. 4, № 2. С. 44–57.

[5] Foster I., Kesselman C. Globus: A metacomputing infrastructure toolkit // International Journal of High Performance Computing Applications. 1997. V. 11, № 2. P. 115–128.

[6] Couvares P., Kosar T., Roy A., Weber J., Wenger K. Workflow management in condor // Workflows for e-Science. London: Springer, 2007.

[7] Anderson D. Boinc: A system for public-resource computing and storage // Proceedings of the 5th IEEE/ACM International Workshop on Grid Computing. IEEE, 2004. P. 4–10.

[8] Воеводин В.В. Решение больших задач в распределенных вычислительных средах // Автоматика и телемеханика. 2007. № 5. С. 32–45.

[9] Talia D. Workflow Systems for Science: Concepts and Tools // ISRN Software Engineering. 2013. V. 2013. P. 1–15.

[10] Tao J., Kolodziej J., Ranjan R., Jayaraman P., Buyya R. A Note on New Trends in Data-Aware Scheduling and Resource Provisioning in Modern HPC Systems // Future Generation Computer Systems. 2015. V. 51, № C. P. 45–46.

[11] Bychkov I., Oparin G., Tchernykh A., Feoktistov A., Bogdanova V., Gorsky S. Conceptual Model of Problem-Oriented Heterogeneous Distributed Computing Environment with Multi-Agent Management // Procedia Computer Science. 2017. V. 103. P. 162–167.

[12] Бычков И.В., Опарин Г.А., Феоктистов А.Г., Богданова В.Г., Пашинин А.А. Сервис-ориентированный мультиагентный подход к управлению распределенными вычислениями // Автоматика и телемеханика. № 11. С. 118-131.

[13] Сидоров И.А., Опарин Г.А., Феоктистов А.Г. Разработка и применение распределенных пакетов прикладных программ // Программные продукты и системы. 2010. № 2. С. 108–111.

[14] Bychkov I., Oparin G., Novopashin A., Sidorov I. Agent-based approach to monitoring and control of distributed computing environment // Lecture Notes in Computer Science. 2015. V. 9251. P. 253–257.

[15] Феоктистов А.Г., Горский С.А. Технология построения пакетов прикладных программ для вычислительных кластеров // Параллельные вычисления и задачи управления: Тр. III Междунар. конф. М.: Изд-во ИПУ РАН, 2006. С. 498–504.

[16] Иркутский суперкомпьютерный центр СО РАН. [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://hpc.icc.ru (дата обращения: 26.05.2017).

[17] Сидоров И.А., Тятюшкин А.И., Феоктистов А.Г. Распределенная информационно-вычислительная среда модульного программирования // Параллельные вычисления и задачи управления: Тр. III Междунар. конф. Москва: Изд-во ИПУ РАН, 2006. С. 505–521.

[18] Заикин О.С., Семенов А.А., Сидоров И.А., Феоктистов А.Г. Параллельная технология решения SAT-задач с применением пакета прикладных программ D-SAT // Вестник ТГУ. 2007. № 23. Приложение. С. 83–95.

[19] Феоктистов А.Г., Горский С.А. Реализация метода мультистарта в пакете Градиент // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Информационные технологии. 2007. Т. 5, вып. 2. С. 78–82.

[20] Galachyants Y.P., Zakharova Yu.R., Petrova D.P., Morozov A.A., Sidorov I.A., Marchenkov A.M., Logacheva M.D., Markelov M.L., Khabudaev K.V., Likhoshway Ye.V., Grachev M.A. Sequencing of the complete genome of an araphid pennate diatom Synedra acus subsp. radians from Lake Baikal // Doklady Biochemistry And Biophysics. 2015. V. 461, № 1. P. 84–88.

[21] Edelev A.V, Sidorov I.A. Combinatorial Modeling Approach to Find Rational Ways of Energy Development with Regard to Energy Security Requirements // Lecture Notes in Computer Science. 2017. V. 10187. P. 310–317.

[22] Bychkov I., Oparin G., Tchernykh A., Feoktistov A., Bogdanova V., Dyadkin Yu., Andrukhova V., Basharina O. Toolkit for Simulation Modeling of Logistics Warehouse in Distributed Computing Environment // Информационные технологии и нанотехнологии: Сб. тр. III Междунар. конф. и молодежной шк. Самара: Новая техника, 2017. С. 1106–1111.

Александр Геннадьевич Феоктистов — к.т.н., ст. науч. сотр.
Института динамики систем и теории управления им. В.М. Матросова СО РАН;
e-mail: agf65@yandex.ru;
Иван Александрович Сидоров — к.т.н., науч. сотр.
Института динамики систем и теории управления им. В.М. Матросова СО РАН;
e-mail: yvan.sidorov@gmail.com;
Сергей Алексеевич Горский — к.т.н., науч. сотр.
Института динамики систем и теории управления им. В.М. Матросова СО РАН;
e-mail: gorskysergey@mail.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ДИСКРЕТНО-АНАЛИТИЧЕСКИЕ АППРОКСИМАЦИИ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ МОДЕЛИ МНОГОФАЗНОЙ СИСТЕМЫ ГИДРОТЕРМОДИНАМИКИ ОЗЕРА БАЙКАЛ

Е. А. Цветова

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.63

Для изучения гидро-геохимических процессов, протекающих в озере Байкал, разрабатывается комплекс математических моделей гидротермодинамики, переноса и трансформации примесей, находящихся в различных фазовых состояниях. Для его численной реализации и построения согласованных алгоритмов используется вариационный подход, в соответствии с которым для всей системы строится интегральное тождество, которое затем аппроксимируется с использованием схем расщепления. На основе концепции сопряженных интегрирующих множителей для операторов типа конвекции-диффузии-реакции разработаны дискретно-аналитические схемы, обладающие свойствами безусловной монотонности. Представлены результаты численных экспериментов по моделированию гидротермодинамики и процессов переноса и трансформации газа, выходящего из источников на дне озера.

Ключевые слова: вариационный подход, дискретно-аналитические аппроксимации, сопряженные интегрирующие множители, конвекция, диффузия, реакция

Введение

Изучение процессов, протекающих в природных объектах, в современной науке происходит с привлечением методов математического моделирования, которое, в свою очередь, формулирует широкий круг вопросов, таких как создание соответствующих математических моделей, разработка алгоритмов для их реализации, построение компьютерных программ и т.д.

В последнее время интерес к экологическим процессам в Байкале сильно возрос. Как утверждают авторы [1], за последние 10 лет концентрация растворенного метана в Байкале увеличилась в три раза, причем переходный процесс начался в 2003 г. и сопровождался линейным ростом концентрации. Естественно предположить, что поступление метана может происходить со дна озера, где находятся грязевые вулканы и подводные выходы газа, тем более, что они были обнаружены повсеместно во всех трех котловинах озера [4–6]. Кроме того, метан может поступать в толщу вод при разложении газогидратов, залежи которых были также обнаружены на дне на больших глубинах. Однако относительно залежей можно сказать, что они лежат на дне испокон века. Процессы растворения, связанные с их омыванием течениями, происходят очень медленно. По законам физики и химии, метан может массово выходить из гидрата только в процессе разложения, которое в Байкальских условиях происходит на глубинах менее 380 м. Но для этого газогидрату как-то нужно оказаться на таких глубинах. Этому могут способствовать такие события как подземные землетрясения, сходы грунта, что случается не часто. Так что, по-видимому, основные причины повышения концентрации метана следует искать в подводных выходах газа [2–4].

В настоящей статье речь идет о процессах распространения метана, выходящего в виде пузырей из источников, находящихся на дне озера.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00137) и Программ фундаментальных исследований РАН I.33П и II.2П/1.3.

1 О комплексе моделей

Для изучения гидро-геохимических процессов, протекающих в озере Байкал, разрабатывается комплекс математических моделей гидротермодинамики, переноса и трансформации примесей, находящихся в различных фазовых состояниях [5–7].

Для моделирования гидротермодинамики несущей среды используется негидростатическая модель [5, 6]. Она представлена системой уравнений в частных производных для трех компонент вектора скорости течений (u, v, w), уравнения для температуры T, уравнения состояния и уравнения сохранения массы:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + L(u) - D(u) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} + lv + kw, \tag{1}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + L(v) - D(v) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y} - lu, \tag{2}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + L(w) - D(w) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z} + g - ku, \tag{3}$$

$$\rho c_p(\frac{\partial T}{\partial t} + L(T)) - D_T(T) = q_T + L_m, \tag{4}$$

$$\rho = \rho(T, \bar{S}, p), \tag{5}$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = f. \tag{6}$$

Здесь l, k — параметры Кориолиса, p — давление, ρ — плотность, L — трехмерные операторы, описывающие перенос,$D()$, $D_T()$ трехмерные диффузионые операторы.

Поведение фаз метана описывается системой уравнений типа конвекции-диффузии-реакции. Предполагается, что растворенный метан движется со скоростью несущей среды, а газовая фаза и гидратные частицы получают дополнительные скорости подъема за счет сил плавучести. Переход газа в раствор регулируется условиями закона Генри-Дальтона. Гидрат разлагается на газ и воду при достижении соответствующих условий по давлению и температуре. В условиях Байкала это происходит на глубинах около 380 м.

Система уравнений для концентраций метан-содержащих компонент C_h, C_g, C_s имеет вид:

$$\frac{\partial C_h}{\partial t} + L_h(C_h) - D(C_h) == -\tilde{k}C_h, \tag{7}$$

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} + L_g(C_g) - D(C_g) = \tilde{k}C_h - \beta(H\hat{p} - C_s), \tag{8}$$

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} + L(C_s) - D(C_s) = \beta(H\hat{p} - C_s) \tag{9}$$

Здесь $\tilde{k}$ и β — скорости процессов, H — константа Генри, $\hat{p} = p + p_{atm}$. Операторы L_h, L_g описывают процессы переноса по трем направлениям с учетом дополнительных скоростей подъема по вертикали для газа и гидрата. Система уравнений дополняется соответствующим набором краевых и начальных условий.

2 Дискретно-аналитические аппроксимации

Для численной реализации и построения согласованных алгоритмов комплекса моделей используется вариационный подход [8], в соответствии с которым для всей системы строится интегральное тождество, которое затем аппроксимируется с использованием схем расщепления по физическим процессам и пространственным координатам. Для локально одномерных задач, содержащих операторы конвекции-диффузии-реакции, в [9] построены дискретно-аналитические схемы, при получении которых использована идея сопряжённых интегрирующих множителей. Под последними понимаются фундаментальные решения локальных сопряженных задач на каждом сеточном интервале. В предположении кусочно-постоянных коэффициентов операторов конвекции-диффузии-реакции в пределах одного сеточного интервала, решения локальных сопряженных задач на смежных интервалах используются для построения трехточечных аппроксимаций. В [9] подробно описаны все этапы построения этих схем.

Построенные численные схемы обладают следующими свойствами:

- все коэффициенты трехточечных уравнений неотрицательны;
- в матрице коэффициентов имеется диагональное преобладание;
- выполняются свойства транспортивности в направлении скорости конвективного переноса;
- матрица коэффициентов является монотонной, она неособенная, принадлежит классу М-матриц; элементы обратной матрицы положительны;
- численная схема является точной при кусочно-постоянном представлении коэффициентов и при точном вычислении интегралов в правых частях;
- краевые условия всех известных типов удовлетворяются в таких схемах точно.

3 Результаты сценарных расчетов

В настоящей работе приводятся результаты численных экспериментов, выполненных на одной из версий комплекса моделей. В отличие от [6,7], где в моделях участвовал гидрат метана в виде твердых частиц, здесь рассматривается двухфазная модель «жидкость-газ» с учетом фазового перехода газа в раствор. В системе имеется 3 компонента: вода - несущая среда, метан в газовой фазе и растворенный метан. Решается задача о крупномасштабной конвекции, которая возникает за счет выталкивающей силы пузырьков, выходящих из точечного источника со дна озера. Явные термические эффекты при переходе газ-раствор не проявляются, поэтому в уравнении для температуры они не учитываются.

В сценарном расчете предполагается, что подводный выход газа происходит в условиях стратифицированной водной толщи с реальным вертикальным распределением температур, соответствующим данным за апрель на одном из разрезов в Южном Байкале. По многолетним наблюдениям в этот период на поверхности озера имеется ледовый покров, а в поведении температуры в приповерхностном слое наблюдается обратная сильно устойчивая стратификация: температура на поверхности около 0 и повышается с глубиной. На глубинах 50–150 м располагается термоклин, ниже лежит слой мезотермического максимума, температура в нем самая высокая по всей толще. Далее до дна температура меняется незначительно, стратификация слабоустойчивая [10]. Для задания параметров выбросов использованы оценки, имеющиеся в [4]. По данным наблюдений скорости подъёма пузырей находятся в интервале 15–25 см/сек в зависимости от параметров пузырей. В представленных сценариях источники работают постоянно.

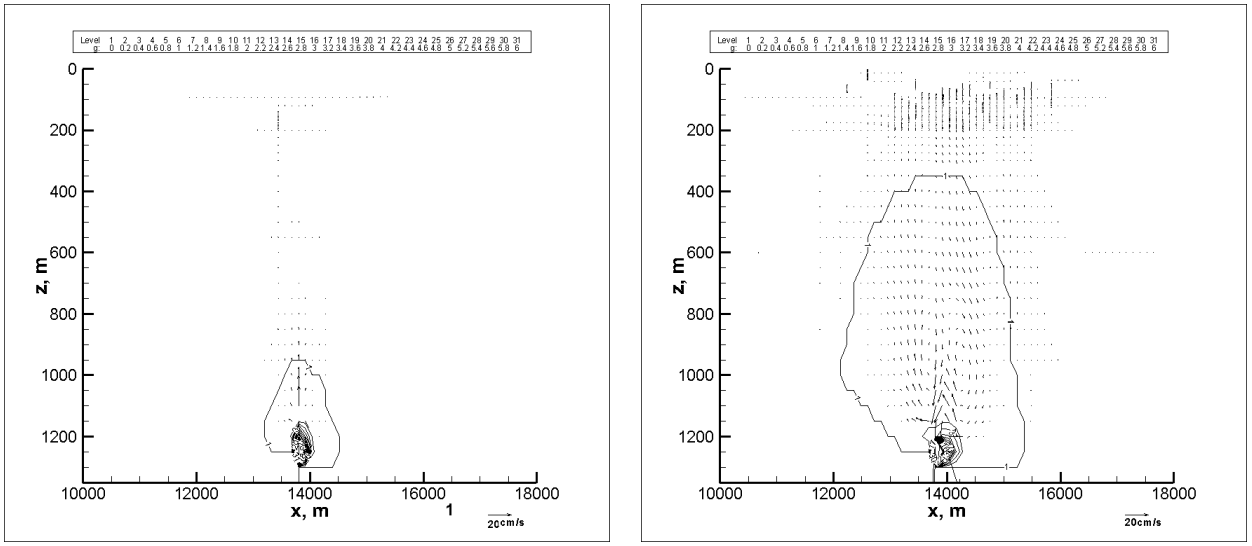


Рис. 1: Подъем газового факела: через 90 сек (слева); через 7,5 часов после начала действия источника (справа).

Результаты расчетов представлены на рис. 1. Сначала факел поднимается быстро, но с течением времени подъем замедляется. Поскольку фоновые концентрации в озере очень далеки до насыщающих значений,

газовая фаза интенсивно переходит в раствор. Примерно через час при постоянной работе источника процесс в системе устанавливается. Дополнительное поступление примеси не приводит к дальнейшему подъему факела. Внутри факела формируется трехмерная система течений с подъемами и компенсирующими опусканиями. С течением времени в циркуляционной системе проявляется колебательный характер. Центральная ось факела смещается, а вокруг неё попеременно усиливаются то правые, то левые ветви. На рисунках показаны двумерные сечения области, проходящие через источник для двух моментов времени. Заметим, что при заданных значениях параметров, глубоководный выброс газа не достиг поверхности.

Заключение

Таким образом, применение вариационного подхода и концепции сопряженных интегрирующих множителей дало возможность построить согласованные алгоритмы для реализации комплекса моделей и решения прикладных задач для озера Байкал. Сценарные расчеты показали, что при выходе газа со дна озера в стратифицированную среду, за счет сил плавучести возникает крупномасштабная конвекция, которая, в зависимости от параметров выбросов, распространяет в толще вод газовые и растворенные примеси.

Список литературы

[1] Гранин Н.Г., Верещагин О.Ф., Козлов В.В., Обжиров А.И., Макаров М.М., Гнатовский Р.Ю., Иванов В.Г., Блинов В.В., Мизандронцев И.Б. Изменение концентрации метана в озере Байкал: возможная причина // Российская конференция «Газовые гидраты в экосистеме Земли». Новосибирск, 2014. — С. 25.

[2] Granin N.G., Makarov M.M., Kucher K.M., Gnatovsky R.Y. Gas seeps in Lake Baikal-detection, distribution, and implications for water column mixing. // Geo-Marine Letters. — 2010, — 30 (3-4), С — 399–409. (9972)

[3] Макаров М. М., Шагдуров А. А., Гранин Н. Г. Пузырьковые выходы газа из донных отложений. Экологический атлас бассейна оз. Байкал [Электронный ресурс] http://bic.iwlearn.org/ru Байкальский информационный центр // URL: http://bic.iwlearn.org/ru/atlas/atlas/138-puzyrkovye-vyhody-gaza-iz-donnyh-otlozhenii-map.

[4] Макаров М.М. Пузырьковые выходы метана из донных отложений озера Байкал. Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата географических наук, Иркутск, 2016, 24 с.

[5] Цветова Е.А. Моделирование переноса и трансформации метана в Байкале // Современные проблемы математического моделирования. Сб. трудов XVI Всероссийской конференции-школы молодых исследователей.— Ростов-на- Дону: Изд ЮФУ.— 2015. —С. 178–185.

[6] Tsvetova E.A. Modeling of hydrodynamics of water-methane heterogeneous system // Proc. SPIE 9680, 21st International Symposium Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics.— 2015.— 968075 (November 19, 2015); doi:10.1117/12.2205998.

[7] Tsvetova E.A. Natural and forced under-ice convection// Proc. SPIE 10035, 22nd International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics: Atmospheric Physics, 1003568 (November 29, 2016); doi:10.1117/12.2249022

[8] Пененко В.В. Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоиздат, 1981. 352 с.

[9] Penenko V.V., Tsvetova E.A., Penenko A.V. Variational approach and Euler's integrating factors for environmental studies//Computers and Mathematics with Applications. 2014. V. 67. P. 2240–2256.

[10] Shimaraev M. N., V. I. Verbolov, N. G. Granin, and P. P. Sherstyankin. Physical Limnology of Lake Baikal: A Review. —1994. — Irkutsk: Baikal Int. Cent. of Ecol. Res.— 81 P.

Елена Александровна Цветова — к.ф.-м.н., ведущий науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: e.tsvetova@ omgp.sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

РАЗРАБОТКА НАДЕЖНОГО ЧИСЛЕННОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ ДЛЯ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННОГО ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ РЕАКЦИИ–ДИФФУЗИИ В ДВУСВЯЗНОЙ ОБЛАСТИ

И. В. Целищева, Г. И. Шишкин

Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, 620990, Екатеринбург

УДК 519.624

В двусвязной области, представляющей из себя прямоугольник с выключенным кругом, рассматривается краевая задача Дирихле для сингулярно возмущенного эллиптического уравнения реакции–диффузии с возмущающим параметром ε, принимающим произвольные значения из полуинтервала (0,1]. При стремлении параметра к нулю в окрестности границы возникают пограничные слои. В окрестности внешней границы, но вне окрестности угловых точек прямоугольника, слой является регулярным, а в окрестности угловых точек — угловым; в окрестности внутренней границы появляется регулярный круговой слой. Погранслои экспоненциально убывают при удалении от внешней и внутренней границ, что затрудняет построение специальных связных сеток, сгущающихся по нормали к границе. Для краевой задачи строится итерационная схема метода Шварца на перекрывающихся подобластях, содержащих или границу круга, или границу прямоугольника. Показана ε-равномерная сходимость метода в равномерной норме с ростом числа итераций (и числа сеточных узлов в случае разностной схемы). Используются сетки Шишкина, сгущающиеся в окрестности пограничных слоев — сетки, кусочно-равномерные по нормали к гладким частям границ подобластей.

Ключевые слова: сингулярно возмущенная задача Дирихле, эллиптическое уравнение реакции–диффузии, пограничные слои, разностная схема, кусочно-равномерные сетки, декомпозиция области, метод Шварца, ε-равномерная сходимость.

Введение

В последние годы растет интерес к разработке надежных численных методов для решения сингулярно возмущенных задач в случае областей сложной геометрии и достаточно сложных пограничных слоев. К надежным относятся методы, специально ориентированные на разрешение пограничных и внутренних слоев в равномерной норме при всех допустимых значениях возмущающего параметра. В этой связи применение методов декомпозиции области является привлекательным, так как позволяет строить эффективные численные аппроксимации, являющиеся достаточно простыми на подобластях. Целью исследований в настоящей работе является построение итерационных схем на основе альтернирующего метода Шварца, позволяющего свести решение задачи к последовательности задач на более простых подобластях, содержащих особенности одного типа, а также осуществить в дальнейшем распараллеливание процесса решения задачи. При построении разностных схем используются классические монотонные аппроксимации и простейшие кусочно-равномерные сетки, сгущающиеся в окрестности пограничных слоев по каждой координате — сетки, кусочно-равномерные по нормали к гладким частям границ подобластей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта № 16-01-00727).

1 Постановка задачи

Рассмотрим задачу Дирихле для сингулярно возмущенного эллиптического уравнения реакции–диффузии [1]

$$\begin{gathered} L_{(1)}u(x) \equiv \varepsilon^2 \Delta u(x) - a(x)u(x) = f(x), \quad x \in D, \\ u(x) = \varphi(x), \quad x \in \Gamma, \end{gathered} \tag{1}$$

на двусвязном множестве $\overline{D}$ — прямоугольнике $\overline{D}_1$ с выключенным кругом D_2 (см. Рис. 1). Здесь $D = D_1 \backslash D_2$, D_1 — прямоугольник, $D_1 = \big(-d_1 < x_1 < d_1\big) \times \big(-d_2 < x_2 < d_2\big)$, $D_2 = \big\{x : (x_1^2 + x_2^2)^{1/2} < d\big\}$ — круг, $d_1,\, d_2 > d > 0$; $\Gamma = \overline{D} \backslash D$, $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, где Γ_1 — граница прямоугольника, Γ_2 — граница круга. Коэффициент и свободный член уравнения $a(x)$, $f(x)$, $x \in \overline{D}$ и граничная функция $\varphi(x)$, $x \in \Gamma$ (рассматриваемая на гладких частях границы Γ) предполагаются ограниченными и достаточно гладкими, причем коэффициент $a(x)$ удовлетворяет условию $a(x) \geq a_0 > 0$. Для простоты считаем, что на множестве угловых точек данные задачи (1) удовлетворяют условиям согласования, обеспечивающим гладкость решения на $\overline{G}$. Параметр ε принимает произвольные значения из полуинтервала (0,1].

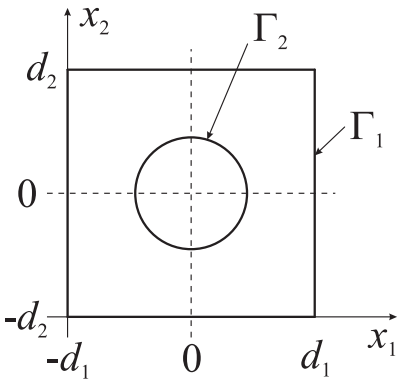


Рис. 1: Двусвязная область

При значении параметра, равном нулю, дифференциальное уравнение вырождается в уравнение нулевого порядка. При $\varepsilon \to 0$ в окрестности границы Γ возникают пограничные слои. В окрестности множества Γ_1, но вне окрестности угловых точек Γ_1^*, пограничный слой является *регулярным*, а в окрестности множества Γ_1^* — *угловым*. В окрестности множества Γ_2 появляется *круговой* погранслой, являющийся регулярным и экспоненциально убывающим при удалении от границы Γ_2. Для построения сеток в окрестности внешней границы Γ_1, где погранслой является достаточно гладким и экспоненциально убывает при удалении от сторон прямоугольника, естественной системой координат является прямоугольная. В двухсвязной кольцевой области в окрестности внутренней границы Γ_2 предлагается использовать полярную систему координат. При построении сеточных аппроксимаций, сходящихся ε-равномерно, такое поведение пограничных слоев обуславливает необходимость использования специальных *составных* сеток, согласованных с границами Γ_1 и Γ_2, и применения метода декомпозиции области с достаточной шириной перекрытия подобластей, содержащих либо границу прямоугольника, либо границу круга.

2 Априорные оценки решения и производных

Обсудим оценки решения задачи (1) и его производных, используемые при построениях и обосновании схем.

С использованием теорем сравнения находим

$$|u(x)| \leq M, \quad x \in \overline{D}. \tag{2a}$$

Для решения краевой задачи и его производных справедлива стандартная оценка

$$\left| \frac{\partial^k}{\partial x_1^{k_1} \partial x_2^{k_2}}\, u(x) \right| \leq M\, \varepsilon^{-k}, \quad x \in \overline{D}, \quad k \leq K. \tag{2b}$$

[1] Запись $L_{(i)}$ ($D_{(i)}$, $m_{(i)}$) означает, что этот оператор (множество, константа) введен в формуле (i). Через M (m) обозначаем достаточно большие (малые) положительные постоянные, не зависящие от величины параметра ε и от параметров схем.

Приведем более тонкие оценки, получаемые на основе асимптотических представлений.

Решение задачи (1) запишем в виде суммы функций

$$u(x) = U(x) + V(x), \quad x \in \overline{D}, \tag{3}$$

где $U(x)$ и $V(x)$ — регулярная и сингулярная части решения. Функции $U(x)$ и $V(x)$, $x \in \overline{D}$, являются соответственно решениями неоднородного и однородного уравнений. Для функции $U(x)$ выполняется оценка

$$\left| \frac{\partial^k}{\partial x_1^{k_1} \partial x_2^{k_2}} U(x) \right| \le M, \quad x \in \overline{D}, \quad k \le K. \tag{4}$$

Функцию $V(x)$ представим в виде суммы функций

$$V(x) = V_0(x) + \sum_{j=1}^{4} V_j(x) + \sum_{i,j=1}^{4} V_{ij}(x), \qquad x \in \overline{D}, \tag{5}$$

где $V_0(x)$ — пограничный слой в окрестности границы Γ_2, $V_j(x)$ и $V_{ij}(x)$ — соответственно, регулярный и угловой эллиптический пограничные слои в окрестности границы Γ_1.

Для сингулярных компонент решения задачи из представления (5) получаются оценки

$$\left| \frac{\partial^k}{\partial n} V_0(x) \right| \le M\varepsilon^{-k} \exp\big(- m\varepsilon^{-k} r(x, \Gamma_2)\big), \quad x \in \overline{D},$$

$$\left| \frac{\partial^k}{\partial x_1^{k_1} \partial x_2^{k_2}} V_j(x) \right| \le M\varepsilon^{-k_j} \exp\big(- m\varepsilon^{-1} r(x, \Gamma_1^j)\big), \quad x \in \overline{D}, \quad 1 \le j \le 4, \tag{6}$$

$$\left| \frac{\partial^k}{\partial x_1^{k_1} \partial x_2^{k_2}} V_{ij}(x) \right| \le M\varepsilon^{-k} \min\Big[\exp\big(- m\varepsilon^{-1} r(x, \Gamma_1^i)\big),\ \exp\big(- m\varepsilon^{-1} r(x, \Gamma_1^j)\big)\Big], \quad x \in \overline{D}, \quad k \le K, \text{‘}$$

где $r(x, \Gamma)$ — расстояние от точки x до границы Γ; $k_j = 1$ при $j = 1, 3$ и $k_j = 2$ при $j = 2, 4$; m — произвольное число из $(0, m^0)$, $m^0 = \min\limits_{\overline{D}} \big[a^{1/2}(x) \big]$, $\partial^k/\partial n$ — производная по нормали к границе Γ_2. Через Γ_1^j, $j = 1, 2, 3, 4$, обозначаем стороны прямоугольника D_1. Считаем, что стороны Γ_1^1 и Γ_1^3 ортогональны оси x_1, а Γ_1^2 и Γ_1^4 — оси x_2; стороны Γ_1^1 и Γ_1^2 содержат вершину $(-d_1, -d_2)$.

Оценки (6) показывают, что функции пограничного слоя убывают экспоненциально при удалении от соответствующих границ.

Априорные оценки получены в предположении, что данные краевой задачи (1) являются достаточно гладкими и удовлетворяют условиям согласования в угловых точках, обеспечивающим требуемую гладкость решения дифференциальной задачи и его регулярной и сингулярной компонент. В оценках (4), (6) $K \ge 2$.

3 Безытерационные разностные схемы

Построим разностную схему для задачи (1), предполагая выполненными оценки (2), (4), (6).

3.1. Рассмотрим случай, когда выполняется условие $D_2 = \emptyset$.

На множестве $\overline{D}$ введем прямоугольную сетку

$$\overline{D}_h = \overline{\omega}_1 \times \overline{\omega}_2, \tag{7}$$

где $\overline{\omega}_s$ — вообще говоря, неравномерная сетка на $[-d_s, d_s]$ на оси x_s, $s = 1, 2$. Полагаем $h_s^i = x_s^{i+1} - x_s^i$, x_s^i, $x_s^{i+1} \in \overline{\omega}_s$, $h_s = \max_i h_s^i$, $h = \max_s h_s$, $s = 1, 2$. Через $N_s + 1$ обозначим число узлов сетки $\overline{\omega}_s$, $N = \min_s N_s$, $h \le MN^{-1}$.

На сетке $\overline{D}_{h\,(7)}$ задаче (1) сопоставим разностную схему [1]

$$\Lambda_{(8)} z(x) \equiv \left\{ \varepsilon^2 \sum_{s=1,2} \delta_{\overline{x}_s \widehat{x}_s} - a(x) \right\} z(x) = f(x), \quad x \in D_h,$$
$$z(x) = \varphi(x), \quad x \in \Gamma_h. \tag{8}$$

Здесь $D_h = D \cap \overline{D}_h$, $\Gamma_h = \Gamma \cap \overline{D}_h$, $\delta_{\overline{x}_s \widehat{x}_s} z(x) = z_{\overline{x}_s \widehat{x}_s}(x)$ — вторые разностные производные по x_s на неравномерной сетке. Разностная схема (8), (7) является монотонной [1].

Разностная схема (8), (7) сходится лишь при фиксированном значении параметра, а именно, при условии $N^{-1} = o(\varepsilon)$. Для погрешности приближенного решения верна оценка

$$| u(x) - z(x) | \le M \left(\varepsilon + N^{-1}\right)^{-1} N^{-1}, \quad x \in \overline{D}_h. \tag{9}$$

Введем специальную сетку [2]

$$\overline{D}_h^c = \overline{\omega}_1^c \times \overline{\omega}_2^c, \tag{10a}$$

где $\overline{\omega}_s^c = \overline{\omega}_s^c(\sigma_s)$ — кусочно-равномерная сетка, сгущающаяся в окрестности концов отрезка $[-d_s, d_s\,]$, σ_s — параметр, зависящий от ε и N, $\sigma_s \le 4^{-1} d_s$. Строим сетку $\overline{\omega}_s^c(\sigma_s)$ равномерной на каждом из множеств $[\,0, \sigma_s\,]$, $[\,\sigma_s, d_s - \sigma_s\,]$, $[\,d_s - \sigma_s, d_s\,]$; шаг сетки равен $h_s^{(1)} = \sigma_s (N_s/4)^{-1}$ на множествах $[\,0, \sigma_s\,]$, $[\,d_s - \sigma_s, d_s\,]$ и $h_s^{(2)} = (d_s - 2\sigma_s)(N_s/2)^{-1}$ на множестве $[\,\sigma_s, d_s - \sigma_s\,]$. Величина σ_s определяется соотношением

$$\sigma_s = \sigma_{s(10)}(\varepsilon, N_s) = \min\,[\; d_s/4, M\varepsilon \ln N_s\;], \tag{10b}$$

где $M \ge 2(m_{(6)})^{-1}$.

Разностная схема (8), (10) сходится ε-равномерно:

$$| u(x) - z(x) | \le M N^{-1} \ln N, \quad x \in \overline{D}_h^c. \tag{11}$$

Т е о р е м а 1. *Пусть для решения краевой задачи* (1) *и его компонент из представлений* (3), (5) *выполняются оценки* (2), (4), (6) *при* $K = 4$. *Тогда решение разностной схемы* (8) *на сетке* (10) *сходится* ε*-равномерно; на сетке* (7) *схема сходится при условии* $N^{-1} = o(\varepsilon)$. *Для решений разностной схемы на сетках* (7) *и* (10) *справедливы оценки* (9) *и* (11) *соответственно.*

3.2. Подобным образом строится ε-равномерно сходящаяся схема в том случае, когда $D_2 \ne \emptyset$.

В случае двухсвязной кольцевой области

$$\overline{D}_3^* = \overline{D}_3 \setminus D_2,$$

где $\overline{D}_3$ — некоторая r_0-окрестность множества D_2, перейдя к полярным координатам r и ψ, связанным с декартовыми формулами $x_1 = r\cos\psi$, $x_2 = r\sin\psi$ (Рис. 2), рассмотрим краевую задачу

$$\begin{aligned} L_{(1)}^{r,\psi} u(r,\psi) &= f(r,\psi), \quad (r,\psi) \in D_3^*, \\ u(r,\psi) &= \varphi(r,\psi), \quad (r,\psi) \in \Gamma_3^*. \end{aligned} \tag{12}$$

Данные задачи в полярных координатах (r, ψ) предполагаются достаточно гладкими, дифференциальный оператор $L_{(1)}^{r,\psi}$ задается выражением

$$L_{(1)}^{r,\psi} u(r,\psi) = \varepsilon^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \psi^2} \right) - a(r,\psi) u(r,\psi)$$

или в дивергентном виде главной части оператора:

$$L_{(1)}^{r,\psi} u(r,\psi) = \varepsilon^2 \left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \psi^2} \right) - a(r,\psi) u(r,\psi).$$

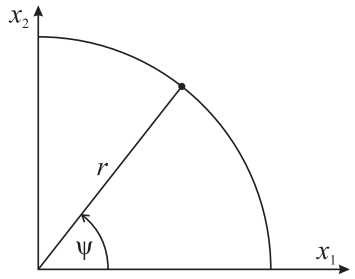


Рис. 2: Полярные координаты

Аппроксимируем задачу (12) неявной разностной схемой

$$\begin{aligned} \Lambda^{r,\psi}_{(8)} \quad z(r,\psi) &= f(r,\psi), \quad (r,\psi) \in D^*_{3h}, \\ z(r,\psi) &= \varphi(r,\psi), \quad (r,\psi) \in \Gamma^*_{3h}; \end{aligned} \tag{13}$$

в разностном операторе $\Lambda^{r,\psi}_{(8)}$ в полярных координатах производная $\partial u/\partial r$ аппроксимируется первой разностной производной $\delta_r z$ (вперед).

Для схемы (13) получается оценка, подобная оценке (9)

$$|\, u(r,\psi) - z(r,\psi)\,| \le M\left(\varepsilon + N_*^{-1}\right)^{-1} N_*^{-1}, \quad (r,\psi) \in \overline{D}^*_{3h}, \tag{14}$$

где $N_* + 1$ — минимальное число узлов сеток по r и ψ.

На сетке, равномерной по ψ и кусочно-равномерной по r, имеем оценку, подобную (11)

$$|\, u(r,\psi) - z(r,\psi)\,| \le M N_*^{-1} \ln N_*, \quad (r,\psi) \in \overline{D}^*_{3h}. \tag{15}$$

4 Схемы метода декомпозиции области

Опишем классический альтернирующий метод Шварца на перекрывающихся областях, позволяющий проводить аналитические вычисления, подобный рассмотренному в [3]. Укажем условия, обеспечивающие ε-равномерную сходимость последовательности решений при увеличении числа итераций. В построениях используется техника работ [2, 4].

4.1. Пусть совокупность открытых подобластей

$$D^1, D^2, \ldots, D^K \tag{16}$$

с кусочно-гладкими границами Γ^k, $\Gamma^k = \Gamma(D^k) = \overline{D}^{\,k} \setminus D^k$, образует покрытие множества D: $D = \bigcup\limits_{k=1}^{K} D^k$. Через δ^k обозначим минимальную толщину перекрытия пары множеств D^k и $D^{[k]}$ — объединения подобластей, не содержащих D^k:

$$D^{[k]} = \bigcup_{i=1,\ i\ne k}^{K} D^i,$$

а через δ — наименьшую из величин δ^k, $k = 1, \ldots, K$; δ — минимальное перекрытие подобластей из (16). Величина δ, вообще говоря, может зависеть от параметра ε: $\delta = \delta(\varepsilon)$.

Пусть

$$u^0(x), \quad x \in \overline{D} \tag{17a}$$

есть начальная функция в итерационном процессе — произвольно заданная функция, удовлетворяющая краевому условию из (1). Находим функции $u^n(x)$, $x \in \overline{D}$, $n = 1, 2, \ldots$, решая последовательно краевые задачи

$$L_{(17)}(u^{n+\frac{k}{K}}(x)) \equiv L_{(1)} u^{n+\frac{k}{K}}(x) - f(x) = 0, \quad x \in D^k, \tag{17b}$$

$$u^{n+\frac{k}{K}}(x) = u^{n+\frac{k-1}{K}}(x), \quad x \in \overline{D} \setminus D^k, \quad k = 1, \ldots, K,$$

$$u^{n+1}(x) = u^{n+\frac{K}{K}}(x), \quad x \in \overline{D}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots.$$

Каждая вспомогательная функция $u^{n+\frac{k}{K}}(x)$, $x \in \overline{D}$, является решением задачи Дирихле на множестве $\overline{D}^{\,k}$

$$L_{(17)}(u^{n+\frac{k}{K}}(x)) = 0, \quad x \in D^k, \quad u^{n+\frac{k}{K}}(x) = u^{n+\frac{k-1}{K}}(x), \quad x \in \Gamma^k$$

и совпадает с функцией $u^{n+\frac{k-1}{K}}(x)$ на множестве $\overline{D} \setminus D^k$. Последовательность функций $u^n(x)$, $x \in \overline{D}$, $n = 1, 2, \ldots$, назовем решением итерационного процесса (17), (16) — альтернирующего метода Шварца.

Условие на ширину перекрытия подобластей

$$\delta = \delta(\varepsilon) > 0, \quad \varepsilon \in (0, 1], \quad \inf_{\varepsilon \in (0,1]} \left[\varepsilon^{-1} \delta(\varepsilon)\right] > 0, \tag{18}$$

эквивалентное условию $\delta = \delta(\varepsilon) \geq m_{(18)}\varepsilon$, является достаточным для ε-равномерной сходимости решения метода Шварца (17), (16) при $n \to \infty$:

$$|u(x) - u^n(x)| \leq Mq^n, \quad x \in \overline{D}, \quad \text{где} \quad q \leq 1 - m. \tag{19}$$

Заметим, что величина q, вообще говоря, $q(\varepsilon, \delta)$ стремится к единице при $\delta \to 0$ и фиксированных значениях параметра ε. При $\delta = 0$ функция $u^n(x)$ не сходится при $n \to \infty$ к решению краевой задачи даже при фиксированных ε.

Это же условие является и необходимым. Если условие (18) нарушается и для величины δ выполняется условие

$$\delta = \delta(\varepsilon) > 0, \quad \varepsilon \in (0, 1], \quad \inf_{\varepsilon \in (0,1]} \left[\varepsilon^{-1}\delta(\varepsilon)\right] = 0, \tag{20}$$

то функция $u^n(x)$ при $n \to \infty$ не сходится ε-равномерно. Таким образом, в случае условия (20) для любой сколь угодно большой величины n можно указать такое значение параметра ε, $\varepsilon = \varepsilon(n)$, что для функций $u^n(x) = u^n(x; \varepsilon(n), \delta(\varepsilon))$ и $u(x) = u(x; \varepsilon(n))$ будет выполняться неравенство

$$\max_{\overline{D}} |u(x) - u^n(x)| \geq m_{(21)}, \tag{21}$$

где величина $m_{(21)}$ не зависит от n. Для того, чтобы убедиться в этом, достаточно рассмотреть задачу Дирихле для однородного одномерного уравнения с постоянными коэффициентами.

Теорема 2. *Условие* (18) *является необходимым и достаточным для ε-равномерной сходимости решения $u^n(x)$ итерационного метода Шварца* (17), (16) *при $n \to \infty$ со скоростью геометрической прогрессии к решению $u(x)$ краевой задачи* (1). *Пусть для решения задачи и его компонент выполняются оценки* (2), (4), (6) *при $K = 4$. Тогда при условии* (18) *для решения метода Шварца* (17), (16) *выполняется оценка* (19).

4.2. Подобным образом строятся итерационные разностные схемы метода Шварца на кусочно-равномерных сетках, сгущающихся в пограничных слоях.

На каждом из множеств $\overline{D}^k$ введем специальные сетки

$$\overline{D}_h^k \equiv \overline{D}_h^{k\,c} = \overline{D}^k \bigcap \overline{D}_{h(10)}^c. \tag{22}$$

Считаем, что грани множеств $\overline{D}^k$ проходят через узлы сетки.

Пусть функция $z^0(x)$, $x \in \overline{D}_h$, есть произвольная функция, удовлетворяющая соотношению

$$z^0(x) = \varphi(x), \quad x \in \Gamma_h. \tag{23a}$$

Определим последовательность сеточных функций $z^1(x)$, $z^2(x), \ldots$, $x \in \overline{D}_h$. Последовательность вспомогательных функций $z^{n+\frac{k}{K}}(x)$, $k = 1, \ldots, K$, $n = 1, 2, \ldots$, находим из решения таких сеточных задач

$$\Lambda_{(23)}(z^{n+\frac{k}{K}}(x)) \equiv \Lambda_{(8)} z^{n+\frac{k}{K}}(x) - f(x) = 0, \quad x \in D_h^k, \tag{23b}$$

$$z^{n+\frac{k}{K}}(x) = z^{n+\frac{k-1}{K}}(x), \quad x \in \overline{D}_h \setminus D^k, \quad k = 1, \ldots, K,$$

$$z^{n+1}(x) = z^{n+\frac{K}{K}}(x), \quad x \in \overline{D}_h, \quad n = 0, 1, 2, \ldots.$$

Каждая функция $z^{n+\frac{k}{K}}(x)$ определена на множестве $\overline{D}_h$, являясь решением сеточной задачи Дирихле, и совпадает с функцией $z^{n+\frac{k-1}{K}}(x)$ на множестве $\overline{D}_h \setminus D^k$. Функцию $z^n(x)$, $x \in \overline{D}_h$, $n = 1, 2, \ldots$, назовем решением итерационного сеточного метода Шварца (23), (22).

С учетом оценок (11), (15) и (19), решение итерационного сеточного метода Шварца на перекрывающихся подобластях, содержащих либо границу прямоугольника, либо границу круга, сходится ε-равномерно

$$|u(x) - z^n(x)| \leq M\left(N^{-1}\ln N + N_*^{-1}\ln N_* + q^n\right), \quad x \in \overline{D}_h, \tag{24}$$

с ростом числа сеточных узлов N, N_* и числа итераций n в методе Шварца. В (24) $q \leq 1 - m$.

Теорема 3. *Пусть выполняются условия теоремы* 1. *Тогда в случае условия* (18) *решение итерационного сеточного метода Шварца* (23) *на сетке* (22) *при $N, N_*, n \to \infty$ сходится ε-равномерно к решению краевой задачи* (1) *с оценкой* (24).

Заключение

В случае модельной краевой задачи Дирихле в прямоугольной области с удаленным кругом для сингулярно возмущенного эллиптического уравнения реакции–диффузии построены и исследованы континуальная, а также разностная (на кусочно-равномерных сетках, сгущающихся в пограничных слоях) схемы метода декомпозиции области на перекрывающихся подобластях, содержащих либо границу прямоугольника, либо границу круга. Получены априорные оценки решения краевой задачи и его производных, показывающие, что в окрестности пограничных слоев производные сингулярных компонент решения неограниченно растут при стремлении возмущающего параметра ε к нулю. Указаны необходимые и достаточные условия, которые обеспечивают ε-равномерную сходимость решений схем декомпозиции при увеличении числа итераций. Показано, что построенный итерационный метод Шварца сходится ε-равномерно в равномерной норме с ростом числа итераций (а в случае разностной схемы — и числа сеточных узлов). Использовались сетки Шишкина — сетки, кусочно-равномерные по нормали к гладким частям границ подобластей. В случае сеток с произвольным распределением узлов, в частности равномерных сеток, имеет место сходимость сеточного метода лишь для фиксированных значений параметра ε, а именно, при условии $h = o(\varepsilon)$, где h — эффективный максимальный шаг сеток.

Список литературы

[1] Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989.

[2] Шишкин Г. И. Сеточные аппроксимации сингулярно возмущенных эллиптических и параболических уравнений. Екатеринбург: УрО РАН, 1992.

[3] Шишкин Г. И., Целищева И. В. Параллельные методы решения сингулярно возмущенных краевых задач для эллиптических уравнений // Матем. моделирование. 1996. Т. 8, N 3. С. 111–127.

[4] Shishkin G. I., Shishkina L. P. Difference Methods for Singular Perturbation Problems. Vol. 140 of Chapman & Hall/CRC Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics. Boca Raton: CRC Press, 2009.

Ирина Васильевна Целищева — вед. математик Института математики и механики УрО РАН;
e-mail: tsi@imm.uran.ru;
Григорий Иванович Шишкин — д.ф.-м.н., вед. науч. сотр. Института математики и механики УрО РАН;
e-mail: shishkin@imm.uran.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СВОЙСТВ ГИДРАВЛИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПОРИСТОЙ СРЕДЫ ПО КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ПОТЕНЦИАЛА НА ОСНОВЕ СТОХАСТИЧЕСКОГО МЕТОДА КОЛЛОКАЦИЙ

И. А. Шалимова, К. К. Сабельфельд

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 517.968

Настоящая работа посвящена численному нахождению параметров распределения гидравлической проницаемости пористой среды по известному распределению потенциала. Для решения прямой задачи мы использовали эффективный подход для решения стационарного уравнения Дарси со случайным коэффициентом гидравлической проницаемости на основе разложения решения в полиномиальный хаос, коэффициенты разложения которого вычисляются стохастическим методом коллокаций. Трудоемкость полученного алгоритма определяется порядком приближения полиномиального хаоса и числом точек коллокаций. При этом точность результатов оказывается достаточной для численного разделения корреляционных функций потенциала, соответствующих различным свойствам среды.

Ключевые слова: метод стохастических коллокаций, стационарное уравнение Дарси, метод Монте — Карло, разложение Кархунена — Лоэва.

Введение

Настоящая работа является продолжением серии работ [1], [5], в которых мы решали задачу о транспорте жидкости в пористых средах, а именно, для уравнения Дарси со случайным коэффициентом гидравлической проницаемости решалась краевая задача на основе разложения решения в полиномиальный хаос.

Метод Монте — Карло, который традиционно используется для решения подобных задач, является универсальным и простым в применении, но весьма трудоемким. Действительно, основываясь на конечно-разностной аппроксимации исходной задачи, для каждой реализации входящего случайного поля приходится вычислять поле решений или искомых функционалов и затем усреднять по всему ансамблю реализаций. Тем самым, для получения удовлетворительной точности, требуется многократно решать аппроксимирующую систему линейных алгебраических уравнений, что ведет к увеличению трудоемкости алгоритма. Поэтому в данной работе мы используем разложение решения в полиномиальный хаос, а именно по полиномам Эрмита, что позволяет существенно уменьшить трудоемкость алгоритма за счет уменьшения числа реализаций входящего поля. Начиная с работы Н.Винера [6], в которой он впервые построил ортогональный случайный базис, этот подход широко применяется в настоящее время для решения краевых задач со случайными данными [7]–[9].

В предыдущих работах мы решали прямую задачу: находили поле потенциала, поле скоростей Дарси, моделировали Лагранжевы траектории и вычисляли статистические характеристики движения такие как средние продольные смещения Лагранжевых частиц, продольный и поперечный коэффициенты корреляций Лагранжевых скоростей, коэффициенты диффузии. В данной работе решается обратная задача об определении свойств среды по известным характеристикам движения, а именно находится дисперсия коэффициента гидравлической проницаемости по известным параметрам распределения гидравлического потенциала.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского научного фонда (код проекта 14-11-00083).

1 Решение прямой задачи

1.1 Постановка задачи

В прямоугольнике $L_x \times L_y = D$ рассматривается краевая задача для уравнения Дарси

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K(x,y,\omega)\frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K(x,y,\omega)\frac{\partial \phi}{\partial y}\right) = 0. \quad \mathbf{x} = (x,y) \in D, \tag{1}$$

где ϕ — гидравлический потенциал, $K(\mathbf{x},\omega)$ — коэффициент гидравлической проницаемости — заданное случайное поле. В рассматриваемой задаче коэффициент гидравлической проницаемости имеет логнормальное распределение, т.е.

$$Y(\mathbf{x},\omega) = \ln[K(\mathbf{x},\omega)], \tag{2}$$

где $Y(\mathbf{x},\omega)$ — гауссовское случайное поле с нулевым средним и корреляционной функцией гауссовского типа

$$C_Y(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sigma_Y^2 \exp(-|x_1 - y_1|^2/\lambda_x^2 - |x_2 - y_2|^2/\lambda_y^2). \tag{3}$$

Здесь σ_Y^2 — дисперсия, а λ_x, λ_y — соответствующие корреляционные длины случайного поля $Y(\mathbf{x},\omega)$. На верхней и нижней границах заданы краевые условия Неймана

$$\frac{\partial \phi}{\partial y}(x,0) = \frac{\partial \phi}{\partial y}(x,L_y) = 0, \quad x \in (0,L_x), \tag{4}$$

а на левой и правой границах — условия Дирихле

$$\phi(0,y) = g_l(y), \quad \phi(L_x,y) = g_r(y), \quad y \in (0,L_y). \tag{5}$$

Для численного решения задачи (1)–(5) на частных реализациях случайного поля $K(\mathbf{x},\omega)$ была применена консервативная конечно-разностная схема с равномерным шагом, имеющая второй порядок аппроксимации по обеим переменным (см., например, [2]). Полученная разреженная система линейных алгебраических уравнений, как и в работах [1],[5] решалась с использованием пакета PARDISO.

1.2 Разложение Кархунена — Лоэва

Для моделирования коэффициента гидравлической проницаемости $K(\mathbf{x},\omega)$ мы использовали разложение Кархунена — Лоэва, для чего была решена задача на собственные значения для корреляционной функции $C_Y(\mathbf{x},\mathbf{y})$,

$$\int_D C_Y(\mathbf{x},\mathbf{y}) f_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \lambda_n f_n(\mathbf{y}), \quad k = 1,2,\ldots, \tag{6}$$

где λ_k, $f_k(\mathbf{x})$ — собственные значения и функции. Собственные функции удовлетворяют условию ортонормированности:

$$\int_D f_n(\mathbf{x}) f_m(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \delta_{nm}, \quad n,m \geq 1. \tag{7}$$

Тогда, корреляционная функция $C_Y(\mathbf{x},\mathbf{y})$ разлагается в ряд по собственным функциям

$$C_Y(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \, f_k(\mathbf{x}) \, f_k(\mathbf{y}), \tag{8}$$

а для случайного поля Y имеет место разложение Кархунена — Лоэва

$$Y(\mathbf{x},\omega) = \sum_{k=1}^{\infty} \xi_k(\omega)\sqrt{\lambda_k} \, f_k(\mathbf{x}), \tag{9}$$

где $\xi_k(\omega)$ — семейство независимых стандартных нормальных величин.

Хорошо известно [4], [10], что разложение по собственным функциям является наилучшем приближением в среднеквадратическом смысле. В алгоритме используется конечное число мод разложения Кархунена —

Лоэва, и частичная проблема отыскания собственных значений решалась численно на основе рандомизированных методов [11]. Среднеквадратическая погрешность остаточного члена, возникающая при замене ряда (9) конечной суммой длины N

$$Y_N(\mathbf{x},\xi) = \sum_{k=1}^{N} \xi_k \sqrt{\lambda_k}\, f_k(\mathbf{x}) \ , \tag{10}$$

в силу независимости ξ_k и условия ортонормированности (7), имеет вид

$$\varepsilon = E\|Y(\mathbf{x},\xi) - Y_N(\mathbf{x},\xi)\|^2 = \sum_{m,k=N+1}^{\infty} E[\xi_k\xi_m]\sqrt{\lambda_k}\sqrt{\lambda_m}\int\limits_D f_k(\mathbf{x}) f_m(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{k=N+1}^{\infty} \lambda_k.$$

Последнее равенство, в частности, показывает, что чем быстрее убывают собственные числа, тем меньшее количество мод N в разложении Кархунена — Лоэва потребуется для описания Y_N. С учетом ортонормированности собственных функций из равенства (8) несложно получить

$$L_x L_y \sigma_Y^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n. \tag{11}$$

Следовательно, число слагаемых разложения N можно выбрать, например, так чтобы выполнялось условие

$$0.9 \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \approx \sum_{n=1}^{N} \lambda_n \ . \tag{12}$$

Согласно этому критерию можно определить количество членов разложения для достижения относительной среднеквадратической погрешности порядка 10%. Большее число гармоник N в разложении Кархунена — Лоэва, как будет показано ниже, увеличивает число слагаемых P в полиномиальном разложении и тем самым увеличивает трудоемкость алгоритма. Поэтому в алгоритме выбирается число гармоник, минимально достаточное для обеспечения заданной среднеквадратической погрешности.

1.3 Полиномиальное разложение хаоса

В данной секции рассматривается разложение гидравлического потенциала ϕ по полиномам Эрмита в вероятностном пространстве, задаваемом коэффициентом гидравлической проницаемости $K(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi})$. В этом случае приближение $\widehat{\phi}$ имеет вид [3]

$$\begin{aligned} \widehat{\phi}(\mathbf{x},\omega) &= a_0(\mathbf{x}) + \sum_{i_1=1}^{\infty} a_{i_1}(\mathbf{x}) H_1(\xi_{i_1}(\omega)) + \sum_{i_1=1}^{\infty}\sum_{i_2=1}^{i_1} a_{i_1 i_2}(\mathbf{x}) H_2(\xi_{i_1}(\omega),\xi_{i_2}(\omega)) \\ &+ \sum_{i_1=1}^{\infty}\sum_{i_2=1}^{i_1}\sum_{i_3=1}^{i_2} a_{i_1 i_2 i_3}(\mathbf{x}) H_3(\xi_{i_1}(\omega),\xi_{i_2}(\omega),\xi_{i_3}(\omega)) + \ldots, \end{aligned} \tag{13}$$

где коэффициенты a_i зависят от пространственной координаты $\mathbf{x}$, $H_d(\xi_{i_1}(\omega),\xi_{i_2}(\omega),\ldots,\xi_{i_d}(\omega))$ — полиномы Эрмита порядка d, $\boldsymbol{\xi} = (\xi_{i_1}(\omega),\xi_{i_2}(\omega),\ldots,\xi_{i_d}(\omega))$ — вектор независимых стандартных нормальных величин размерности d,

$$H_d(\xi_{i_1}(\omega),\xi_{i_2}(\omega),\ldots,\xi_{i_d}(\omega)) = (-1)^d \exp(\frac{\boldsymbol{\xi}^T\boldsymbol{\xi}}{2}) \frac{\partial^d}{\partial\xi_{i_1}\ldots\partial\xi_{i_d}} [\exp(\frac{\boldsymbol{\xi}^T\boldsymbol{\xi}}{2})] \ .$$

Мы будем использовать конечное число слагаемых разложения (13) и представление

$$\widehat{\phi}(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi}) = \sum_{j=1}^{P} c_j(\mathbf{x}) \Psi_j(\boldsymbol{\xi}) \ , \tag{14}$$

где $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_N)$ — вектор независимых стандартных нормальных величин размерности N. Для функций $\Psi_j(\boldsymbol{\xi})$ в (14) существует однозначное соответствие с $H_d(\xi_{i_1}(\omega),\xi_{i_2}(\omega),\ldots,\xi_{i_d}(\omega))_d$ из (13). Общее число

слагаемых P определяется размерностью N — числа слагаемых в разложении Кархунена — Лоэва и порядком разложения полиномиального хаоса d,

$$P = \frac{(N+d)!}{N!d!}. \tag{15}$$

Для определения коэффициентов разложения полиномиального хаоса $c_j(\mathbf{x})$ в (14) традиционно используются либо проекционные методы типа Галеркина либо метод коллокаций [3]. В данной работе реализован стохастический метод коллокаций.

1.4 Стохастический метод коллокаций

Уравнение Дарси, с учетом усеченного разложения Кархунена — Лоэва для случайного поля коэффициента проницаемости K, а также стоков или источников $g(\mathbf{x})$ имеет вид

$$\nabla \cdot \{\exp[\sum_{n=1}^{N} \sqrt{\lambda_n} f_n(\mathbf{x})\xi_n]\nabla\phi(\mathbf{x})\} = g(\mathbf{x}).$$

Определим невязку R для приближенного решения $\widehat{\phi}$ следующим образом

$$R(c_1,\ldots,c_P;\boldsymbol{\xi}) = \nabla \cdot \{\exp[\sum_{n=1}^{N} \sqrt{\lambda_n} f_n(\mathbf{x})\xi_n]\nabla\widehat{\phi}(\mathbf{x})\} - g(\mathbf{x}).$$

Тогда, неизвестные коэффициенты $c_i(\mathbf{x})$ полиномиального разложения (14) находятся из требования равенства нулю усредненного с некоторым весом W_j значения невязки, т.е. из условия

$$\int_{R^N} R(c_1,\ldots,c_P;\mathbf{z}_\xi) W_j(\mathbf{z}_\xi) p(\mathbf{z}_\xi) d\mathbf{z}_\xi = 0, \tag{16}$$

где $p(\mathbf{z}_\xi)$ — плотность совместного распределения вектора стандартных нормальных величин $\boldsymbol{\xi}$. Веса в методе коллокаций определяются выражением

$$W_j(\boldsymbol{\xi}) = \delta(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_j^{col}), \quad j = 1,\ldots,P,$$

где $\boldsymbol{\xi}_j^{col}$ — множество частных значений вектора $\boldsymbol{\xi}$, так называемые точки коллокаций. Такой выбор весовых функций позволяет найти решение уравнения Дарси в точках коллокаций. Обозначим $\widehat{\Phi}$ — вектор решений размерности P, вычисленный в точках коллокаций. Тогда, для нахождения коэффициентов $c_1,\ldots,c_P$ достаточно решить систему линейных алгебраических уравнений

$$\mathbf{Z}\ C(\mathbf{x}) = \widehat{\Phi}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^{col}), \tag{17}$$

где $C = (c_1,\ldots,c_P)$ — вектор искомых коэффициентов, $Z_{ij} = \Psi_j(\boldsymbol{\xi}_i^{col})$ — элементы независимой от пространственных переменных матрицы $\mathbf{Z}$, состоящей из полиномов Эрмита.

Очевидно, что коэффициенты разложения c_j существенно зависят от выбора точек коллокаций. В данной работе как и предыдущих, они находятся по аналогии с квадратурами Гаусса [1].

2 Обратная задача

В данном разделе описан алгоритм отыскания дисперсии σ_Y^2 коэффициента гидравлической проницаемости K — "входящего" поля по известным значениям дисперсии σ_ϕ^2 потенциала ϕ — "выходящего поля". Из разложения (14) несложно получить представление для статистических моментов гидравлического потенциала. Так, среднее имеет вид

$$\langle\widehat{\phi}(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi})\rangle = c_1(\mathbf{x})$$

и дисперсия

$$\sigma_\phi^2(\mathbf{x}) = \langle\widehat{\phi}^2(\mathbf{x},\boldsymbol{\xi})\rangle = \sum_{j=2}^{p} c_j^2(\mathbf{x})\langle\Psi_j^2(\boldsymbol{\xi})\rangle\ . \tag{18}$$

Здесь мы воспользовались ортогональностью стохастических полиномов Эрмита $\Psi_j(\boldsymbol{\xi})$. Кроме того, пользуясь явным представлением для полиномов $\Psi_j(\boldsymbol{\xi})$, можно аналитически вычислить их вторые моменты. Так, например, в одномерном случае

$$\langle \Psi_j^2(\xi) \rangle = j! \ .$$

Свойство (18) позволяет вычислять дисперсию σ_ϕ^2 суммируя квадраты коэффициентов c_j с соответствующим весом, не моделируя само поле $\widehat{\phi}$. Последнее обстоятельство существенно уменьшает трудоемкость предложенного подхода по сравнению с прямым моделированием. При этом точность вычислений является достаточной для разделения дисперсий выходящего поля σ_ϕ^2, соответствующих различным значениям входящего параметра σ_Y. Ниже приведен пошаговый алгоритм решения обратной задачи.

1. Для выбранного множества значений параметра $\sigma_{Y,i}$, $i = 1, \ldots, M$ формируется распределение коэффициента гидравлической проницаемости $K(\sigma_{Y,i}, \mathbf{x}, \omega)$, строится разложение Кархунена — Лоэва и решается прямая задача (1)–(5). Согласно представлению (18) находятся соответствующие значения дисперсии гидравлического потенциала $\sigma_{\phi,1}(\mathbf{x}), \ldots, \sigma_{\phi,M}(\mathbf{x})$.

2. Для M вычисленных значений $\sigma_{\phi,i}$ строится интерполяционный многочлен Лагранжа и устанавливается зависимость $\sigma_Y(\sigma_\phi)$.

3. Полученная в п. 2 зависимость позволяет определить искомые значения σ_Y по заданным значениям σ_ϕ.

4. В качестве проверки, для найденного в п. 3 значения σ_Y, решается уравнение Дарси и вычисляется дисперсия потенциала σ_ϕ^*. Найденное значение σ_ϕ^* сравнивается с исходным σ_ϕ и, если погрешность приближения является неудовлетворительной, переходят к пункту 2 и повторяют процедуру. При этом полученные значения σ_Y и σ_ϕ^* можно включить в интерполяционный многочлен, тем самым повысив его степень аппроксимации.

3 Численные результаты

В этом разделе представлены результаты численной реализации метода стохастических коллокаций для решения обратной задачи*.

Численные расчеты выполнялись в квадрате $L_x \times L_y$ размера $L_x = L_y = 10$ с равномерным шагом $h_x = h_y = 0.125$. На верхней и нижней границах поставлено условие непротекания, а на левой и правой границах для потенциала взяты значения $\phi = 10.0$ и $\phi = 15.0$, соответственно. Предполагалось отсутствие источников и стоков, $g(x) = 0$. Коэффициент гидравлической проницаемости задается случайным логнормальным распределением с заданной корреляционной функцией гауссовского вида (3) с нулевым средним $\langle Y \rangle = 0$ и коэффициентами $\lambda_x = \lambda_y = 6.59$, что соответствует длине корреляций порядка $L \approx 10.0$. Численные результаты соответствуют четвертому порядку приближения полиномиального хаоса $d = 4$ и $N = 13$ гармоникам в разложении Кархунена — Лоэва. В этом случае для вычисления коэффициентов разложения c_j, система линейных уравнений, аппроксимирующих уравнение Дарси, решалась $P = 521$ раз. Собственные числа λ_i и собственные функции находились численно, на основе проекционного метода.

Заметим, что в методе Монте — Карло для решения прямой задачи необходимое число гармоник бралось порядка $N = 100$ на статистике $N_{st} = 10^5$, в то время как в полиномиальном разложении $N = 13$ и аппроксимирующая система уравнений решалась $P = 521$ раз. Среднее поле потенциала, вычисленное на основе полиномиального разложения, лежит в доверительном интервале равным $2.3 \cdot 10^{-2}$.

На рис. 1 приведены графики дисперсии σ_ϕ^2 гидравлического потенциала ϕ для разных значений входящего параметра σ_Y^2 в сечении области $y = 5.0$, $x \in [0; 10]$, вычисленные на основе полиномиального разложения (PCE).

На следующем рис. 2 приведен график зависимости дисперсии σ_Y — входящего случайного поля, от дисперсии гидравлического потенциала σ_ϕ, построенного на основе интерполяционного многочлена Лежандра. Представлены два случая $M = 5$ и $M = 6$.

Наконец, в Таблице 1 во втором столбце представлены значения параметра σ_Y для гидравлической проницаемости среды $K(\mathbf{x}, \omega)$, найденные из построенной численно зависимости $\sigma_Y(\sigma_\phi)$ в точке (5.0;5.0). Для тестирования полученного результата решена прямая задача с вычисленным параметром распределения σ_Y, и подсчитана дисперсия гидравлического потенциала σ'_ϕ (эти данные помещены в третий столбец).

*Расчеты выполнялись с использованием Сибирского суперкомпьютерного центра СО РАН

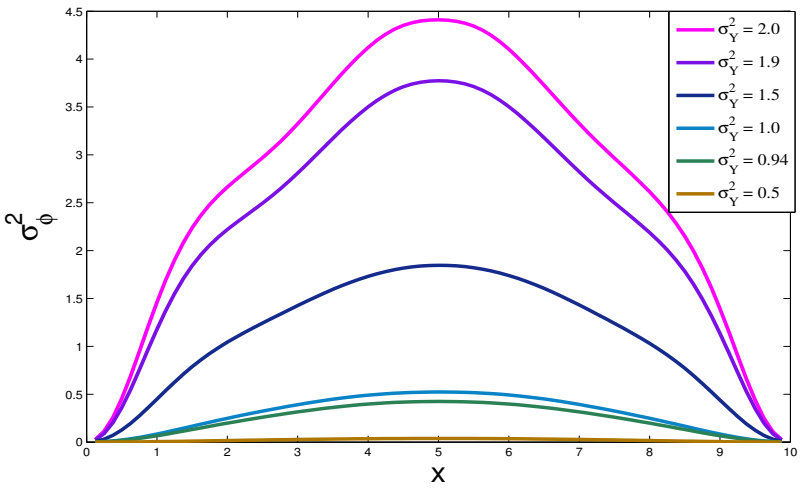


Рис. 1: Дисперсия поля потенциала ϕ, вычисленная для разных значений σ_Y^2

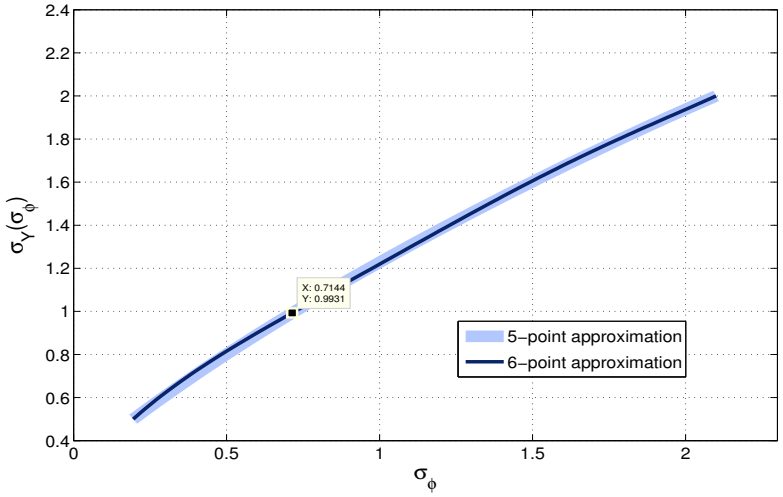


Рис. 2: Зависимость дисперсии σ_Y — входящего случайного поля, как функции от дисперсии гидравлического потенциала σ_ϕ

Таблица 1: Результаты решения прямой и обратной задач

σ_ϕ	σ_Y	σ'_ϕ
0.6567	0.9424	0.6515
1.3299	1.4784	1.3274

Заключение

В данной работе на основе полиномиального разложения, решена обратная задача определения свойств распределения случайного поля коэффициента гидравлической проницаемости по известным параметрам распределения поля гидравлического потенциала. Данный подход является более экономичным по сравнению с методом Монте — Карло, при этом точность приближения искомого параметра распределения лежит в рамках статистической погрешности.

Список литературы

[1] I. Shalimova and K. Sabelfeld. Stochastic polynomial chaos based algorithm for solving PDS with random coefficients. Monte Carlo Methods and Applications, 2014, Vol. 20, issue 4, pp. 279–289. doi:10.1515/mcma-2014-0006

[2] Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений, изд-во "Наука М., 1978.

[3] Heng Li, and Dongxiao Zhang, Probabilistic collocation method for flow in porous media: Comparisons with other stochastic methods, Water Resources Research, 2007, Vol. 43, W09409. doi:10.1029/2006WR005673

[4] Ghanem, R.G., Spanos P., Stochastic Finite Element: A Spectral Approach, Springer, New York, 1991.

[5] Shalimova, Irina A., Sabelfeld, Karl K., Dulzon, Olga V., Uncertainty quantification and stochastic polynomial chaos expansion for recovering random data in Darcy and Diffusion equations, Journal of Inverse and Ill-posed Problems, Published Online: 03/16/2017.

[6] N. Wiener, The homogenous chaos, Amer. J. Math., 1938, Vol. 60, No.4, pp. 897–936. DOI: 10.2307/2371268

[7] W. Schoutens, Stochastic Processes and Orthogonal Polynomials, Springer, 2000.

[8] Dongbin Xiu, Fast Numerical Methods for Stochastic Computations: A Review, Commun. Comput. Phys., 2009, Vol. 5, No. 2-4, pp. 242-272. doi:10.1137/040615201

[9] Dongbin Xiu and Jan S. Hesthaven, High-order collocation methods for differential equations with random inputs, SIAM J. Sci. Comput., 2006, Vol. 27(3), 1118–1139. doi:10.1137/040615201

[10] O. P. Le Maitre and O. M. Knio, Spectral Methods for Uncertainty Quantification: with Applications to Computational Fluid Dynamics, Springer Netherlands, Houten, Netherlands, 2010.

[11] K.K. Sabelfeld, N.S. Mozartova, Sparsified Randomization algorithms for low rank approximations and applications to integral equations and inhomogeneous random field simulation, Math. Comput. Simul. (2011), vol.82, 295–317. doi10.1016/j.matcom.2011.08.002

Ирина Александровна Шалимова — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
Новосибирск, 630090; e-mail: ias@osmf.sscc.ru;
Карл Карлович Сабельфельд — д.ф.-м.н., гл. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
Новосибирск, 630090; e-mail: karl@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ИНТЕРВАЛЬНАЯ РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

С. П. Шарый[1,2]

[1] *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 517.968

Рассматривается задача решения плохообусловленных и неточно заданных систем линейных алгебраических уравнений. Для улучшения устойчивости решения предлагается погружение исходной системы в интервальную систему линейных алгебраических уравнений той же структуры и рассмотрение её *допускового множества решений*. В результате «раздувшаяся» матрица системы приобретает близкие и существенно лучше обусловленные матрицы, для которых решение соответствующих систем уравнений более устойчиво.

Для нахождения псевдорешения исходной системы линейных алгебраических уравнений мы исследуем допусковое множество решений полученной интервальной линейной системы и выбираем из него точку, обеспечивающую наибольшую совместность относительно этого множества решений. Для её нахождения используется техника, основанная на применении так называемого распознающего функционала допускового множества решений и методы негладкой выпуклой оптимизации.

Ключевые слова: система линейных уравнений, регуляризация, псевдорешение, интервальная система линейных уравнений, допусковое множество решений, распознающий функционал.

1 Постановка задачи и идея решения

В нашей работе рассматривается решение плохообусловленных и неточно заданных систем линейных алгебраических уравнений с помощью методов интервального анализа. Предлагается процедура регуляризации, названная *интервальной регуляризацией*, которую можно рассматривать как обобщение известного приёма М.М. Лаврентьева.

Пусть дана система линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \quad\vdots \qquad\quad \vdots \qquad \ddots \qquad \vdots \qquad\quad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n = b_m, \end{cases} \tag{1}$$

с коэффициентами a_{ij} и свободными членами b_i, или, в краткой форме,

$$Ax = b \tag{2}$$

с $m \times n$-матрицей $A = (\,a_{ij})$ и m-вектором правой части $b = (\,b_i)$. Матрица A предполагается плохообусловленной, и необходимо найти решение системы (1)–(2) устойчивым образом. Возможную неточность в задании этой системы уравнений мы будем описывать с помощью языка интервального анализа. Соответственно, при неточности и неопределённости в данных будет рассматриваться интервальная система линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} \boldsymbol{a}_{11}x_1 + \boldsymbol{a}_{12}x_2 + \ldots + \boldsymbol{a}_{1n}x_n = \boldsymbol{b}_1, \\ \boldsymbol{a}_{21}x_1 + \boldsymbol{a}_{22}x_2 + \ldots + \boldsymbol{a}_{2n}x_n = \boldsymbol{b}_2, \\ \quad\vdots \qquad\quad \vdots \qquad \ddots \qquad \vdots \qquad\quad \vdots \\ \boldsymbol{a}_{m1}x_1 + \boldsymbol{a}_{m2}x_2 + \ldots + \boldsymbol{a}_{mn}x_n = \boldsymbol{b}_m, \end{cases}$$

или, кратко,

$$\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$$

с интервальными $m \times n$-матрицей $\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{a}_{ij})$ и m-вектором правой части $\boldsymbol{b} = (\boldsymbol{b}_i)$. Бóльшая часть наших конструкций нечувствительна к такой замене объекта рассмотрения. В нашей работе мы рассматриваем, главным образом, квадратный случай $m = n$, но некоторые из рассуждений и результатов применимы также к более общим прямоугольным системам линейных уравнений с $m \neq n$.

Популярным методом регуляризации системы (1)–(2) является небольшое возмущение матрицы, которое отодвигает малые сингулярные числа от нуля, но не сильно влияет на решение задачи. В этом заключается, в частности, известный метод М.М. Лаврентьева; см., к примеру, [3, 4, 5, 10]. Таким образом, вместо системы (1)–(2) мы решаем систему с лучшей обусловленностью

$$(A + \tau I)x = b,$$

где I — единичная матрица.

Метод М.М. Лаврентьева широко применяется для регуляризации различных уравнений и систем уравнений, но его недостатком является неочевидный выбор параметра τ, т. е. направления сдвига матрицы и его величины, в случае, когда нам ничего не известно о свойствах матрицы A.

Неожиданная идея реализации метода М.М. Лаврентьева состоит в том, чтобы выполнить сдвиг τI «во все стороны сразу». Тогда среди них обязательно найдётся нужное направление, которое обеспечит желаемую регуляризацию и улучшение свойств оператора. В рамках традиционных типов данных, которыми оперируют анализ и вычислительная математика, реализовать такой экзотический рецепт едва ли возможно, но подходящие инструменты созданы в интервальном анализе (см., к примеру, [2, 13]), и с их помощью наша идея получает элегантное воплощение.

Итак, пусть параметр регуляризации τ является интервальным. В соответствии с неформальным международным стандартом [14], который будет использоваться всюду в этой работе, мы обозначаем интервалы и интервальные объекты жирным шрифтом. По этой причине интервальным параметром регуляризации будет $\boldsymbol{\tau}$. Чтобы накрыть все возможные направления сдвига матрицы, положим $\boldsymbol{\tau}$ интервалом, который содержит нуль во внутренности. В целом вместо системы уравнений (1)–(2) необходимо «решать» интервальную систему линейных алгебраических уравнений

$$(A + \boldsymbol{\tau} I)x = b, \tag{3}$$

причём процесс решения должен быть устойчивым.

В современном интервальном анализе в понятие «решения» интервального уравнения или системы уравнений может вкладываться различный смысл. Как правило, решения интервальных задач — это оценки (чаще всего, тоже интервальные) тех или иных «множеств решений», возникающих в связи с интервальной постановкой. При этом «множество решений» может определяться различными способами в зависимости от типов неопределённости, который несут интервалы входных данных задачи. Интервальная неопределённость данных изначально носит двойственный характер [13, 19], и при формальной постановке задачи нам необходимо различать так называемые неопределённости A-типа и E-типа (или A-неопределённость и E-неопределённость), которые соответствуют применению логических кванторов «$\forall$» и «$\exists$» по переменным, пробегающим интервалы значений. Как следствие, различные множества решений для интервальных систем уравнений определяются различными комбинациями этих кванторов, которые применяются к интервальным параметрам.

Наиболее простым из множеств решений является множество, которое получается объединением всевозможных решений неинтервальных (точечных) уравнений или систем уравнений, возникающих при фиксации параметров системы в пределах заданных интервалов. Оно так и называется — *объединённое множество решений*, и для интервальной системы линейных алгебраических уравнений

$$\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b} \tag{4}$$

определяется (в соответствии с аксимомой выделения из формальной теории множеств) следующим образом

$$\Xi_{uni}(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}) := \big\{ x \in \mathbb{R}^n \mid (\exists A \in \boldsymbol{A})(\exists b \in \boldsymbol{b})(Ax = b) \big\}.$$

Объединённое множество решений соответствует применению кванторов существования «$\exists$» ко всем интервальным параметрам системы уравнений. Его равносильное теоретико-множественное представление —

$$\Xi_{uni}(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}) = \bigcup_{A \in \boldsymbol{A}} \big\{ x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \in \boldsymbol{b} \big\}. \tag{5}$$

Объединённое множество решений аккуратно учитывает, путём объединения, вклад всех точечных систем уравнений, образующих интервальную систему. Соответственно, оно подвержено изменчивости в той же степени, в какой эту изменчивость демонстрируют решения отдельных систем, образующих данную интервальную систему. Если интервальная система уравнений включает плохообусловленые точечные системы, для которых решение изменяется очень сильно при вариациях данных, то и объединённое множество решений включит в себя все эти большие изменения и никакой стабилизирующей роли не сыграет. Это случится, в частности, при интервализации плохообусловленной системы (1)–(2). Таким образом, объединённое множество решений не годится для устойчивого решения задачи (1)–(2), так как имеет устойчивость, которая определяется, фактически, решениями самых неустойчивых из возмущённых системы. В нашей ситуации от множества решений и от процесса решения требуются другие свойства. Желательно, чтобы решение интервальной системы строилось по наиболее устойчивым решениям точечных систем, образующих интервальную систему уравнений.

Среди множеств решений для интервальных систем уравнений наиболее устойчивым и, как следствие, наиболее подходящим для наших целей является так называмое *допусковое множество решений*. Для интервальной линейной системы (4) это множество определяется как

$$\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) := \big\{x \in \mathbb{R}^n \mid (\forall A \in \boldsymbol{A})(\exists b \in \boldsymbol{b})(Ax = b)\big\}, \tag{6}$$

т. е. как множество всех таких векторов x, что произведение Ax попадает в интервал правой части $\boldsymbol{b}$ при любой матрице $A \in \boldsymbol{A}$. Определение (6) можно также записать в виде

$$\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) = \big\{x \in \mathbb{R}^n \mid (\forall A \in \boldsymbol{A})(Ax \in \boldsymbol{b})\big\}.$$

Наличие условия с квантором всеобщности $\forall A \in \boldsymbol{A}$ в определении допускового множества решений приводит к тому, что теоретико-множественное представление этого множества использует операцию пересечения, а не объединения, как было с $\Xi_{uni}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$. Таким образом, вместо (5) мы получаем

$$\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) = \bigcap_{A\in\boldsymbol{A}} \big\{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax \in \boldsymbol{b}\big\}.$$

Как следствие, допусковое множество решений является наименее чувствительным к изменениям в матрице и правой части среди всех множеств решений интервальных линейных систем, так как оно не больше «наиболее устойчивого» множества решений $\big\{x \in \mathbb{R}^n \mid \tilde{A}x \in \boldsymbol{b}\big\}$, определяемого матрицей $\tilde{A}$ с наилучшей обусловленностью из $\boldsymbol{A}$. Хотя некоторые точечные матрицы из $\boldsymbol{A}$ могут быть плохообусловленными или даже особенными, но их влияние компенсируется присутствием в этой же интервальной матрице «хороших» точечных матриц, которые делают допусковое множество решений в целом ограниченным и устойчивым.

Принципиальное отличие допускового множества решений от объединённого выражается, в частности, в том, что при расширении интервальной матрицы $\boldsymbol{A}$ объединённое множество решений системы $\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$ расширяется, тогда как допусковое множество решений уменьшается.

Итак, для интервальной системы линейных алгебраических уравнений, которая получается после «обинтерваливания» исходной плохообусловленной системы, мы будем рассматривать допусковое множество решений $\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$. Нас интересуют точки из него или его оценки. Задачу исследования и оценивания допускового множества решений для интервальных систем уравнений называют математической «задачей о допусках» [12, 13, 18]. Нам, таким образом, требуется её решение, возможно, частичное, которое и будет взято в качестве псевдорешения исходной задачи.

Но здесь мы сталкиваемся со специфической особенностью допускового множества решений интервальной системы линейных алгебраических уравнений, которая состоит в том, что оно может оказаться пустым даже для совершенно обычных данных. Это происходит в том случае, когда интервалы правой части $\boldsymbol{b}$ системы «относительно узки» в сравнении с интервалами в матрице $\boldsymbol{A}$. Тогда размах всевозможных произведений Ax при $A \in \boldsymbol{A}$ превышает ширину «коридора» правой части $\boldsymbol{b}$, в которую должно вписаться это произведение. Например, это происходит для одномерного интервального уравнения $[2,3]\,x = [3,4]$.

Для того, чтобы сделать допусковое множество решений непустым, можно искусственно расширить правую часть интервальной линейной системы уравнений, например, равномерно относительно середин интервалов компонент. Нетрудно понять, что с помощью такого расширения мы всегда можем сделать допусковое множество непустым.

Другой путь состоит в том, чтобы рассматривать не само множество решений, а некоторую количественную меру разрешимости задачи, и псевдорешениями объявить точки, на которых достигается максимум этой меры. Этот подход и развивается в настоящей работе.

2 Допусковое множество решений для интервальных систем уравнений

Существует несколько результатов, дающих аналитические описания допускового множества решений для интервальных систем линейных алгебраических уравнений.

Теорема И. Рона [13, 16, 17] *Точка $x \in \mathbb{R}^n$ принадлежит допусковому множеству решений интервальной линейной системы уравнений $\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$ тогда и только тогда, когда $x = x' - x''$ для некоторых векторов x', $x'' \in \mathbb{R}^n$, которые удовлетворяют системе линейных неравенств*

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \overline{\boldsymbol{A}}x' - \underline{\boldsymbol{A}}x'' & \leq & \overline{\boldsymbol{b}}, \\ -\underline{\boldsymbol{A}}x' + \overline{\boldsymbol{A}}x'' & \leq & -\underline{\boldsymbol{b}}, \\ x',\, x'' & \geq & 0. \end{array} \right. \tag{7}$$

Теорема И.А. Шарой [11] *Пусть $\boldsymbol{A}_{i:}$ — i-ая строка интервальной матрицы $\boldsymbol{A}$, и $\operatorname{vert} \boldsymbol{A}_{i:}$ — множество вершин этого интервального вектора. Для интервальной $m \times n$-системы линейных алгебраических уравнений $\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$ допусковое множество решений $\Xi_{tol}(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b})$ представимо в виде*

$$\Xi_{tol}(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}) \;=\; \bigcap_{i=1}^{m} \bigcap_{a \in \operatorname{vert} \boldsymbol{A}_{i:}} \{\, x \in \mathbb{R}^n \mid ax \in \boldsymbol{b}_i \}, \tag{8}$$

т. е. как пересечение гиперполос, число которых не превосходит $\sum_{i=1}^{m} |\operatorname{vert} \boldsymbol{A}_{i:}|$ и, тем более, не превосходит $m \cdot 2^n$.

Каждое из включений $ax \in \boldsymbol{b}_i$ для $a \in \boldsymbol{A}_{i:}$, задающее гиперполосу в $\mathbb{R}^n$, равносильно двустороннему линейному неравенству

$$\underline{\boldsymbol{b}}_i \leq a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \ldots + a_{in}x_n \leq \overline{\boldsymbol{b}}_i.$$

Поэтому теорема И.А. Шарой даёт, фактически представление допускового множества решений в виде решения системы двусторонних линейных неравенств, количество которых существенно меньше общего числа крайних («угловых») неравенств интервальной системы, равное $2^{m(n+1)}$.

Коль скоро задача решения систем линейных неравенств разрешима за полиномиальное от размеров задачи время (см., к примеру, [9]), то из теоремы И. Рона следует, что в общем случае распознавание пустоты/непустоты допускового множества решений интервальной линейной системы уравнений — также полиномиально разрешимая задача.

Приведённые выше результаты — теорема И. Рона и теорема И.А. Шарой, в принципе, дают инструменты для исследования допускового множества решений и работы с ним. В некоторых ситуациях более удобен и предпочтителен первый результат, в других — второй. Тем не менее, представление допускового множества решений через систему линейных неравенств имеет определённые недостатки. Желательно исследовать допусковое множество решений и работать с ним в терминах целостных интервалов данных задачи, а не с отдельными их концами, многократно входящими в системы неравенств. Кроме того, на этом пути необходимо уметь обрабатывать случай пустого допускового множества решений, и для этого требуется удобная процедура коррекции несовместных систем неравенств (7) и (8).

Подход, использующий коррекцию и решение системы неравенств (7), развивался в работе [6], но мы идём другим путём, который основан на введении количественной меры совместности (разрешимости) задачи и последующей её максимизации. При этом не требуется виртуальная коррекция интервальной системы уравнений.

3 Распознающий функционал и его применение

Далее нам понадобится классическая интервальная арифметика $\mathbb{IR}$ — алгебраическая система, образованная интервалами $\boldsymbol{x} = [\underline{\boldsymbol{x}}, \overline{\boldsymbol{x}}] \subset \mathbb{R}$ так, что для любой арифметической операции «$\star$» из множества $\{+, -, \cdot, /\}$ результат операции между интервалами определяется как $\boldsymbol{x} \star \boldsymbol{y} = \{\, x \star y \;\mid\; x \in \boldsymbol{x},\, y \in \boldsymbol{y} \,\}$. Развёрнутые

конструктивные формулы для арифметических операций выглядят следующим образом

$$\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}=\left[\underline{\boldsymbol{x}}+\underline{\boldsymbol{y}},\ \overline{\boldsymbol{x}}+\overline{\boldsymbol{y}}\right],\qquad \boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}=\left[\underline{\boldsymbol{x}}-\overline{\boldsymbol{y}},\ \overline{\boldsymbol{x}}-\underline{\boldsymbol{y}}\right],$$
$$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}=\left[\min\{\underline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}},\underline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}},\overline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}},\overline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}}\},\ \max\{\underline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}},\underline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}},\overline{\boldsymbol{x}}\,\underline{\boldsymbol{y}},\overline{\boldsymbol{x}}\,\overline{\boldsymbol{y}}\}\right],$$
$$\boldsymbol{x}/\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}\cdot\left[1/\overline{\boldsymbol{y}},\ 1/\underline{\boldsymbol{y}}\right]\qquad\text{для}\quad \boldsymbol{y}\not\ni 0.$$

Отправной точкой дальнейших конструкций, опубликованных ранее в [12, 13, 18], является следующая характеризация точек из допускового множества решений: для интервальной системы линейных уравнений $\boldsymbol{A}x=\boldsymbol{b}$ точка $x\in\mathbb{R}^n$ принадлежит множеству решений $\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$ тогда и только тогда, когда

$$\boldsymbol{A}\cdot x\ \subseteq\ \boldsymbol{b}, \tag{9}$$

где «$\cdot$» интервальное матричное умножение. Справедливость этой характеризации следует из свойств интервального матрично-векторного умножения и определения допускового множества решений. Придадим включению (9) другую, более удобную форму.

Если $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{a}_{ij})$, то по определению интервального матричного умножения вместо (9) можно написать

$$\sum_{j=1}^{n}\boldsymbol{a}_{ij}x_j\subseteq\boldsymbol{b}_i,\qquad i=1,2,\ldots,m.$$

Представим правые части этих включений в виде суммы средней точки $\operatorname{mid}\boldsymbol{b}_i$ и уравновешенного интервала $\left[-\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i,\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i\right]$:

$$\sum_{j=1}^{n}\boldsymbol{a}_{ij}x_j\ \subseteq\ \operatorname{mid}\boldsymbol{b}_i+\left[-\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i,\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i\right],\qquad i=1,2,\ldots,m.$$

Добавляя теперь к обеим частям включений по $(-\operatorname{mid}\boldsymbol{b}_i)$, получим:

$$\sum_{j=1}^{n}\boldsymbol{a}_{ij}x_j\ -\operatorname{mid}\boldsymbol{b}_i\ \subseteq\ \left[-\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i,\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i\right],\qquad i=1,2,\ldots,m.$$

Но включение интервала левой части в уравновешенный относительно нуля интервал $\left[-\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i,\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i\right]$ можно эквивалентным образом записать как неравенство на абсолютное значение:

$$\left|\sum_{j=1}^{n}\boldsymbol{a}_{ij}x_j\ -\operatorname{mid}\boldsymbol{b}_i\right|\ \le\ \operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i,\qquad i=1,2,\ldots,m,$$

что равносильно

$$\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i-\left|\sum_{j=1}^{n}\boldsymbol{a}_{ij}x_j\ -\operatorname{mid}\boldsymbol{b}_i\right|\ \ge\ 0,\qquad i=1,2,\ldots,m.$$

Поэтому

$$\boldsymbol{A}x\subseteq\boldsymbol{b}\quad\Leftrightarrow\quad\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i-\left|\operatorname{mid}\boldsymbol{b}_i-\sum_{j=1}^{n}\boldsymbol{a}_{ij}x_j\right|\ge 0,\quad i=1,2,\ldots,m.$$

Наконец, можно свернуть по i конъюнкцию неравенств в правой части полученной логической эквивалентности:

$$\boldsymbol{A}x\subseteq\boldsymbol{b}\quad\Leftrightarrow\quad\min_{1\le i\le m}\left\{\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i-\left|\operatorname{mid}\boldsymbol{b}_i-\sum_{j=1}^{n}\boldsymbol{a}_{ij}x_j\right|\right\}\ge 0.$$

Мы пришли к следующему результату:

Теорема. *Пусть $\boldsymbol{A}$ — интервальная $m\times n$-матрица, $\boldsymbol{b}$ — интервальный m-вектор. Тогда выражением*

$$\operatorname{Tol}(x,\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})\ =\ \min_{1\le i\le m}\left\{\operatorname{rad}\boldsymbol{b}_i-\left|\operatorname{mid}\boldsymbol{b}_i-\sum_{j=1}^{n}\boldsymbol{a}_{ij}x_j\right|\right\}$$

задаётся отображение $\mathrm{Tol} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{m\times n} \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$, *такое что принадлежность точки* $x \in \mathbb{R}^n$ *допусковому множеству решений* $\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$ *интервальной линейной системы уравнений* $\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$ *равносильна неотрицательности в* x *отображения* Tol, *т. е.*

$$x \in \Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathrm{Tol}\,(x,\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) \geq 0.$$

Таким образом, допусковое множество решений $\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$ интервальной линейной системы является множеством уровня $\left\{\, x \in \mathbb{R}^n \mid \mathrm{Tol}\,(x,\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) \geq 0 \,\right\}$ отображения Tol по первому аргументу x при фиксированных $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{b}$. Мы будем называть Tol «распознающим функционалом» допускового множества решений, так как областью значений этого отображения является вещественная ось $\mathbb{R}$ и посредством знака своих значений Tol «распознаёт» принадлежность точки множеству $\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$.

Конспективно изложим ниже свойства распознающего функционала, а их подробные доказательства можно найти в работах [12, 13, 18]. Функционал Tol является непрерывной функцией своих аргументов. Более того, он непрерывен в более сильном смысле, по Липшицу. Функционал Tol — вогнутый по переменной x всюду в $\mathbb{R}^n$. Функционал $\mathrm{Tol}\,(x,\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$ — полиэдральный, т. е. его подграфик — полиэдральное множество. Наконец, функционал $\mathrm{Tol}\,(x,\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$ достигает конечного максимума на всём пространстве $\mathbb{R}^n$.

Если $\mathrm{Tol}\,(x,\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) > 0$, то x — точка топологической внутренности $\operatorname{int}\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$ допускового множества решений. Поясним, что точка топологической внутренности — это точка множества, принадлежащая ему вместе с некоторым шаром (относительно какой-то нормы), имеющим центр в этой точке. Следовательно, точки из внутренности множества остаются принадлежащими этому множеству даже при их малых «шевелениях», что подчас бывает важно на практике.

Верно и обратное утверждение. Пусть интервальная линейная система уравнений $\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$ такова, что для каждого индекса $i = 1, 2, \ldots, m$ в i-ой строке матрицы $\boldsymbol{A}$ существует хотя бы один ненулевой элемент или же не равен нулю ни один из концов соответствующей компоненты правой части $\boldsymbol{b}_i$. Тогда из принадлежности $x \in \operatorname{int}\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$, следует строгое неравенство $\mathrm{Tol}\,(x,\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) > 0$.

Как следствие сформулированных результатов, с помощью распознающего функционала мы можем выполнить исследование пустоты/непустоты допускового множества решений интервальной системы линейных алгебраических уравнений по следующей схеме. Для интервальной системы $\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$ решаем задачу безусловной максимизации распознающего функционала $\mathrm{Tol}\,(x,\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$. Пусть $U = \max_{x\in\mathbb{R}^n} \mathrm{Tol}\,(x,\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$ и достигается в точке $\tau \in \mathbb{R}^n$. Тогда

- если $U \geq 0$, то $\tau \in \Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) \neq \varnothing$, т. е. допусковое множество решений системы $\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$ непусто и τ лежит в нём;
- если $U > 0$, то $\tau \in \operatorname{int}\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) \neq \varnothing$, и принадлежность точки τ множеству решений устойчива к малым возмущениям $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{b}$;
- если $U < 0$, то $\Xi_{tol}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) = \varnothing$, т. е. допусковое множество решений интервальной системы уравнений $\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$ пусто.

4 Псевдорешения систем линейных алгебраических уравнений

Из результатов предшествующего раздела следует, что значения распознающего функционала в точке дают количественную меру совместности этой точки по отношению к допусковому множеству решений данной интервальной системы линейных уравнений. Следовательно, аргумент максимума распознающего функционала, вне зависимости от того, принадлежит он непустому допусковому множеству решений или нет, является точкой максимума совместности для заданной интервальной линейной системы. Его можно считать псевдорешением исходной регуляризуемой системы линейных алгебраических уравнений.

Максимизация распознающего функционала на практике может быть выполнена с помощью методов негладкой выпуклой оптимизации, получивших большое развитие в последние десятилетия. Автор использовал для этой цели так называемые r-алгоритмы Н.З. Шора, разработанные в Институте кибернетики НАН Украины [7, 8]. В частности, на основе кода `ralgb5` П.И. Стецюка была создана свободно распространяемая программа `tolsolvty` для систем Scilab и MATLAB [2]. Другая возможность для реализации нашего подхода появилась с развитием методов отделяющих плоскостей [1, 15, 20].

Итак, в методе интервальной регуляризации системы линейных алгебраический уравнений (1)–(2) матрица A системы «раздувается» на некоторую малую величину до интервальной матрицы $\boldsymbol{A}$. Это можно сделать

с помошью интервального сдвига, положив $\boldsymbol{A} = A + \boldsymbol{\tau} I$, либо индивидуальным «раздуванием» каждого элемента матрицы A, либо как-то ещё. Если исходная система линейных алгебраических уравнений изначально является неточной и задана в виде интервальной системы $\boldsymbol{A}x = \boldsymbol{b}$, то далее рассматриваем эту систему, которую, возможно, «раздуваем» ещё дополнительно. Затем мы численно находим безусловный максимум по x распознающего функционала $\mathrm{Tol}\,(x, \boldsymbol{A}, b)$ допускового множества решений полученной интервальной линейной системы $\boldsymbol{A}x = b$. Аргумент этого максимума является искомым псевдорешением системы (1)–(2).

Для уяснения связи предложенного подхода с другими существующими понятиями псевдорешения полезно рассмотреть крайний случай — полное отсутствие неопределенности в данных, когда все они заданы точно. Если матрица системы $\boldsymbol{A}$ и вектор правой части $\boldsymbol{b}$ — точечные (неинтервальные), т. е. $\boldsymbol{A} = A = (a_{ij})$ и $\boldsymbol{b} = b = (b_i)$, то для всех i, j

$$\mathrm{rad}\ \boldsymbol{a}_{ij} = 0,\ \mathrm{rad}\ \boldsymbol{b}_i = 0 \qquad \text{и} \qquad \mathrm{mid}\ \boldsymbol{a}_{ij} = a_{ij},\ \mathrm{mid}\ \boldsymbol{b}_i = b_i.$$

Распознающий функционал допускового множества решений принимает при этом вид

$$\mathrm{Tol}\,(x, A, b) = \min_{1 \le i \le m} \left\{ -\left| b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right| \right\} = -\max_{1 \le i \le m} \left| b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right|$$

$$= -\max_{1 \le i \le m} \left| \,(Ax)_i - b_i \,\right| = -\,\|Ax - b\,\|_\infty\,.$$

Здесь посредством $\|\cdot\|_\infty$ обозначается чебышевская норма (∞-норма) вектора в конечномерном пространстве $\mathbb{R}^m$, которая определяется как $\|y\|_\infty = \max_{1 \le i \le m} |y_i|$. Тогда

$$\max\ \mathrm{Tol}\,(x) \ = \max_{x \in \mathbb{R}^n} \left(-\|Ax - b\,\|_\infty\right) \ = -\min_{x \in \mathbb{R}^n}\ \|Ax - b\,\|_\infty,$$

коль скоро $\max\,(-f(x)) = -\min\ f(x)$ для любой функции f. Таким образом, максимизация распознающего функционала равносильна в этом случае минимизации чебышёвской нормы невязки решения. Вычисление предложенного в работе псевдорешения превращается тогда в чебышёвское сглаживание данных, которое давно и успешно применяется на практике.

Интересный открытый вопрос — выбор величины интервального раздувания матрицы системы A, т. е. ширины параметра сдвига $\boldsymbol{\tau}$ или же ширины элементов $\boldsymbol{A}$ и правой части $\boldsymbol{b}$. Он аналогичен вопросу о выборе величины сдвига в традиционной неинтервальной версии регуляризации.

Заключение

В работе предложен новый подход к регуляризации плохообусловленных и неточно заданных систем линейных алгебраических уравнений, основанный на методах интервального анализа. Он назван *интервальной регуляризацией* и может рассматриваться как обобщение приёма М.М. Лаврентьева (регуляризации сдвигом).

При интервальной регуляризации исходная система линейных алгебраических уравнений погружается в интервальную систему, для которой исследуется так называемое допусковое множество решений. Для количественной характеризации разрешимости задачи, т. е. пустоты/непустоты допускового множества решений, мы вводим спецальную меру, названную распознающим функционалом, а в качестве псевдорешений исходной системы линейных уравнений берём точки максимума этой меры. Для численного нахождения максимума распознающего функционала применяются методы негладкой выпуклой оптимизации.

Список литературы

[1] Воронцова Е.А. Линейная задача о допусках для интервальной модели межотраслевого баланса // Вычислительные Технологии. 2017. №2. С. 67–84.

[2] «Интервальный анализ и его приложения» — веб-сайт. [Электронный ресурс]. URL: `http://www.nsc.ru/interval` (дата обращения: 31.05.2017).

[3] Кабанихин С.И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сибирское научное издательство, 2009.

[4] Лаврентьев М.М., Савельев Л.Я. Теория операторов и некорректные задачи. Новосибирск: Издательство Инстиута математики, 2010.

[5] Назимов А.Б., Мухамадиев Э.М., Морозов В.А., Муллоджанов М. Метод регуляризации сдвигом: Теория и приложения. Вологда: Вологодский государственный технический университет, 2012.

[6] Панюков А.В., Голодов В.А. Подход к решению систем линейных алгебраических уравнений с интервальной неопределенностью в исходных данных // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». 2013. Вып. 6, №2. С. 108–119.

[7] Стецюк П.И. Методы эллипсоидов и r-алгоритмы. Кишинэу: «Эврика», 2014.

[8] Стецюк П.И. Субградиентные методы `ralgb5` и `ralgb4` для минимизации овражных выпуклых функций // Вычислительные Технологии. 2017. №2. С. 127–149.

[9] Схрейвер А. Теория линейного и целочисленного программирования. Том 1. М.: Мир, 1991.

[10] Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.

[11] Шарая И.А. Строение допустимого множества решений интервальной линейной системы // Вычислительные Технологии. 2005. Т. 10, №5. С. 103–119. Электронная версия статьи доступна на `http://www.nsc.ru/interval/sharaya/Papers/ct05.pdf`

[12] Шарый С.П. Решение интервальной линейной задачи о допусках // Автоматика и телемеханика. 2004. №7. С. 147–162.

[13] Шарый С.П. Конечномерный интервальный анализ. Новосибирск: ИВТ СО РАН, 2017. [Электронный ресурс]. URL: `http://www.nsc.ru/interval/?page=Library/InteBooks` (дата обращения: 31.05.2017).

[14] Kearfott B., Nakao M., Neumaier A., Rump S., Shary S.P., van Hentenryck P. Standardized notation in interval analysis // Вычислительные Технологии. 2010. Vol. 15, No. 1. P. 7–13.

[15] Nurminski E.A. Separating plane algorithms for convex optimization // Mathematical Programming. 1997. Vol. 76. P. 373–391.

[16] Rohn J. Inner solutions of linear interval systems / Interval Mathematics 1985 / K. Nickel, ed. Lecture Notes in Computer Science 212. Berlin: Springer-Verlag, 1986. P. 157–158.

[17] Rohn J. A Handbook of results on interval linear problems. 2005. 80 p. Электронная книга, доступная на `http://www.nsc.ru/interval/Library/Surveys/ILinProblems.pdf`

[18] Shary S.P. Solving the linear interval tolerance problem // Mathematics and Computers in Simulation. 1995. Vol. 39. P. 53–85.

[19] Shary S.P. A new technique in systems analysis under interval uncertainty and ambiguity // Reliable Computing. 2002. Vol. 8, No. 5. P. 321–418.

[20] Vorontsova E. Extended separating plane algorithm and NSO-solutions of PageRank problem // Discrete Optimization and Operations Research. Proceedings of 9th International Conference DOOR 2016, Vladivostok, Russia, September 19-23, 2016 / Kochetov, Y., Khachay, M., Beresnev, V., Nurminski, E., Pardalos, P., eds. Lecture Notes in Computer Science, vol. 9869. Cham, Switzerland: Springer International, 2016. P. 547–560. DOI:10.1007/978-3-319-44914-2.43

Сергей Петрович Шарый — д.ф.-м.н., вед. науч. сотр. Института вычислительных технологий СО РАН;
e-mail: shary@ict.nsc.ru.

Дата поступления — 5 июня 2017 г.

РАЗРАБОТКА РОБАСТНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА

Г. И. Шишкин, Л. П. Шишкина

Институт математики и механики им. Н. Н. Красовского УрО РАН, 620990, Екатеринбург

УДК 519.63

На множестве $\overline{G}$, где $G = (0 < x \le d] \times (0 < t \le T]$, рассматривается начально-краевая задача для сингулярно возмущенного уравнения переноса с возмущающим параметром ε при пространственной производной; параметр ε принимает произвольные значения из полуинтервала $(0, 1]$. При $\varepsilon \to 0$ в окрестности боковой границы S^l появляется *пограничный слой* — узкая подобласть ширины $\mathcal{O}(\varepsilon)$, на которой решение задачи изменяется на конечную величину. Для такой задачи стандартная разностная схема на равномерной сетке не сходится ε-равномерно в равномерной норме; сходимость имеет место лишь при условии $h \ll \varepsilon$, где h — шаг сетки по x. Для исследуемой задачи строится робастная разностная схема на специальной сетке $\overline{G}_h^s$ — кусочно-равномерной по x (сгущающейся в окрестности пограничного слоя) и равномерной по t, сходящаяся ε-равномерно в равномерной норме со скоростью $\mathcal{O}(N^{-1} + N_0^{-1})$, где $N+1$ и N_0+1 — число узлов сеток по x и t соответственно. Приводятся результаты численных экспериментов, согласующиеся с теоретическими.

Ключевые слова: сингулярно возмущенное уравнение переноса, пограничный слой, декомпозиция решения, стандартная разностная схема, равномерная сетка, робастная разностная схема, кусочно-равномерная сетка, равномерная норма, априорные оценки.

Введение

Моделирование процессов тепло-массообмена, когда скорость переноса субстанции становится достаточно малой, приводит к *сингулярно возмущенным задачам для уравнения переноса*. В настоящее время в школах Г.И. Марчука, А.А. Самарского, Н.Н. Калиткина разработан ряд подходов к построению высокоэффективных численных методов решения задач для регулярных уравнений переноса (см., например, [1], [2], [3] и библ. там). Численные методы для сингулярно возмущенных уравнений переноса ранее не рассматривались. В настоящей работе для начально-краевой задачи для сингулярно возмущенного уравнения переноса с возмущающим параметром ε при пространственной производной, $\varepsilon \in (0, 1]$, на основе подходов из [4], [5], с использованием специальной кусочно-равномерной сетки, известной в литературе как сетка Шишкина [6], разрабатывается робастная разностная схема — схема, сходящаяся ε-равномерно в равномерной норме.

1 Постановка задачи. Цель работы

На множестве

$$\overline{G} = G \cup S, \quad G = D \times (0, T], \quad D = (0, d], \tag{1}$$

где $S = S_0 \cup S^l$, S_0 и S^l — нижняя и боковая части границы S, $S_0 = \{(x,t) : 0 \le x \le d,\ t = 0\}$, $S^l = \{(x,t) : x = 0,\ 0 < t \le T\}$, причем, $d, T \sim \mathcal{O}(1)$, рассмотрим начально-краевую задачу для сингулярно возмущенного уравнения переноса

$$\begin{aligned} L\,u(x,t) &= f(x,t), \quad (x,t) \in G, \\ u(x,t) &= \varphi(x,t), \quad (x,t) \in S. \end{aligned} \tag{2}$$

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта № 16-01-00727).

Здесь

$$L = \varepsilon\, b(x,t)\frac{\partial}{\partial x} + c(x,t) + p(x,t)\frac{\partial}{\partial t}, \quad (x,t) \in G,$$

функции $b(x,t)$, $c(x,t)$, $p(x,t)$, $f(x,t)$ предполагаются достаточно гладкими на $\overline{G}$, функция $\varphi(x,t)$, $(x,t) \in S$, достаточно гладкая на множествах S_0 и $\overline{S}^l$, непрерывна на S, причем,[1]

$$b_0 \le b(x,t) \le b^0, \quad 0 \le c(x,t) \le c^0, \quad p_0 \le p(x,t) \le p^0, \tag{3}$$

$$|f(x,t)| \le M, \quad (x,t) \in \overline{G}; \quad |\varphi(x,t)| \le M, \quad (x,t) \in S; \quad b_0,\, p_0 > 0;$$

параметр ε принимает произвольные значения из полуинтервала $(0,1]$. Пусть данные задачи (2) на множестве $S^c = S_0 \cap \overline{S}^l$ — угловой точке, удовлетворяют *условиям согласования*, обеспечивающим гладкость решения на $\overline{G}$.

В решении задачи (2) при малых значениях параметра ε появляется *пограничный слой* в окрестности множества $\overline{S}^l$.

Задачи для сингулярно возмущенных уравнений переноса, а также численные методы их решения ранее не рассматривались.

Наша цель: для задачи (2) построить разностную схему, сходящуюся ε-равномерно в равномерной норме.

2 Стандартная схема на равномерной сетке

На множестве $\overline{G}$ введем прямоугольную сетку

$$\overline{G}_h = \overline{\omega} \times \overline{\omega}_0. \tag{4}$$

Здесь $\overline{\omega}$ и $\overline{\omega}_0$ — произвольные, вообще говоря, неравномерные сетки на отрезках $[0,d]$ и $[0,T]$ соответственно. Пусть $h^i = x^{i+1} - x^i$, x^i, $x^{i+1} \in \overline{\omega}$, $h = \max_i h^i$, и $\tau^k = t^{k+1} - t^k$, t^k, $t^{k+1} \in \overline{\omega}_0$, $\tau = \max_k \tau^k$. Предполагаем выполненным условие $h \le M\,N^{-1}$, $\tau \le M\,N_0^{-1}$, где $N+1$ и N_0+1 — число узлов сеток $\overline{\omega}$ и $\overline{\omega}_0$ соответственно.

Задачу (2) аппроксимируем *стандартной разностной схемой* [1], [2]

$$\begin{aligned} \Lambda z(x,t) &= f(x,t), \quad (x,t) \in G_h, \\ z(x,t) &= \varphi(x,t), \quad (x,t) \in S_h. \end{aligned} \tag{5a}$$

Здесь

$$\Lambda \equiv \varepsilon\, b(x,t)\,\delta_{\overline{x}} + c(x,t) + p(x,t)\,\delta_{\overline{t}}, \quad (x,t) \in G_h, \tag{5b}$$

$G_h = G \sqcap \overline{G}_h$, $S_h = S \sqcap \overline{G}_h$, $\delta_{\overline{x}}\, z(x,t)$ и $\delta_{\overline{t}}\, z(x,t)$ — первые разностные производные назад по x и t.

$$\delta_{\overline{x}}\, z(x^i,t^k) = \big[z(x^i,t^k) - z(x^{i-1},t^k)\big]/h^{i-1}, \quad \delta_{\overline{t}}\, z(x^i,t^k) = \big[z(x^i,t^k) - z(x^i,t^{k-1})\big]/\tau^{k-1}. \tag{5c}$$

Схема (5) монотонна ε-равномерно (определение монотонности разностных схем см., например, в [2]). Для схемы (5) справедлив *сеточный принцип максимума*.

В случае сеток $\overline{G}_{h\,(4)}$ с учетом априорных оценок (17) и соотношения для сингулярной компоненты (18) получаем оценку

$$\|u - z\| \le M\,[\big(\varepsilon + N^{-1}\big)^{-1}\, N^{-1} + N_0^{-1}],\ (x,t) \in \overline{G}_{h\,(4)}. \tag{6}$$

На сетках $\overline{G}_h^u$, равномерных по x и t,

$$\overline{G}_h = \overline{G}_h^u \equiv \overline{\omega} \times \overline{\omega}_0, \tag{7}$$

имеем оценку, подобную (6)

$$\|u - z\| \le M\,[(\varepsilon + N^{-1})^{-1}\, N^{-1} + N_0^{-1}], \quad (x,t) \in \overline{G}_{h\,(7)}^u, \tag{8}$$

где $M_{(6)}$, $M_{(8)} = \mathcal{O}(1)$.

[1] Через M (через m) обозначаем достаточно большие (малые) положительные постоянные, не зависящие от величины параметра ε. В случае сеточных задач эти постоянные не зависят и от шаблонов разностных схем.

Теорема 1. *Пусть для данных начально-краевой задачи для сингулярно возмущенного уравнения переноса* (2) *выполняется условие* (3), *а для решения задачи справедливы оценки Теоремы* 3 *при* $K = 2$. *Тогда для решения разностных схем* (5), (4) *и* (5), (7) *справедливы оценки* (6) *и* (8) *соответственно.*

Замечание 1. Схемы (5), (4) и (5), (7) сходятся при неулучшаемом условии

$$N^{-1} = o(\varepsilon), \quad N_0^{-1} = o(1). \tag{9}$$

В соответствии с условием (9), для сходимости стандартных разностных схем (5), (4) и (5), (7) требуется использовать сетки по x с числом узлов, удовлетворяющим условию $N \gg \varepsilon^{-1}$, т.е. неограниченно растущим при $\varepsilon \to 0$. Таким образом, *стандартные схемы* (5), (4) и (5), (7), сходящиеся при фиксированных значениях параметра ε, *не сходятся* ε*-равномерно.* □

3 Специальная схема, сходящаяся ε-равномерно

На множестве $\overline{G}$ введем "специальную" сетку

$$\overline{G}_h = \overline{G}_h^s = \overline{\omega}^s \times \overline{\omega}_0. \tag{10a}$$

Здесь $\overline{\omega}^s$ — *кусочно-равномерная сетка*[2] по x и $\overline{\omega}_0$ — *равномерная сетка* по t. При построении $\overline{\omega}^s_{(10)}$ отрезок $[0, d]$ разобьем на две части $[0, \sigma]$ и $[\sigma, d]$, на каждой из которых строим равномерные сетки с одинаковым числом интервалов равным $2^{-1} N$; величину N считаем четной. Величину σ задаем зависящей от параметра ε

$$\sigma = \sigma(\varepsilon;\, d,\, T) = \min\left[M_1\, \varepsilon\, T,\, 2^{-1}\, d\right], \quad M_1 = M_{1\,(18)}. \tag{10b}$$

Таким образом, шаги сетки $\overline{\omega}^s_{(10)}$ определяются соотношениями

$$h_1 = 2\,\sigma N^{-1},\ x \in [0,\, \sigma]; \quad h_2 = 2\,(d - \sigma)\, N^{-1},\ x \in [\sigma,\, d]. \tag{10c}$$

При не слишком малых значениях параметра ε, а именно, при условии $\varepsilon \geq 2^{-1}\, M_1^{-1}\, T^{-1}\, d$, сетка $\overline{G}_{h\,(10)}$ становится равномерной.

Для решения разностной схемы (5), (10) с учетом априорных оценок (17) и соотношений для сингулярной компоненты (18) с использованием сеточного принципа максимума получаем оценку

$$\|u - z\| \leq M\left[N^{-1} + N_0^{-1}\right], \quad (x,t) \in \overline{G}_{h\,(10)}. \tag{11}$$

Таким образом, разностная схема (5), (10) — стандартная схема на кусочно-равномерной сетке, сходится ε-равномерно с первым порядком точности по x и t.

Теорема 2. *Пусть для решения начально-краевой задачи для сингулярно возмущенного уравнения переноса* (2) *выполняются априорные оценки* (17), *а также условие* (18) *для сингулярной компоненты решения из Теоремы* 4. *Тогда решение разностной схемы* (5), (10) *сходится* ε*-равномерно с первым порядком точности по* x *и* t *с оценкой* (11).

4 Априорные оценки решений и производных

Приведем априорные оценки решения задачи (2) и его компонент, используемые при построении разностных схем и обосновании ε-равномерной сходимости сеточного решения.

4.1 Принцип максимума

Для начально-краевой задачи для сингулярно возмущенного уравнения переноса (2) справедлив *принцип максимума*, подобный принципу максимума для начально-краевой задачи для сингулярно возмущенного параболического уравнения [4], [5].

Теорема 3. *Пусть для данных начально-краевой задачи для уравнения переноса* (2) *выполняется условие* $L\,u(x,t) \geq 0$, $(x,t) \in G$; $u(x,t) \geq 0$, $(x,t) \in S$. *Тогда для функции* $u(x,t)$ *справедлива оценка* $u(x,t) \geq 0$, $(x,t) \in \overline{G}$.

[2] Кусочно-равномерная сетка $\overline{\omega}^s$ известна в литературе по численным методам для сингулярно возмущенных эллиптических и параболических задач как "Shishkin mesh".

4.2 Стандартные априорные оценки

Приведем "стандартные априорные оценки" для решения сингулярно возмущенного уравнения переноса (2). При не слишком малых значениях ε эта задача подобна регулярной задаче, рассмотренной в [3].

Предполагаем, что производные $\dfrac{\partial^k}{\partial x^k}\varphi(x,0)$, $\dfrac{\partial^{k_0}}{\partial t^{k_0}}\varphi(0,t)$ ограничены при $k, k_0 \le 2$, причем, в угловой точке $(x,t)=(0,0)$ выполняются условия согласования, обеспечивающие требуемую непрерывность решения на $\overline{G}$ и его производных по x и t до второго порядка

$$u \in C^{k,k_0}(\overline{G}), \quad k+k_0 \le 2. \tag{12}$$

Для решения задачи (2) получаем "стандартную оценку"

$$\left|\frac{\partial^{k+k_0}}{\partial x^k \partial t^{k_0}} u(x,t)\right| \le M\varepsilon^{-k}, \quad (x,t)\in\overline{G}, \quad k+k_0 \le 2. \tag{13}$$

4.3 Улучшенные априорные оценки

Вывод "улучшенных оценок" с учетом поведения решения в окрестности пограничного слоя подобен выводу оценок для начально-краевой задачи для сингулярно возмущенного параболического уравнения конвекции-диффузии в [4], [5].

Решение задачи (2) представим в виде *декомпозиции*[3]

$$u(x,t) = U(x,t) + V(x,t), \quad (x,t)\in\overline{G}, \tag{14}$$

где компоненты $U(x,t)$ и $V(x,t)$ — *регулярная и сингулярная компоненты* решения. Здесь $U(x,t)=U^e(x,t)$, $(x,t)\in\overline{G}$, есть сужение на $\overline{G}$ функции $U^e(x,t)$, $(x,t)\in\overline{G}^e$, являющейся решением расширенной задачи

$$\begin{aligned} L^e U^e(x,t) &= f^e(x,t), \quad (x,t)\in G^e, \\ U^e(x,t) &= \varphi^e(x,t), \quad (x,t)\in S^e, \end{aligned} \tag{15}$$

где $\overline{G}^e = [-d^*, d]\times[0,T]$ — продолжение $\overline{G}$ за боковую границу S^l, оператор L^e и функции $f^e(x,t)$ и $\varphi^e(x,t)$ — расширения оператора L на множество $\overline{G}^e$ и функций $f(x,t)$ и $\varphi(x,t)$ на множества $\overline{G}^e$ и S^e соответственно с сохранением свойств данных задачи (2).

Сингулярная компонента $V(x,t)$ — решение задачи

$$L\,V(x,t) = 0, \quad (x,t)\in G, \tag{16}$$

$$V(x,t) = \varphi^l(x,t), \quad (x,t)\in S^l, \quad V(x,t)=0, \quad (x,t)\in S_0,$$

где $\varphi^l(x,t) = \varphi(x,t) - U^e(x,t)$, $(x,t)\in S^l$.

Для компонент $U(x,t)$ и $V(x,t)$, $(x,t)\in\overline{G}$, справедливы оценки

$$\left|\frac{\partial^{k+k_0}}{\partial x^k \partial t^{k_0}}\, U(x,t)\right| \le M, \tag{17a}$$

$$\left|\frac{\partial^{k+k_0}}{\partial x^k \partial t^{k_0}}\, V(x,t)\right| \le M\,\varepsilon^{-k}, \quad (x,t)\in\overline{G}, \quad k+k_0\le 2, \tag{17b}$$

причем,

$$V(x,t) = 0, \quad (x,t)\in\overline{G} \ \text{ при } x \ge M_1\,\varepsilon\,t, \tag{18}$$

где $M_1 \ge max_{\overline{G}}\,[\,b(x,t)\,p^{-1}(x,t)\,]$.

Т е о р е м а 4. *Пусть для данных начально-краевой задачи для сингулярно возмущенного уравнения переноса* (2) *выполняется условие* $b,\, c,\, p,\, \in C^{k,\,k_0}(\overline{G})$, $f\in C^{k,\,k_0}(\overline{G})$, $\varphi(\cdot,0)\in C^2(S_0)$, $\varphi(0,\cdot)\in C^2(\overline{S}^l)$, $k,\, k_0 \le 2$, $k+k_0\le 2$. *Тогда для решения* $u(x,t)$ *начально-краевой задачи и его компонент* $U(x,t)$ *и* $V(x,t)$ *из представления* (14) *справедливы оценки* (17), *где* $k,\, k_0 \le 2$, $k+k_0\le 2$; *для сингулярной компоненты* $V(x,t)$ *справедливо соотношение* (18).

[3] Декомпозиция решения $u(x,t)$ в виде суммы (14) регулярной и сингулярной компонент известна в литературе по численным методам для сингулярно возмущенных эллиптических и параболических задач, как "Shishkin decomposition".

5 Численное исследование модельной задачи

В этом разделе мы проведем численное исследование модельной начально-краевой задачи для сингулярно возмущенного уравнения переноса.

В качестве модельной задачи рассмотрим упрощенную начально-краевую задачу (2), (1) на множестве $\overline{G}_{(1)}$ при $d = T = 1$ для следующего сингулярно возмущенного уравнения переноса:

$$\begin{aligned} L\,u(x,t) \equiv \left(\varepsilon\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}\right) u(x,t) &= f(x,t), \quad (x,t) \in G, \\ u(x,t) &= \varphi(x,t), \quad (x,t) \in S. \end{aligned} \tag{19a}$$

Здесь

$$\begin{aligned} f(x,t) &= \varepsilon\, x - 2^{-1}\, t, \quad (x,t) \in G, \\ \varphi(x,t) &= \left\{ \begin{array}{lll} \varphi(0,t) = -2^{-2}\,t^2 + t^3, & x = 0, & 0 < t \le 1 \\ \varphi(x,0) = 2^{-1}x^2, & 0 \le x \le 1, & t = 0 \end{array} \right\}, \quad (x,t) \in S, \end{aligned} \tag{19b}$$

Решение модельной задачи (19) представим в виде декомпозиции

$$u(x,t) = U(x,t) + V(x,t), \quad (x,t) \in G, \tag{20}$$

в которой регулярная компонента $U(x,t)$ и сингулярная компонента $V(x,t)$ определяются соотношениями

$$U(x,t) = 2^{-1}(x^2 - 2^{-1}t^2), \quad (x,t) \in G; \tag{21}$$

$$V(x,t) = \left\{ \begin{array}{cc} -(\varepsilon^{-1}\,x - t)^3, & 0 \le x < \varepsilon\, t \\ 0, & \varepsilon\, t \le x \le 1 \end{array} \right\}, \quad (x,t) \in \overline{G}. \tag{22}$$

Таким образом, мы имеем явное точное решение $u(x,t)$ модельной задачи.

Модельную задачу (19) аппроксимируем на сетке $\overline{G}_h = \overline{G}_{h(4)}$ стандартной разностной схемой

$$(\varepsilon\,\delta_{\overline{x}} + \delta_{\overline{t}})\, z(x,t) = f(x,t), \quad (x,t) \in G_h, \quad z(x,t) = \varphi(x,t), \quad (x,t) \in S_h. \tag{23}$$

Нас интересуют ошибки аппроксимации решения $u(x,t) = u(x,t;\varepsilon)$ модельной задачи (19) сеточным решением $z(x,t) = z(x,t;\varepsilon, N = N_0)$ схемы (23) в двух случаях, когда:

(1) используется сетка[4] $\overline{G}_h = \overline{G}^u_{h(7)} \equiv \overline{\omega} \times \overline{\omega}_0$,, где сетки $\overline{\omega}$ и $\overline{\omega}_0$ — равномерные по x и t,

(2) используется специальная сетка $\overline{G}_h = \overline{G}^s_{h(10)} \equiv \overline{\omega}^s \times \overline{\omega}_0$, где $\overline{\omega}^s$ — кусочно-равномерная сетка по x, а $\overline{\omega}_0$ — равномерная по t.

Для этого будем исследовать поведение величин

$$E(\varepsilon, N = N_0) = \max_{\overline{G}_h} |u(x,t;\varepsilon) - z(x,t;\varepsilon, N = N_0)|, \quad \overline{E}(N = N_0) = \overline{E}(N = N_0; u(\cdot)) = \max_{\varepsilon} E(\varepsilon, N = N_0)$$

в зависимости от значения параметра ε, $\varepsilon = 2^0 \div 2^{-14}$, при $N = N_0 = 2^2 \div 2^{12}$.

Случаю (1) соответствует Таблица 1, а случаю (2) — Таблица 2. Сеточные решения, соответствующие случаям (1) и (2) показаны на Рис. 1.

Из Таблицы 1 следует, что с ростом N, $N = N_0$, сеточное решение $z(x,t)$ стандартной схемы на равномерной сетке **сходится** к точному решению $u(x,t)$ лишь при **фиксированных значениях параметра ε** (выше выделенной диагонали), однако оно **не сходится ε-равномерно**.

Из Таблицы 2 следует, что с ростом N, $N = N_0$ сеточное решение $z(x,t)$ **специальной** разностной схемы на кусочно-равномерной сетке **сходится** к точному решению $u(x,t)$ **ε-равномерно**.

[4] Запись $G_{(i)}$ ($L_{(i)}$, $m_{(i)}$, $M_{(i)}$, $G_{h(i)}$)) означает, что эти множества (операторы, постоянные, сетки) введены в формуле (i).

Таблица 1: Ошибки $E(\varepsilon, N = N_0)$ решения стандартной схемы на равномерной сетке

$\varepsilon \setminus N$	4	16	64	256	1024	4096
1	2.832e−1	9.050e−2	2.467e−2	6.310e−3	1.586e−3	3.972e−4
2^{-2}	**2.666e−1**	1.661e−1	5.226e−2	1.407e−2	3.580e−3	8.990e−4
2^{-4}	5.463e−2	**2.183e−1**	1.450e−1	4.517e−2	1.208e−2	3.070e−3
2^{-6}	6.055e−2	5.326e−2	**2.098e−1**	1.403e−1	4.355e−2	1.162e−2
2^{-8}	6.201e−2	1.550e−2	5.781e−2	**2.079e−1**	1.391e−1	4.315e−2
2^{-10}	6.238e−2	1.559e−2	1.213e−2	5.907e−2	**2.074e−1**	1.388e−1
2^{-12}	6.247e−2	1.562e−2	3.904e−3	1.460e−2	5.939e−2	**2.073e−1**
2^{-14}	6.249e−2	1.562e−2	3.906e−3	2.956e−3	1.522e−2	5.947e−2
$\overline{E}(N)$	**2.832e−1**	**2.183e−1**	**2.098e−1**	**2.079e−1**	**2.074e−1**	**2.073e−1**

Таблица 2: Ошибки $E(\varepsilon, N = N_0)$ решения специальной схемы на кусочно-равномерной сетке

$\varepsilon \setminus N$	4	16	64	256	1024	4096
1	2.832e−1	9.050e−2	2.467e−2	6.310e−3	1.586e−3	3.972e−4
2^{-2}	2.666e−1	1.661e−1	5.226e−2	1.407e−2	3.580e−3	8.990e−4
2^{-4}	2.494e−1	1.627e−1	5.135e−2	1.384e−2	3.524e−3	8.849e−4
2^{-6}	2.482e−1	1.625e−1	5.129e−2	1.383e−2	3.520e−3	8.839e−4
...	...	...	...	...	...	...
2^{-14}	2.482e−1	1.625e−1	5.129e−2	1.383e−2	3.520e−3	8.839e−4
$\overline{E}(N)$	**2.832e−1**	**1.661e−1**	**5.226e−2**	**1.407e−2**	**3.580e−3**	**8.990e−4**

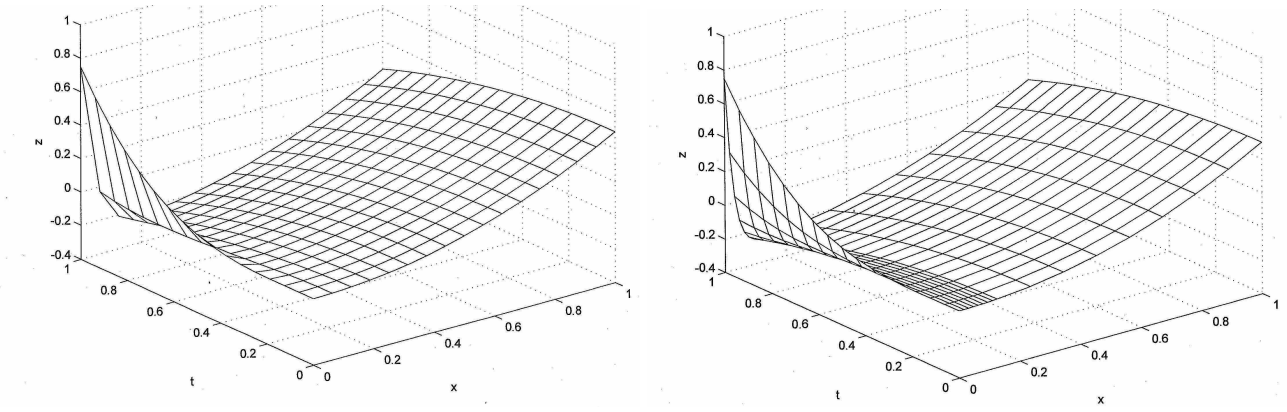


Рис. 1: Численные решения $\boldsymbol{z(x,t)}$: слева — для стандартной схемы, $(x,t) \in \overline{G}_{h\,(7)}$, справа — для специальной схемы, $(x,t) \in \overline{G}_{h\,(10)}$, при $\varepsilon = 2^{-5}$, $N = N_0 = 16$

6 Результаты

В работе получены следующие результаты:

(а) Поставлена начально-краевая задача для *сингулярно возмущенного уравнения переноса* с возмущающим параметром ε при пространственной производной, где $\varepsilon \in (0, 1]$. Установлено, что в окрестности боковой границы при $\varepsilon \to 0$ в решении задачи *появляется пограничный слой*.

(б) Построена *декомпозиция решения* на регулярную и сингулярную компоненты решения, для которых получены априорные оценки решения вместе с производными. Показано, что в окрестности пограничного слоя *производные по x сингулярной компоненты* решения *неограниченно растут* при $\varepsilon \to 0$, причем производные решения по t остаются ε-равномерно ограниченными.

(в) Показано, что решение *стандартной разностной схемы* — монотонной сеточной аппроксимации дифференциальной задачи на сетках с произвольным распределением узлов, в частности — на равномерных сетках, сходится в равномерной норме при фиксированных значениях параметра ε, однако *не сходится*

ε-равномерно. Сходимость имеет место лишь при условии $h = o(\varepsilon)$, $\tau = o(1)$, где h и τ — максимальный шаг сеток по x и t соответственно.

(г) Для начально-краевой задачи построена специальная разностная схема — стандартная схема *на кусочно-равномерной сетке* по x (сгущающейся в окрестности пограничного слоя) и *равномерной* по t, являющаяся *ε-равномерно монотонной*. Такая схема сходится *ε-равномерно в равномерной норме* со скоростью $\mathcal{O}(N^{-1} + N_0^{-1})$, где $N+1$ и N_0+1 — число узлов сеток по x и t соответственно.

(д) С использованием экспериментальной техники, подобной разработанной для сингулярно возмущенных краевых и начально-краевых задач в [7], проведено численное исследование модельной начально-краевой задачи для сингулярно возмущенного уравнения переноса; численные результаты согласуются с теоретическими.

Заключение

Для сингулярно возмущенного уравнения переноса ставится и исследуется начально-краевая задача. Решение такой задачи при малых значениях возмущающего параметра имеет особенность типа пограничного слоя — узкая подобласть в окрестности боковой границы ширины порядка $\mathcal{O}(\varepsilon)$. Производные решения в этой окрестности неограниченно растут при $\varepsilon \to 0$. Разрабатывается техника построения и исследования специальной разностной схемы, сходящейся ε-равномерно в равномерной норме с ростом числа сеточных узлов.

Таким образом, рассмотрен новый класс начально-краевых задач для уравнения переноса — задача для сингулярно возмущенного уравнения переноса. Такие задачи могут возникать при моделировании сложных процессов и явлений, связанных с переносом субстанции, приводящие к задачам с пограничными и внутренними слоями.

Список литературы

[1] Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. Москва: Наука, 1989.

[2] Самарский А. А. Теория разностных схем. Москва: Наука, 1989.

[3] Калиткин Н. Н., Корякин П. В. Численные методы. Методы математической физики. Москва: Издательский центр “Академия”, 2013.

[4] Шишкин Г. И. Сеточные аппроксимации сингулярно возмущенных эллиптических и параболических уравнений. Екатеринбург: УрО РАН, 1992.

[5] Shishkin G. I., Shishkina L. P. Difference Methods for Singular Perturbation Problems. Vol. 140 of Chapman and Hall/CRC Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics. Boca Raton: CRC Press, 2009.

[6] Roos H.-G., Stynes M., Tobiska L. Numerical Methods for Singularly Perturbed Differential Equations. Convection-Diffusion and Flow Problems. Berlin: Springer-Verlag, 1996.

[7] *Farrel P.A., Hegarty A.F., Miller J.J.H., ORiordan., Shishkin G.I.* Robust Computational Techniques for Boudary Layers. Chapman & Hall/CRC Press, 2000.

Григорий Иванович Шишкин — д.ф.-м.н., вед. науч.сотр. Института математики и механики им. Н. Н. Красовского УрО РАН;
e-mail: shishkin@imm.uran.ru;
Лидия Павловна Шишкина — вед. математик Института математики и механики им. Н. Н. Красовского УрО РАН;
e-mail: Lida@convex.ru.
Дата поступления — 27 мая 2017 г.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МИКРОЦИРКУЛЯТОРНЫХ ПРОЦЕССОВ С УЧЕТОМ ЛИМФАТИЧЕСКОГО ДРЕНАЖА

И. В. Шваб[1,2], В. В. Нимаев[2,3]

[1] *Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090, Новосибирск*
[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*
[3] *Научно-исследовательский институт клинической и экспериментальной лимфологии — филиал ИЦиГ СО РАН, 630060, Новосибирск*

УДК 517.968

Обменные процессы в организме состоят в постоянном перераспределении веществ между кровеносными капиллярами, окружающей тканью и лимфатическими капиллярами. В этой связи важны комплексные модели, учитывающие взаимосвязь процессов, происходящих во всех частях микроциркуляторного русла. В работе представлен один из подходов к построению математической модели обменных процессов, происходящих на микроциркуляционном уровне и включающих в себя следующие взаимосвязанные процессы: течение крови в капиллярах, транскапиллярный обмен, движение жидкости в интерстиции, обмен веществ между интерстициальной жидкостью и клетками ткани, дренаж в лимфатические капилляры. Изучение микроциркуляции позволяет лучше понять сложные взаимосвязанные процессы, обеспечивающие обмен веществ в организме, выявить причины возникновения патологий и предложить пути их лечения.

Ключевые слова: математическое моделирование, лимфатический дренаж, микроциркуляция

Введение

Одним из ключевых звеньев в работе сердечно-сосудистой системы является микроциркуляция, обеспечивающая транспорт биологических жидкостей на тканевом уровне и включающая в себя капиллярное кровообращение (движение крови по микрососудам капиллярного типа), обращение интерстициальной жидкости и веществ по межклеточным пространствам, ток лимфы по лимфатическим микрососудам.

Экспериментальные исследования обменных процессов на микроуровне позволяют производить измерения влияющих на микроциркуляторные процессы характеристик (таких, как геометрия и размеры капилляра, скорость течения крови в отдельном капилляре, объемная скорость транскапиллярного обмена и др.). Тем не менее исследование обменных процессов с помощью математического моделирования актуально, так как помогает ответить на многие возникающие в практической хирургии вопросы и позволяет выявить параметры, изменение которых вызвало данное расстройство в организме, оценить величину их отклонения от нормы, спрогнозировать результаты лечения тем или иным методом.

При моделировании обменных процессов на микроуровне необходимо учитывать множество взаимосвязанных явлений: движение крови по кровеносному капилляру, транскапиллярный обмен, движение жидкости в ткани, обменные процессы между клетками ткани и интерстициальной жидкостью, реабсорбция жидкости в кровеносные и лимфатические сосуды. В совокупности все эти процессы представляют чрезвычайно сложную для математического моделирования систему (см., например, работы [1–4]).

Следует отметить, что моделированием течения крови в капиллярах занимаются не одно десятилетие (см., например, работы [5–7]). Однако настоящая статья посвящена не моделированию течения крови в капиллярах, а моделированию микроциркуляторных процессов с учетом лимфатического дренажа жидкости из ткани. При математическом моделировании соответствующих явлений для целей оперативной хирургии важно описать и изучить накапливание жидкости в интерстиции и образование отеков. Это отдельная математическая проблема, решить которую с помощью уже известных моделей течения крови в капиллярах

не представляется возможным. Новизна изложенных в работе результатов состоит в предложенной здесь математической модели, объединяющей в себе несколько разработанных ранее подмоделей [1–4]. Приведены также графические результаты тестовых расчетов, позволяющие сделать выводы о пригодности предложенной модели для дальнейших совместных исследований медиков и математиков в заданном направлении.

1 Модель

1.1 Основные уравнения

В дальнейшем будем рассматривать систему, состоящую из кровеносного капилляра, окружающей его ткани и расположенной в этой ткани начальной лимфатической системы [1]. В системе происходят следующие процессы: течение крови в кровеносном капилляре; фильтрация и реабсорбция жидкости через стенку кровеносного капилляра в окружающую ткань и из неё в капилляр; движение жидкости в ткани; дренаж жидкости из ткани в лимфатическую систему. При этом предполагаем, что все капилляры одинаковы по размеру, характеристикам течения жидкости и т. д. Нужно отметить, что существует три основных механизма транскапиллярного обмена: фильтрация, диффузия и активный (везикулярный) транспорт. На уровне микроциркуляторного русла, когда размер сосудов сравним с размером клеток крови, существенную роль начинает играть эффект уменьшения вязкости с увеличением скорости сдвига, и кровь начинает проявлять вязкоупругие свойства, которыми в крупных и средних сосудах можно пренебречь [2]. Указанные выше свойства отражены в выборе определяющих соотношений для описания крови. Плотность крови в микроциркуляционных процессах изменяется на десятые доли процента. Следовательно, можно сделать предположение, что кровь является практически несжимаемой жидкостью. В работе [4] показано, что при скоростях сдвига, характерных для течения крови в капиллярах, тензор напряжения ткани $\vec{\sigma} = \vec{\sigma}(t, r, x)$, давление в капиллярах $\vec{P}(t, r, x)$ и тензор скоростей деформации связаны соотношением

$$\sigma = f(\gamma)\gamma - P\mathbf{I}. \tag{1}$$

Тензор скоростей деформации определяется по формуле:

$$\gamma = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{V} + \nabla\mathbf{V}^T), \tag{2}$$

где $\mathbf{V} = \mathbf{V}(t, r, x)$ — вектор скорости течения крови с аксиальной и радиальной компонентами Скалярная функция $f(\gamma)$ определяется следующим равенством

$$f(\gamma) = C_1 e^{C_2 H + C_4 \frac{\chi}{H^2}} (\gamma)^{-C_3 H}, \tag{3}$$

где γ — скорость сдвига, H — показатель гематокрита, характеризующий содержание в крови форменных элементов (в норме 35–50%), χ — общее количество протеинов за исключением альбумина (в норме 1,5–4,0 г. на 100 мл.). Коэффициенты C_i, $i = 1, 2, 3, 4$, найдены эмпирически, сравнением с экспериментальными данными. Дополняют систему (1)–(2) уравнение движения крови в капилляре и уравнение неразрывности

$$\frac{\partial\mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V}\cdot\nabla)\mathbf{V} = \frac{1}{\rho}\nabla\sigma, \tag{4}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{V} = 0. \tag{5}$$

Кровь в микроциркуляторных процессах является жидкостью с высокой вязкостью. Поэтому отвечающими за инерционные силы членами можно пренебречь: они во много раз меньше сил трения. Биологическая ткань моделируется как пористый, упругий, изотропный матрикс или каркас, насыщенный жидкостью одного типа. Считается, что жидкость содержится в порах матрикса. Определяющее соотношение для ткани имеет следующий вид:

$$\vec{\sigma} = 2\mu\varepsilon + \lambda eI + PI, \tag{6}$$

где λ, μ — константы Ламе для упругого каркаса, $\sigma = \sigma(t, r, x)$ — тензор напряжений ткани, $P = P(t, r, x)$ — давление жидкости в порах матрикса. Расширение твердой фазы $e = e(t, r, x)$ представляет собой дивергенцию смещения твердой фазы:

$$e = \nabla\cdot\mathbf{U}. \tag{7}$$

Тензор малых деформаций $e = e(t, r, x)$ является симметричной формой градиента вектора смещения:

$$\varepsilon = \frac{1}{2}(\nabla \cdot \mathbf{U} + \nabla \cdot \mathbf{U}^{\mathbf{T}}). \tag{8}$$

Уравнение равновесия имеет следующий вид:

$$\nabla \cdot \vec{\sigma} = 0. \tag{9}$$

Получим уравнение для смещения твердой фазы, выведенное Био. Подставляя (6) и (8) в (9), имеем

$$\mu\nabla \cdot (\nabla\mathbf{U} + (\nabla\mathbf{U})^T) + \lambda\nabla\cdot(\nabla\cdot\mathbf{U}\mathbf{I} - \nabla \cdot (\vec{P}\mathbf{I})) = 0, \tag{10}$$

$$\nabla(2\mu\varepsilon + \lambda e\mathbf{I} - \vec{P}\mathbf{I}) = 0, \tag{11}$$

$$\mu \cdot (\nabla(\nabla\mathbf{U} + \nabla(\nabla\mathbf{U})^T)) + \lambda\nabla(\nabla \cdot \mathbf{U}\mathbf{I}) - \nabla\vec{P} = 0. \tag{12}$$

Учитывая, что

$$\nabla(\nabla\mathbf{U})^T = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{U}), \tag{13}$$

а также соотношение

$$\nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{U}\mathbf{I}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{U}), \tag{14}$$

получаем

$$\mu\nabla^2\mathbf{U} + (\lambda + \mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{U}) - \nabla\vec{P} = 0. \tag{15}$$

Взяв дивергенцию от левой и правой частей последнего уравнения, имеем

$$\mu\nabla^2 e + (\lambda + \mu)\nabla^2 e - \nabla^2\vec{P} = 0, \tag{16}$$

$$(\lambda + 2\mu)\nabla^2 e = \nabla^2\vec{P}. \tag{17}$$

Пусть Φ — объемная доля жидкости в недеформированной ткани, называемая пористостью; $u = u(t, r, x)$ — скорость течения интерстициальной жидкости. Запишем закон сохранения массы для ткани

$$\nabla \cdot ((1 - \Phi)\frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t} + \Phi u) = 0, \tag{18}$$

$$\nabla(\frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t} + \Phi(u - \frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t})) = 0. \tag{19}$$

Будем считать, что $\Phi = const$ и $\frac{d\mathbf{U}}{dt} = \frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t}$. Так как $\nabla \cdot \frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t} = \frac{\partial e}{\partial t}$, из (19) получим

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \Phi(\nabla \cdot u - \frac{\partial e}{\partial t}) = 0. \tag{20}$$

Закон Дарси связывает относительную скорость течения интерстициальной жидкости в твердой фазе и градиент давления с помощью соотношения

$$\Phi(\mathbf{u} - \frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t}) = -K\nabla\vec{P}, \tag{21}$$

где K — коэффициент проницаемости ткани. Из уравнения (21) следует, что в порах матрикса градиент давления жидкости пропорционален скорости течения интерстициальной жидкости. Взяв градиент от (21), получим

$$\Phi(\nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{\partial e}{\partial t}) = -K\nabla^2\vec{P}. \tag{22}$$

Подставляя (17) в (22), имеем

$$\Phi(\nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{\partial e}{\partial t}) = -K(\lambda + 2\mu)\nabla^2 e, \tag{23}$$

или

$$\frac{\partial e}{\partial t} = K(\lambda + 2\mu)\nabla^2 e. \tag{24}$$

Для того чтобы учесть отток жидкости из ткани за счет лимфатического дренажа, следует в правую часть уравнения (24) добавить отвечающее за дренаж жидкости слагаемое

$$\nabla \cdot (\Phi \mathbf{u} + (1-\Phi)\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}) = -J_L. \tag{25}$$

Здесь $J_L = J_L(t, r, x)$ — объемный поток лимфы, дренируемой из ткани в лимфатическую систему. Окончательно получаем следующую систему дифференциальных уравнений:

$$(\lambda + 2\mu)\nabla^2 e = \nabla^2 \vec{P}, \tag{26}$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} = K(\lambda + 2\mu)\nabla^2 e + J_L. \tag{27}$$

Функция, отвечающая за лимфатический дренаж, может быть выбрана различными способами [3], [4]. На основе экспериментальных данных о лимфатической системе в данной работе объемный поток J_L поступающей в лимфатическую систему жидкости задается в виде функции от координат и времени. Функционирование артериол и лимфатических капилляров тесно связано. Поэтому зависимость лимфатического дренажа от времени можно согласовать с изменением давления в артериоле (на артериальном конце капилляра). В кровеносный капилляр кровь поступает из артериолы. По мере наполнения капилляра кровью происходит увеличение давления на артериальном конце капилляра. При этом артериола сжимается, а соседний с ней лимфатический капилляр расширяется , действуя как насос и забирая в себя тканевую жидкость. Через некоторое время после открытия прекапиллярного сфинктера давление на артериальном конце капилляра и в артериоле выравнивается и перестает изменяться. При этом артериола перестанет сужаться и расширение лимфатического капилляра прекратится, что приводит к затуханию лимфатического дренажа. На основе этих наблюдений зависимость лимфатического дренажа от времени и координат можно задавать, согласуя ее с законом изменения давления на артериальном конце капилляра. Пусть давление на артериальном конце кровеносного капилляра изменяется со временем как гармоническая функция, т. е. имеет вид

$$P(t) = P_v + (P_a - P_v)\frac{1 - \cos\frac{2\pi}{T}t}{2}. \tag{28}$$

Тогда объемный поток жидкости, дренирующий в лимфосистему, задается следующим соотношением

$$J_L(r,t) = C_1(r - R_c)^{C_2} e^{C_3(r-R_c)}\frac{1 - \cos\frac{2\pi}{T}t}{2}. \tag{29}$$

Здесь T — продолжительность одного обменного цикла, R_c — радиус капилляра, P_a и P_v — давление на артериальном и венозном концах капилляра соответственно. Из формулы (29) следует, что непосредственно у кровеносного капилляра лимфатический дренаж равен нулю, затем достигает максимума и затухает по мере дальнейшего удаления от кровеносного капилляра. Коэффициенты C_i, $i = 1, 2, 3$, задают вид графика J_L и расположение на нем точек максимума и перегиба.

2 Численный метод

Для численных расчетов используется модель представительного капилляра в цилиндрической системе координат (r, θ, x) (рис. 1): r — радиальная координата, x — аксиальная. В силу осевой симметрии капилляра величины не зависят от угла поворота θ. При этом предполагается, что с левой стороны от капилляра располагается питающая его артериола, а с правой — венула. Начало координат располагается в центре капилляра на его артериальном конце. Давление и скорость течения жидкости в капилляре и ткани, а также зависящие от них величины, рассматриваются как функции времени и двух пространственных координат.

3 Результаты

На рис. 2 представлена зависимость от давления интерстициальной жидкости относительного лимфооттока (отношение полученного лимфооттока к осредненному значению, равному 0,2 мм/сек). Можно увидеть, что при более отрицательном давлении (по сравнению с нормой — 6 мм. рт. ст.) интерстициальной жидкости наблюдается низкий уровень лимфотока. Затем по мере увеличения давления до 0 мм рт. ст. (атмосферное

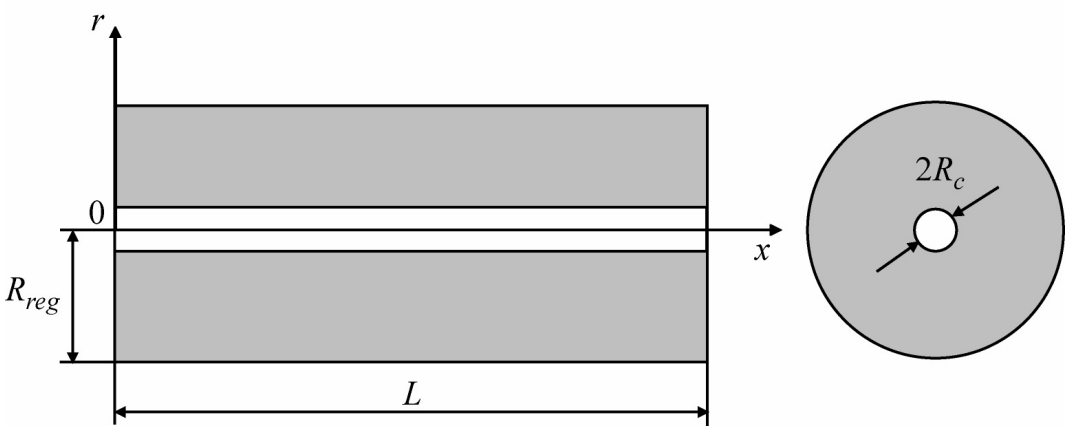


Рис. 1: Модель представительного капилляра: R_c — радиус капилляра, L — длина капилляра

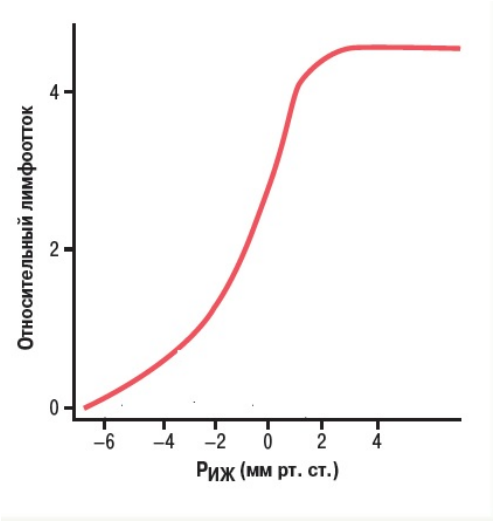


Рис. 2: Зависимость лимфооттока от давления интерстициальной жидкости

давление) отток лимфы увеличивается в 20 раз. При увеличении давления интерстициальной жидкости до 1–2 мм рт. ст. дальнейшее увеличение лимфооттока прекращается. Это объясняется тем, что увеличение давления интерстициальной жидкости вызывает не только поступление жидкости в лимфатические капилляры, но также и сдавливание лимфатических сосудов, затрудняя отток лимфы. При высоком давлении эти два фактора почти полностью уравновешивают друг друга. Лимфатический ток при этом достигает максимальной величины, что отражено в виде плато в верхней части кривой на рис. 2.

На рис. 3 представлены изменения обьема и давления интерстициальной жидкости при ступенчатом изменении давления в капилляре. Отношение величин $\mathbf{V}/P_i$ влияют на скорость, с которой система переходит в устойчивое состояние. Расчеты показали, что увеличение объемной скорости фильтрации жидкости из капилляра достигается за счет увеличения артериального или уменьшения венозного давления, увеличения радиуса капилляра (а соответственно, и площади обмена между капилляром и тканью) и проницаемости стенки капилляра. Причем наибольшее влияние оказывают последние два параметра. Так, изменение на порядок гидравлической проницаемости стенки приводит к изменению на порядок объемной скорости фильтрации жидкости. Кроме того, изменение онкотического давления, пористости и проницаемости ткани практически не влияет на объемную скорость фильтрации жидкости.

Из проведенных расчетов можно сделать вывод, что лимфатический дренаж происходит более интенсивно на артериальном конце капилляра. Таким образом, задавая лимфатический дренаж как функцию координаты, можно учесть реальное расположение лимфатических капилляров в микроциркуляторном русле (вблизи артериального конца кровеносного капилляра). Изменение характеристик ткани и кровеносного

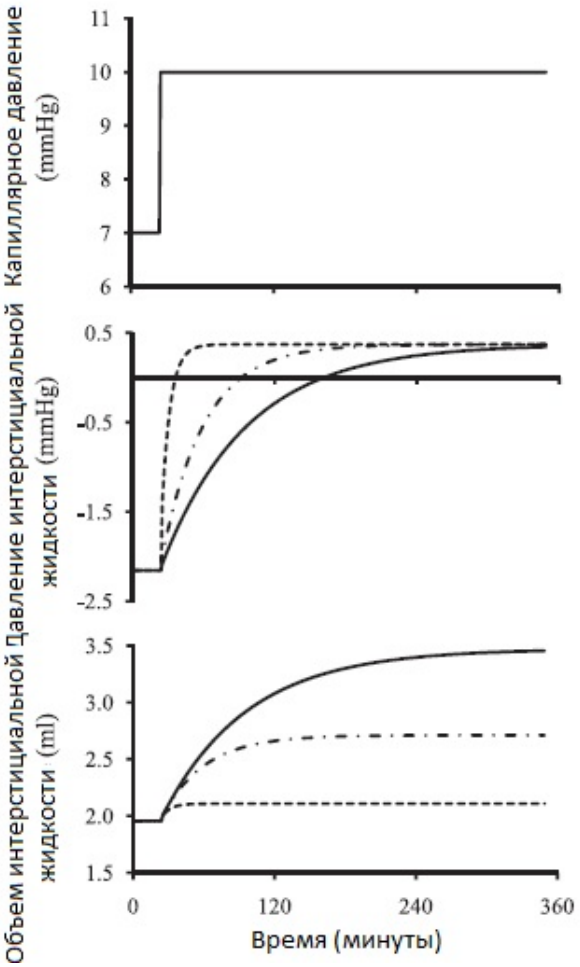


Рис. 3: Изменение обьема и давления интерстициальной жидкости при изменении давления в капилляре

капилляра в случае учета лимфатического дренажа приводит к изменению среднего давления в ткани. К увеличению давления приводит увеличение пористости и уменьшение влагопроводимости ткани, а также увеличение радиуса и гидравлической проницаемости стенки кровеносного капилляра. Расширение зоны активного лимфатического дренажа и увеличение максимального значения приводят к уменьшению среднего давления и увеличению объемной скорости фильтрации жидкости. Таким образом, более интенсивный лимфатический дренаж способствует ускорению обменных процессов. При дальнейшем увеличении лимфатического дренажа характер распределения давления в ткани меняется и преобладающим процессом становится фильтрация жидкости в ткань.

Заключение

В работе построена математическая модель микроциркуляторных процессов, описывающая взаимосвязанные процессы, происходящие в кровеносном капилляре и окружающей ткани с учетом лимфатического дренажа жидкости из ткани. С помощью предложенной модели получены зависимость лимфооттока от давления интерстициальной жидкости и изменение объема и давления интерстициальной жидкости от скачка давления в капилляре. Показано, что наличие лимфатического дренажа снижает давление в ткани и приводит к интенсификации обменных процессов. Следовательно, лимфатическая система оказывает существенное влияние на такие параметры микроциркуляции, как регуляция белков в интерстициальной жидкости, ее объем и давление.

Список литературы

[1] Krogh, A. E. The movement of fluid through the human capillary wall in relation to venous pressure and to the colloid osmotic pressure of the blood / A.E. Krogh, E.M. Landis, A.H. Turner // J. Clin. Invest. — 1932. — V. 11. — P. 63–95.

[2] Kucaba-Pietal, A. Blood as Complex Fluid, Flow of Suspensions / A. Kucaba-Pietal // Blood Flow Modelling and Diagnostics: Advanced Course and Workshop. Warsaw, June 20-23, 2005. Lecture notes. — Warsaw, 2005. P. 9–30.

[3] Swartz, M. A. Mechanics of interstitial-lymphatic fluid transport: theoretical foundation and experimental validation / M.A. Swartz, A. Kaipainen, P.A. Netti // Journal of Biomechanics. — 1999. — P . 1297–1307.

[4] Shabrykina, N. S. Biomechanical Models of Microcirculation and Extravascular Fluid Exchange / N.S. Shabrykina, Y.I. Nyashin, M.Y. Nyashin // Proceedings of the Euro Summer School on Biorheology. Sofia: Demetra Ltd, 2004. — P. 62–68.

[5] Воропаева О. Ф., Шокин Ю. И. Численное моделирование в медицине: некоторые постановки задач и результаты расчетов // Вычислительные технологии. — 2012. — Т.17. — № 4. — С. 29–55.

[6] Киселев И. Н., Семисалов Б. В., Бибердорф Э. А., Шарипов Р. Н., Блохин А. М., Колпаков Ф. А. Модульное моделирование сердечно-сосудистой системы человека // Матем. биология и биоинформ., 7:2 (2012), С. 703–736.

[7] Михайлова А. В., Черевко А. А., Чупахин А. П., Кривошапкин А. Л., Орлов К. Ю. Построение гемодинамической модели по экспериментальным клиническим данным // Доклад на Международной конференции по дифференциальным уравнениям и динамическим системам, 8 июля 2014 г.

Ирина Васильевна Шваб — к.т.н., науч.сотр. Института вычислительных технологий СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: Schwab_Irina@mail.ru;
Вадим Валерьевич Нимаев — д.м.н., зав. лаб. Научно-исследовательского института клинической и экспериментальной лимфологии — филиала ИЦиГ СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: nimaev@gmail.com.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

О ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИИ КУБИЧЕСКИХ СПЛАЙНОВ НА НЕРАВНОМЕРНЫХ СЕТКАХ

Б. М. Шумилов

Томский государственный архитектурно-строительный университет, 634003, Томск

УДК 517.968

Для сплайнов третьей степени с неравномерными узлами получен алгоритм вейвлет-разложения в виде решения трехдиагональной системы линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов.

Ключевые слова: неравномерные измерения, кубические сплайны, вейвлеты, ортогональность вторых производных, дифференцирование, прогнозирование.

Введение

В теории кратномасштабного анализа вейвлетами называют базис множества, заполняющего разность между аппроксимирующими пространствами на густой и прореженной сетках (см. [1, с. 41]). В классическом случае аппроксимации на равномерных бесконечно продолженных в обе стороны сетках такой базис порождается сжатиями и смещениями единственной волновой функции, имеющей вид короткого всплеска или быстро затухающей ряби, которая и называется вейвлетом. За счет сжатия вейвлеты выявляют с разной степенью подробности различие в характеристиках измеренного сигнала, а путем сдвига способны проанализировать свойства сигнала в разных точках на всем изучаемом интервале. При анализе нестационарных сигналов свойство локальности вейвлетов обеспечивает им существенное преимущество перед преобразованием Фурье, которое дает только глобальные сведения о свойствах исследуемого сигнала, поскольку используемые при этом базисные функции (синусы и косинусы) имеют бесконечный носитель. При решении задач численного анализа, поскольку вейвлеты преобразуют систему базисных функций с распределенными параметрами в систему с сосредоточенными параметрами, такой базис оказывается гораздо более эффективным с точки зрения обусловленности и сходимости.

Вейвлет-преобразованием в данном контексте и называется, собственно, проблема вычисления коэффициентов вейвлет-разложения по заданным коэффициентам аппроксимирующей функции. В случае ортонормальных и биортогональных вейвлетов решение сводится к применению локальных усредняющих фильтров. Мы считаем это недостатком, так как информация для расчета каждого коэффициента на прореженной сетке учитывается не полностью. В отличие от этого, коэффициенты полуортогональных [2, с. 115] вейвлетов связаны системой линейных алгебраических уравнений, но хорошая обусловленность для нее не гарантирована. В случае измерений, заданных на неравномерной сетке, эти проблемы усугубляются проблемой устойчивости относительно расположения узлов сетки [3]. В [4] при вычислениях предлагалось воспользоваться уникальным свойством “Point Value Vanishing” построенных вейвлетов для того, чтобы получить алгоритм вейвлет-преобразования, требующий на каждом шаге вычисления коэффициентов некоторых интерполяционных сплайнов. Но результирующие выражения получились очень запутанными, и ссылки на использование предложенной конструкции в практических вычислениях найти не удалось. Мы предлагаем использовать вместо этого разработанный ранее [5] прием получения конечных неявных соотношений, связывающих базисные функции пространства сплайнов на густой сетке, базисные функции на прореженной сетке и вейвлеты. В [6] сходная идея факторизации матрицы вейвлет-преобразования использовалась при доказательстве ее обратимости, однако без явного указания возможности практического применения для вычислений.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Администрации Томской области (код проекта 16-41-700400 р_а).

1 Калибровочные соотношения для кубических сплайнов на неравномерной сетке

Основой для построения вейвлетов является наличие так называемых масштабирующих (или, иначе, калибровочных) соотношений таких, что каждая базисная функция на прореженной сетке может быть выражена в виде линейной комбинации базисных функций на густой сетке. В частности, такими соотношениями обладают сплайны – гладкие функции, склеенные из кусков многочленов степени m, на вложенной последовательности сеток. В случае равномерных сеток на всей числовой оси эти соотношения хорошо известны, так же, как и некоторые случаи приближения на конечном интервале. В практически важном случае измерений, заданных на неравномерной сетке, некоторые рекомендации по получению системы уравнений для нахождения масштабирующих коэффициентов и способах ее решения содержатся в [7]. В [8] рассматривалась задача добавления узлов "по одному"для построения "телескопического" вейвлет-разложения, а в [9] другой вариант – удаления узлов "по одному". В [4] для этого использовался рекурсивный алгоритм вставки узлов, иначе называемый «Oslo algorithm», требующий для своего обоснования теорию дискретных B-сплайнов и имеющий неоднозначность в виде наличия неустойчивых вариантов. Однако явные выражения калибровочных коэффициентов указаны не были. Поэтому в данной работе мы применим решение Демьяновича Ю.К. [10], полученное с использованием специального дробно-рационального тождества.

Пусть пространство V_L является пространством сплайнов третьей степени, непрерывных до производных второго порядка включительно, на отрезке $[a,b]$ с неравномерной сеткой узлов $\Delta^L : a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{2^L} = b$ размерности $2^L + 3$. Для того, чтобы получить базисные функции пространства V_L, следует к сетке Δ^L добавить фиктивные узлы $x_{-3} < x_{-2} < x_{-1} < x_0$, $x_{2^L} < x_{2^L+1} < x_{2^L+2} < x_{2^L+3}$ и построить для функции $\varphi_3(x,t) = (\max\{x-t,0\})^3$ разделенные разности 4-го порядка по значениям аргумента $t = x_{k-2}, x_{k-1}, x_k, x_{k+1}, x_{k+2}$. Тогда функции (см. [11, с. 86]; [12, с. 18–23])

$$N_k^L(x) = (x_{k+2} - x_{k-2})\varphi_3[x; x_{k-2}, x_{k-1}, x_k, x_{k+1}, x_{k+2}],\ k = -1, 0, \ldots, 2^L + 1,$$

суть нормализованные B-сплайны. Это — сплайн-функции степени 3 дефекта 1. Они отличны от нуля на промежутках (носителях) (x_{k-2}, x_{k+2}) и тождественно равны нулю вне их. Иначе говоря, в точках x_{k-2}, x_{k+2} производные $N_k^L(x)$ до порядка 2 включительно равны нулю. Последнее накладывает 6 условий на параметры полученного сплайна, и еще один свободный параметр в данном случае определяется так, чтобы было выполнено условие нормировки $\sum_{k=-1}^{2^L+1} N_k^L(x) = 1, a \le x \le b$. Всякий сплайн третьей степени $S^L(x) \in V_L$ может быть единственным образом представлен на интервале $[a,b]$ изменения параметра x в виде линейной комбинации B-сплайнов:

$$S^L(x) = \sum_{i=-1}^{2^L+1} C_i^L N_i^L(x),\ a \le x \le b, \tag{1}$$

где C_i^L — постоянные коэффициенты.

Мы не устанавливаем каких-либо условий непрерывности в конечных точках рассматриваемого интервала. Это соответствует тому, что базис из B-сплайнов обеспечивает правильное представление элементов пространства V_L только на интервале $[a,b]$. При этом для того, чтобы включить в рассмотрение случай дефекта $\nu > 1$, следует приписать узлу сетки Δ кратность, равную дефекту сплайна в этой точке, и перенумеровать узлы с учетом их кратности. Для последующего удобно выбрать начальные и конечные узлы такими, чтобы $a = x_{-2} = x_{-1} = x_0$, $x_{2^L} = x_{2^L+1} = x_{2^L+2} = b$. Тогда при $C_{-1}^L = C_0^L = C_{2^L}^L = C_{2^L+1}^L = 0$ введенные функции удовлетворяют однородным краевым условиям [13]

$$S^L(a) = \left(S^L\right)'(a) = S^L(b) = \left(S^L\right)'(b) = 0.$$

Обозначим полученное пространство V_L^0. Пусть сетка Δ^{L-1}, $L \ge 3$, получена из Δ^L посредством удаления внутренних нечетных узлов. Тогда соответствующее пространство V_{L-1}^0 с базисными функциями $N_i^{L-1}(x)$, не равными нулю на удвоенных носителях $[x_{2i-4}, x_{2i+4}]$, вложено в V_L^0. Двухмасштабное калибровочное соотношение между базисными функциями в V_L^0 и V_{L-1}^0 было получено в [10]

$$N_i^{L-1}(x) = \sum_{k=0}^{4} p_{i,k} N_{2i-2+k}^L(x), \tag{2}$$

где

$$\begin{aligned} p_{i,0} &= \frac{(x_{2i-1}-x_{2i-4})(x_{2i-3}-x_{2i-4})}{(x_{2i+2}-x_{2i-4})(x_{2i}-x_{2i-4})},\ p_{i,1} = \frac{x_{2i-1}-x_{2i-4}}{x_{2i+2}-x_{2i-4}},\\ p_{i,2} &= \frac{(x_{2i+1}-x_{2i+2})(x_{2i-1}-x_{2i-4})}{(x_{2i+2}-x_{2i-2})(x_{2i-4}-x_{2i+2})} + \frac{(x_{2i+1}-x_{2i-2})(x_{2i-1}-x_{2i+4})}{(x_{2i-2}-x_{2i+4})(x_{2i+2}-x_{2i-2})},\\ p_{i,3} &= \frac{x_{2i+1}-x_{2i+4}}{x_{2i-2}-x_{2i+4}},\ p_{i,4} = \frac{(x_{2i+3}-x_{2i+4})(x_{2i+1}-x_{2i+4})}{(x_{2i}-x_{2i+4})(x_{2i-2}-x_{2i+4})}. \end{aligned}$$

В частности, на левом краю интервала калибровочное соотношение между базисными функциями в V_L^0 и V_{L-1}^0 принимает вид

$$N_1^{L-1}(x) = \sum_{k=1}^{4} p_{1,k} N_k^L(x) \tag{3}$$

и

$$\begin{aligned} p_{1,1} &= \frac{x_1-x_0}{x_4-x_0},\ p_{1,2} = \frac{(x_1-x_0)(x_4-x_3)}{(x_0-x_4)^2} + \frac{(x_6-x_1)(x_3-x_0)}{(x_6-x_0)(x_4-x_0)},\\ p_{1,3} &= \frac{x_3-x_6}{x_0-x_6},\ p_{1,4} = \frac{(x_5-x_6)(x_3-x_6)}{(x_2-x_6)(x_0-x_6)}. \end{aligned}$$

Представление крайней правой широкой базисной функции зеркально отражает полученное выше представление

$$N_{2^{L-1}-1}^{L-1}(x) = \sum_{k=0}^{3} p_{2^{L-1}-1,k} N_{2^L-4+k}^L(x), \tag{4}$$

где

$$\begin{aligned} p_{2^{L-1}-1,0} &= \frac{(x_{2^L-5}-x_{2^L-6})(x_{2^L-3}-x_{2^L-6})}{(x_{2^L-2}-x_{2^L-6})(x_{2^L}-x_{2^L-6})},\ p_{2^{L-1}-1,1} = \frac{x_{2^L-3}-x_{2^L-6}}{x_{2^L}-x_{2^L-6}},\\ p_{2^{L-1}-1,2} &= \frac{(x_{2^L-1}-x_{2^L})(x_{2^L-4}-x_{2^L-3})}{(x_{2^L}-x_{2^L-4})^2} +\\ &+ \frac{(x_{2^L}-x_{2^L-3})(x_{2^L-1}-x_{2^L-6})}{(x_{2^L-6}-x_{2^L})(x_{2^L-4}-x_{2^L})},\ p_{2^{L-1}-1,3} = \frac{x_{2^L}-x_{2^L-1}}{x_{2^L}-x_{2^L-4}}. \end{aligned}$$

2 Построение кубических сплайн-вейвлетов

Второе, что лежит в основе всякого вейвлет-преобразования, — это масштабирующие (калибровочные) соотношения для самих вейвлетов. Такие соотношения известны для случаев ортогональных и биортогональных вейвлетов, что позволяет бесконечным итерированием получить их графическое представление, но не доставляет аналитического выражения, которое может быть использовано в качестве пробной функции, например, в методе типа Галеркина. В отличие от этого, полуортогональные [2, с. 112] вейвлеты определяются явным образом, как линейные комбинации базисных сплайнов на густой сетке. Характерным свойством полуортогональных вейвлетов, которое иногда полагается в основу численного метода [14] построения вейвлет-преобразования, является то, что вейвлет-разложение обеспечивает построение наилучшего среднеквадратического приближения сплайнов на густой сетке посредством сплайнов на прореженной сетке. Это дает преимущество при решении задачи сжатия дискретной числовой информации. Однако данное преимущество нивелируется при дифференцировании полученных сплайн-вейвлетных разложений. Поэтому оптимальным решением являются сплайн-вейвлеты, наследующие свойство наилучшего среднеквадратического приближения производных сплайнов на густой сетке посредством производных сплайнов на прореженной сетке. Впервые такие вейвлеты были изучены в случае кубических сплайнов [15], где были найдены вейвлеты третьей степени $\psi(x-i)\forall i$, для которых удовлетворяются условия ортогональности соответствующим базисным сплайнам $\varphi(x-j)\forall j$, относительно скалярного произведения со вторыми производными: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi''(x-i)\varphi''(x-j)dx = 0\ \forall i,j$. При этом оказывается, что эти вейвлеты имеют очень простую конструкцию, в частности, носитель меньше носителя классических полуортогональных сплайн-вейвлетов, а именно, $[0,3] \subset [0,7]$. Обобщение данной конструкции на случай неравномерной сетки было сделано в [4].

Пространство вейвлетов W_{L-1} определяется как ортогональное дополнение V^0_{L-1} до V^0_L в гильбертовом пространстве

$$H^2_0[a,b] = \{f \in C[a,b];\ f'' \in L^2[a,b],\ f(a) = f'(a) = f(b) = f'(b) = 0\},$$

в котором скалярное произведение определяется как

$$< f, g >= \int_a^b f''g''.$$

Характерным свойством функций $g \in W_{L-1}$ является то, что $g(x_{2i}) = 0$, $i = 1, 2, \ldots\ \ldots, 2^{L-1}$, откуда немедленно следует, что множество базисных вейвлетов удовлетворяет следующим масштабирующим соотношениям [4]:

$$\psi^{L-1}_k(x) = q_{k,0}N^L_{2k-2}(x) + N^L_{2k-1}(x) + q_{k,2}N^L_{2k}(x),\ k = 2, 3, \ldots, 2^{L-1} - 1, \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \psi^{L-1}_1(x) &= N^L_1(x) + q_{1,2}N^L_2(x), & (6)\\ \psi^{L-1}_{2^{L-1}}(x) &= q_{2^{L-1},0}N^L_{2^L-2}(x) + N^L_{2^L-1}(x), & (7) \end{aligned}$$

где

$$q_{k,0} = -\frac{N^L_{2k-1}(x_{2k-2})}{N^L_{2k-2}(x_{2k-2})},\ k = 2, 3, \ldots, 2^{L-1},$$

и

$$q_{k,2} = -\frac{N^L_{2k-1}(x_{2k})}{N^L_{2k}(x_{2k})},\ k = 1, 2, \ldots, 2^{L-1} - 1.$$

Очевидно, что носитель данных вейвлетов равен $[x_{2k-4}, x_{2k+2}] \cap [a, b]$, что меньше носителя кубического B-сплайна.

3 Построение вейвлет-преобразования

Удобно записать коэффициенты сплайна и базисные функции в V^0_L, как $C^L = \left[C^L_1, C^L_2, \ldots\ \ldots, C^L_{2^L-1}\right]^T$ и $\varphi^L = \left[N^L_1, N^L_2, \ldots, N^L_{2^L-1}\right]$. Тогда для любой функции $S^L_0(x) \in V^0_L$ уравнение (1) переписывается в виде $S^L_0(x) = \varphi^L(x)C^L$. Аналогично, в пространстве W_L запишем базисные вейвлет-функции в виде матрицы-строки, $\psi^L = \left[\psi^L_1, \psi^L_2, \ldots, \psi^L_{2^L}\right]$. Соответствующие вейвлет-коэффициенты будем собирать в вектор, $D^L = \left[D^L_1, D^L_2, \ldots, D^L_{2^L}\right]^T$. Для сетки Δ^{L-1}, $L \geq 3$, можно записать функции φ^{L-1} и ψ^{L-1} в виде линейных комбинаций функций φ^L, так как каждую широкую базисную функцию внутри отрезка аппроксимации можно построить из пяти (соответственно, из трех), а на краях интервала из четырех (соответственно, из двух) узких базисных функций $\varphi^{L-1} = \varphi^L P^L$ и $\psi^{L-1} = \varphi^L Q^L$, где элементы столбцов матрицы P^L составлены из коэффициентов калибровочных соотношений (2)–(4), тогда как элементы столбцов матрицы Q^L — из коэффициентов калибровочных соотношений для вейвлетов (5)–(7).

Поскольку любая функция в V^0_L может быть записана в виде суммы некоторой функции в V^0_{L-1} и некоторой функции в W_{L-1}, то справедливы равенства

$$\varphi^L(x)C^L = \varphi^{L-1}(x)C^{L-1} + \psi^{L-1}(x)D^{L-1} = \varphi^L(x)P^LC^{L-1} + \varphi^L(x)Q^LD^{L-1}.$$

Следовательно, коэффициенты C^L кубического сплайна на сетке Δ^L могут быть получены из коэффициентов C^{L-1} и D^{L-1} вейвлет-разложения на сетке Δ^{L-1} как $C^L = P^LC^{L-1} + Q^LD^{L-1}$ или, с использованием обозначения для блочных матриц (см. [2, с. 114]),

$$C^L = \left[P^L \mid Q^L\right] \left[\frac{C^{L-1}}{D^{L-1}}\right]. \tag{8}$$

Ниже представлен пример матрицы $\left[P^L \mid Q^L\right]$, соответствующий $L = 3$:

$$\left[P^3 \mid Q^3\right] = \left[\begin{array}{ccc|cccc} p_{1,1} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ p_{1,2} & p_{2,0} & 0 & q_{1,2} & q_{2,0} & 0 & 0 \\ p_{1,3} & p_{2,1} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ p_{1,4} & p_{2,2} & p_{3,0} & 0 & q_{2,2} & q_{3,0} & 0 \\ 0 & p_{2,3} & p_{3,1} & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & p_{2,4} & p_{3,2} & 0 & 0 & q_{3,2} & q_{4,0} \\ 0 & 0 & p_{3,3} & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right]. \tag{9}$$

Обратный процесс разбиения коэффициентов C^L на более грубую версию C^{L-1} и уточняющие коэффициенты D^{L-1} состоит в решении системы линейных уравнений (8). Имеет место следующая

Теорема 1. Пусть значения сплайн-коэффициентов C_i^{L-1} на прореженной сетке Δ^{L-1} вычислены из решения трехдиагональной системы линейных уравнений вида

$$\begin{aligned} N_1^{L-1}(x_2)C_1^{L-1} + N_2^{L-1}(x_2)C_2^{L-1} &= f_1, \\ N_{i-1}^{L-1}(x_{2i})C_{i-1}^{L-1} + N_i^{L-1}(x_{2i})C_i^{L-1} + N_{i+1}^{L-1}(x_{2i})C_{i+1}^{L-1} &= f_i,\ i = 2, \ldots, 2^{L-1} - 2, \\ N_{2^{L-1}-2}^{L-1}(x_{2^L-2})C_{2^{L-1}-2}^{L-1} + N_{2^{L-1}-1}^{L-1}(x_{2^L-2})C_{2^{L-1}-1}^{L-1} &= f_{2^{L-1}-1}, \\ f_i = S^L(x_{2i}),\ i = 1, \ldots, 2^{L-1} - 1. & \end{aligned} \tag{10}$$

Тогда значения вейвлет-коэффициентов равны

$$D_1^{L-1} = C_1^L - p_{1,1}C_1^{L-1},\ D_{2^{L-1}}^{L-1} = C_{2^L-1}^L - p_{2^{L-1}-1,3}C_{2^{L-1}-1}^{L-1}, \tag{11}$$

$$D_i^{L-1} = C_{2i-1}^L - p_{i-1,3}C_{i-1}^{L-1} - p_{i,1}C_i^{L-1},\ i = 2, 3, \ldots, 2^{L-1} - 1. \tag{12}$$

Разрешимость системы (10) следует из единственности соответствующего интерполяционного сплайна (см. [12, с. 141]).

Обозначим

$$\rho = \max(h_i/h_j, |i - j| = 1),$$

где $h_i = x_{2i+2} - x_{2i}$.

Известно (см.[12, с. 143]), что если $\rho < (1 + \sqrt{13})/2$, то система (10) будет со строгим диагональным преобладанием, и для решения системы рекомендуется применять метод прогонки. Если же это условие не выполняется, то следует прибегнуть к методу немонотонной прогонки, который корректен для всякой хорошо обусловленной матрицы. К сожалению, для $\rho \geq (3 + \sqrt{5})/2$ хорошую обусловленность матрицы нельзя гарантировать.

Поэтому в общем случае предлагается решать интерполяционную систему относительно величин $\left(S^{L-1}\right)''(x_{2i}) = M_i,\ i = 0, 1, \ldots, 2^{L-1}$, вида (см. [12, с. 100])

$$\begin{aligned} 2M_0 + M_1 &= \frac{6f_1}{h_0^2}, \\ \mu_i M_{i-1} + 2M_i + \lambda_i M_{i+1} &= d_i,\ i = 1, \ldots, 2^{L-1} - 1, \\ M_i + 2M_{i+1} &= \frac{6f_i}{h_i^2},\ i = 2^{L-1} - 1, \end{aligned} \tag{13}$$

причем

$$\lambda_i = h_i/(h_{i-1} + h_i), \mu_i = 1 - \lambda_i, \tag{14}$$

$$d_i = \frac{6}{h_{i-1} + h_i}\left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} - \frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}}\right). \tag{15}$$

Матрица полученной системы (13) есть матрица с диагональным преобладанием (см. [16, с. 78]). Такие матрицы не вырождены, и поэтому система уравнений относительно сплайн-коэффициентов M_i на прореженной сетке Δ^{L-1} имеет и притом единственное решение, которое находится методом прогонки. После определения M_i вычисление коэффициентов сплайна C_i^{L-1} проводится по формуле (см. [17]; [11, с. 96]), выражающей коэффициенты локально-аппроксимационного сплайна через значения аппроксимируемой функции в узлах сетки Δ^{L-1}:

$$C_i^{L-1} = f_i + \frac{1}{3}(h_i - h_{i-1})m_i - \frac{1}{6}h_i h_{i-1} M_i, \tag{16}$$

где

$$m_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} - \frac{h_i}{6}(2M_i + M_{i+1}) = \frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}} + \frac{h_{i-1}}{6}(M_{i-1} + 2M_i). \tag{17}$$

Заключение

Представленная в статье схема построения сплайн-вейвлетов, полуортогональных относительно скалярного произведения с производными, и получения для них алгоритма вейвлет-преобразования в виде решения трехдиагональной системы линейных алгебраических уравнений предоставляет новые возможности для создания вычислительно-эффективных алгоритмов построения и использования сплайн-вейвлетов на неравномерных сетках. В докладе в режиме "ручного счета" продемонстрировано применение построенного алгоритма к задаче численного дифференцирования. Полученные результаты используются при решении задачи прогнозирования. Результаты численных экспериментов позволяют обосновать существование наилучших прогнозных значений построенных сплайн-вейвлетов.

Список литературы

[1] Добеши И. Десять лекций по вейвлетам / Пер. с англ. Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика 2001.

[2] Столниц Э., ДеРоуз Т., Салезин Д. Вейвлеты в компьютерной графике / Пер. с англ. Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика 2002.

[3] Lyche T., Mørken K., Pelosi F. Stable, linear spline wavelets on nonuniform knots with vanishing moments // Computer Aided Geometric Design. 2009. V. 26. P. 203–216.

[4] Wang J. Interpolating cubic spline wavelet packet on arbitrary partitions // Journal of Computational Analysis and Applications. 2003. V. 5. № 1. P. 179–193.

[5] Шумилов Б.М. Алгоритм с расщеплением вейвлет-преобразования эрмитовых кубических сплайнов // Вестн. Томского гос. ун-та. Сер. Математика. Механика. 2010. № 4. С. 45–55.

[6] Ĉerná D., Finêk V. Cubic spline wavelets with short support for fourth-order problems // Applied Mathematics and Computation. 2014. V. 243. P. 44–56.

[7] Оселедец И.В. Применение разделенных разностей и B-сплайнов для построения быстрых дискретных преобразований вейвлетовского типа на неравномерных сетках // Матем. заметки. 2005. Т. 77. Вып. 7. С. 743–752.

[8] Макаров А.А. Один вариант сплайн-вэйвлетного разложения пространств B-сплайнов // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 10. 2009. Вып. 2. С. 59–71.

[9] Зимин А. В. Вэйвлетная схема, основанная на аппроксимации кубическими B-сплайнами на неравномерной сетке // Сб. Методы вычислений. 2008. Т. 23. С. 56–73.

[10] Демьянович Ю.К. Калибровочное соотношение для B-сплайнов на неравномерной сетке // Матем. моделирование. 2001. Т. 13. № 9. С. 98–100.

[11] Де Бор К. Практическое руководство по сплайнам. М.: Радио и связь. 1985.

[12] Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.

[13] Volkov Y.S. Obtaining a banded system of equations in complete spline interpolation problem via B-spline basis // Central European Journal of Mathematics. 2012. V. 10. № 1. P. 352–356.

[14] Lyche T., Mørken K., Quak E. Theory and algorithms for non-uniform spline wavelets, in "Multivariate Approximation and Applications", N. Dyn, D. Leviatan, D. Levin, and A. Pinkus,(eds), Cambridge University Press, Cambridge, 2001, P. 152–187.

[15] Wang J. Cubic spline wavelet bases of sobolev spaces and multilevel interpolation // Applied and Computational Harmonic Analysis. 1996. V. 3. № 2. P. 154–163.

[16] Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.

[17] de Boor C., Fix G. Spline approximation by quasi-interpolants // J. Approx. Theory. 1973. V. 8. P. 19–45.

Борис Михайлович Шумилов — д.ф.-м.н., проф. Томского государственного архитектурно-строительного университета;
e-mail: sbm05@yandex.ru.
Дата поступления — 30 апреля 2017 г.

АНАЛИЗ СМЕШАННЫХ ВАРИАЦИОННЫХ ПОСТАНОВОК НА БАЗЕ НЕКОНФОРМНЫХ КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНЫХ МЕТОДОВ

Э. П. Шурина[1,2], С. А. Трофимова[1,2], Н. Б. Иткина[1]

[1] *Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск*

[2] *Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.635.4

Предлагается и анализируется построение вычислительной схемы для задачи Дарси с тензорным коэффициентом проницаемости среды с использованием смешанной конечно-элементной аппроксимации на базе разрывного метода Галеркина (DG — Discontinuous Galerkin method). Исследуется влияние выбора численных потоков на устойчивость вычислительной схемы. Рассматривается построение иерархической базисной системы для скорости в специальном функциональном пространстве H^{div}. Приводится сравнительный анализ результатов, полученных с помощью смешанной формулировки, с результатами математического моделирования, полученными с использованием прямой вариационной постановки на базе разрывного метода Галеркина.

Ключевые слова: теория фильтрации, модель Дарси, смешанный конечно-элементный метод, разрывный метод Галеркина.

Введение

Смешанный метод конечных элементов на базе разрывного метода Галеркина [1] является одним из современных подходов для численного решения задачи Дарси. Основная идея данного метода заключается в нахождении как первичной, так и дуальной переменной, при этом осуществляется поиск критической точки соответствующего функционала над конечно-элементным пространством допустимых пробных функций, которое представимо в виде прямой суммы двух или более подпространств. Основная проблема применения смешанных вариационных постановок заключается в том, что критическая точка функционала — седловая точка [2, 3, 4]. Такой подход позволяет найти решение, соответствующее физике моделируемых процессов, и имеет ряд достоинств и недостатков.

Для некоторого класса задач, например, задачи Стокса, прямые вариационные постановки оказываются непрактичными, а смешанные методы показывают эффективные результаты и широко применимы [5, 6, 7]. Зачастую возникают ситуации, когда необходимо знать дуальную переменную (напряжение для задач эластичности, тепловой поток или скорость движения жидкости и т.п.), в этом случае смешанный метод позволяет сразу найти значения этой переменной, в отличие от прямых постановок, в которых дуальные переменные определяются a posteriori путем дифференцирования.

Применение смешанных вариационных постановок позволило R. Ewing, M. Wheeler и другим получить вычислительную схему повышенной устойчивости для моделирования вытеснения нефти из пористой среды [8, 9]. A. Masud и T.J.R. Hughes предложили стабилизированную конечно-элементную формулировку [10], в которой надлежащим образом «взвешенная» невязка была добавлена к стандартной смешанной формулировке для задачи Дарси. F. Brezzi, T.J.R. Hughes, L.D. Marini, A. Masud предложили устойчивую конечно-элементную вычислительную схему, основанную на разрывном методе Галеркина [11], для задачи Дарси со скалярным коэффициентом проницаемости среды, используя при этом комбинацию двух изначально неустойчивых методов Bassy-Rebay [12] и Baumann-Oden [13].

Несмотря на достоинства смешанных методов, существуют и очевидные недостатки. Из-за того, что одновременно аппроксимируются как первичные, так и дуальные переменные, происходит резкое увеличение количества степеней свободы, а соответственно, и рост размерности системы алгебраических уравнений.

Поскольку смешанная задача — это задача о седловой точке, то результирующая дискретная система будет неопределенной, т.е. содержащей как положительные, так и отрицательные собственные значения, и для её решения невозможно будет непосредственно использовать разложение холецкого или итерационные методы, такие как метод сопряженных градиентов. Третьим недостатком является то, что дискретные аналоги смешанных постановок менее устойчивы, чем дискретные аналоги прямых постановок, в которых выбор конечно-элементных пространств обусловлен только свойствами аппроксимации и удобством реализации. Из-за наличия такого рода недостатков эффективное построение смешанных вычислительных схем требует большего опыта, а также порождает необходимость детального анализа смешанных постановок, использования более жестких ограничений на построение конечно-элементных пространств, выбора специального базиса из заданных конечно-элементных подпространств, а также построения специального решателя для дискретного аналога.

1 Смешанная постановка на базе DG-метода

Пусть $\Omega \subset R^n$ — ограниченная n-мерная область с границей $\partial\Omega = \Gamma_D$, модель Дарси описывается краевой задачей с эллиптическим оператором:

$$-\nabla \cdot K\nabla p = f \quad \text{в } \Omega, \tag{1}$$

$$-K\nabla p \cdot n = g \quad \text{на } \partial\Omega, \tag{2}$$

которую можно записать в виде системы уравнений для скорости u и давления p:

$$\begin{cases} u = -K\nabla p & \text{в } \Omega \\ \nabla \cdot u = f & \text{в } \Omega \\ u \cdot n = g & \text{на } \partial\Omega \end{cases} \tag{3}$$

где K — симметричный положительно определенный тензор.

Введем бесконечномерное пространство Лебега $L_2(\Omega)$ со скалярным произведением $(v,w)_{L_2(\Omega)} = \int\limits_\Omega vwd\Omega$ и нормой $\|v\|_{L_2(\Omega)} = (v,v)^{1/2}_{L_2(\Omega)}$ и пространство векторных функций:

$$H_0^{div}(\Omega) = \{v \in (L_2(\Omega))^n, \nabla \cdot v \in L_2(\Omega), v \cdot n \mid_{\partial\Omega} = 0\}$$

Смешанная формулировка для задачи Дарси имеет вид:
найти $(u,p) \in H_0^{div}(\Omega) \times L_2(\Omega)$ такие, что:

$$\begin{cases} (K^{-1}u, v)_{L_2(\Omega)} - (p, \nabla \cdot v)_{L_2(\Omega)} = 0 & \forall v \in H_0^{div} \\ (\nabla \cdot u, q)_{L_2(\Omega)} = (f, q)_{L_2(\Omega)} & \forall q \in L_2(\Omega) \end{cases} \tag{4}$$

Пусть $\Xi_h = \{T\}$ — разбиение расчетной области Ω на конечные элементы T. Тогда $\Gamma = \bigcup\limits_T \partial T$ — множество границ элементов T, $\Gamma_0 = \Gamma \backslash \partial\Omega$. Введем конечно-элементные подпространства следующим образом:

$$V_h = \{v \in (L_2(\Omega))^n : \ v \mid_T \in (P_k(T))^n \ \forall T \in \Xi_h\} \tag{5}$$

$$Q_h = \{q \in L_2(\Omega) : \ q \mid_T \in P_l(T) \ \forall T \in \Xi_h\} \tag{6}$$

где $P_{k,l}(T)$ — пространства полиномов степени $k \geq 1$ и $l \geq 1$ соответственно, определенных на элементе T.

Определим скалярный численный поток $\hat{p} = (\hat{p}_T)_{T \in \Xi_h}$ и векторный численный поток $\hat{u} = (\hat{u}_T)_{T \in \Xi_h}$ как линейные операторы:

$$\hat{p} : \ H^1(\Xi_h) \to T(\Gamma)$$

$$\hat{u} : \ H^2(\Xi_h) \times [H^1(\Xi_h)]^2 \to [T(\Gamma)]^2$$

Функции из пространства $T(\Gamma) = \prod\limits_{T \in \Xi_h} L_2(\Omega)$ принимают два значения на множестве внутренних границ конечных элементов Γ_0 и одно значение на границе $\partial\Omega$.

Для того, чтобы определить численные потоки на границах конечных элементов, необходимо ввести операторы среднего значения $\{\cdot\}$ и скачка $[\cdot]$ скалярной и векторной функций. Пусть $e \in \Gamma_0$ — внутреннее

ребро, разделяющее элементы T_1 и T_2, для которых на ребре e определены внешние нормали n_1 и n_2 соответственно. Тогда операторы среднего значения и скачка скалярной функции $q \in T(\Gamma)$ можно определить следующим образом:

$$\{q\} = \frac{1}{2}(q_1 + q_2),$$
$$[q] = q_1 n_1 + q_2 n_2,$$

где $q_i = q\,|_{T_i}$, $i = 1, 2$. Операторы $\{\cdot\}$ и $[\cdot]$ для векторной функции $u \in [T(\Gamma)]^2$ примут вид:

$$\{u\} = \frac{1}{2}(u_1 + u_2),$$
$$[u] = u_1 \cdot n_1 + u_2 \cdot n_2$$

Выберем в качестве численных потоков среднее значение давления на границе конечного элемента и скачок скорости через границу [12], т.е.:

$$\hat{p} = \{p\} \quad \text{на } \Gamma = \Gamma^0 \cup \partial\Omega \tag{7}$$
$$\hat{u} = [u] \quad \text{на } \Gamma = \Gamma^0 \cup \partial\Omega \tag{8}$$

Введем дополнительный стабилизатор вида $\mu \int\limits_{\Gamma} [u] \cdot [v] d\Omega$ в первое уравнение системы, получим:

$$\begin{cases} \int\limits_{\Omega} K^{-1} u \cdot v d\Omega - \int\limits_{\Omega} p\nabla \cdot v d\Omega + \int\limits_{\Gamma_0} \{p\}[v] dS + \int\limits_{\Gamma_D} p(v \cdot n) dS + \mu \int\limits_{\Gamma_0} [u] \cdot [v] dS + \mu \int\limits_{\Gamma_D} u \cdot v dS = 0 \\ -\int\limits_{\Omega} \nabla \cdot u q d\Omega + \int\limits_{\Gamma_0} [u]\{q\} dS + \int\limits_{\Gamma_D} (u \cdot n) q dS = \int\limits_{\Omega} f q d\Omega - \int\limits_{\Gamma_D} g q dS \end{cases} \tag{9}$$

Теперь рассмотрим другой подход к выбору численных потоков. Выберем в качестве потоков среднее значение скорости на границе конечного элемента и скачок давления через границу, т.е.:

$$\hat{p} = [p] \quad \text{на } \Gamma = \Gamma^0 \cup \partial\Omega \tag{10}$$
$$\hat{u} = \{u\} \quad \text{на } \Gamma = \Gamma^0 \cup \partial\Omega \tag{11}$$

Подставим выражения для потоков в систему, а для дополнительной стабилизации вариационной постановки введем штраф на скачки давления p и скорости u, следуя подходу, описанному в [11]. Получим:

$$\begin{cases} \int\limits_{\Omega} K^{-1} u \cdot v d\Omega - \int\limits_{\Omega} p\nabla \cdot v d\Omega + \int\limits_{\Gamma_0} [p]\{v\} dS + \int\limits_{\Gamma_D} (pn) \cdot v dS - \theta \int\limits_{\Omega} (K^{-1} u + \nabla p) \cdot v d\Omega = 0 \\ -\int\limits_{\Omega} \nabla \cdot u q d\Omega + \int\limits_{\Gamma_0} \{u\}[q] dS + \int\limits_{\Gamma_D} u \cdot (qn) dS + \delta\theta \int\limits_{\Omega} (u + K\nabla p) \cdot \nabla q d\Omega = \int\limits_{\Omega} f q d\Omega - \int\limits_{\Gamma_D} g q dS \end{cases} \tag{12}$$

где θ — выбираемый параметр, $\delta = \pm 1$.

Прямая вариационная формулировка для решения задачи Дарси разрывным методом Галеркина в форме Baumann-Oden [1] имеет вид:

$$\int\limits_{\Omega} K\nabla p \cdot \nabla q d\Omega + \int\limits_{\Gamma_0} [p] \cdot \{K\nabla q\} - \{K\nabla p\} \cdot [q] dS + \int\limits_{\Gamma_D} pn \cdot K\nabla q - K\nabla p \cdot qn dS = \int\limits_{\Omega} f q d\Omega - \int\limits_{\Gamma_D} gn \cdot K\nabla q dS \tag{13}$$

2 Построение базисных систем в пространствах H^{div} и L_2

Рассмотрим один из способов построения иерархического конформного базиса в пространстве H^{div}. Базисные функции будем строить как результат тензорного произведения ортогональных полиномов, заданных на данном носителе, само пространство при этом представляется в виде суммы двух подпространств: подпространства дивергентно свободных функций и подпространства недивергентно свободных функций [14].

Диаграмма De Rhama'a:

$$H^1 \xrightarrow{\nabla} H^{curl} \xrightarrow{\nabla\times} H^{div} \xrightarrow{\nabla\cdot} L_2$$

Конформность подразумевает требование непрерывности нормальных компонент базисных функций на межэлементных границах.

Для построения базиса для скорости в пространстве H^{div} будем использовать ортогональные полиномы Лежандра. Рассмотрим прямоугольный мастер-элемент $T^{div}_{quad} = [-1,\ 1] \times [-1,\ 1]$.

Будем формировать базисные функции двух типов: дивергентно свободные edge-функции высокого порядка и базисные функции недивергентно свободные высокого порядка, определенные во внутренних узлах конечного элемента (bubble-функции).

Диаграмма De Rham'a предполагает, что конечный элемент T^{div}_{quad} будет оснащен полиномиальным пространством:

$$V_{quad} = \{v \in Q_{p^{b,1}+1,p^{b,2}} \times Q_{p^{b,1},p^{b,2}+1},\ v \cdot n\ |_{e_j} \in P_{p^{e_j}}(e_j),\ j = \overline{1,4}\} \tag{14}$$

где $p^{b,1},\ p^{b,2}$ — степени полиномов для bubble-функций, p^{e_j} — степени полиномов для edge-функций.

Следы нормальных компонент edge-функций $\gamma^{e_i}_k$ связаны с полиномами Лежандра L_k степени $k = 0, 1, ..., p^{e_i}$ на ребре $e_i,\ i = \overline{1,4}$ и равны нулю на остальных ребрах.

$$\gamma^{e_1}_k = l_0(\xi_1)L_k(\xi_2)\tau_1,\ 0 \le k \ge p^{e_1} \tag{15}$$

$$\gamma^{e_2}_k = l_1(\xi_1)L_k(\xi_2)\tau_1,\ 0 \le k \ge p^{e_2} \tag{16}$$

$$\gamma^{e_3}_k = L_k(\xi_1)l_0(\xi_2)\tau_2,\ 0 \le k \ge p^{e_3} \tag{17}$$

$$\gamma^{e_4}_k = L_k(\xi_1)l_1(\xi_2)\tau_2,\ 0 \le k \ge p^{e_4} \tag{18}$$

где $\tau_1 = (1, 0)$ и $\tau_2 = (0, 1)$ — направления, $l_0(\xi) = \frac{1-\xi}{2}$, $l_1(\xi) = \frac{1+\xi}{2}$.

Bubble-функции строятся таким образом, что их нормальные компоненты равны нулю на всех ребрах:

$$\gamma^{b,1}_{k_1,k_2} = l_{k_1}(\xi_1)L_{k_2}(\xi_2)\tau_1,\ 2 \le k_1 \ge p^{b,1} + 1,\ 0 \le k_2 \ge p^{b,2} \tag{19}$$

$$\gamma^{b,2}_{k_1,k_2} = L_{k_1}(\xi_1)l_{k_2}(\xi_2)\tau_2,\ 0 \le k_1 \ge p^{b,1},\ 2 \le k_2 \ge p^{b,2} + 1 \tag{20}$$

Рассмотрим построение квадратичного базиса для давления в пространстве L_2. Представим каждую базисную функцию в виде тензорного произведения одномерных квадратичных базисных функций, определенных на отрезке [0, 1]. Для построения одномерного базиса введем две разрывные функции и дополним одной непрерывной функцией. Квадратичные базисные функции для одномерного случая определяются формулами [15]:

$$\psi_1(\xi) = \frac{1}{2}(\xi - 1)(1 - 3\xi) \tag{21}$$

$$\psi_2(\xi) = -2\xi^2 + 2\xi \tag{22}$$

$$\psi_3(\xi) = \frac{1}{2}(3\xi^2 - 2\xi) \tag{23}$$

Биквадратичные базисные функции будут определяться по следующим формулам:

$$\varphi_1(\xi, \eta) = \psi_1(\xi)\psi_1(\eta) \tag{24}$$

$$\varphi_2(\xi, \eta) = \psi_2(\xi)\psi_1(\eta) \tag{25}$$

$$\varphi_3(\xi, \eta) = \psi_3(\xi)\psi_1(\eta) \tag{26}$$

$$\varphi_4(\xi, \eta) = \psi_1(\xi)\psi_2(\eta) \tag{27}$$

$$\varphi_5(\xi, \eta) = \psi_2(\xi)\psi_2(\eta) \tag{28}$$

$$\varphi_6(\xi, \eta) = \psi_3(\xi)\psi_2(\eta) \tag{29}$$

$$\varphi_7(\xi, \eta) = \psi_1(\xi)\psi_3(\eta) \tag{30}$$

$$\varphi_8(\xi, \eta) = \psi_2(\xi)\psi_3(\eta) \tag{31}$$

$$\varphi_9(\xi, \eta) = \psi_3(\xi)\psi_3(\eta) \tag{32}$$

3 Вычислительные эксперименты

Проведем вычислительные эксперименты для смешанной вариационной постановки (12) с параметром $\theta = 0.5$ и прямой постановки (13). Пусть задана расчетная область $\Omega = [0,\ 1] \times [0,\ 1]$ с вертикальными и горизонтальными прямоугольными включениями (см. Рис. 1). Рассмотрим систему уравнений (3) с краевыми условиями:

$$p|_{y=0} = p_1 = 0;$$
$$p|_{y=1} = p_2 = 1;$$
$$K\frac{\partial p}{\partial n}|_{x=0} = K\frac{\partial p}{\partial n}|_{x=1} = 0.$$

Правая часть $f = 0$, коэффициент проницаемости среды $K_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$, шаг сетки $h = 0.05$, $h/2 = 0.025$, $h/4 = 0.0125$. Базис для давления квадратичный (см. (24)–(32)), для скорости основан на полиномах Лежандра, включает edge-функции 0 и 1 порядков и bubble-функции 2 порядка.

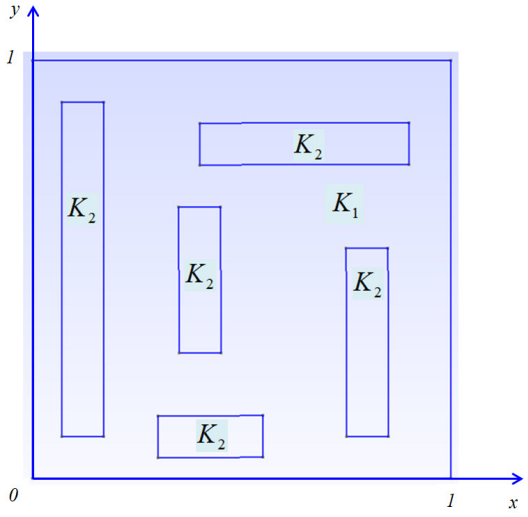


Рис. 1: Расчетная область с вертикальными и горизонтальными включениями

В таблицах 1 — 3 представлены результаты вычислительных экспериментов, полученных с использованием прямой и смешанной вариационных постановок, при различном коэффициенте проницаемости включений.

Таблица 1: Относительные погрешности давления $\frac{\|p_{h/4} - p_{h/2}\|_{L_2}}{\|p_{h/4}\|_{L_2}}$ в норме L_2

K_2	$\begin{bmatrix} 0.001 & 0 \\ 0 & 0.001 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.01 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.1 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 10.0 & 0 \\ 0 & 10.0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 100.0 & 0 \\ 0 & 100.0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1000.0 & 0 \\ 0 & 1000.0 \end{bmatrix}$
Прямая	1.1523e-3	1.1523e-3	4.68548e-4	8.52589e-4	1.8816e-3	2.13219e-3
Смешанная	3.25489e-4	2.98654e-4	1.52004e-4	1.62997e-4	3.49262e-4	3.88961e-4

Таблица 2: Относительные погрешности x-компоненты скорости $\frac{\|u^x_{h/4} - u^x_{h/2}\|_{L_2}}{\|u^x_{h/4}\|_{L_2}}$ в норме L_2

K_2	$\begin{bmatrix} 0.001 & 0 \\ 0 & 0.001 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.01 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.1 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 10.0 & 0 \\ 0 & 10.0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 100.0 & 0 \\ 0 & 100.0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1000.0 & 0 \\ 0 & 1000.0 \end{bmatrix}$
Прямая	8.63586e-2	8.27021e-2	6.68058e-2	1.29577e-1	2.21698e-1	2.41531e-1
Смешанная	8.6855e-2	8.57888e-2	7.87274e-2	9.29783e-2	1.00427e-1	1.00516e-1

Таблица 3: Относительные погрешности y-компоненты скорости $\frac{\|u^y_{h/4}-u^y_{h/2}\|_{L_2}}{\|u^y_{h/4}\|_{L_2}}$ в норме L_2

K_2	$\begin{bmatrix} 0.001 & 0 \\ 0 & 0.001 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.01 & 0 \\ 0 & 0.01 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.1 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 10.0 & 0 \\ 0 & 10.0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 100.0 & 0 \\ 0 & 100.0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1000.0 & 0 \\ 0 & 1000.0 \end{bmatrix}$
Прямая	2.70711e-2	2.46069e-2	1.29488e-2	1.87025e-2	3.97079e-2	4.44857e-2
Смешанная	2.63486e-2	2.47273e-2	1.48604e-2	1.38548e-2	1.80322e-2	1.84071e-2

На Рис. 2 представлены численные поля давления, полученные с использованием смешанной вариационной постановки, при коэффициенте проницаемости включений $K_2 = \begin{bmatrix} 10.0 & 0 \\ 0 & 10.0 \end{bmatrix}$.

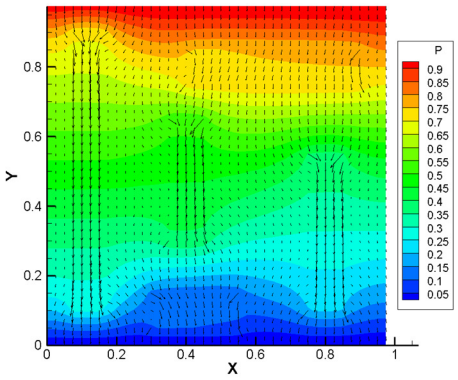


Рис. 2: Численные поля давления

Заключение

Построена вычислительная схема смешанной постановки на базе разрывного метода Галеркина для решения задачи Дарси с тензорным коэффициентом проницаемости среды. Исследовано влияние выбора численных потоков на устойчивость вычислительной схемы, в процессе которого обнаружено, что численные потоки F. Bassi и S. Rebay оказываются неэффективны [12]. Однако подход, описанный в [11], позволяет получить устойчивую схему, обладающую необходимыми свойствами. Проведенные исследования на классе модельных задач показали, что порядок аппроксимации метода существенно зависит от выбора численных потоков и построения адекватной базисной системы. Получено, что вычислительная схема с численными потоками F. Brezzi и T. J. R. Hughes устойчива к контрастным значениям тензорного коэффициента проницаемости среды. Сравнительный анализ относительных погрешностей вычисления давления и скорости (см. Табл. 1 – 3) полученных с использованием прямой и смешанной вариационных постановок показал, что применение смешанных методов не ухудшает точность вычисления, несмотря на увеличение размерности задачи на 30–40 %.

Список литературы

[1] Arnold D.N., Brezzi F., Marini L.D. Unified analysis of discontinuous Galerkin methods for elliptic problems // SIAM J. Numer. Anal. 2002. Vol. 39, No. 5. P. 1749–1779.

[2] Arnold D.N. Mixed finite element methods for elliptic problems // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1990. No. 82. P. 281–300.

[3] Brezzi F. On the existence, uniqueness, and approximation of saddle point problems arising from Lagrangian multipliers // RAIRO Anal. Numer. 1974. 8-32. P. 129–151.

[4] Arnold D.N., Brezzi F. Mixed and nonconforming finite element methods: implementation, postprocessing and error estimates // Math. Modelling and Numer. Anal. 1985. No. 19. P. 7–32.

[5] Arnold D.N., Brezzi F., Fortin M. A stable finite element for the Stokes equations // Calcolo. 1984. No. 21. P. 337–344.

[6] Crouzeix M., Raviart P.-A. Conforming and non conforming finite element methods for solving the stationary Stokes equations // RAIRO Anal. Numer. 1973. R3. P. 33–76.

[7] Ainsworth M., Coggins P. The stability of mixed hp-finite element methods for Stokes flow on high aspect ratio elements // Siam J. Numer. Anal. 2000. No. 38(5). P. 1721–1761.

[8] Darlow B., Ewing R., Wheeler M. Mixed finite element methods for miscible displacement in porous media // Six SPE Symposium on Reservoir Simulation. SPE 10501. New Orleans: 1982.

[9] Ewing R., Russel T., Wheeler M. Simulation of miscible displacement using mixed methods and a modified method of characteristics // Seventh SPE Symposium on Reservoir Simulation. SPE 12241. San Francisco: 1983.

[10] Masud A., Hughes T.J.R. A stabilized mixed finite element method for Darcy flow // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 2002. No. 191. P. 4341–4370.

[11] Brezzi F., Hughes T.J.R., Marini L.D., Masud A. Mixed discontinuous Galerkin methods for Darcy flow // Journal of Scientific Computing. 2005. Vol. 22, No. 1. P. 119–225.

[12] Bassi F., Rebay S. Discontinuous finite element high order accurate numerical solution of the compressible Navier-Stokes equatios // in Proceedings of the Conference "Numerical methods for fluid dynamics V". Oxford: Clarendon Press. April 3–6 1995. P. 295–302.

[13] Baumann C.E., Oden J.T. A discontinuous hp finite element method for convection-diffusion problems // Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg. 1999. No. 175. P. 311–341.

[14] Beuchler S., Pillwein V., Zaglmayr S. Sparsity optimized high order finite element functions for H(div) on simplices. // Numerische Mathematik. 2012. Vol. 22, No. 2. P. 197–225.

[15] Шокин Ю.И., Шурина Э.П.. Иткина Н.Б. Современные многосеточные методы. // Часть I. Многомасштабные методы: учеб. пособие – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2010. – 68 с.

Элла Петровна Шурина — д.т.н., профессор кафедры Вычислительных технологий Новосибирского государственного университета,
гл. науч. сотр. Института нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН;
e-mail: shurina@online.sinor.ru;
Светлана Алексеевна Трофимова — аспирант Новосибирского государственного технического университета,
инженер Института нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН;
e-mail: www.svetik-missy@mail.ru;
Иткина Наталья Борисовна — к.т.н., доцент кафедры Вычислительных технологий;
Новосибирский государственный технический университет;
e-mail: itkina.nat@yandex.ru.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ АЛГОРИТМЫ С ЛОКАЛЬНЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ДАННЫМИ В СИСТЕМЕ ФРАГМЕНТИРОВАННОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ LuNA

Г. А. Щукин[1,2]

[1] *Институт Вычислительной Математики и Математической Геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский Государственный Технический Университет, 630073, Новосибирск*

УДК 004.021

В работе описаны распределенные алгоритмы с локальными взаимодействиями Rope и Patch для динамического распределения данных в системе фрагментированного программирования LuNA. Задача нового алгоритма Patch — уменьшить длину и объем коммуникаций между узлами во время исполнения фрагментированной программы по сравнению с алгоритмом Rope. Коммуникации включают в себя все взаимодействия по распределению, обработке, пересылке и поиску данных. Patch учитывает зависимости между данными и поддерживает локальность зависимых данных при их распределении и миграции.

Ключевые слова: распределение данных, динамическая балансировка нагрузки, распределенные алгоритмы, технология фрагментированного программирования.

Введение

В настоящее время крупномасштабное численное моделирование широко используется в науке. Для достижения хорошей производительности и масштабируемости при исполнении прикладных параллельных программ численного моделирования требуются эффективные стратегии распределения ресурсов, динамическая балансировка нагрузки и другие средства. В итоге, сложность прикладного параллельного программирования приближается к сложности системного параллельного программирования. Для упрощения разработки прикладных параллельных программ численного моделирования была разработана система LuNA [1–6].

Система LuNA автоматически конструирует параллельную программу из частей (фрагментов) данных и вычислений. Каждый фрагмент вычислений (ФВ) в ходе исполнения LuNA-программы определяет независимый процесс. Каждый ФВ вычисляет выходные фрагменты данных (ФД) из значений своих входных ФД. Каждый фрагмент данных получает свое значение только один раз и является иммутабельным. Фрагментированная структура программы сохраняется в ходе исполнения, что позволяет производить миграцию фрагментов данных и вычислений между узлами мультикомпьютера и их параллельную обработку.

Эффективность исполнения фрагментированной LuNA-программы значительно зависит от качества распределения ресурсов. Ниже приведено описание распределенных алгоритмов с локальными взаимодействиями Rope и Patch, предназначенных для управления данными в системе LuNA.

1 Обзор родственных работ

Существует много методов декомпозиции данных для их дальнейшего распределения и динамической балансировки нагрузки при создании параллельных программ для вычислительных машин с распределенной памятью. Один из таких методов — “плиточные” массивы (tiled arrays, [7–10]), в котором массивы данных разбиваются на блоки — “плитки”, которые затем распределяются по узлам мультикомпьютера и обрабатываются параллельно. В [7] и [9] используются иерархические массивы плиток — каждая плитка в свою очередь может быть разбита на плитки меньшего размера, что позволяет создавать вложенные структуры

над плитками. В [10] используются разнородные плитки — каждая плитка может иметь разный размер по каждому измерению и не обязательно должна быть выровнена относительно других плиток. В [8] описано, как пользователь может задавать произвольное разбиение массива данных на плитки. Ограничения "плиточных" массивов — прямоугольная форма плиток, которая в определенных случаях может помешать достижению баланса нагрузки между плитками. Также, разбиение массива на плитки зачастую подразумевается статическим, без возможности динамического изменения распределенным способом в ходе исполнения программы.

Декомпозиция области данных на подобласти часто используется при распараллеливании задач молекулярной динамики и моделирования поведения частиц ([11–15]). В [11] и [13] двух или трехмерная область данных (область с частицами) разбивается на сетку подобластей путем помещения в нее промежуточных внутренних вершин; каждая подобласть содержит группу частиц и распределяется на отдельный вычислительный узел. В целях балансировки нагрузки форма подобластей (и соответственно число частиц в них) может меняться путем сдвига внутренних вершин. Балансировка может производиться распределенным способом, при этом требуется синхронизация между всеми узлами, разделяющими одну и ту же внутреннюю вершину (до 8 узлов в трехмерном случае). Существует ограничение - в целях корректной работы подобласти должны иметь выпуклую форму.

В [14] для декомпозиции области данных на подобласти используется рекурсивная ортогональная бисекция. Для балансировки нагрузки плоскости бисекции могут быть сдвинуты. Сдвиг плоскостей требует рекурсивной обработки дерева бисекции и может привести к коммуникациям между неограниченным числом разных (не обязательно соседних) вычислительных узлов.

В [12] на область данных накладывается сетка ячеек Вороного, каждая подобласть состоит из связного множества таких ячеек. Для балансировки загрузки ячейки могут перемещаться между соседними подобластями. В [15] прямоугольные ячейки используются схожим образом. Эти алгоритмы нацелены на класс задач молекулярной динамики и при расчете балансировки загрузки используют дополнительную информацию (такую как характеристики частиц), которая может быть недоступна в задачах другого класса.

Можно заключить, что желаемые свойства алгоритма распределения данных и балансировки нагрузки — распределенность, использование преимущественно локальных коммуникаций и применимость к широкому кругу задач.

2 Распределенные алгоритмы управления данными

Разработанный ранее алгоритм Rope [[1,2]] был предназначен для обработки произвольных (с учетом выбора соответствующей функции отображения данных на одномерные координаты) структур данных на вычислительных машинах с распределенной памятью. В статье представлен новый алгоритм Patch, улучшающий обработку регулярных сеток на вычислительных машинах с топологией "многомерная решетка". В следующих разделах представлено описание обоих алгоритмов и их сравнение.

2.1 Вспомогательные определения

В численных алгоритмах зачастую в качестве данных используются многомерные декартовые сетки (например, сетки в методе частиц-в-ячейках или в решении дифференциальных уравнений итерационными методами). Для декомпозиции сетка разбивается по нескольким измерениям на фрагменты данных (параллелепипеды), формируя сетку фрагментов данных. Фрагменты данных, находящиеся рядом в сетке по какой-либо декартовой координате, будем называть смежными. Два фрагмента данных называются соседними, если или значение одного из них вычисляется с использованием значения другого, или значения обоих используются для вычисления значения некоторого третьего фрагмента данных (т.е. такие фрагменты данных связаны информационными зависимостями). Во многих численных методах смежные фрагменты данных являются соседними и наоборот.

2.2 Алгоритм Rope

Алгоритм Rope использует отображение сетки фрагментов данных на одномерный числовой диапазон, например, с помощью пространственной кривой Гильберта (Рис. 1, [16]). Таким образом, каждый фрагмент данных получает свою (целочисленную) координату в диапазоне. Отображение на диапазон делается таким образом, чтобы соседние фрагменты данных отображались или на одну и ту же координату, или на близкие

координаты в диапазоне (использование кривой Гильберта обеспечивает это условие в некоторой степени). Отображение фиксируется перед началом исполнения фрагментированной программы и в ходе исполнения не меняется.

Для распределения фрагментов данных по узлам мультикомпьютера диапазон разбивается на сегменты по числу вычислительных узлов, каждый узел получает свой сегмент. Предполагается, что узлы объединены в линейную топологию, тогда отображение сегментов на узлы выполняется один-в-один. Если соседние фрагменты данных находятся на разных узлах (их координаты находятся в разных сегментах), это приводит к коммуникациям между этими узлами.

Резиденцией фрагмента данных называется такой вычислительный узел, в сегмент которого попадает координата этого ФД. Каждый ФД распределяется на свой узел-резиденцию и хранится на нем, а также может быть запрошен (скопирован) с него. Поиск резиденции каждого ФД заключается в поиске сегмента, содержащего координату искомого фрагмента данных, и может быть произведен с использованием только локальных взаимодействий между вычислительными узлами.

Подробнее про алгоритм Rope см. в [1,2].

2.3 Алгоритм Patch

Из-за отображения фрагментов данных на одномерный диапазон алгоритм Rope не позволяет полностью сохранять соседство фрагментов данных по всем измерениям в случае многомерных сеток (некоторые соседние фрагменты данных будут распределены на далеко отстоящие друг от друга в топологии узлы). Для устранения этого недостатка был разработан новый алгоритм Patch, использующий отображение k-мерной сетки фрагментов данных на n-мерную область координат. Область представляется в виде регулярной декартовой сетки ячеек, каждая ячейка имеет свою n-мерную координату. Отображение фрагментов данных на n-мерную сетку ячеек позволяет соседним фрагментам данных быть отображенными на одну и ту же или смежные ячейки, лучше сохраняя отношение соседства, чем в Rope. Как и в Rope, отображение фиксируется на все время исполнения фрагментированной программы.

Предполагая, что вычислительные узлы объединены в топологию “решетка”, сетка ячеек разбивается на домены ячеек, по одному домену на узел (Рис. 2, [16]). Как и в случае с Rope, отображение доменов на узлы выполняется один-в-один. В общем случае, домены ячеек могут быть любой формы (не обязательно параллелепипеды), но должны учитываться следующие ограничения:

- Не допускается пустых доменов (не содержащих ни одной ячейки)
- Площадь границы доменов должна быть минимальна, чтобы уменьшить объем коммуникаций между доменами (и соответственно между соседними узлами)
- Домен каждого вычислительного узла должен быть смежен (иметь смежные ячейки) с доменами соседних с ним в топологии вычислительных узлов

Эти ограничения служат для обеспечения корректности распределения и поиска фрагментов данных, о которых будет рассказано дальше.

В системе LuNA каждый фрагмент данных и вычислений распределяется по вычислительным узлам мультикомпьютера динамически, т.е. по ходу исполнения программы. Т.к. распределение фрагментов данных по узлам не статическое, а может меняться со временем (например, из-за динамической балансировки нагрузки), требуется способ динамического определения текущего местоположения фрагментов данных. Узел, которому в данный момент принадлежит ячейка, на которую отображается фрагмент данных, будем называть резиденцией этого фрагмента данных. Если известна резиденция фрагмента данных (узел), то этот фрагмент данных должен храниться (быть создан) на этом узле, а также может быть запрошен (скопирован) с него при необходимости. Таким образом, проблема распределения и поиска фрагмента данных сводится к проблеме определения его резиденции с любого узла.

Для возможности определения резиденции фрагмента данных каждая ячейка хранит информацию о смежности — текущее местоположение (номер узла) всех смежных с ней ячеек в сетке ячеек. Используя эту информацию, возможно определить резиденцию любого фрагмента данных, начиная с любого узла, за конечное число шагов. Сначала вычисляется координата ячейки, на которую отображен искомый фрагмент данных. Ввиду неизменности отображения фрагментов данных на ячейки, эта координата — константа. Затем проверяется, содержит ли текущий узел ячейку с нужной координатой. Если ячейка найдена, поиск

резиденции завершен. Иначе на узле находится ячейка, ближайшая к искомой, и поиск продолжается с узла, смежного с этой ячейкой в направлении искомой ячейки.

Преимущества алгоритма Patch:

- Сохранение отношения соседства фрагментов данных по всем измерениям (соседние фрагменты данных находятся или на одном и том же, или соседних узлах, что приводит к сокращению объема и длины коммуникаций)
- Хорошо подходит для вычислительных систем с реальной топологией “решетка”
- Худшее время распределения или поиска фрагмента данных пропорционально диаметру вычислительной сети, в то время как у Rope оно пропорционально числу вычислительных узлов

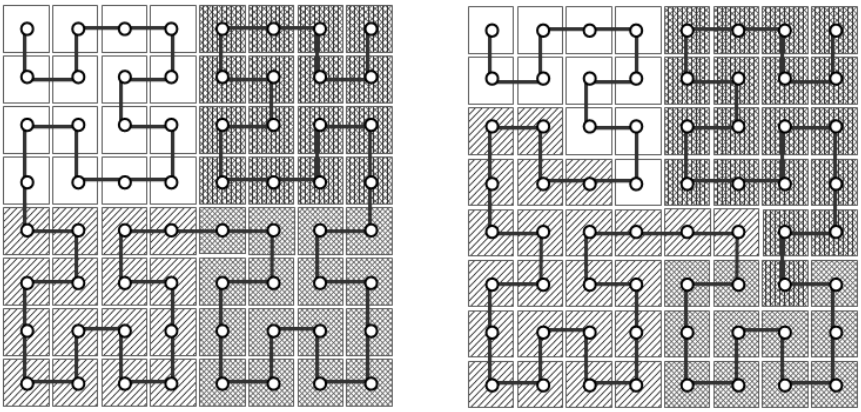


Рис. 1: Распределение данных по вычислительным узлам в алгоритме Rope с помощью кривой Гильберта, изначальное (слева) и после возможной балансировки нагрузки (справа). Разные цвета обозначают разные вычислительные узлы.

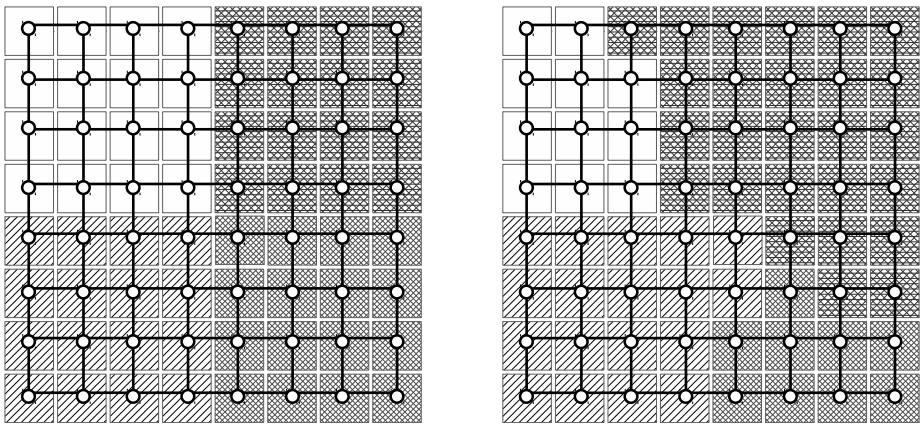


Рис. 2: Распределение данных (ячеек) по вычислительным узлам в алгоритме Patch, изначальное (слева) и после возможной балансировки нагрузки (справа). Разные цвета обозначают разные вычислительные узлы.

2.4 Динамическая балансировка нагрузки в алгоритме Patch

Для динамической балансировки нагрузки в алгоритмах Rope и Patch используется диффузионный подход. Все вычислительные узлы мультикомпьютера разбиваются на перекрывающиеся группы, каждая группа состоит из центрального узла группы и всех смежных с ним узлов в топологии. Центральный узел каждой группы может одновременно быть смежным узлов в других группах, что обеспечивает взаимодействие

между группами. Для каждого узла рассчитывается значение его нагрузки. В алгоритме Rope нагрузка рассчитывается для каждой координаты из сегмента на узле, в Patch — для каждой ячейки из домена на узле. Значение нагрузки каждого узла равно сумме значений нагрузки его координат/ячеек. Для расчета значения нагрузки координаты/ячейки могут использоваться различные формулы и критерии, например, суммарный текущий объем фрагментов данных на узле, отображенных на эту координату/ячейку. Каждому узлу известны значения его нагрузки и нагрузки его соседей в группе. Узел считается перегруженным, если значение его нагрузки больше значения средней нагрузки в группе (с учетом некоторого порога дисбаланса), и недогруженным, если меньше. Если центральный узел группы перегружен, он должен передать свою избыточную нагрузку недогруженным узлам в группе.

В алгоритме Rope для балансировки нагрузки использовался сдвиг границы между смежными сегментами. В алгоритме Patch используется миграция ячеек между смежными доменами, от перегруженного узла на недогруженный. Ячейки для миграции выбираются таким образом, чтобы, во-первых, их суммарное значение нагрузки было примерно равно значению нагрузки, которую нужно отдать на недогруженный узел, и, во-вторых, число граничных клеток между доменами оставалось минимальным (т.к. это число прямо пропорционально объему возможных коммуникаций между доменами и, соответственно, узлами). Для этого используется жадный алгоритм, выбирающий группу смежных ячеек на границе доменов, соответствующую вышеуказанным критериям.

Для синхронизации одновременной пересылки ячеек между многими узлами используется механизм транзакций. Каждая транзакция заключает в себя пересылку одной группы ячеек от одного узла другому. В каждый момент времени каждый узел может выполнять только одну транзакцию (прием или отправка ячеек). Для определения порядка исполнения транзакций и предотвращения дедлоков каждой транзакции назначается случайный приоритет; транзакция с максимальным приоритетом на узле выполняется в первую очередь. Так как миграция ячеек может потребовать изменение информации о смежности в ячейках на многих узлах (не только участвующих в приеме и отправке ячеек), таким узлам отправляются специальные сообщения для поддержания корректности этой информации.

Передача единичных групп ячеек вместо, например, сдвига всей границы домена по какой-либо координате обеспечивает более высокую точность балансировки нагрузки. Т.к. каждая миграция ячеек требует синхронизации (блокирования) только двух узлов, множество миграций может проводиться параллельно, ускоряя процесс балансировки. Для динамической балансировки нагрузки требуются только локальные взаимодействия между соседними вычислительными узлами, что делает алгоритм балансировки масштабируемым на большое число узлов.

3 Тесты

Для сравнения алгоритмов использовалась LuNA-реализация решения дифференциального уравнения Пуассона на трехмерной сетке итерационным методом Якоби. Тесты проводились на кластере МВС-10П МСКЦ РАН с двумя процессорами Intel Xeon E5-2690 на вычислительный узел и транспортной сетью Infiniband FDR. Для компиляции программы использовался компилятор C++ GCC 5.3 и MPI библиотека MPICH 3.2.

3.1 Результаты тестирования

Для тестирования регулярная сетка размером 512^3 была разбита на 32^2 трехмерных фрагмента по двум координатам. Измерения проводились до 256 процессов (N). До 4-х процессов могло помещаться на одном вычислительном узле кластера. Для алгоритма Rope процессы были объединены в линейную топологию, для Patch использовалась топология “двумерная решетка”.

Измерялись следующие характеристики исполнения фрагментированной программы: общее время выполнения (ET, секунды), средняя дистанция пересылки фрагмента данных процессом (AvgSD, процессы), средний суммарный объем фрагментов данных, отправленных процессом (AvgSD, мегабайты) и среднеквадратичное отклонение среднего времени полезных вычислений на процессе (AvgCTD, секунды).

Таблица 1 показывает результаты для случая равномерной загрузки процессов данными и вычислениями. Алгоритм Patch демонстрирует практически одинаковое с Rope общее время работы, и, ожидаемо, показывает намного меньшие среднюю дистанцию пересылки и суммарный объем отправленных фрагментов данных. Превосходящие результаты Patch объясняются лучшим учетом соседства фрагментов данных чем в Rope.

Таблица 1: Сетка 512^3, 32^2 фрагментов, равномерное распределение.

N	1	2	4	8	16	32	64	128	256
ET, Rope	773.8	407.4	217.8	111.9	57.9	31.7	19.7	14.7	17.4
ET, Patch	769.0	409.4	221.3	113.4	68.8	31.7	19.4	12.3	13.6
AvgSD, Rope	0	1	1.5	1.8	2.5	3.24	4.84	6.41	9.66
AvgSD, Patch	0	1	1	1	1	1	1	1	1
AvgSS, Rope	0	20.2	20.2	20.2	15.1	12.6	8.8	6.9	4.7
AvgSS, Patch	0	20.2	20.2	20.2	15.1	12.6	8.8	6.9	4.7

Таблица 2: Сетка 512^3, 32^2 фрагментов, неравномерное распределение.

N	2	4	8	16	32	64	128	256
AvgCTD, Rope	53.4	15.99	55.68	47.21	25.18	13.51	7.44	3.93
AvgCTD, Patch	58.11	23.7	56.49	33.33	21.39	12.56	7.01	3.71
AvgSD, Rope	1	1.19	1.42	1.48	1.46	1.80	1.30	1.44
AvgSD, Patch	1	1.03	1.18	1.27	1.31	1.24	1.16	1.04
AvgSS, Rope	7787.6	6246.7	2821.6	1032.2	1192.6	598.0	566.9	392.0
AvgSS, Patch	9917.9	4955.9	2225.3	1226.2	714.6	444.1	193.8	91.8

Для тестирования динамической балансировки нагрузки был создан дизбаланс путем начального распределения данных и вычислений только на половину работающих процессов. Целью балансировки было постараться динамически перераспределить данные и вычисления на все процессы для их равномерной загрузки. Результаты показаны в таблице 2. Алгоритм Patch в общем демонстрирует меньшее отклонение времени полезных вычислений, чем Rope, что означает, что ему удалось равномернее загрузить процессы данными и вычислениями. Опять же из-за лучшего учета отношения соседства Patch показывает меньшие среднюю дистанцию пересылки и суммарный объем отправленных фрагментов данных, чем Rope. Значительное уменьшение средней дистанции пересылки и увеличение объема отправленных данных, по сравнению с результатами в таблице 1, связано с учетом вклада от миграции фрагментов данных при балансировке, которая происходила между соседними узлами.

Заключение

Предложен распределенный алгоритм с локальными взаимодействиями Patch для динамического распределения данных и балансировки нагрузки в системе фрагментированного программирования LuNA. Проведено сравнительное тестирование алгоритма на реальной вычислительной задаче. Показаны преимущества разработанного алгоритма. В направления дальнейшей работы входит оптимизация и тестирование алгоритма на вычислительных задачах разных классов.

Список литературы

[1] Malyshkin V.E., Perepelkin V.A., Schukin G.A. Scalable distributed data allocation in LuNA fragmented programming system // The Journal of Supercomputing. 2017. V. 73, iss. 2. P. 726–732.

[2] Malyshkin V.E., Perepelkin V.A., Schukin G.A. Distributed Algorithm of Data Allocation in the Fragmented Programming System LuNA // PaCT 2015, LNCS. 2015. V. 9251. P. 80–85.

[3] Malyshkin V.E., Perepelkin V.A. LuNA Fragmented Programming System, Main Functions and Peculiarities of Run-Time Subsystem // PaCT 2011, LNCS. 2011. V. 6873. P. 53–61.

[4] Malyshkin V.E., Perepelkin V.A. Optimization Methods of Parallel Execution of Numerical Programs in the LuNA Fragmented Programming System // The Journal of Supercomputing. 2012. V. 61, iss. 1. P. 235–248.

[5] Malyshkin V.E., Perepelkin V.A. The PIC Implementation in LuNA System of Fragmented Programming // The Journla of Supercomputing. 2014. V. 69, iss. 1. P. 89–97.

[6] Kraeva M.A., Malyshkin V.E. Assembly Technology for Parallel Realization of Numerical Models on MIMD-Multicomputers // Journal Future Generation Computer Systems. 2001. V. 17, iss. 6. P. 755–765.

[7] Gonzalez-Escribano A., Torres Y., Fresno J., Llanos D.R. An Extensible System for Multilevel Automatic Data Partition and Mapping // Journal IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems. 2014. V. 25, iss. 5. P. 1145–1154.

[8] Chamberlain B.L., Deitz S.J., Iten D., Choi S.-E. User-Defined Distributions and Layouts in Chapel: Philosophy and Framework // HotPar'10, 2nd USENIX conference on Hot topics in parallelism. 2010. P. 12.

[9] Bikshandi G., Guo J., Hoeflinger D., Almasi G., Fraguela B.B., Garzar?n M.J., Padua D., von Praun C. Programming for Parallelism and Locality with Hierarchically Tiled Arrays // PPoPP '06, 11th ACM SIGPLAN symposium on Principles and Practice of Parallel Programming. 2006. P. 48–57.

[10] Furtado P., Baumann P. Storage of Multidimensional Arrays Based on Arbitrary Tiling // 15th International Conference on Data Engineering. 1999. P. 480–489.

[11] Begau C., Sutmann G. Adaptive dynamic load-balancing with irregular domain decomposition for particle simulations // Journal Computer Physics Communications. 2015. V. 190. P. 51–61.

[12] Fattebert J.-L., Richards D.F., Glosli J.N. Dynamic load balancing algorithm for molecular dynamics based on Voronoi cells domain decompositions // Journal Computer Physics Communications. 2012. V. 183, iss. 12. P. 2608–2615.

[13] Deng Y., Peierls R.F., Rivera C. An Adaptive Load Balancing Method for Parallel Molecular Dynamics Simulations // Journal of Computational Physics. 2000. V. 161, iss. 1. P. 250–263.

[14] Fleissner F., Eberhard P. Parallel load-balanced simulation for short-range interaction particle methods with hierarchical particle grouping based on orthogonal recursive bisection // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2008. V. 74, iss. 4. P. 531–553.

[15] Hayashi R., Horiguchi S. Efficiency of dynamic load balancing based on permanent cells for parallel molecular dynamics simulation // IPDPS 2000, 14th International Parallel and Distributed Processing Symposium. 2008. P. 85–92.

[16] Веб-страница с демонстрацией работы алгоритмов Rope и Patch: http://ssd.sscc.ru/en/algorithms.

Георгий Анатольевич Щукин — мл. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: schukin@ssd.sscc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГРАВИТАЦИОННЫХ ПОТОКОВ В СТРАТИФИЦИРОВАННОЙ АТМОСФЕРЕ С ИНВЕРСИЕЙ

М. С. Юдин

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 551. 51+519. 6

В работе исследуется влияние стратификации и инверсии на приземное давление при распространении гравитационного течения (атмосферного холодного фронта) над плоской орографией с помощью конечно-разностной негидростатической модели динамики атмосферы. С целью сравнения с имеющимися в литературе данными моделирования, физический процесс считается невязким и адиабатическим, исключено также влияние орографии. В модели используется система уравнений Навье — Стокса в приближении Буссинеска. Эффективная численная реализация системы уравнений достигается введением искусственной сжимаемости. Поверхность фронта описывается в модели специальным уравнением. Приводятся результаты расчетов приземного давления для нейтральной и устойчивой стратификации при наличии в атмосфере слоя инверсии. При устойчивой стратификации, по сравнению с нейтральной, фронт движется быстрее и имеется резкий скачок давления гораздо раньше, чем фронт доходит до точки наблюдения. Это явление описывается современной теорией атмосферных фронтов. Результаты расчетов находятся также в качественном согласии с данными моделирования по конечноразностной модели с исходной генерацией фронта протяженным источником холодного воздуха.

Ключевые слова: гравитационный поток, стратификация, инверсионный слой.

1 Introduction

A front in the atmosphere is a phenomenon of gravitational flows that take place in variety of forms: breeze fronts, storm flows, squall-lines, etc [1]. Phenomena of great importance are cold atmospheric fronts propagating near the surface with high speeds. These fronts may be retarded and changed in shape under the influence of the underlying surface and stratification of the atmosphere. A change in the shape of a frontal system under the influence of inversion layers is a commonly observed phenomenon[2, 3]. Atmospheric gravity currents occupy a wide range of length scales from several meters to thousands of kilometers. These currents may be subdivided into classes varying from micro- to macro-scales. Mesoscale flows are defined to lie approximately in the interval from two to two thousand kilometers[4]. The flows of interest in the present study are mesoscale currents. These flows are relatively shallow: they belong to the atmospheric boundary layer and range in an interval of only a few kilometers from the surface, in the lower atmosphere. An important paper in the literature on theoretical and numerical studies of atmospheric fronts is [5]. Two distinct approaches can be recognized in the numerical simulation of front propagation. In one approach, the front to be calculated is considered to be a gravity current driven by a cold air source [3]. In the other, the front surface is considered to be a passive scalar, a tracer, to distinguish between warm and cold air masses [6]. The purpose of the present paper is to estimate the stratification and inversion effects on surface pressure in the propagation of an atmospheric gravity current (cold front) over flat terrain. The study is carried out with a non-hydrostatic finite-difference model of atmospheric dynamics. Artificial compressibility is introduced into the model in order to make its equations hyperbolic, which greatly simplifies the formulation of the boundary conditions and the numerical treatment of the model[7]. For comparison with the available simulation data, the physical processes under study are assumed to be non-viscous and adiabatic. The influence of orography is also eliminated. The results of simulations of surface pressure under neutral stratification and stable stratification with an inversion layer are presented.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00137)и Президиума РАН (код проекта I. 33П, II. 2П/3-2 и II. 2П/3-3).

2 Model equations

The Navier — Stokes equations for a compressible air flow are used here for the calculation of gravity flows in a stratified atmosphere. In a three-dimensional statement, the basic equations of motion, heat, moisture and continuity, written in a terrain-following coordinate system, are as follows:

$$\frac{dU}{dt} + \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial (G^{13}P)}{\partial \eta} = f_1(V - V_g) - f_2 W + R_u, \tag{1}$$

$$\frac{dV}{dt} + \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial (G^{23}P)}{\partial \eta} = -f_1(U - U_g) + R_v, \tag{2}$$

$$\frac{dW}{dt} + \frac{1}{G^{1/2}}\frac{\partial P}{\partial \eta} + \frac{gP}{C_s^2} = f_2 U + g\frac{G^{1/2}\bar{\rho}\theta'}{\bar{\theta}} + R_w \tag{3}$$

$$\frac{d\theta}{dt} = R_\theta, \qquad \frac{ds}{dt} = R_s, \tag{4}$$

$$\frac{1}{C_s^2}\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \eta}\Big(G^{13}U + G^{23}V + \frac{1}{G^{1/2}}W\Big) = \frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{G^{1/2}\bar{\rho}\theta'}{\bar{\theta}}\Big), \tag{5}$$

Here $U = \bar{\rho}G^{1/2}u$, $V = \bar{\rho}G^{1/2}v$, $W = \bar{\rho}G^{1/2}w$, $P = G^{1/2}p'$, where p', θ' are deviations from a basic state pressure $\bar{p}$ and potential temperature $\bar{\theta}$, s is the specific humidity, C_s is the sound wave speed, u_g, v_g are components of a geostrophic wind representing the synoptic part of the pressure, η is a terrain-following coordinate transformation:

$$\eta = \frac{H(z - z_s)}{(H - z_s)}, \tag{6}$$

z_s is the surface height, H is the height of the top of the model domain. Here $H = const$,

$$G^{1/2} = 1 - z_s/H, \quad G^{13} = \frac{1}{G^{1/2}}\Big(\frac{\eta}{H} - 1\Big)\frac{\partial z_s}{\partial x}, \quad G^{23} = \frac{1}{G^{1/2}}\Big(\frac{\eta}{H} - 1\Big)\frac{\partial z_s}{\partial y}. \tag{7}$$

For an arbitrary function φ

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial u\varphi}{\partial x} + \frac{\partial v\varphi}{\partial y} + \frac{\partial \omega\varphi}{\partial \eta}, \tag{8}$$

where

$$\omega = \frac{1}{G^{1/2}}W + G^{13}u + G^{23}v. \tag{9}$$

The terms R_u, R_v, R_ω, R_θ, R_s refer to subgrid-scale processes. As a turbulence parameterization, we use the simple scheme:

$$K_m = \begin{cases} l^2\sqrt{\frac{1}{2}D^2(1 - \mathrm{Ri})}, & \mathrm{Ri} < 1, \\ 0, & \mathrm{Ri} \geq 1, \\ \mathrm{Ri} = \frac{g(d\ln\theta/dz)}{D^2/2}, & D = \nabla\underline{u} + \underline{u}\nabla. \end{cases}$$

A more detailed description of the model can be found, for instance, in[8]. We consider here a small-scale nonhydrostatic model developed for simulations mainly in meso- and microscales. In the present study, a two-dimensional finite-difference version of the model is employed[9].

3 Approximations

The advective terms in the model described above are approximated by difference operators based on conservation laws of the original equation system. The exact form of the equations is given in[8]. The time approximation is similar to that proposed in[9]. It is also described in paper[10]. The advective terms in the model described above are approximated by the following difference operators:

$$\delta_d\varphi = [\varphi(d + \Delta d/2) - \varphi(d - \Delta/2)]/\Delta d, \tag{10}$$

$$\varphi^d = [\varphi(d + \Delta d/2) + \varphi(d + \Delta d/2)]/2, \tag{11}$$

$$ADVX = \delta_x(u^x(\rho^x u^x)) + \delta_y(v^x(\rho^x u)^y) + \delta_z(\varpi^x(\rho^x u)^z) \tag{12}$$

$$ADVY = \delta_x(u^y(\rho^y v)^x) + \delta_y(v^y(\rho^y v)^y) + \delta_z(\varpi^y(\rho^y v)^z) \tag{13}$$

$$ADVZ = \delta_x(u^z(\rho^z w)^x) + \delta_y(v^x(v(\rho^z w)^y) + \delta_z(\varpi^z(\rho^z w)^z) \tag{14}$$

$$ADVT = \delta_x(u(\rho\Theta)^x) + \delta_y(v(\rho\Theta)^y) + \delta_z(\varpi(\rho\Theta)^z) \tag{15}$$

4 Numerical experiments on idealized front propagation over flat terrain

In this section the results of a series of calculations are presented to simulate the stratification and inversion effects on the surface pressure in the propagation of an atmospheric gravity current (cold front) over flat terrain. The model parameters are taken from paper[3]. The calculation domain is 25x25 km. In contrast to[3], where the front is generated by a volume of cold air, in the present study the front is initially given in the form of a step- function of 400 m in height. The front surface is treated by an efficient semi-Lagrangian scheme [11, 8]. Figure 1 shows the surface pressure in the middle of the simulation domain, at 12 km. Neutral stratification is adopted in the computation of the front. Figure 2 shows the results of calculations of the surface pressure at the same point 12 km under stable stratification with an inversion layer. Under stable stratification the front moves faster and shows an abrupt pressure jump at the point of observation [2]. The introduction of an inversion layer into the atmosphere increases the pressure further.

5 Conclusions

The change in stratification from neutral to stable in the propagation of a cold atmospheric front shows a time evolution of surface pressure that is in good agreement with the available observational data [3]. Under stable stratification the front moves faster and shows an abrupt pressure jump long before the front reaches the point of observation. This fact is in accordance with the present-day theory of atmospheric fronts [2]. The introduction of an inversion layer into the atmosphere increases the pressure further and its behavior is also in accordance with the simulation results obtained by a finite-difference model with initial generation of the front by an extended source of cold air [3].

Список литературы

[1] Pielke R. A. Mesoscale Meteorological Modeling. – Orlando: Academic Press, 1984.

[2] Charba J. , Application of a gravity current model to analysis of squall-line gust fronts // Mon. Wea. Rev. – 1974. – Vol. 102, № 2. – P. 140–156.

[3] Bischoff-Gauss, I. , Gross, G. , Numerical studies on cold fronts. Part 1: Gravity flows in a neutral and stratified atmosphere//Meteorol. Atmos. P. – 1989. – Vol. 40. – P. 150–158.

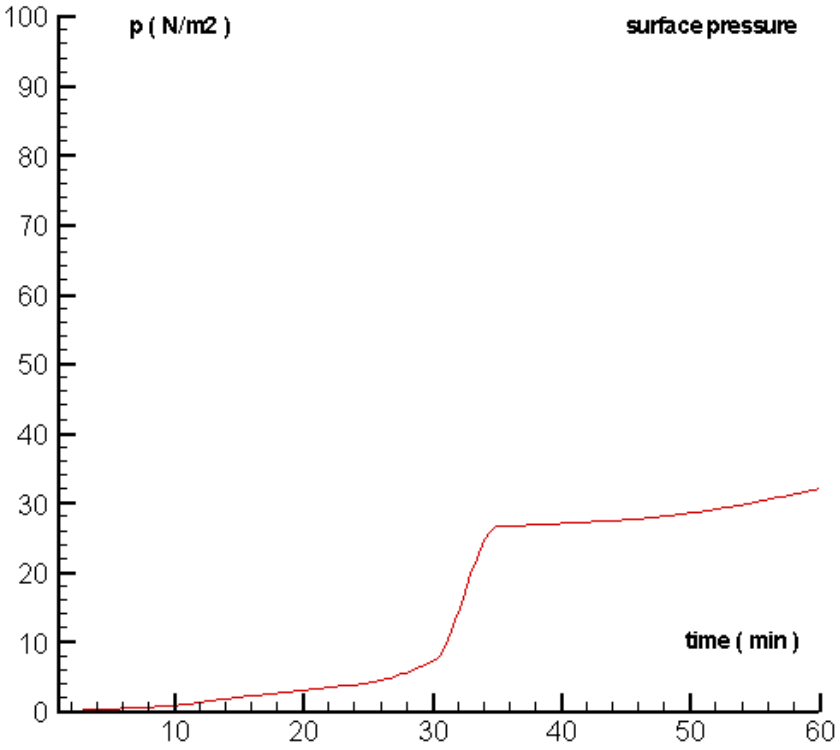


Рис. 1: Surface pressure at 12 km. Neutral stratification

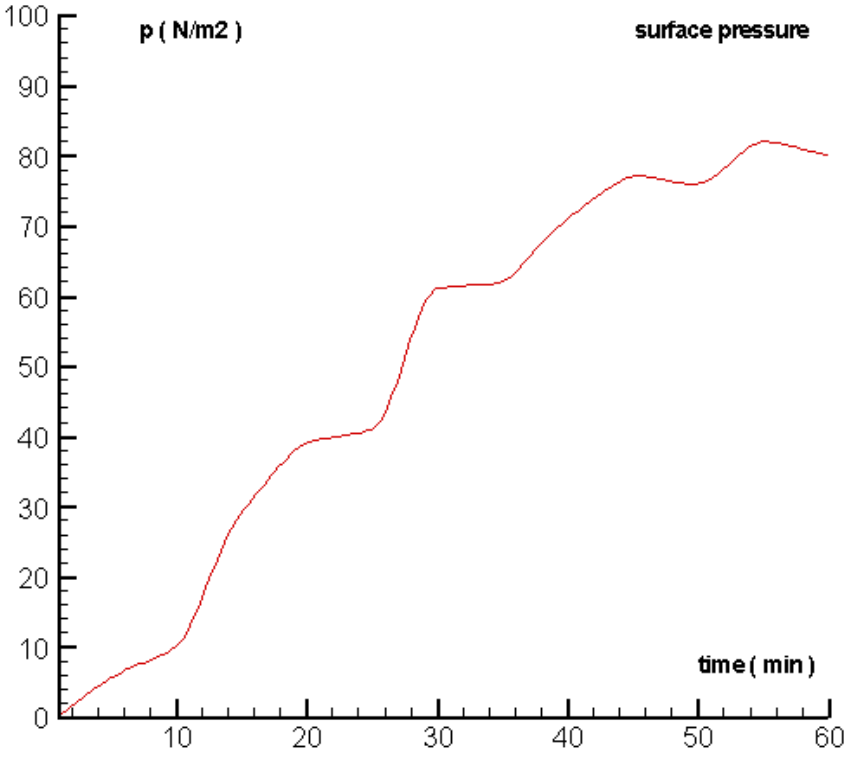


Рис. 2: Surface pressure at 12 km. Stable stratification with inversion

[4] Penenko V. V. , Aloyan A. E. Models and Methods for Environmental Problems. – Novosibirsk: Nauka, 1985 (In Russian).

[5] Davies H. C. , On the orographic retardation of a cold front // Beitr. Phys. Atmos. – 1984. – Vol. 57. – P. 409–418.

[6] Schumann U. Influence of mesoscale orography on idealized cold fronts // J. Atmos. Sci. – 1987. – Vol. 44, № 23. – P. 3423–3441.

[7] Godunov S. K. Equations of Mathematical Physics. – Moscow: Nauka, 1978 (In Russian).

[8] Yudin M. S. , Wilderotter K. Simulating atmospheric flows in the vicinity of a water basin // Computational Technologies. – 2006. – Vol. 11, № 3. – P. 128–134.

[9] Ikawa M. Comparison of some schemes for nonhydrostatic models with orography // J. Meteor. Soc. Japan. – 1988. – Vol. 66, № 5. – P. 753–776.

[10] Yudin M. S. , A numerical study of gravity waves in the atmosphere: smooth and steep orography effects // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. – 2016. – V. 48, № 1. – DOI http: //dx. doi. org/10. 1088/1755-1315/48/1/012024

[11] Ritchie H. Semi-Lagrangian advection on a Gaussian grid // Mon. Wea. Rev. – 1987. – Vol. 115. – P. 136–146.

Михаил Серафимович Юдин — ст. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: M. Yudin@ommgp. sscc. ru.
Дата поступления — 30 мая 2017

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЦЕНАРИЕВ ПЕРЕХОДА К ТУРБУЛЕНТНОСТИ В ОБЛАСТИ ОБРУШЕНИЯ ВНУТРЕННИХ ВОЛН В РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ

С. Н. Яковенко

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 532.517.4

Выполнено математическое моделирование течений с препятствием и стратификацией в различных условиях при помощи методов моделирования крупных вихрей (LES) и прямого численного моделирования (DNS), примененных для решения трехмерных уравнений Навье–Стокса в приближении Буссинеска, дополненных уравнением диффузии скаляра. Представлены результаты сканирования в широких диапазонах физических параметров ($\mathrm{Re} = UH/\nu$, $\mathrm{Pr} = \nu/\kappa$) для сценариев перехода к турбулентности при опрокидывании внутренних волн, генерируемых двумерным препятствием высоты H в устойчиво стратифицированном потоке с постоянными входными значениями скорости U и градиента плотности. Это явление изучается путем визуализации полей скорости, плотности и анализа спектров, полученных из данных моделирования DNS/LES при числах Рейнольдса $50 \leq \mathrm{Re} \leq 40\ 000$, соответствующих опытам в гидродинамических каналах с буксируемым телом, и числах Прандтля/Шмидта $1 \leq \mathrm{Pr} \leq 700$, соответствующих течениям в атмосфере и океане.

Ключевые слова: устойчивая стратификация, течение над препятствием, обрушение внутренних волн, неустойчивость, турбулентность, моделирование.

Введение

Работа выполняется в продолжение численного исследования процессов неустойчивости и турбулентности при обрушении подветренных волн, начатого в [1, 2], где приведены результаты DNS при $\mathrm{Re} = 4000$ и $\mathrm{Pr} = 1$ (рис. 1) с разрешением, достаточным для выявления тонких деталей процессов перехода [2] и последующей турбулентности [1]. Подобное явление исследовано в лабораторных экспериментах в каналах с буксируемым телом [3, 4, 5]. Вторичная неустойчивость поля плотности, возникающая после опрокидывания волны, включает набор трансверсальных мод. Наименьшая мода (с длиной волны $\lambda_y \simeq 0,5H$) отвечает возмущениям неустойчивости Рэлея—Тейлора (НРТ), быстро растущим и порождающим конвективные грибовидные структуры с вихрями неустойчивости Кельвина–Гельмгольца. В поздние моменты перехода мелкие вихри трансформируются в крупные тороидальные структуры, и становится доминирующей другая мода $\lambda_y \sim 2,5H$, которая также была зафиксирована в [4, 5, 6]. Эту крупномасштабную моду можно ассоциировать с наиболее неустойчивым возмущением двумерной вихревой пары в месте опрокидывания волны. Визуализация структур усложнена наличием каскада мелкомасштабных вихрей, приводящего к формированию инерционного интервала $-5/3$ и диссипативной подобласти с более крутым наклоном. Для $\mathrm{Pr} \gg 1$ наблюдается более ранний и быстрый рост НРТ с более мелкими структурами [7].

Целью настоящей работы является численное моделирование при различных числах Рейнольдса, Прандтля/Шмидта и выяснение влияния этих параметров на детали перехода к турбулентности. Например, уменьшение значения $\mathrm{Re} < 4000$ позволяет улучшить разрешение вследствие меньших отношений размера сетки к колмогоровскокому микромасштабу при меньших Re; это дает улучшение статистики в турбулентной области. Расчеты при различных Re могут выявить критическое значение (Re_1) для возникновения неустойчивости. С другой стороны, при $\mathrm{Re} > \mathrm{Re}_2$ и в зависимости от разрешения сетки подход DNS (или неявный

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (код проекта 17-01-00332а).

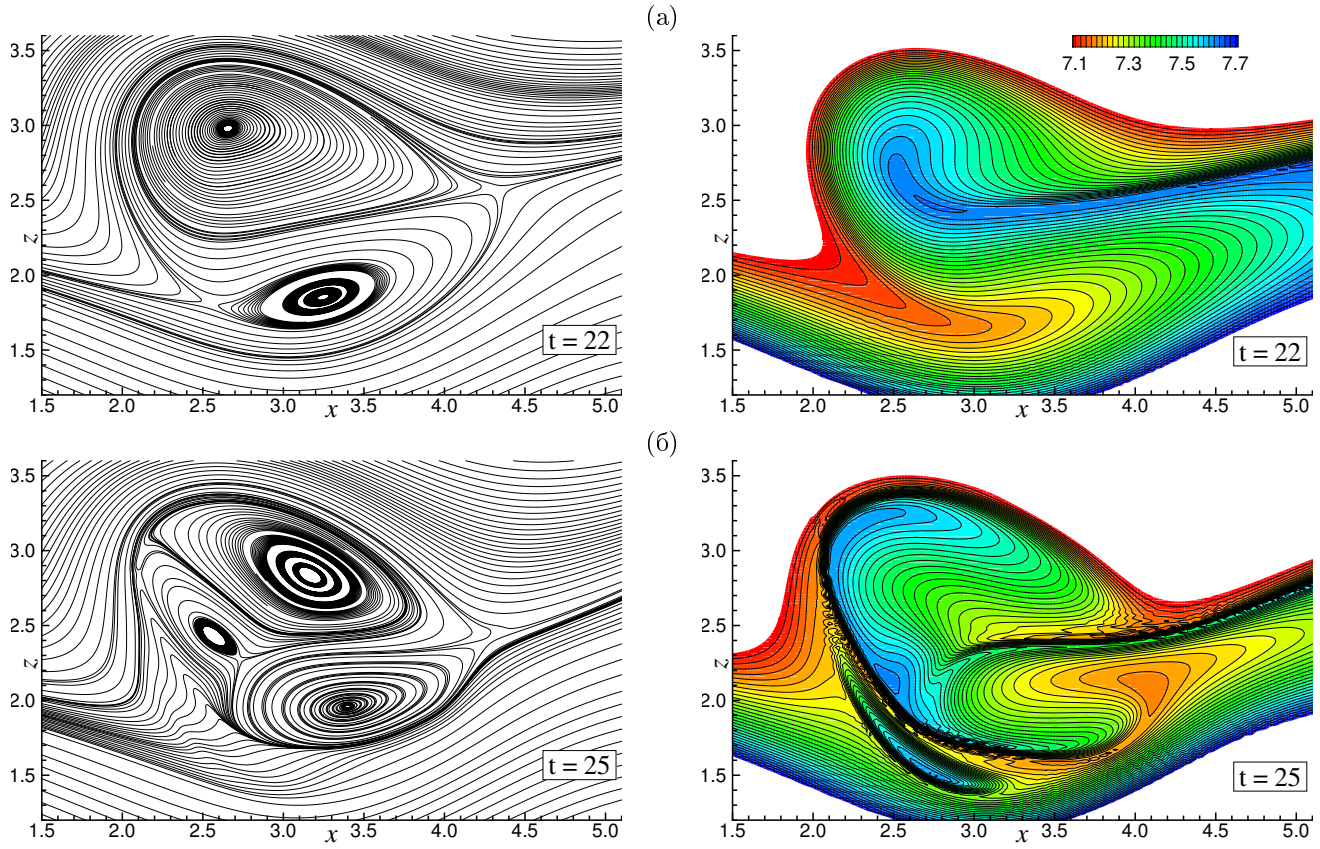


Рис. 1: Линии тока (слева), изолинии скаляра (справа), Re = 4000, Pr = 1, $y = 0$, $t = 22$ (а) и 25 (б)

LES) может становиться неадекватным, и для параметризации мелких вихрей подсеточных масштабов (SGS) необходимо вводить SGS-модель подсеточной вязкости и диффузии. Варьирование значения Pr также позволит найти критические значения, в частности, для определения предела применимости DNS. Имеет смысл отдельно рассматривать реальные ситуации неизотермических течений в атмосфере (Pr $\sim$ 1) и водоемах (Pr $\sim$ 7), а также соленой воды в океанскиъх эстуариях (Pr $\sim$ 700).

1 Модель

Применены трехмерные уравнения неразрывности, Навье–Стокса и диффузии скаляра (плотности) для несжимаемой жидкости в приближении Буссинеска, учитывающем эффекты плавучести в стратифицированной среде. Основные уравнения и подробности их численной реализации представлены в предшествующей работе [1].

2 Результаты

Результаты для Pr = 1 и различных Re показывают (рис. 2), что при Re = 1000 во время роста возмущений наблюдается набор пиков ($0,6H < \lambda_y \leq 2,0H$) на трансверсальном спектре, на этапе турбулентной области появляется доминирующая мода $\lambda_y \approx 3,3H$. При Re = 500 можно видеть почти постоянное доминирование моды спектра $\lambda_y \approx 2H$ (соответствующей позднему росту НРТ при $45 \leq t \leq 60$) и более слабые пики $\lambda_y \approx 0,9H$ и 3,3H. При Re = 200 и Pr = 1 амплитуда трансверсальной неустойчивости мала, так что возмущения изолиний плотности незаметны и не приводят к развитию турбулентности. Однако, в расчетах при Re = 200 с большими числами Pr происходит рост НРТ с длиной волны максимально нарастающего возмущения $\lambda_y \approx 2H$ (рис. 3, 4), а спектры на этапе развитой турбулентности ($t > 60$) иллюстрируют как инерционный интервал ($k^{-5/3}$), так и конвективно-вязкий интервалы (k^{-1}) при высоких волновых числах,

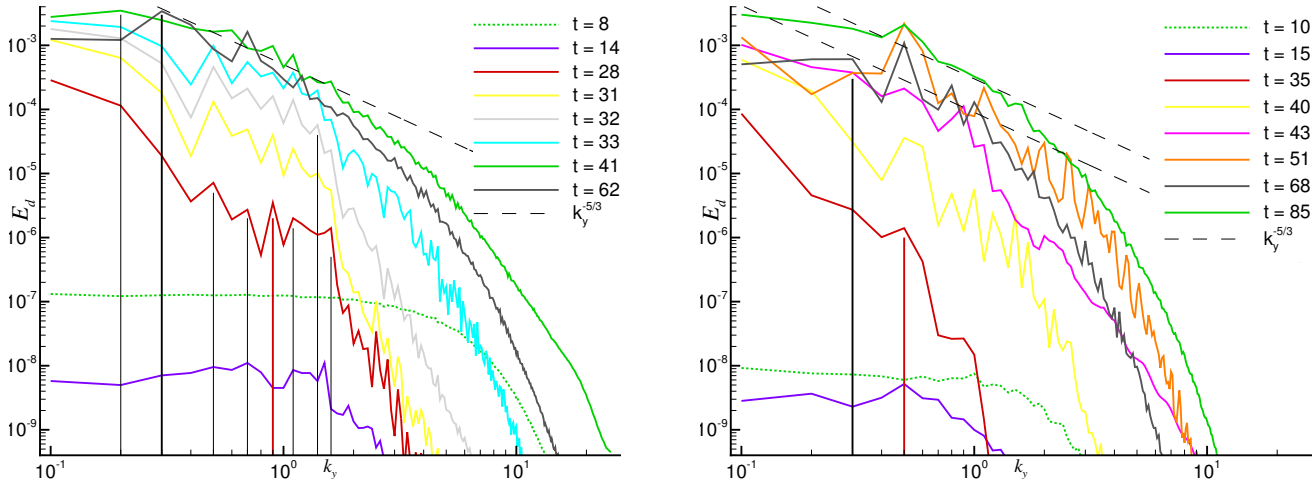


Рис. 2: Трансверсальные спектры дисперсии пульсаций скаляра при Pr = 1, Re = 1000 (слева) и 500 (справа)

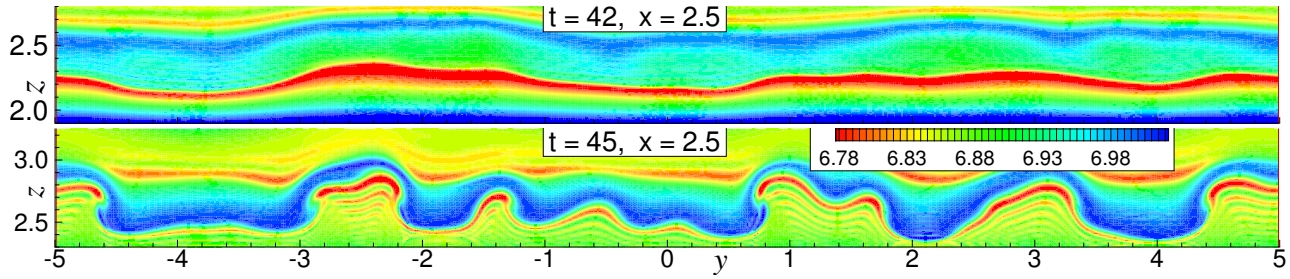


Рис. 3: Изолинии скаляра (плотности) в поперечном сечении $x = 2.5$ при Re = 200, Pr = 700

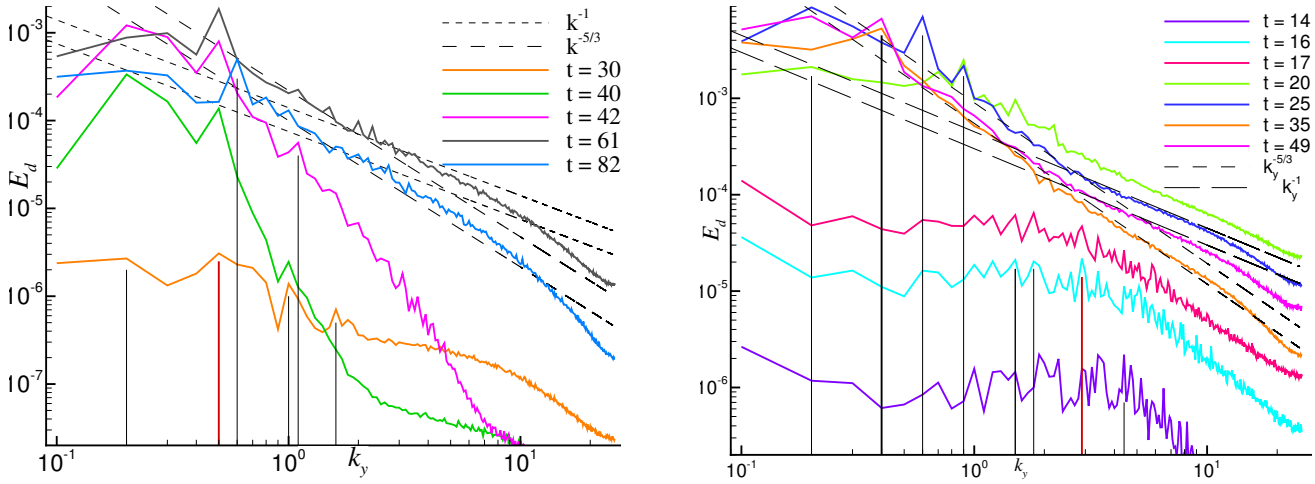


Рис. 4: Спектры дисперсии пульсаций скаляра: Re = 200, Pr = 700 (слева) и Re = 10 000, Pr = 1 (справа)

возможно, подтверждая теорию Бэтчелора при $\mathrm{Pr} \gg 1$, тогда как измерения не способны уловить этот тонкий эффект [8]. С другой стороны, меньшие наклоны спектров также могут быть связаны с недоразрешением поля плотности и возникающим при этом численным шумом, на что указывают спектры при $\mathrm{Pr} = 1$ и большом числе $\mathrm{Re} = 10^4$ (рис. 4).

В целом, можно заметить, что с ростом чисел Re или Pr уменьшается длина волны квазидвумерных возмущений НРТ (см., напр., рис. 3, 5), ускоряется их рост, а также возникают несколько рядов возмущений НРТ в поперечном сечении (рис. 5) и ряд — в продольном направлении x (рис. 6).

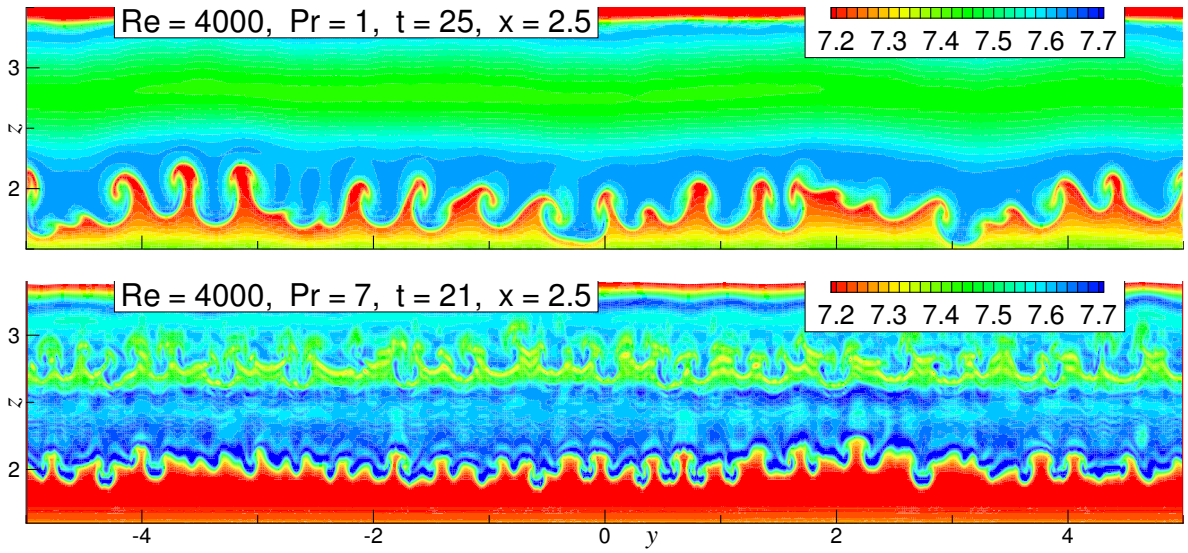


Рис. 5: Изолинии скаляра (плотности) в сечении $x = 2.5$ — DNS, $\mathrm{Re} = 4000$, $\mathrm{Pr} = 1$ и 7

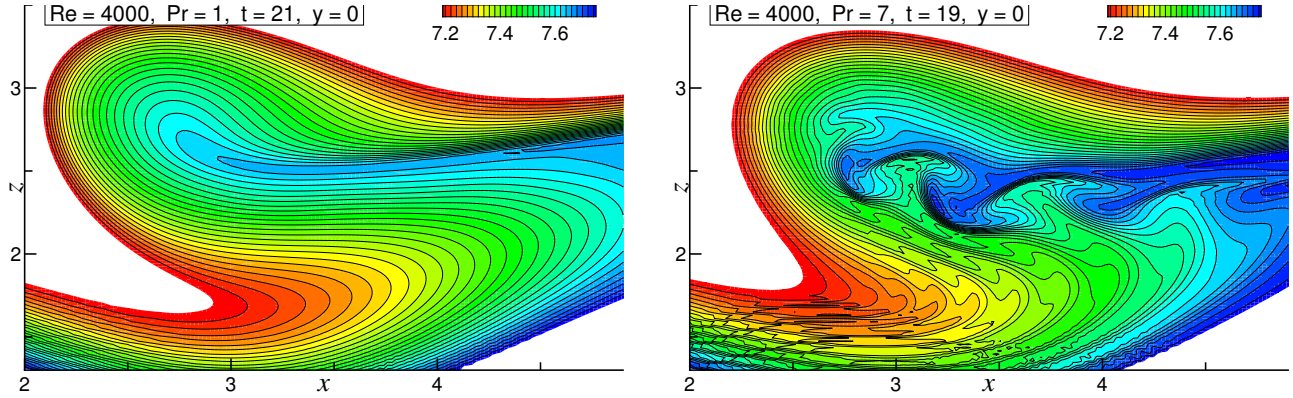


Рис. 6: Изолинии скаляра (плотности) в сечении $y = 0$ — DNS, $\mathrm{Re} = 4000$, $\mathrm{Pr} = 1$ и 7

Интегральные результаты приведены на рис. 7, где символами нанесена длина волны максимально нарастающего возмущения, полученная из визуализации полей плотности и анализа спектров. Заметим, что соблюдается выражение $\lambda = \lambda' = 4\pi H[(2\Delta\rho_H/\Delta\rho)\mathrm{F}_H^2\mathrm{Re}^{-2}]^{1/3}$ (штриховая линия), соответствующее теории [9] и записанное в [2] при $\mathrm{Pr} = 1$ (характерный перепад плотности между порциями тяжелой и легкой сред, $\Delta\rho \simeq 10^{-3}\Delta\rho_H$, относится к ранним этапам НРТ). Для произвольных чисел Прандтля это соотношение следует уточнить как $\lambda = f(\mathrm{Pr})\lambda'$, где $f(\mathrm{Pr}) \to \mathrm{const}$ при $\mathrm{Pr} \to \infty$ и $f(\mathrm{Pr}_1) > f(\mathrm{Pr}_2)$ при $\mathrm{Pr}_1 < \mathrm{Pr}_2$.

Заключение

Представлены результаты математического моделирования области обрушения подветренных волн, генерируемых двумерным препятствием в устойчиво стратифицированном потоке, в широком диапазоне чисел

Рейнольдса и Прандтля/Шмидта. Обсуждаемые сценарии развития неустойчивости могут реализовываться при генерации геофизической турбулентности вдали от подстилающей поверхности.

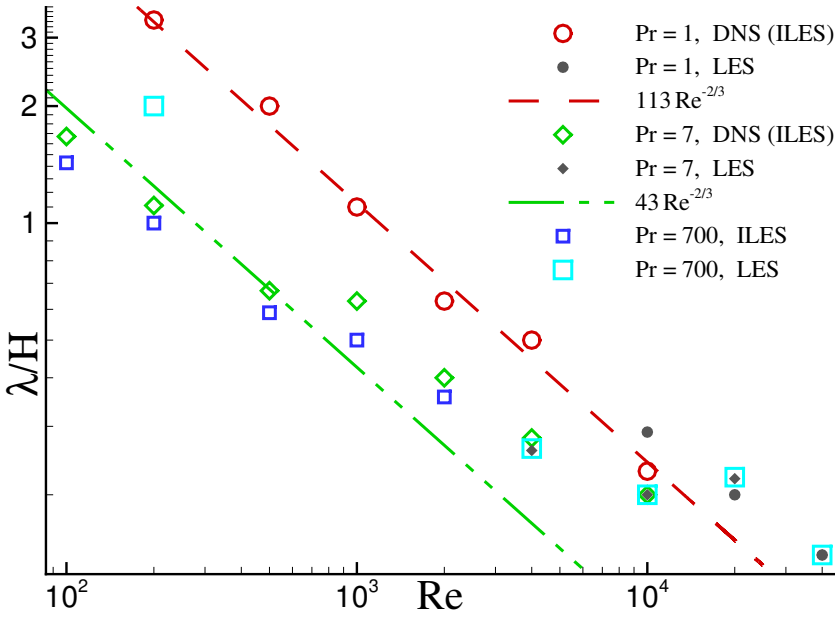


Рис. 7: Длина волны максимально нарастающего возмущения в зависимости от Re и Pr

Список литературы

[1] Yakovenko S. N., Thomas T. G., Castro I. P. A turbulent patch arising from a breaking internal wave // J. Fluid Mech. 2011. V. 677. P. 103–133.

[2] Yakovenko S. N., Thomas T. G., Castro I. P. Transition through Rayleigh–Taylor instabilities in a breaking internal lee wave // J. Fluid Mech. 2014. V. 760. P. 466–493.

[3] Castro I. P., Snyder W. H. Experiments on wave breaking in stratified flow over obstacles // J. Fluid Mech. 1993. V. 255. P. 195—211.

[4] Eiff O., Bonneton P. Lee-wave breaking over obstacles in stratified flow // Phys. Fluids. 2000. V. 12. P. 1073—1086.

[5] Eiff O., Huteau F., Tolu J. High-Reynolds-number orographic wave-breaking experiments // Dyn. Atmos. Oceans. 2005. V. 40. P. 71–89.

[6] Gheusi F., Stein J., Eiff O. F. A numerical study of three-dimensional orographic gravity-wave breaking observed in a hydraulic tank // J. Fluid Mech. 2000. V. 410. P. 67–99.

[7] Yakovenko S. N., Thomas T. G., Castro I. P. On subgrid-scale model implementation for a lee-wave turbulent patch in a stratified flow above an obstacle // Progress in Turbulence V: Proc. of the iTi Conf. in Turbulence, 2012 / ed. A. Talamelli et al. Springer, 2014. – Springer Proceedings in Physics. V. 149. P. 233–236.

[8] Warhaft Z. Passive scalars in turbulent flows // Annu. Rev. Fluid Mech. 2000. V. 32. P. 203–240.

[9] Youngs D. L. Numerical simulation of turbulent mixing by Rayleigh—Taylor instability // Physica D. V. 12. P. 32—44.

Сергей Николаевич Яковенко — д.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН;
e-mail: yakovenk@itam.nsc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ ИЗ УЗКОЙ ЩЕЛИ ПРИ НЕБОЛЬШИХ ЧИСЛАХ РЕЙНОЛЬДСА

С. Н. Яковенко

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 532.517

Выполнено математическое моделирование плоской струи, истекающей из узкой щели, на основе численного решения уравнений Навье — Стокса при различных числах Рейнольдса. Получено стационарное решение, соответствующее аналитическому решению вдали от входа в струю. При этом, положение асимптотического выхода на аналитического решение смещается вниз по потоку с ростом числа Рейнольдса. Работа является основой для дальнейших исследований развития неустойчивости в плоской струе.

Ключевые слова: плоская струя, двумерные уравнения Навье — Стокса, численное моделирование.

Введение

Целью работы является численное исследование структуры потока в истекающей из узкой щели плоской струе, стационарной и с наложенными осцилляциями в поперечном направлении, аналогичными акустике. Результаты работы могут применяться, например, для развития основанной на сжигании экологически чистого топлива водородной энергетики, с огромными запасами в мировом океане. Процессы струйного истечения водорода из различного типа горелок, форсунок, сопел и его горения представляют интерес с точки зрения повышения устойчивости пламени и снижения выбросов в атмосферу оксидов азота. Возникает вопрос возможности влиять на эти процессы с помощью различных методов управления. Например, формирующаяся под влиянием акустики вихревая структура способствует росту подсоса воздуха, повышению степени смешения топливо-воздух и устойчивости пламени, снижению температуры и длины пламени, и, как результат, сокращению эмиссии вредных выбросов [1]. Результаты моделирования также применимы в задачах пульсирующих микроструй для воздействия на основные источники шума (крупные турбулентные вихри в выхлопных потоках в авиадвигателях) и снижения шума от самолета; для охлаждения и вентиляции в микроэлектронике; активно воздействующих на поток актуаторов для снижения сопротивления летательных аппаратов и экономии топлива.

1 Модель

Для численного моделирования плоской струи используются двумерные нестационарные уравнения неразрывности и Навье — Стокса для несжимаемой жидкости в декартовых координатах (x, y). Как и в [2, 3], дискретизация уравнений проводится на смещенной сетке для предотвращения рассогласования полей скорости и давления, определяемых при помощи одновременных итераций и метода искусственной сжимаемости. В предварительных этапах работы изучается влияние шага по координате/времени, разрежения/сгущения сетки, длины и ширины области расчета, условий на границах.

2 Результаты

Полученные результаты стационарных расчетов (для получения установившегося по времени численного решения) показывают качественно правильную картину развития и расширения струи (рис. 1–5). При этом

наблюдается асимптотическое стремление с ростом продольной координаты x к степенным законам затухания скорости в центре струи ($\sim x^{-1/3}$) и характерных толщин струи ($\sim x^{2/3}$) (рис. 4, 5) , соответствующим точному решению для плоской струи из точечного источника (см., напр., в [4]).

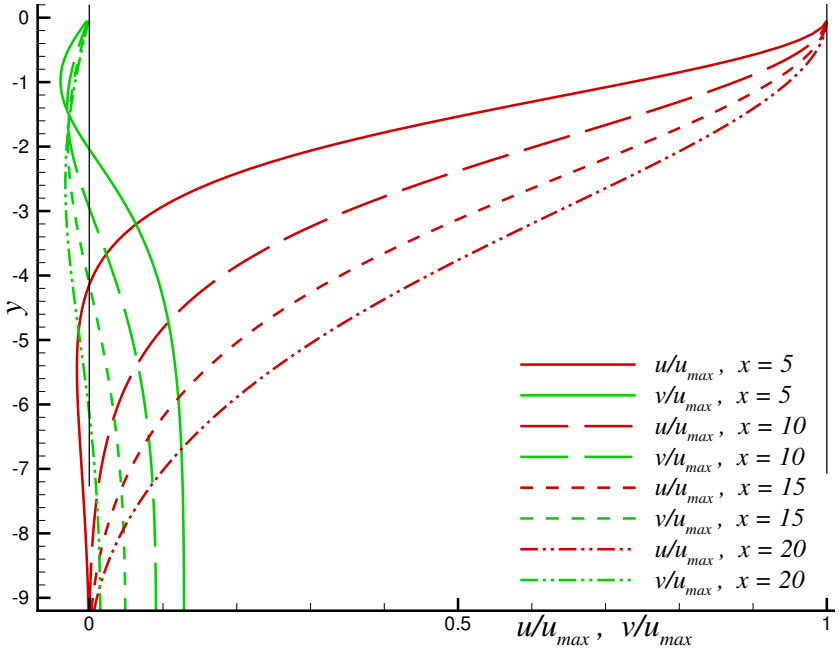


Рис. 1: Профили горизонтальной скорости $u(y)$ и вертикальной скорости $v(y)$ в четырех сечениях струи (x = 5, 10, 15 и 20), обезразмеренные на максимальную скорость в центре струи $u_{max}(x, y = 0)$

На рис. 1–4 приведены результаты расчета в области $0 < x < 30$, $-10 < y < 0$ на равномерной сетке с шагом $\Delta x = \Delta y = h/10$ при числе Рейнольдса $\mathrm{Re} = 2hu_{max}(x = y = 0)/\nu = 32$. Координаты (x, y) обезразмерены на полувысоту щели h (полувысоту струи на входе); скорость и давление при $0 < y < 10$ получены из симметрии относительно плоскости y = 0.

На рис. 5 представлены результаты стационарных расчетов на неравномерных сетках с минимальным шагом $\Delta x = \Delta y = h/10$ вблизи выхода течения из плоской щели и разрежением по x и y, а именно:

(а) область $0 < x < 100$ и $-40 < y < 0$, коэффициент разрежения сетки 1,05 в вычислениях при Re = 32;

(б) область $0 < x < 200$ и $-50 < y < 0$, коэффициент разрежения сетки 1,10 при Re = 160;

(в) область $0 < x < 500$ и $-70 < y < 0$, коэффициент разрежения сетки 1,20 при Re = 1600.

Данные численного моделирования показывают существенный рост дальнобойности струи с ростом числа Рейнольдса (в координатах, обезразмеренных на полувысоту плоской щели), поэтому для достижения выхода стационарного решения на асимптотические степенные законы необходимо увеличивать вычислительную область с ростом Re.

Заключение

Представлены результаты математического моделирования плоской струи, истекающей из узкой щели, при различных числах Рейнольдса. Получено стационарное решение, соответствующее аналитическому решению вдали от входа в струю. Работа является основой для дальнейшего исследования неустойчивости струи. В частности, шпланируется изучить влияние различных распределений скорости на входе в струю: в частности, перехода от параболического профиля Пуазейля и к “ударному” профилю (с постоянной скоростью) при различном числе Рейнольдса. Предполагается также изучить развитие возмущений из численной неустойчивости, или малых случайных возмущений, или наложенных колебаний струи различной частоты и сравнить полученные результаты с данными других работ, полученными в лабораторных экспериментах (см., напр., [1]), численных и аналитических исследованиях.

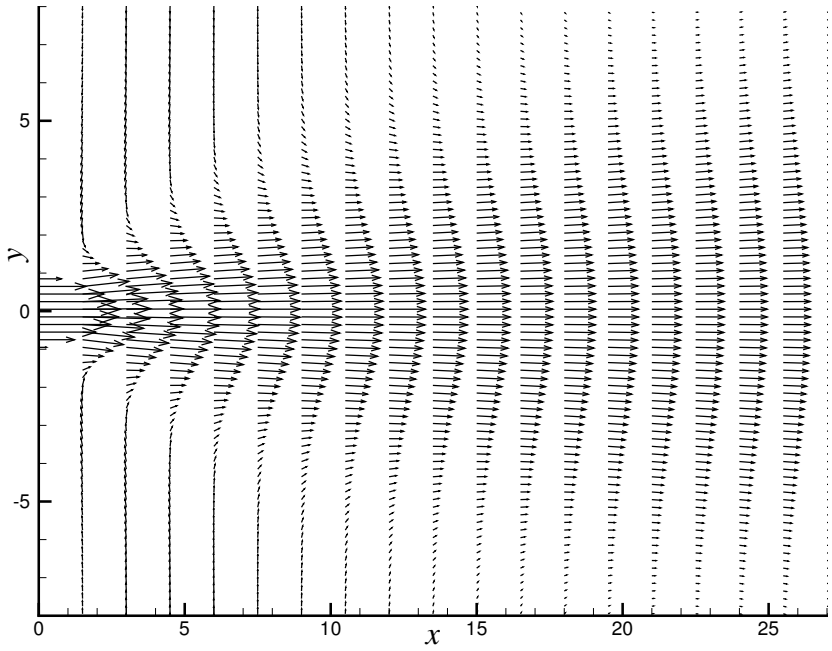


Рис. 2: Векторы скорости (длина вектора пропорциональна амплитуде скорости) в плоской струе

Список литературы

[1] Козлов В. В., Грек Г. Р., Коробейничев О. П., Литвиненко Ю. А., Шмаков А. Г. Особенности горения водорода в круглой и плоской струе в поперечном акустическом поле и их сравнение с результатами горения пропана в тех же условиях // Вестн. Новосиб. гос. ун-та. Серия: Физика. 2014. Т. 9, вып. 1. С. 79–86.

[2] Viecelli J. A. A computing method for incompressible flows bounded by moving walls // J. Comput. Phys. 1971. Vol. 8. P. 119–143.

[3] Курбацкий А. Ф., Яковенко С. Н. Численное исследование турбулентного течения вокруг двумерного препятствия в пограничном слое // Теплофизика и аэромеханика. 1996. Т. 3, вып. 2. С. 145–163.

[4] Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. М.: Дрофа, 2003.

Сергей Николаевич Яковенко — д.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН;
e-mail: yakovenk@itam.nsc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

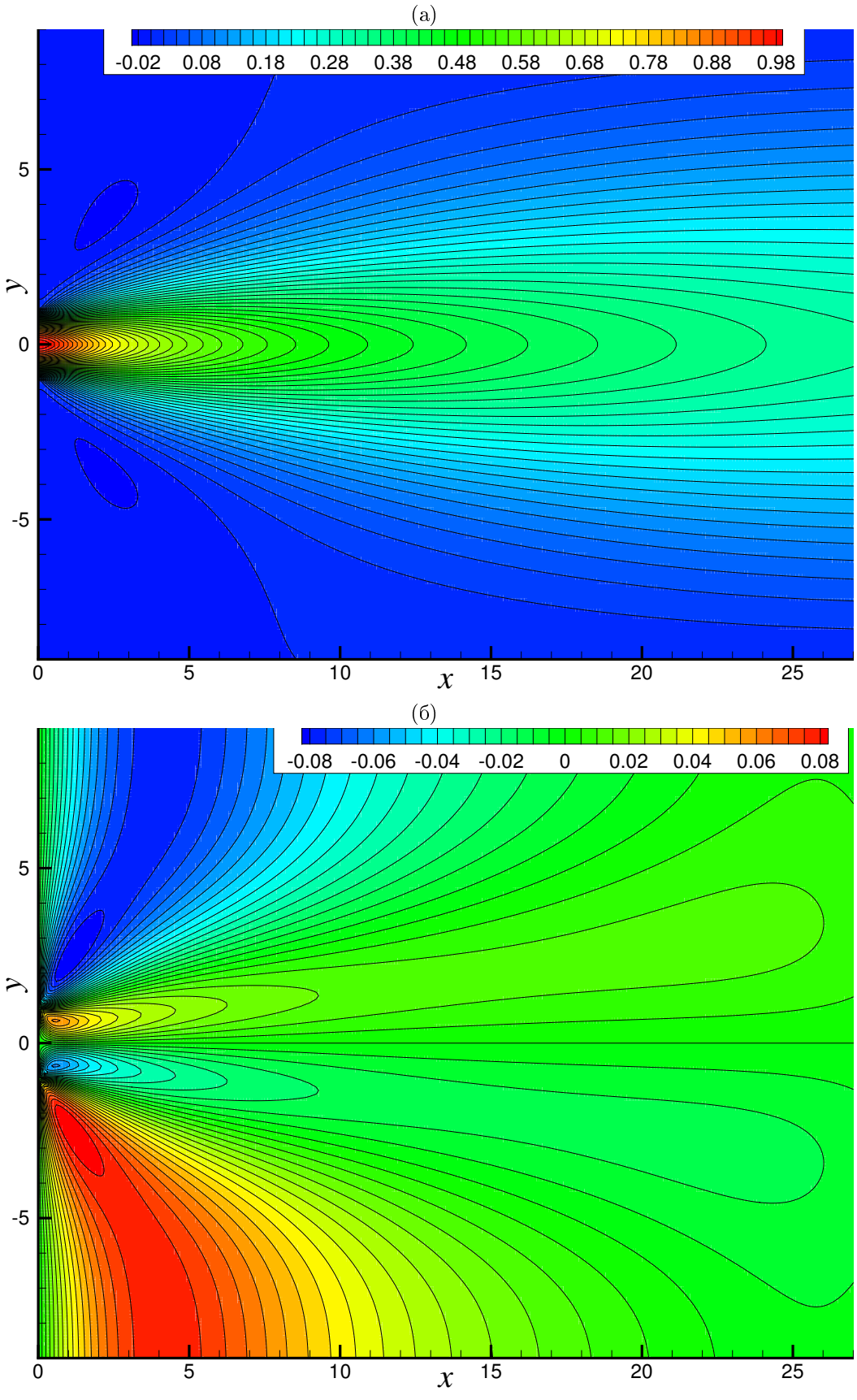


Рис. 3: Изолинии: (а) горизонтальной скорости $u(x, y)$; (б) вертикальной скорости $v(x, y)$

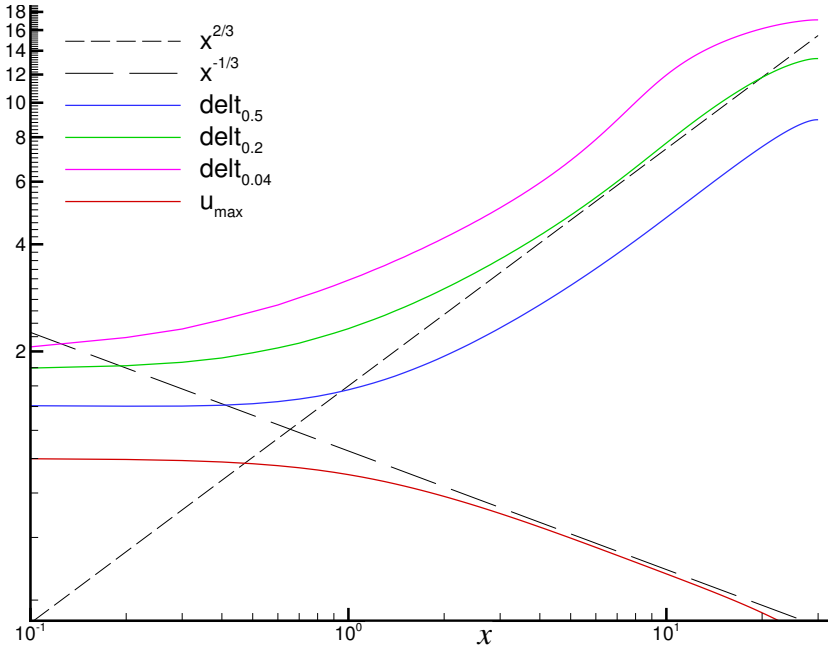


Рис. 4: Безразмерные величины максимальной скорости $u_{max}(x, y = 0)/u_{max}(x = y = 0)$, характерных толщин $\delta_{0.5} = 2|y(u/u_{max} = 0,5)|$, $\delta_{0.2} = 2|y(u/u_{max} = 0,2)|$, $\delta_{0.04} = 2|y(u/u_{max} = 0,04)|$, в зависимости от продольной координаты x и в сравнении со степенными законами

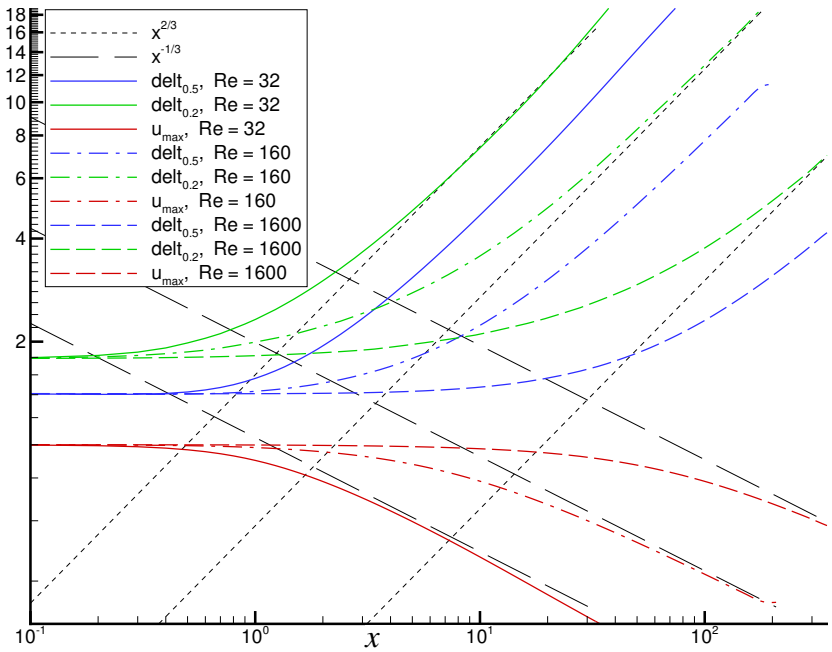


Рис. 5: Те же величины, что на рис. 4, полученные в расчетах в увеличенных областях при различных Re

АНАЛИЗ СТОХАСТИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ МЕТОДОМ СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

М. А. Якунин

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.676

В работе с помощью метода статистического моделирования исследуется влияние винеровских и пуассоновских случайных шумов на поведение линейного осциллятора и осциллятора Ван–дер–Поля. Для линейного осциллятора получено аналитическое выражение автоковариационной функции решения стохастического дифференциального уравнения (СДУ), позволяющее совместно с формулами для математического ожидания и дисперсии решения исследовать оценки моментов численного решения СДУ на основе обобщенного явного метода Эйлера. Для осциллятора Ван–дер–Поля численно исследовано влияние пуассоновской составляющей на характер колебаний первого и второго моментов решения СДУ при большой величине скачков. Приводятся результаты численных экспериментов.

Ключевые слова: стохастические дифференциальные уравнения, винеровская и пуассоновская составляющие, обобщенный метод Эйлера, стохастические осцилляторы.

Введение

Исследование влияния случайных шумов на поведение осциллирующих решений стохастических дифференциальных уравнений (СДУ) ранее проводилось в работах [1–6]. Для нелинейной системы СДУ, в отличие от линейной, невозможно получить конечную систему обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) на математическое ожидание ее решения, которая в линейном случае легко получается из сопутствующей системы ОДУ, т.е. системы СДУ с нулевыми интенсивностями шумов. Параметрический анализ решений нелинейных систем СДУ можно провести только методом статистического моделирования. В [1] приводится большое количество примеров математических моделей физических процессов в виде систем СДУ, описывающих линейные и нелинейные стохастические колебания, проведен численный анализ решений этих систем. В [2, 3] исследованы первые два момента гармонического осциллятора с аддитивным и мультипликативным шумами. Рассмотрены варианты случайного затухания и случайной частоты и влияние на моменты внешнего периодического воздействия. В [4, 5] для стохастических осцилляторов с полиномиальной нелинейностью, в том числе осцилляторов Ван–дер–Поля и Дуффинга, при наличии внешнего и мультипликативного пуассоновских шумов построены аппроксимации плотностей вероятности распределений их решений.

Настоящая работа является продолжением работы [6] по исследованию влияния винеровских и пуассоновских случайных шумов на поведение линейного осциллятора и осциллятора Ван–дер–Поля и оценок функционалов от численных решений соответствующих им СДУ, полученных обобщенным явным методом Эйлера. При численном решении СДУ используется адаптированная к скачкам временная сетка, представляющая собой суперпозицию заданной равномерной временной сетки и множества моментов скачков моделируемой траектории решения [7]. Используемая численная схема решения СДУ, не имеющая ошибки дискретизации пуассоновской составляющей, удобна при очень малом размере шага интегрирования метода Эйлера, что необходимо, например, при решении уравнения Ван–дер–Поля, при этом среднее число скачков на интервале интегрирования существенно меньше числа шагов интегрирования. В этом случае пуассоновская составляющая не так существенно увеличивает среднее время моделирования одной траектории решения СДУ, как винеровская, поскольку не требует моделирования случайной величины на каждом шаге. Для осциллятора

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00698 А).

Ван–дер–Поля численно исследовано влияние пуассоновской составляющей на характер колебаний первого и второго моментов решения СДУ, приводящее при большой величине скачков к появлению эффекта “биений”, накладывающихся на основные колебания оценок моментных функций.

1 Линейный осциллятор

Рассмотрим случай “шумящей” частоты колебаний в линейном колебательном контуре, который задается СДУ в смысле Ито второго порядка вида

$$\frac{d^2z(t)}{dt^2} + a\frac{dz(t)}{dt} + \omega^2 z(t) = \left(\sigma\frac{\mathrm{dw}(t)}{dt} + \mathrm{P}(t)\right)z(t), \quad 0 \le t \le T, \tag{1}$$

где a, ω, σ — вещественные параметры, $\mathrm{w}(t)$ — стандартный винеровский процесс, $\mathrm{P}(t)$ — пуассоновский белый шум вида

$$\mathrm{P}(t) = \sum_{k=1}^{N_T} \xi_k \delta(t - \tau_k),$$

N_T — случайное число скачков на интервале $(0, T]$ (процесс Пуассона), ξ_k — независимые одинаково распределенные случайные величины скачков в моменты времени τ_k, $\delta(t)$ — дельта-функция. При $N_T = 0$ формально будем полагать $\mathrm{P}(t) \equiv 0$. Вводя новые переменные $y_1 = z$, $y_2 = dz/dt$, СДУ (1) можно переписать в виде линейной системы

$$\begin{aligned} dy_1 &= y_2 dt, \quad y_1(0) = y_{10}, \\ dy_2 &= -(\omega^2 y_1 + a y_2)dt + \sigma y_1 \mathrm{dw}(t) + y_1 \int\limits_{\mathbf{R}} x\nu(dx, dt), \quad y_2(0) = y_{20}, \end{aligned} \tag{2}$$

где ν — независимая с $\mathrm{w}(t)$ однородная пуассоновская мера в пространстве $\mathbf{R} \times [0, T]$ с характеристической мерой, заданной функцией

$$\varphi(x) = \frac{\lambda}{\sqrt{2\pi}\sigma_\xi} \exp\left(-\frac{(x - m_\xi)^2}{2\sigma_\xi^2}\right). \tag{3}$$

Здесь λ — интенсивность скачков, m_ξ и σ_ξ^2 — соответственно математическое ожидание и дисперсия нормальной случайной величины скачка ξ. При $\sigma_\xi = 0$ имеем пуассоновский процесс со скачками постоянной величины и формально в этом случае будем задавать $\varphi(x) = \lambda\delta(x - m_\xi)$. Заметим, что СДУ в смысле Ито (2) не отличается от соответствующего ему СДУ в смысле Стратоновича, что несложно установить из связи интегралов Ито и Стратоновича [8].

Из системы СДУ (2) несложно получить ОДУ на математическое ожидание $m_1(t) = \mathbf{E}y_1(t)$ первой компоненты решения СДУ, являющееся уравнением свободных колебаний

$$\frac{d^2m_1(t)}{dt^2} + a\frac{dm_1(t)}{dt} + (\omega^2 - \lambda m_\xi)m_1(t) = 0, \quad m_1(0) = y_{10}. \tag{4}$$

При

$$\beta^2 = 4(\omega^2 - \lambda m_\xi) - a^2 > 0 \tag{5}$$

решение данного ОДУ имеет вид

$$m_1(t) = \mathrm{e}^{-at/2}\left(y_{10}\cos\frac{\beta t}{2} + (2y_{20} + a y_{10})\frac{1}{\beta}\sin\frac{\beta t}{2}\right). \tag{6}$$

Для нахождения вторых моментов $s_{ij}(t) = \mathbf{E}y_i(t)y_j(t)$, $i, j = 1, 2$, вначале с помощью формулы Ито [8] перейдем от системы (2) к трехмерной системе СДУ для случайных процессов $z_{ij}(t) = y_i(t)y_j(t)$. Затем, применяя к полученной системе СДУ операцию взятия математического ожидания, получаем трехмерную линейную систему ОДУ

$$\begin{aligned} ds_{11}/dt &= 2s_{12}, \quad s_{11}(0) = y_{10}^2, \\ ds_{12}/dt &= (\lambda m_\xi - \omega^2)s_{11} - a s_{12} + s_{22}, \quad s_{12}(0) = y_{10}\, y_{20}, \\ ds_{22}/dt &= (\lambda(m_\xi^2 + \sigma_\xi^2) + \sigma^2)s_{11} + 2(\lambda m_\xi - \omega^2)s_{12} - 2a s_{22}, \quad s_{22}(0) = y_{20}^2. \end{aligned} \tag{7}$$

Численное решение этой системы можно получить, например, методом Эйлера. Точное решение линейных систем ОДУ, как известно, выражается через матричную экспоненту. Колебательный режим решения системы (7) обеспечивается в случае, если

$$\widetilde{\beta}^2 = q^2 + \big(4(\omega^2 - \lambda m_\xi) - a^2\big)^3/27 > 0,$$

где $q = \lambda(m_\xi^2+\sigma_\xi^2)+\sigma^2$. В этом случае матрица коэффициентов, входящая в правую часть системы (7), имеет одно вещественное и два комплексно-сопряженных собственных значения. Точная формула для второго момента $s_{11}(t)$ в случае колебательного режима решения приведена в [6], дисперсия первой компоненты решения СДУ (2) $D_1(t) = s_{11}(t)-m_1^2(t)$. Зная $s_{11}(t)$, из первого уравнения системы ОДУ (7) можно получить формулу для второго смешанного момента $s_{12}(t) = 0.5ds_{11}(t)/dt$.

Обозначим ковариационные функции компонент решения системы СДУ (2) через $c_{ij}(t, t+\tau) = \mathbf{E}y_i(t)y_j(t+\tau)$, $i, j = 1, 2$.

Утверждение. *Пусть значения параметров СДУ* (2) *удовлетворяют условию* (5). *Тогда автоковариационная функция* $c_{11}(t, t+\tau)$ *определяется по формуле*

$$c_{11}(t, t+\tau) = \mathrm{e}^{-a|\tau|/2}\left(s_{11}(t_m)\cos\frac{\beta\tau}{2} + (2s_{12}(t_m) + as_{11}(t_m))\frac{1}{\beta}\sin\frac{\beta|\tau|}{2}\right), \tag{8}$$

где $t_m = \min(t,\ t+\tau)$, $\tau \geq -t$, β *определяется согласно* (5).

Систему СДУ (2) можно представить в виде

$$dy_1 = y_2 d\theta, \quad dy_2 = -(\omega^2 y_1 + ay_2)d\theta + \sigma y_1 \mathrm{dw}(\theta) + y_1 \int\limits_{\mathbf{R}} x\nu(dx, d\theta), \tag{9}$$

где $\theta \geq t$, с начальными значениями $y_1(t)$, $y_2(t)$ при $\theta = t$. Производя домножение каждого уравнения системы (9) на $y_1(t)$ и применяя к полученной системе СДУ операцию взятия математического ожидания, получаем систему ОДУ на ковариационные функции $c_{11}(t, \theta)$, $c_{12}(t, \theta)$ с начальными значениями $c_{11}(t, t) = s_{11}(t)$, $c_{12}(t, t) = s_{12}(t)$, которая является формой записи уравнения свободных колебаний вида (4). Первая компонента ее решения имеет вид (8) при $\tau = \theta - t \geq 0$, $t_m = t$. При $-t \leq \tau \leq 0$ имеем $c_{11}(t, t+\tau) = c_{11}(t+\tau, t+\tau+|\tau|)$ и в формуле (8) $t_m = t+\tau$. Аналогичным путем можно получить автоковариационную функцию c_{22} и взаимные ковариационные функции c_{12}, c_{21}. При $t = 0$ из (8) имеем $c_{11}(0, \tau) = y_{10}m_1(\tau)$, где $m_1(\tau)$ определяется согласно (6).

2 Осциллятор Ван–дер–Поля

Стохастическое нелинейное уравнение Ван–дер–Поля, записанное аналогично (1) в виде системы СДУ в смысле Ито

$$\begin{aligned} dy_1 &= y_2 dt, \quad y_1(0) = y_{10}, \\ dy_2 &= \big(\mu y_2(1 - by_1^2) - \omega^2 y_1\big)dt + \sigma y_1 \mathrm{dw}(t) + y_1 \int\limits_{\mathbf{R}} x\nu(dx, dt), \quad y_2(0) = y_{20}, \end{aligned} \tag{10}$$

описывает колебания нелинейного контура под воздействием винеровского и пуассоновского случайных шумов. В (10) параметры μ, b, ω определяют скорость переходных участков в решении, пуассоновская мера ν задается согласно (3). Для вычисления математического ожидания решения системы СДУ (10) замкнутой системы ОДУ не существует.

Пуассоновская составляющая, входящая во второе уравнение системы (10), имеет инфинитезимальные моменты

$$\mathbf{E}\Big(\int\limits_{\mathbf{R}} x\nu(dx, dt)\Big)^k = \mathbf{E}\int\limits_{\mathbf{R}} x^k\nu(dx, dt) = \lambda dt\mathbf{E}\xi^k, \quad k = 1, 2, ..., \tag{11}$$

где ξ — постоянная или случайная величина скачков. Второе уравнение системы (10) удобно представить с использованием центрированной меры $\widetilde{\nu}(dx, dt) = \nu(dx, dt) - \varphi(x)dxdt$ в виде

$$dy_2 = \big(\mu y_2(1 - by_1^2) - \widetilde{\omega}^2 y_1\big)dt + \sigma y_1 \mathrm{dw}(t) + y_1 \int\limits_{\mathbf{R}} x\widetilde{\nu}(dx, dt),$$

где $\widetilde{\omega}^2 = \omega^2 - \lambda m_\xi$. При этом $\mathbf{E}\int\limits_{\mathbf{R}} x\widetilde{\nu}(dx, dt) = 0$, а k-й момент интеграла $\int\limits_{\mathbf{R}} x\widetilde{\nu}(dx, dt)$ при $k \geq 2$ будет совпадать с (11). Численные исследования решения системы СДУ (10) без винеровской составляющей показали [6], что разные значения параметров СДУ могут задавать близкие по характеру колебаний математические ожидания решения СДУ, если для второго момента (11) (при $k = 2$) выполняется условие $\lambda \mathbf{E}\xi^2 = \text{const}$, т.е. в случае нормальной случайной величины скачков $\lambda(m_\xi^2 + \sigma_\xi^2) = \text{const}$, при одновременном выполнении условия $\widetilde{\omega} = \text{const}$.

3 Численные эксперименты

Общая численная схема решения СДУ (2) или (10) на основе обобщенного явного метода Эйлера приведена в [6]. В ней используется адаптированная к скачкам временная сетка, представляющая собой суперпозицию заданной равномерной временной сетки $\{t_n\}$, $n = 0, ..., N_h$, $t_0 = 0$, $t_{N_h} = T$ с постоянным шагом h и множества моментов скачков моделируемой траектории решения. Оценки математического ожидания $\widehat{m}_1(t)$, второго момента $\widehat{s}_{11}(t)$ и автоковариационной функции $\widehat{c}_{11}(t, t+\tau)$ первой компоненты случайного процесса $\{y_1(t), y_2(t)\}$ на основе ансамбля из N_{tr} траекторий численного решения системы СДУ (2) или (10) определяются стандартным способом. Ниже будут исследоваться указанные СДУ только с пуассоновской составляющей, т.е. при $\sigma = 0$.

Для линейного осциллятора (2) задавались $y_{10} = 1$, $y_{20} = 0$, интервал интегрирования $T = 10$, $N_h = T/h = 10^6$, значения параметров СДУ $m_\xi = 1$, $\sigma_\xi = 0.35$, $\omega = 2\pi$, $\lambda = 1.44\pi^2$. При $a = 0$ период гармонических колебаний математического ожидания (6) равен 1.25 вместо 1 при отсутствии пуассоновской составляющей. На рис. 1 приведены два примера графиков оценок автоковариационной функции $\widehat{c}_{11}(t, t+\tau)$ при $N_{tr} = 10^5$, $t = 5$, $a = 0$ (сплошная линия) и $a = 0.6$ в случае затухающих колебаний (штриховая линия). Графики оценок визуально совпадают с соответствующими графиками, построенными по точной формуле (8).

В приведенных ниже примерах исследования осциллятора Ван–дер–Поля (10) задавались значения $y_{10} = 3$, $y_{20} = 0$, $T = 200$.

Пример 1. Исследуется зависимость точности оценок математического ожидания решения СДУ (10) от размера шага интегрирования численной схемы. Значения параметров СДУ: $\mu = 20$, $b = 0.3$, $\omega = \sqrt{2}$, $\lambda = 0.8$, $m_\xi = 1.25$, $\sigma_\xi = 0$, число моделируемых траекторий решения $N_{tr} = 10^5$. Как видно из рис. 2, увеличение размера шага интегрирования (т.е. уменьшение числа шагов на интервале интегрирования N_h) ведет к завышению периода колебаний математического ожидания решения и с ростом t к все большему смещению графика его оценки вправо по оси времени. При малых размерах шага таких, что $N_h \geq 2 \cdot 10^6$, графики будут визуально совпадать между собой. Как показали вычисления, сказанное справедливо и в случае, когда для пуассоновской составляющей задается $m_\xi = 0$, $\sigma_\xi \neq 0$ или когда $m_\xi < 0$. Заметим также, что увеличение значения параметра нелинейности μ в уравнении Ван–дер–Поля требует при численном решении СДУ соответствующего уменьшения размера шага интегрирования численной схемы.

Пример 2. Наличие в СДУ (10) пуассоновской составляющей с ненулевым значением m_ξ приводит к искажениям моментов решения СДУ по сравнению со случаем $m_\xi = 0$, $\sigma_\xi \neq 0$, которые при $m_\xi > 0$ имеют характер затухающих высокочастотных осцилляций (“биений”) на фоне основных колебаний момента. Они становятся заметными на графиках оценки математического ожидания при достаточно больших значениях m_ξ. На рис. 3 приведены графики оценок математического ожидания решения СДУ при $N_{tr} = 10^5$, $N_h = 2 \cdot 10^7$, $\mu = 10$, $b = 0.3$, $\lambda = 0.1$. Для одного варианта оценок задавалось $m_\xi = 2$, $\sigma_\xi = 0$, $\omega = \sqrt{1.2}$, для второго $m_\xi = -2$, $\sigma_\xi = 0$, $\omega = \sqrt{0.8}$, для третьего $m_\xi = 0$, $\sigma_\xi = 2$, $\omega = 1$. Значения параметров СДУ для всех этих вариантов заданы таким образом, чтобы обеспечить, как указывалось выше, неизменность величин $\lambda(m_\xi^2 + \sigma_\xi^2)$ и $\widetilde{\omega}$, равных в данном примере соответственно 0.4 и 1. Как видно из рис. 3, “биения” возникают при $m_\xi = 2$, а при $m_\xi = 0$ они отсутствуют. При $m_\xi = -2$ искажения колебаний также имеют место по сравнению с вариантом $m_\xi = 0$. В целом характер таких искажений или “биений” зависит от значений параметров СДУ μ, λ, m_ξ, σ_ξ. Например, при $m_\xi = 2$, $\sigma_\xi \neq 0$ “биения” математического ожидания быстро сглаживаются с ростом t уже при небольших значениях $\sigma_\xi \approx 0.3$. На рис. 4 приведены графики оценок второго момента решения СДУ для двух вариантов $m_\xi = 2$, $\sigma_\xi = 0$ и $m_\xi = 0$, $\sigma_\xi = 2$. Колебания оценки второго момента при $m_\xi = 2$ включают медленно затухающую высокочастотную составляющую.

Замечание 1. Вычисления оценки второго момента решения СДУ (10) при указанных в приведенном выше примере 1 значениях параметров показали наличие в ее колебаниях “биений”, хотя для оценки математического ожидания на рис. 2 они незаметны.

Замечание 2. Вычисления оценок первого и второго моментов решения СДУ (10) по упрощенной по

сравнению с используемой в настоящей работе численной схеме решения СДУ на равномерной временной сетке, когда появление скачка на каждом шаге моделируется с вероятностью λh, при $N_{tr} = 10^5$, $N_h = 2 \cdot 10^6$ и приведенных в примере 2 значениях параметров СДУ показали визуальное совпадение графиков этих оценок с соответствующими графиками, приведенными на рис. 3, 4.

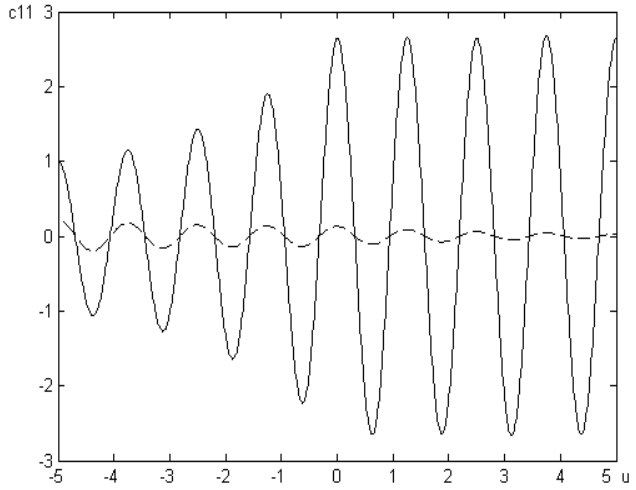


Рис. 1: Оценки автоковариационной функции $\widehat{c}_{11}(t, t+\tau)$ решения СДУ (2) при $t = 5$, $a = 0$ (сплошная линия) и $a = 0.6$ (штриховая линия). На рисунке обозначено $u = \tau$

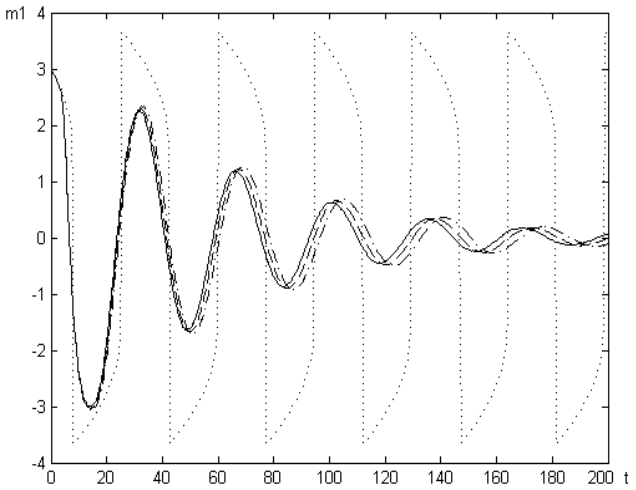


Рис. 2: Оценки математического ожидания решения СДУ (10) при $N_h = 2 \cdot 10^6$ (сплошная линия), $N_h = 2 \cdot 10^5$ (штриховая линия) и $N_h = 10^5$ (штрих-пунктирная линия). Точечная линия – решение сопутствующей системы ОДУ при $\widetilde{\omega} = 1$.

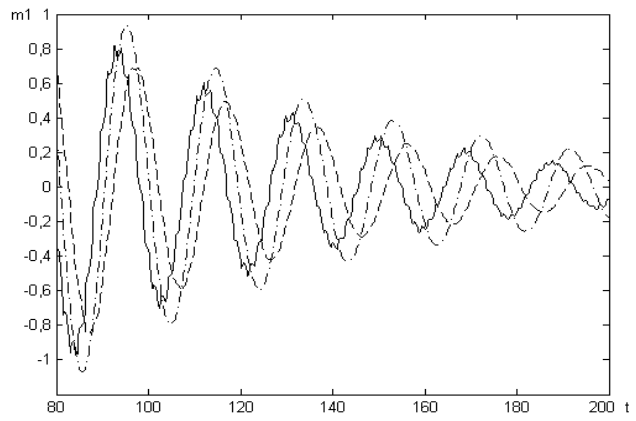


Рис. 3: Оценки математического ожидания решения СДУ (10) при $m_\xi = 2$, $\sigma_\xi = 0$ (сплошная линия), $m_\xi = -2$, $\sigma_\xi = 0$ (штриховая линия) и $m_\xi = 0$, $\sigma_\xi = 2$ (штрих-пунктирная линия)

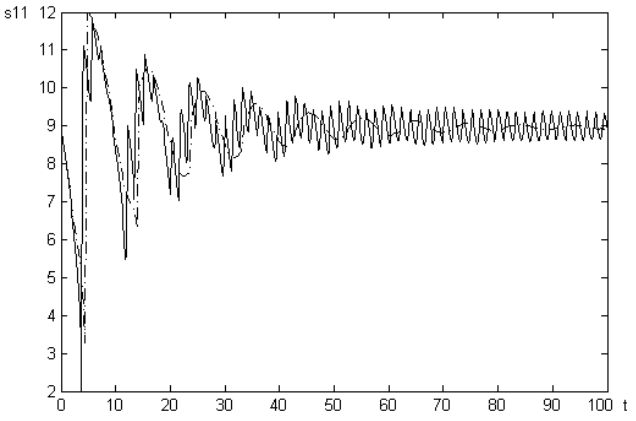


Рис. 4: Оценки второго момента решения СДУ (10) при $m_\xi = 2$, $\sigma_\xi = 0$ (сплошная линия) и $m_\xi = 0$, $\sigma_\xi = 2$ (штрих-пунктирная линия)

Заключение

Для линейного осциллятора получено аналитическое выражение автоковариационной функции решения СДУ, позволяющее совместно с формулами для математического ожидания и дисперсии проводить параметрический анализ и исследовать точность оценок моментов численного решения СДУ. Проведенные

численные исследования влияния пуассоновской составляющей на осциллятор Ван–дер–Поля показали, что большие значения $|m_\xi|$ приводят к искажениям колебаний оценок моментных функций по сравнению с вариантом нормальной случайной величины скачков при $m_\xi = 0$, $\sigma_\xi \neq 0$. При $m_\xi > 0$ колебания оценок включают в себя высокочастотную составляющую в виде "биений", амплитуда которых растет с ростом m_ξ, а при $m_\xi = 0$ и больших значениях σ_ξ они отсутствуют.

Список литературы

[1] Артемьев С.С., Марченко М.А., Корнеев В.Д., Якунин М.А., Иванов А.А., Смирнов Д.Д. Анализ стохастических колебаний методом Монте-Карло на суперкомпьютерах. Новосибирск: Изд. СО РАН, 2016.

[2] Gitterman M. Classical harmonic oscillator with multiplicative noise // Physica A. 2005. Vol. 352. P. 309–334.

[3] Gitterman M. New stochastic equation for a harmonic oscillator: Brownian motion with adhesion // Journal of Physics: Conference Series. 2010. Vol. 248.

[4] Guo S.S., Er G.K. The probabilistic solution of stochastic oscillators with even nonlinearity under poisson excitation // Central European Journal of Physics. 2012. Vol. 10, N 3. P. 702–707.

[5] Er G.K., Zhu H.T., Iu V.P., Kou K.P. PDF solution of nonlinear oscillators subject to multiplicative Poisson pulse excitation on displacement // Nonlinear Dynamics. 2009. Vol. 55, iss. 4. P. 337–348.

[6] Артемьев С.С., Якунин М.А. Параметрический анализ осциллирующих решений СДУ с винеровской и пуассоновской составляющими методом Монте-Карло // Сиб. журн. индустриальной математики. 2017. Т. 20, № 2. С. 3–14.

[7] Platen E., Bruti-Liberati N. Numerical solution of stochastic differential equations with jumps in finance. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2010.

[8] Тихонов В.И. Статистическая радиотехника. М.: Радио и связь, 1982.

Михаил Александрович Якунин — к.ф.-м.н., ст.науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: yma@osmf.sscc.ru.
Дата поступления — 25 мая 2017 г.

ОПТИМИЗАЦИОННЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

М. В. Янулевич, А. С. Стрекаловский

Институт динамики систем и теории управления имени В.М. Матросова СО РАН, 664033, Иркутск

УДК 519.615.5+519.853.4

Рассматривается задача численного решения системы нелинейных алгебраических уравнений. Исследуемая задача редуцируется к оптимизационной задаче, для решения которой применяется теория глобального поиска, основанная на необходимых и достаточных условиях глобальной оптимальности для задач d.c. минимизации. Метод глобального поиска включает в себя два основных этапа: локальный поиск и процедуру улучшения (критических) точек, полученных локальным поиском. Проведен вычислительный эксперимент, в ходе которого исследована эффективность работы методов локального и глобального поисков на различных тестовых задачах отыскания решения систем нелинейных уравнений.

Ключевые слова: системы нелинейных алгебраических уравнений, невыпуклая оптимизация, d.c. функции, локальный поиск, глобальный поиск.

Введение

Несмотря на широкий спектр методов [1–3], разработанных для решения систем нелинейных алгебраических уравнений, проблема численного поиска решений остается весьма актуальной. Например, при применении методов типа Ньютона [1, 4–6], возникает трудность в выборе подходящего начального приближения, обеспечивающего сходимость к решению. Причем с ростом размерности системы сложность поиска стартовой точки многократно возрастает.

В случае использования вариационных методов мы имеем дело с экстремальной задачей, которая на практике оказывается невыпуклой. Уже на протяжении нескольких десятилетий для специалистов препятствием являются невыпуклым задачам оптимизации [7–11], в которых может существовать достаточно большое количество локальных решений и стационарных точек, весьма далеких от глобального решения по значению целевой функции. Выпуклые же задачи оптимизации, как известно, обладают свойством, что каждое локальное решение является глобальным [4].

Для невыпуклых задачах оптимизации прямое применение методов выпуклой оптимизации (ньютоновских, сопряженных градиентов, барьерных и др.) может давать непредсказуемые последствия [12]. Тем не менее, существуют и другие подходы к решению невыпуклых экстремальных задач [10, 13–17]. В частности, обратим внимание на разрабатываемую в последние десятилетия теорию глобального поиска [10], ядром которой являются необходимые и достаточные условия глобальной оптимальности [10, 11].

В настоящей работе для решения систем нелинейных алгебраических уравнений осуществляется их редукция к невыпуклым задачам оптимизации, которые в свою очередь решаются с применением теории глобального поиска (ТГП) [10]. Основными этапами ТГП являются локальный поиск и процедура нелокального улучшения по значению целевой функции. Кроме того, осуществляется сравнительное численное тестирование разработанных алгоритмов с известными пакетами [18, 19], показавшее эффективность применяемого подхода на серии тестовых задач.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 15-11-20015).

1 Постановка задачи

Рассмотрим следующую систему уравнений:

$$f_i(x) := g_i(x) - h_i(x) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, m, \tag{1}$$

в которой $x \in I\!R^n$, а $x \mapsto f_i(x)$ — (d.c.) функции, представимые в виде разности двух выпуклых функций: $g_i(x)$, $h_i(x)$ — выпуклые на $I\!R^n$ функции, $i = 1, 2, \ldots, m$..

Как известно [3], система уравнений (1) может быть сведена к задаче минимизации

$$F(x) = \Phi(f_1(x), \ldots, f_m(x)) \downarrow \min, \quad x \in I\!R^n, \tag{2}$$

где в качестве функций $\Phi\colon I\!R^m \to I\!R$ можно использовать, например, следующие функции:

$$\Phi_1(t) = \sum_{i=1}^{m} |t_i|, \quad \Phi_2(t) = \sum_{i=1}^{m} t_i^2.$$

Учитывая невыпуклость в общем случае функций $f_i(\cdot)$ (например, см. [7]), нетрудно видеть, что задача (2) оказывается невыпуклой.

Замечание 1.1. Отметим, что для численного решения системы уравнений (1) использование функции $\Phi_1(t) = \|t\|_1$, $t \in I\!R^m$, выглядит предпочтительным. Действительно, если точка $\tilde{x}$ является приближенным решением задачи (2) с точностью ε ($\tilde{x} \in \varepsilon$-$Sol(2)$):

$$F(\tilde{x}) \le \inf_x \{F(x) \mid x \in I\!R^n\} + \varepsilon = \varepsilon,$$

то в случае использования функции $\Phi_1(t) = \|t\|_1$, $t \in I\!R^m$, мы получаем, что $|f_i(\tilde{x})| \le \varepsilon$ $\forall i = 1, 2, \ldots, m$. Если же выбрать функцию $\Phi_2(t) = \|t\|_2^2$, $t \in I\!R^m$, то при тех же условиях мы получим, что $|f_i(\tilde{x})| \le \varepsilon^{\frac{1}{2}}$ $\forall i = 1, 2, \ldots, m$. Другими словами, если удалось найти решение оптимизационной задачи (2), например, с точностью $\varepsilon = 10^{-4}$, что в случае выбора функции $\Phi_1(\cdot)$ каждое уравнение системы (1) выполняется с той же точностью 10^{-4}, а в случае выбора $\Phi_2(\cdot)$ каждое уравнение системы (1) выполняется с точностью 10^{-2}. $\square$

Далее в работе для сведения системы уравнений (1) к оптимизационной задаче (2) мы будем использовать функцию

$$\Phi(t) := \Phi_w(t) = \sum_{i=1}^{m} w_i |t_i|, \tag{3}$$

где $w = (w_1, w_2, \ldots, w_m)^\top$ — вектор весовых коэффициентов, который вводится с целью решения проблемы масштабирования значений функции $f_i(\cdot)$ (например, см. [20]). В этой случае целевая функция задачи (2) является негладкой.

Используя известные свойства d.c. функций [7, 8, 10, 21], нетрудно видеть, что целевая функция $F(\cdot)$ задачи (2) является d.c. функцией, т.е. представима в виде разности двух выпуклых функций:

$$F(x) = G(x) - H(x), \tag{4}$$

где функции

$$G(x) = 2\sum_{i=1}^{m} w_i \max\{g_i(x), h_i(x)\}, \qquad H(x) = \sum_{i=1}^{m} w_i (g_i(x) + h_i(x)) \tag{5}$$

являются выпуклыми. Таким образом, для решения задачи

$$(\mathcal{P})\colon \qquad F(x) = G(x) - H(x) \downarrow \min, \quad x \in I\!R^n, \tag{2'}$$

являющейся эквивалентной системе уравнений (1), может быть использована теория глобального поиска для d.c. минимизации [10, 17], в соответствии с которой поиск глобального решения в задаче ($\mathcal{P}$) состоит из двух основных этапов: локального поиска и процедуры нелокального улучшения, основанной на условиях глобального оптимальности.

2 Метод локального поиска

Метод локального поиска для задачи d.c. минимизации $(\mathcal{P})$ состоит в последовательном (приближенном) решении задач

$$(\mathcal{P}L_s): \quad \Phi_s(x) = G(x) - \langle \nabla H(x^s), x\rangle \downarrow \min_x, \quad x \in I\!R^n. \tag{6}$$

Зная точку x^s, можно построить точку x^{s+1} как приближенное решение задачи (6):

$$\Phi_s(x^{s+1}) \le \inf_x\{\Phi_s(x) \mid x \in I\!R^n\} + \delta_s, \tag{7}$$

где числовая последовательность $\{\delta_s\}$ такая, что $\delta_s > 0, \quad s = 0, 1, 2, \ldots, \quad \sum\limits_{i=0}^{\infty} \delta_s < +\infty$.

Можно показать [10,17,22], что в случае сильной выпуклости [23] функции $H(\cdot)$ последовательность $\{x^s\}$, генерируемая методом локального поиска, сходится к точке x_*, являющейся решением линеаризованной задачи

$$\Phi_*(x) = G(x) - \langle \nabla H(x_*), x\rangle \downarrow \min_x, \quad x \in I\!R^n. \tag{8}$$

Точку x_* в этом случае будем называть критической точкой в задаче $(\mathcal{P}_0)$.

В качестве критерия останова метода локального поиска будем использовать следующее неравенство:

$$\Phi_s(x^s) - \Phi_s(x^{s+1}) + \delta_s \le \tau, \tag{9}$$

которое обеспечивает то, что точка x^s является δ_s-критической, т.е. является δ_s-приближенным решением задачи $(\mathcal{P}L_s)$:

$$\Phi_s(x^s) \le \inf_x\{\Phi_s(x) \mid x \in I\!R^n\} + \tau.$$

С учетом d.c. разложения (4)–(5) выпуклую задачу $(\mathcal{P}L_s)$ можно представить в следующем виде:

$$\Phi_s(x) = 2\sum_{i=1}^{m} w_i \max\{g_i(x), h_i(x)\} - \sum_{i=1}^{m} w_i \langle \nabla g_i(x^s) + \nabla h_i(x^s), x\rangle \downarrow \min_x, \quad x \in I\!R^n. \tag{6'}$$

Данная задача является, вообще говоря, негладкой задачей оптимизации, для решение которой можно использовать соответствующие методы негладкой оптимизации. Тем не менее, в работе предлагается осуществлять решение задачи $(\mathcal{P}L_s)$ без использования методов негладкой оптимизации, редуцируя негладкие задачи к гладким [5] и применяя известные методы и пакеты программ для выпуклой оптимизации (в частности, IBM ILOG CPLEX [24] или Gurobi [25]).

3 Системы квадратичных уравнений

С целью проведения численного тестирования метода локального поиска были рассмотрены следующие системы систем нелинейных уравнений с квадратичными функциями:

$$f_i(x) = \frac{1}{2}\langle x, C_i x\rangle + \langle d^i, x\rangle + \gamma_i = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, m, \tag{10}$$

где $(n \times n)$-матрицы C_i, $i = \overline{1,m}$, являются, вообще говоря, знаконеопределенными. Как известно [10], их можно представить в виде разности двух положительно определенных матриц: $C_i = A_i - B_i, \quad A_i, B_i > 0$ $\forall i \in \{1, 2, \ldots, m\}$. Далее, система (10) редуцируется к оптимизационной задаче $(\mathcal{P})$, где целевая функция $F(\cdot)$, которая представима в виде разности двух выпуклых функций:

$$G(x) = \sum_{i=1}^{m} \max\{\langle x, A_i x\rangle + \langle d^i, x\rangle + \gamma_i, \langle x, B_i x\rangle - \langle d^i, x\rangle - \gamma_i\}, \quad H(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\langle x, (A_i + B_i)x\rangle.$$

Нетрудно видеть, что функция $G(\cdot)$, $j = 1, 2$, является негладкой, а функция $H(\cdot)$ дифференцируема.

Для произвольного фиксированного вектора $y \in I\!R^n$ необходимо уметь решать следующую вспомогательную линеаризованную выпуклую задачу:

$$(\mathcal{P}L(y)): \quad \Phi_y(x) = G(x) - \langle \nabla H(y), x\rangle \downarrow \min_x, \quad x \in I\!R^n.$$

Вообще говоря, существует бесконечно много представлений матриц C_i, $i = 1, 2, \ldots, m$, в виде разности двух положительно определенных матриц. В работе будем использовать разложение матриц C_i, $i = 1, 2, \ldots, m$, в соответствии с процедурой, описанной, в частности, в [10].

Кроме того, разложение матриц C_i, $i = 1, 2, \ldots, m$, можно осуществить, например, следующим образом: $C_i = A_i - B_i$, где $A_i = C_i + \mu_i I$, $B_i = \mu_i I$, $i = 1, 2, \ldots, m$. При этом параметр $\mu_i \geq 0$ полагается равным $\mu_i := -\min\{0, \lambda_{\min}(C_i)\} + \chi$, $\chi \geq 0$, где $\lambda_{\min}(C_i)$ — минимальное собственное значение матрицы C_i, $i = \overline{1, m}$.

4 Численное тестирование метода локального поиска

В данном разделе приведем результаты тестирования метода локального поиска, заключающегося в последовательном приближенном решении выпуклых задач $(\mathcal{P}L_s)$–(6), $s = 0, 1, 2, \ldots$. Для решения задач $(\mathcal{P}L_s)$, $s = 0, 1, 2, \ldots$, использовался пакет программ IBM ILOG CPLEX 12.6.2 (64 bit) [24]. Программная реализация метода локального поиска осуществлялась на языке C++. Все вычисления проводились на ПК с процессором Intel Core i5–4670K 3.4GHz и RAM 16 Gb.

Для вычислительного эксперимента были взяты примеры из набора тестовых систем нелинейных (квадратичных) уравнений из [26], решения которых заранее известны. В частности, представим результаты тестирования на следующих тестовых задачах:

$$(\mathcal{P}_1): \qquad f_i(x) = (3 - 2x_i)x_i + 1 - x_{i-1} - 2x_{i+1} = 0, \quad i = \overline{1, n}, \quad x_0 = x_{n+1} = 0,$$

$$(\mathcal{P}_2): \qquad f_1(x) = 1 - x_1 = 0, \quad f_i(x) = 10(i-1)(x_i - x_{i-1})^2 = 0, \quad i = \overline{2, n}.$$

Выбирались 10 различных стартовых точек с целью создать наихудшие условия для работы тестируемого алгоритма, а также для подготовки работы метода глобального поиска.

			SLSM			STRSCNE			MATLAB		
n	$N(x^0)$	$F(x^0)$	$F(\bar{x})$	It	Time	$F(\bar{x})$	It	Time	$F(\bar{x})$	It	Time
10	1	57	1.61919	30	0.2	2.56295	136	0.11	2.56360	21	0.09
10	2	9	1.37246	85	0.28	2.56295	124	0.11	2.80064	16	0.08
10	3	114	1.47488	26	0.11	2.56295	138	0.11	2.56251	18	0.08
10	4	10	**0**	2	0.01	**0**	6	0.01	**0**	7	0.03
10	5	1960	1.71204	6	0.01	2.80132	98	0.09	2.80150	25	0.07
10	6	8	1.37238	54	0.19	2.56295	118	0.10	2.56353	17	0.08
10	7	60	**0**	3	0.01	**0**	6	0.01	**0**	5	0.06
10	8	784	1.35361	64	0.22	2.56295	145	0.12	2.56351	20	0.07
10	9	748	1.71262	42	0.17	2.80132	111	0.09	2.80215	40	0.11
10	10	3422	1.71112	7	0.03	2.80132	94	0.08	2.80220	41	0.11
30	1	177	1.59832	4	0.02	2.69624	124	0.33	2.69804	41	0.58
30	2	29	1.41425	3	0.02	2.69624	113	0.29	2.89842	21	0.40
30	3	354	1.53945	6	0.02	2.69624	128	0.49	2.69794	40	0.52
30	4	30	**0**	3	0.02	**0**	6	0.08	2.07460	31	0.26
30	5	5940	1.76974	6	0.03	2.89807	103	0.27	2.90133	50	0.60
30	6	23	1.41424	3	0.01	2.69624	101	0.55	2.69833	41	0.32
30	7	180	**0**	3	0.02	**0**	6	0.21	**0**	5	0.31
30	8	18924	1.53936	8	0.03	2.69624	118	0.72	2.69768	46	0.66
30	9	18848	1.76981	9	0.03	2.89796	233	1.21	2.90066	52	0.36
30	10	9193.3	1.7698	7	0.03	2.89807	105	0.51	2.90090	64	0.56

Таблица 1: Результаты сравнительного тестирования метода локального поиска на задаче $(\mathcal{P}_1)$

Было произведено сравнительное тестирование метода локального поиска с результатами, полученными в среде MathWorks MATLAB 7.11.0.584 R2010b 64-bit с использованием стандартного решателя "fsolve" [18], а также Scaled Trust Region Solver for Constrained Nonlinear Equations (STRSCNE) [19]. Результаты сравнительного тестирования представлены в Табл. 1. Здесь и далее в таблицах используются следующие обозначения: $N(x^0)$ — номер стартовой точки x^0; $F(x_0)$ и $F(\bar{x})$ — значение целевой функции задачи $(\mathcal{P})$ в стартовой точке x^0 и полученной точке $\bar{x}$ соответственно; It — число итераций метода (количество решенных вспомогательных выпуклых задач на этапе локального поиска); Time — время работы (в секундах).

Жирным шрифтом выделены случаи, когда уже на этапе локального поиска было получено глобальное решение. Как нетрудно видеть из Табл. 1, метод локального поиска оказался эффективнее по полученному значению целевой функции задачи $(\mathcal{P})$ в сравнении с решателями "fsolve" [18] и STRSCNE [19], хотя время его работы при этом было больше.

Следует отметить, что (d.c.) разложение матриц C_i имеет значительное влияние на результаты вычислительного эксперимента, которые могут существенно отличаться. Так, например, в тестовой задаче $(\mathcal{P}_2)$, в которой все функции $f_i(\cdot)$, $i = \overline{1,m}$, являются выпуклыми, оказалось, что в случае использования весовых коэффициентов $w_i = 1$, $i = \overline{1,m}$, и разложения матриц C_i, $i = \overline{1,m}$, основанного на их минимальном собственном значении, уже на этапе локального поиска мы получаем приближенное глобальное решение с точностью 10^{-3} (см. Табл. 2). Для задачи $(\mathcal{P}_2)$ использование весовых коэффициентов дало лишь выигрыш по времени работы метода локального поиска, но не по значению функции $F(\cdot)$.

				СМЛП with weights				СМЛП without weights		
x^0	$n = m$	$F(x^0)$	$F_w(x^0)$	$F(\bar{x})$	$F_w(\bar{x})$	PL	Time	$F(\bar{x})$	PL	Time
1	100	198000	49.5	0.98732	0.00014	7	0.12	0.00086	20	0.39
2	100	0	0	0	0	1	0.01	0	1	0.01
3	100	792001	50.5	3.94734	0.00014	7	0.13	0.00121	19	0.39
4	100	1	1	0	0	2	0.03	0	2	0.03
5	100	9	1	0.50000	0.05555	2	0.03	0	2	0.03
6	100	12375	49.5	0.06182	0.00014	7	0.13	0.00075	17	0.34
7	100	49502	50.5	0.74647	0.25013	7	0.11	0.00075	18	0.36
8	100	993283500	49.5	10381.62488	0.00014	7	0.12	0.00104	19	0.39
9	100	4900500	49.5	1.04005	0.00014	7	0.13	0.00088	20	0.41
10	100	1980.8	50.2	0.00988	0.00014	7	0.12	0.00077	15	0.31

Таблица 2: Результаты тестирования метода локального поиска на задаче $(\mathcal{P}_2)$

5 Глобальный поиск

Глобальный поиск осуществлялся в соответствии с теорией глобального поиска из [10] (см. также [17])

В Табл. 3–3 представлены результаты тестирования алгоритма глобального поиска. В дополнение к предыдущим обозначениям в Табл. 3–3 будем использовать следующие: $F(z)$ — значение целевой функции в полученной точке; It_{glob} — количество итераций алгоритма глобального поиска.

		GSA				STRSCNE			MATLAB		
x^0	$F(x^0)$	$F(z)$	It_{glob}	PL	Time	$F(z)$	It	Time	$F(z)$	It	Time
1	57	0	7	976	3.12	2.56295	136	0.11	2.56360	21	0.09
2	9	0	3	888	2.78	2.56295	124	0.11	2.80064	16	0.08
3	114	0	7	969	3.10	2.56295	138	0.11	2.56251	18	0.08
5	1960	0	10	1913	6.19	2.80132	98	0.09	2.80150	25	0.07
6	8	0	4	907	2.87	2.56295	118	0.10	2.56353	17	0.08
8	784	0	19	2587	8.45	2.56295	145	0.12	2.56351	20	0.07
9	748	0	10	2102	6.76	2.80132	111	0.09	2.80215	40	0.11
10	3422	0	9	2060	6.63	2.80132	94	0.08	2.80220	41	0.11

Таблица 3: Результаты тестирования алгоритма глобального поиска на задаче $(\mathcal{P}_1)$, $n = 10$

Как можно видеть из результатов вычислительного эксперимента, на небольшой размерности систем уравнений (в частности, при $n = 10$) отличие от методов STRSCNE [19] и MATLAB "fsolve" [18] для всех стартовых точек алгоритм глобального поиска позволил отыскать глобальное решение задачи $(\mathcal{P})$, а значит и решение системы уравнений $(\mathcal{P}_1)$.

Отметим. что с ростом размерности задачи ситуация изменяется. Вычислительный эксперимент показал (см. Табл. 4), что при размерности $n = 20$, стартуя из 2 точек (с номерами 3 и 10), алгоритмом глобального поиска не удалось найти глобальное решение (значения целевого функционала выделены курсивным шриф-

x^0	$F(x^0)$	GSA				STRSCNE			MATLAB		
		$F(z)$	It_{glob}	PL	Time	$F(z)$	It	Time	$F(z)$	It	Time
1	117	0	7	3147	11.23	2.69240	284	1.14	2.69243	32	0.38
2	19	0	7	3453	13.06	2.69240	93	0.32	2.89438	19	0.2
3	234	*0.83067*	12	4624	18.39	2.69240	81	0.19	2.69247	32	0.15
5	3950	0	24	7415	29.13	2.89458	104	0.47	2.89584	47	0.77
6	15	0	7	3592	13.48	2.69240	80	0.22	2.69239	32	0.29
8	5754	0	18	6719	27.23	2.69240	79	0.39	2.69377	31	0.26
9	5698	0	29	8743	38.18	2.89459	118	0.23	2.89457	146	0.79
10	6494	*0.83067*	22	7261	28.34	2.89459	112	0.53	2.89578	54	0.38

Таблица 4: Результаты тестирования алгоритма глобального поиска на задаче $(\mathcal{P}_1)$, $n = 20$

том). Отметим при этом, что алгоритму всегда все же удавалось несколько раз осуществлять нелокальные улучшения критических точек (см. колонку It_{glob}).

Тем не менее, результаты алгоритма глобального поиска оказались значительно лучше в сравнении с результатами STRSCNE [19] и MATLAB "fsolve" [18], что свидетельствует об эффективности работы алгоритма глобального поиска. При этом нужно отметить, что модификация и усовершенствование алгоритма глобального поиска будут продолжены.

Заключение

На основе теории глобального поиска [10] разработан алгоритм решения систем нелинейных уравнений, основанных на редукции к негладкой невыпуклой задаче оптимизации. Данный подход протестирован на серии тестовых систем квадратичных уравнений из [26] и произведено сравнение с известными пакетами программ [18, 19]. Результаты вычислительно эксперимента в большинстве случаев продемонстрировали высокую эффективность разработанного подхода.

Список литературы

[1] Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2008.

[2] Dennis J., Schnabel R. Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations. New York: SIAM, 1996.

[3] Ortega J., Rheinboldt W. Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables. New York: Academic Press, 1970.

[4] Васильев Ф.П. Методы оптимизации. М.: Факториал Пресс, 2002.

[5] Nocedal J., Wright S. Numerical Optimization. New York: Springer, 2006.

[6] Izmailov A.F., Solodov M. Newton-Type Methods for Optimization and Variational Problems. New York: Springer, 2014.

[7] Hiriart-Urruty J.-B. Generalized differentiability, duality and optimization for problems dealing with difference of convex functions // Convexity and Duality in Optimization / Ed. by J. Ponstein. Vol. 256 of Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems. Berlin: Springer-Verlag, 1985. P. 37–70.

[8] Tuy H. Convex Analysis and Global Optimization. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1998.

[9] Handbook of Global Optimization, Nonconvex Optimization and its Applications / Ed. by R. Horst, P.M. Pardalos. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1995.

[10] Стрекаловский А.С. Элементы невыпуклой оптимизации. Новосибирск: Наука, 2003.

[11] Strekalovsky A.S. Global optimality conditions in nonconvex optimization // Journal of Optimization Theory and Applications. 2017. Vol. 173, No. 3. P. 770–792.

[12] Mascarenhas W. Newton's iterates can converge to non-stationary points // Mathematical Programming. 2008. Vol. 112, No. 2. P. 327–334.

[13] Strongin R.G., Sergeev Y.D. Global Optimization with Non-convex Constraints. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2000.

[14] Tuy H. On solving nonconvex optimization problems by reducing the duality gap // Journal of Global Optimization. 2005. Vol. 32, No. 3. P. 349–365.

[15] Zilinskas A. A strong homogeneity of two global optimization based on statistical models of multimodal objective functions // Applied Mathematics and Computation. 2012. Vol. 218, No. 16. P. 8131–8136.

[16] Floudas C. Deterministic Global Optimization: Theory,Methods and Application. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1999.

[17] Strekalovsky A.S. On solving optimization problems with hidden nonconvex structures // Optimization in Science and Engineering / Ed. by T.M. Rassias, C.A. Floudas, S. Butenko. New York: Springer, 2014. P. 465–502.

[18] MathWorks. MATLAB. https://www.mathworks.com/help/optim/ug/fsolve.html. 2017. Accessed: 31.05.2017.

[19] Bellavia S., Macconi M., Morini B. STRSCNE: A scaled trust region solver for constrained nonlinear equations // COAP. 2004. Vol. 28, No. 1. P. 31–50.

[20] Gill P., Murray W., Wright M. Practical optimization. London: Academic Press, 1981.

[21] Horst R., Tuy H. Global Optimization: Deterministic Approaches. Berlin: Springer-Verlag, 1996.

[22] Strekalovsky A.S. On local search in d.c. optimization problems // Applied Mathematics and Computation. 2015. Vol. 255. P. 73–83.

[23] Rockafellar R.T. Convex Analysis. Princeton, NJ: Princeton University Press, 1970.

[24] IBM. IBM ILOG CPLEX manual. http://www-03.ibm.com/software/products/ru/ibmilogcpleoptistud. 2017. Accessed: 31.05.2017.

[25] Gurobi Optimization, Inc. Gurobi optimizer reference manual. http://www.gurobi.com. 2016. Accessed: 31.05.2017.

[26] Roose A., Kulla V., Lomp M., Meressoov T. Test examples of systems of non-linear equations Tallin: Estonian Software and Computer Service Company, 1990.

Максим Викторович Янулевич — программист Института динамики систем и теории управления имени В.М. Матросова СО РАН;
e-mail: max@irk.ru;
Александр Сергеевич Стрекаловский — д.ф.-м.н., зав. лабораторией Института динамики систем и теории управления имени В.М. Матросова СО РАН;
e-mail: strekal@icc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ РЕГИОНАЛЬНЫХ ВЫПАДЕНИЙ АЭРОЗОЛЬНЫХ ПРИМЕСЕЙ ОТ ПРОМЫШЛЕННЫХ ИСТОЧНИКОВ ПО НАЗЕМНЫМ И СПУТНИКОВЫМ НАБЛЮДЕНИЯМ

Т. В. Ярославцева[1], В. Ф. Рапута[2]

[1] *Новосибирский НИИ гигиены Роспотребнадзора, 630108, Новосибирск*

[2] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 528.8:574

Обсуждаются экспериментальные и численные исследования полей длительных выпадений примесей на значительных удалениях от точечных и площадных источников. В качестве экспериментальных данных использовались результаты наземных и спутниковых исследований загрязнения снежного покрова в окрестностях городов и промышленных площадок Сибири. Выявлено наличие функциональной связи между изменениями тонов серого цвета по мере удаления от источника и динамикой уменьшения концентраций примесей.

Ключевые слова: загрязнение, снежный покров, спутниковые наблюдения, модель, функциональная связь.

Введение

Описание полей длительного загрязнения территорий на значительных удалениях от источника атмосферных выбросов примесей допускает существенные упрощения. Экспериментальные и теоретические исследования показывают, что, в зимнее время, начиная с расстояний порядка 5–7 км от источника, распределение концентрации примеси выравнивается по высоте слоя перемешивания [1]–[3]. Для таких расстояний влияние ряда параметров нивелируется. К ним следует отнести высоту источника, скорость оседания аэрозольных частиц и т.д.

Одним из наиболее надежных индикаторов контроля пространственного распространения аэрозольных примесей от атмосферных источников является снежный покров. Методы исследования состава снега освещены во многих работах [4]–[6]. В настоящее время существенным дополнением к наземным измерениям являются спутниковые наблюдения состояния снежного покрова в окрестностях городов, ТЭЦ, промышленных предприятий, крупных автомагистралей [7]–[10]. Совместное использование данных наземных и спутниковых наблюдений загрязнения снежного покрова позволяет более надёжно и детально описать поля выпадений примесей, повысить экономичность проводимых мониторинговых исследований.

1 Модели оценивания региональных выпадений примеси

При реконструкции полей концентраций требуется определённая стилизация и упрощение модельных описаний процессов переноса примесей в атмосфере. В начале ограничимся рассмотрением случая стационарного точечного источника и пусть длительный вынос примеси от него по направлениям происходит в соответствии с розой ветров. В этом случае для построения модели оценивания целесообразно воспользоваться записью полуэмпирического уравнения переноса и диффузии примеси в цилиндрической системе координат

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r \cdot u(z)q) = \frac{\partial}{\partial z}\nu(z)\frac{\partial q}{\partial z}. \qquad (1)$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН, проект 18.

Здесь ось r находится в горизонтальной плоскости и сориентирована по направлению ветра, ось z направлена вверх, $u(z)$ — горизонтальная компонента скорости ветра, ν — коэффициент вертикального турбулентного обмена. Интегрируя уравнение (1) по z от 0 до H — верхней границы пограничного слоя атмосферы, получим следующее соотношение

$$\frac{\partial}{\partial r}(r\int_0^H u(z)q(r,z)dz) = 0. \tag{2}$$

Отсюда следует

$$\int_0^H u(z)q(r,z)dz = \frac{C}{r}, \tag{3}$$

где C — константа интегрирования.
Используя обобщённую интегральную теорему о среднем значении функции [11], получим, что

$$q(r, z_{cp}) = \frac{C}{r \cdot \bar{U}}, \qquad \bar{U} = \int_0^H u(z)dz. \tag{4}$$

Учитывая, что при достаточно больших r концентрация примеси практически не зависит от z, из (4) вытекает соотношение для оценивания длительного загрязнения на значительных удалениях от источника в заданном направлении.

Константа интегрирования $C(\varphi)$ пропорциональна мощности эмиссии, повторяемости направлений ветра и обратно пропорциональна толщине слоя перемешивания и средней скорости ветра в нём, т.е.

$$C(\varphi) = \frac{M \cdot g(\varphi)}{2\pi H}, \tag{5}$$

где $g(\varphi)$ — вероятность противоположного φ направления ветра, M — мощность эмиссии, H — толщина слоя перемешивания.

Для фиксированного угла φ_0 оценка неизвестного параметра $C(\varphi_0)$ в (4) может быть найдена с использованием данных наблюдений, например по методу наименьших квадратов. Зависимость (4) позволяет проводить восстановление полей аэрозольных выпадений примесей по сравнительно небольшому числу опорных точек измерения.

Для оценивания регионального загрязнения территорий площадным источником S следует использовать достаточно компактное и вполне адекватное описание [12]:

$$Q(x,y) = \frac{\theta \cdot P(\arctan\frac{y-\mu}{x-\lambda} + 180^\circ)}{\sqrt{(x-\lambda)^2 + (y-\mu)^2}}, \qquad \theta = \frac{M}{2\pi\bar{U}H}, \qquad M = \iint_S m(\xi,\eta)d\xi d\eta, \tag{6}$$

где M — суммарное поступление примеси с территории S, $m(\xi,\eta)$ — эмиссия примеси из точки (ξ,η), принадлежащей S, P — роза ветров, λ, μ — эффективный центр выброса.
Предполагается, что точка (x,y) удалена от S на расстояние более 5–7 км.

2 Оценивание региональных выпадений от площадного источника.

На рис. 1 представлена схема отбора проб снега в северо-восточном направлении от Новосибирска и результаты численной реконструкции по модели (6) содержания цинка и хрома в снеговых пробах. В качестве опорной точки наблюдения была взята точка под номером 1, расположенная в районе пос. Мочище.

Анализ рис. 1б и 1в показывает, что в контрольных точках имеет место вполне удовлетворительное согласие между вычисленными и измеренными концентрациями тяжёлых металлов.

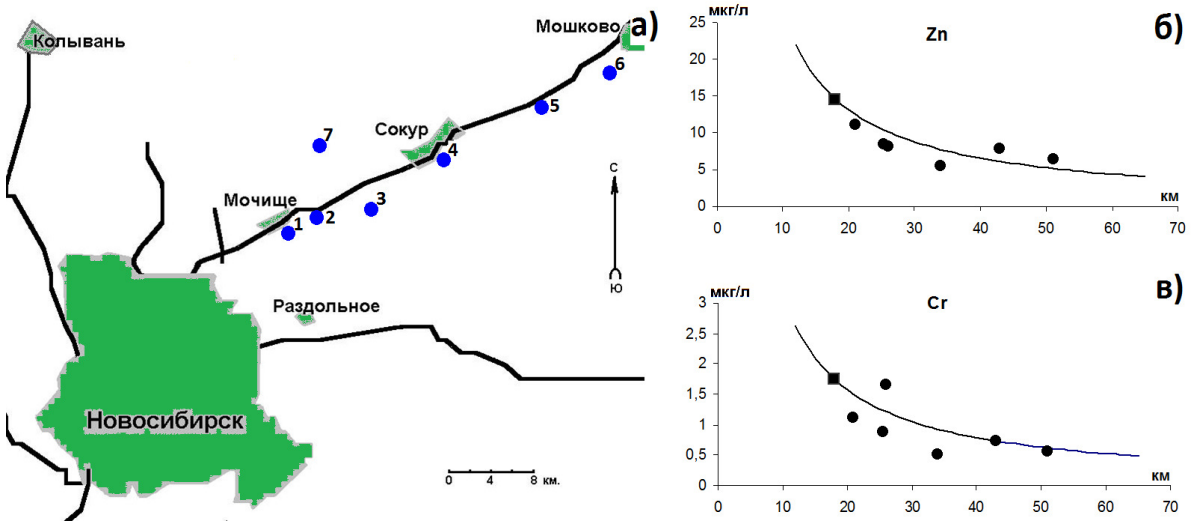


Рис. 1: Схема отбора проб снега (а). Измеренные и восстановленные по модели (б) выпадения цинка (б), хрома (в) в направлении на северо-восток от г. Новосибирска. ■ — опорная точка, • — контрольные точки наблюдений

3 Анализ функциональных связей

С использованием спутниковых снимков проведём количественное исследование ореолов загрязнения снежного покрова в окрестностях крупных промышленных предприятий Сибири: Норильского асфальто-бетонного завода и Искитимского цементного завода (Новосибирская обл.). Для этой цели спутниковые снимки на рис. 2а и рис. 3а были проиндексированы с помощью дискретной шкалы оттенков серого цвета по направлениям доминирующих выносов примесей.

Изучение рис. 2б и рис. 3б показало, что в ближней зоне выпадений примесей в значительной степени проявляются локальные особенности их распространения, обусловленные высотами источников, дисперсным составом, текущими метеорологическими условиями и т.д. Начиная же примерно с 4-х км и далее изменения интенсивности тонов происходит монотонным образом. Дальнейший анализ снимков на рис. 2, 3 с использованием модели (4) позволил выявить наличие функциональных связей между изменениями тонов серого цвета по мере удаления от источников и динамикой уменьшения концентраций примесей (рис. 2в, 3в). Как показало численное исследование, вполне удовлетворительное их описание может быть достигнуто с помощью логарифмической аппроксимации рассматриваемых рядов данных.

Заключение

С использованием уравнения баланса лёгкой примеси в пограничном слое атмосферы на основе асимптотик его решений построены экономичные по числу опорных точек модели реконструкции регионального загрязнения территорий сосредоточенными и площадными источниками. Проведена апробация разработанных моделей на данных натурных исследований аэрозольного загрязнения снежного покрова в окрестностях Новосибирска, а также ряда крупных промышленных предприятий Сибири.

Выявлены устойчивые количественные закономерности между полями выпадения взвешенных веществ и интенсивностью изменения тонов серого цвета на космических снимках в радиальных направлениях от промышленных источников. Для этой цели очаги загрязнения от этих источников были проиндексированы с помощью дискретной шкалы оттенков серого цвета по направлениям доминирующих выносов примесей. Установлено, что для загрязнений регионального масштаба между этими полями характерной является функциональная связь, выражаемая логарифмической зависимостью.

Полученные зависимости позволяют существенно снизить затраты на проведение наземных мониторинговых исследований загрязнения территорий в окрестностях городов и промышленных предприятий. По ограниченному числу опорных точек наблюдений может быть проведена пространственная реконструкция полей выпадений, выполнена оценка суммарных выбросов примесей.

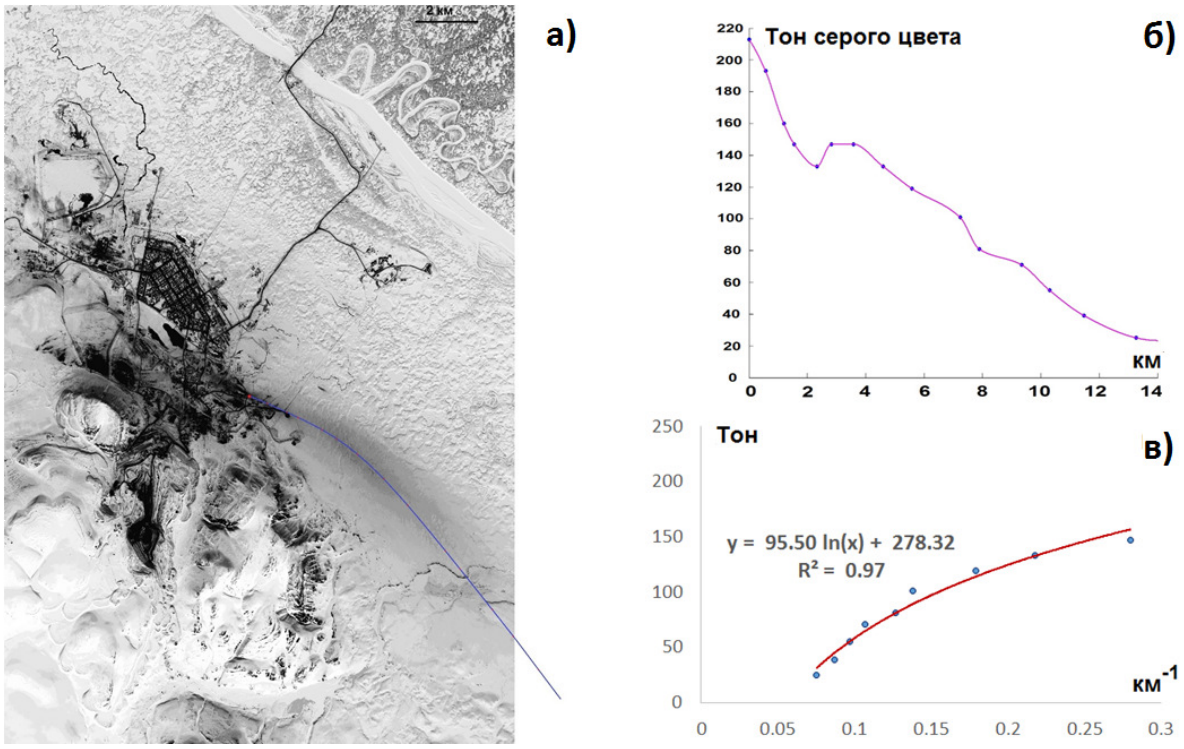


Рис. 2: Спутниковый снимок Норильска (4.05.2004) (а). Изменения тонов серого цвета снежного покрова в юго-восточном направлении выноса пыли от асфальто-бетонного завода (б). Функциональная связь (в)

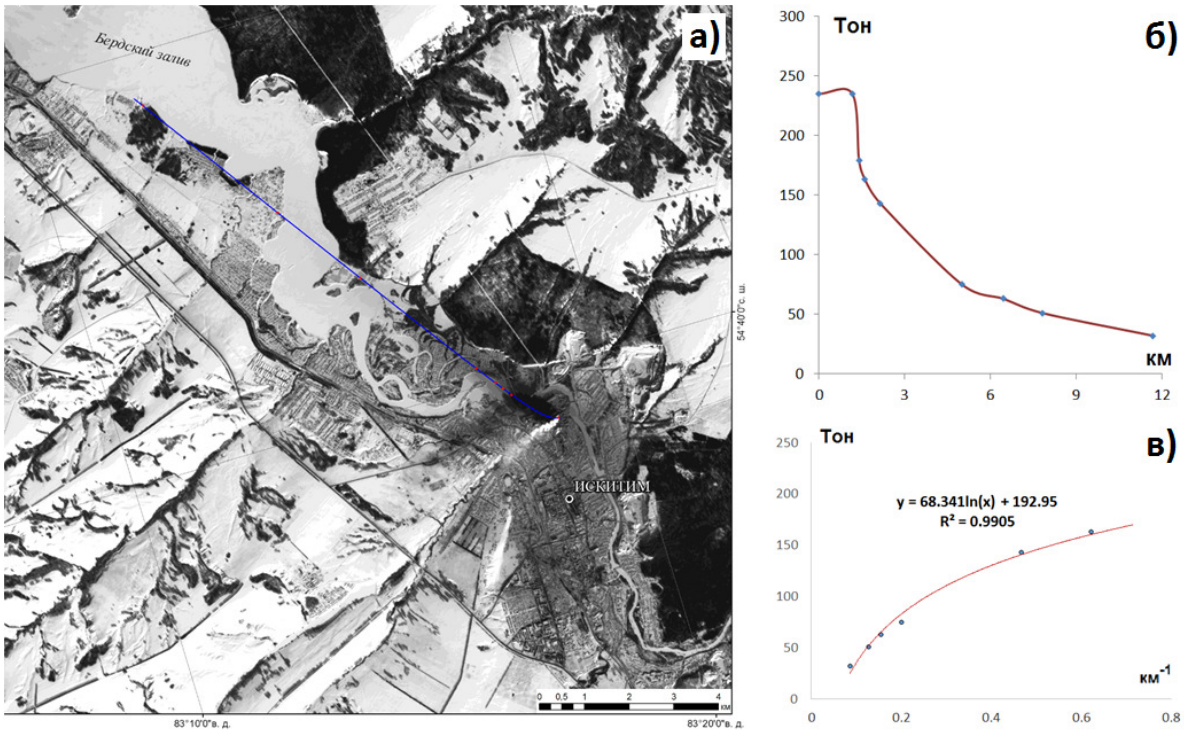


Рис. 3: Спутниковый снимок г. Искитима (7.02.2014) (а). Изменения тонов серого цвета снежного покрова (б) и функциональная связь (в) в северо-западном направлении выноса пыли от цементного завода

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН № 18.

Список литературы

[1] Бызова Н.Л., Гаргер Е.К., Иванов В.Н. Экспериментальные исследования атмосферной диффузии и расчеты рассеяния примеси. Л.: Гидрометеоиздат, 1991. 279 с.

[2] Атмосферная турбулентность и моделирование распространения примесей / Под ред. Ф.Т.М. Ньистада и Х. Ван Допа. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. 351 с.

[3] Берлянд М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. 272 с.

[4] Василенко В.Н., Назаров И.М., Фридман Ш.Д. Мониторинг загрязнения снежного покрова. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. 182 с.

[5] Прокачева В.Г., Усачёв В.Ф. Снежный покров в сфере влияния города. Л.: Гидрометеоиздат, 1989. 176 с.

[6] Бортникова С.Б., Рапута В.Ф., Девятова А.Ю., Юдахин Ф.Н. Методы анализа данных загрязнения снегового покрова в зонах влияния промышленных предприятий (на примере г. Новосибирска) // Геоэкология. 2009. № 6. С. 515–525.

[7] Онучин А.А., Буренина Т.А., Зубарева О.Н., Трефилова О.В., Данилова И.В. Загрязнение снежного покрова в зоне воздействия предприятий Норильского промышленного района // Сибирский экологический журнал. 2014. № 6. С. 1025–1037.

[8] Василевич М.И., Щапов В.М., Василевич Р.С. Применение спутниковых методов исследования при оценке загрязнения снежного покрова вокруг промышленных предприятий в тундровой зоне // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2015. Т. 12. № 2. С. 50–60.

[9] Прокачева В.Г., Усачев В.Ф. Снежный покров как индикатор кумулятивного техногенного загрязнения в сфере влияния городов и дорог // Метеорология и гидрология. 2013. № 3. С. 94–106.

[10] Дмитриев А.В., Дмитриев В.В. Теоретическое и экспериментальное исследование процесса таяния снежного покрова в районе г. Омска по материалам 2007–2009 г. // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2011. Т. 8. № 2. С. 34–41.

[11] Камынин Л.И. Курс математического анализа. М.: Изд-во МГУ, 1995. Т. 2. 624 с.

[12] Рапута В.Ф., Олькин С.Е., Резникова И.К. Методы численного анализа данных наблюдений регионального загрязнения территорий площадным источником // Оптика атмосферы и океана. 2008. Т. 21, № 6. С. 558–562.

Владимир Федотович Рапута — д.ф.-м.н., гл. науч. сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: raputa@sscc.ru;
Татьяна Владимировна Ярославцева — к.т.н., ст. науч. сотр. Новосибирского НИИ гигиены Роспотребнадзора;
e-mail: tani-ta@list.ru.
Дата поступления — 3 мая 2017 г.

H. POINCARE BALAYAGE METHOD AND NUMERICAL REALIZATION OF THE METHOD ON BASE OF POTENTIAL THEORY

Y. V. Glasko

Research Computing Center, M.V. Lomonosov Moscow State University, 119992, Moscow, Russia

UDC 519.6; 550.8

Several mathematical models for gravity potential on base of time-dependent diffusion equation are constructed in the article. We proposed set of boundary conditions. Numerical realizations H. Poincare balayage method for solving the boundary problems are constructed. We considered inverse for the balayage method concentration method and the numerical concentration.

Key words: the mathematical models of balayage, swelling, concentration, field potential, simple layer.

Introduction

Dirichlet problem — first kind boundary-value problem for Poisson equation of potential field has important mean for mathematical physics. B. Riemann solution of the problem was disproved by K. Weierstrass (1869 y.). It had great difficulties for mathematicians [4]. H. Poincare developed an ingenious and general method for Dirichlet problem (1890 y.). He generalized 2D alternating Schwartz method. The method was used for proof of many theorems of mathematical theory (including potential theory). Also principle of the method realized by mesh method. However, the method has not wide using for solving Dirichlet problem. H. Poincare proposed using for practice Neumann method. V.A. Steklov used Neumann method. Besides, Riemann solution of the problem was proved by D. Hilbert (1900).

At present, Poincare method is adapted to geophysics on base of D. Zidarov work [3] where was considered inverse gravity problem, inverse magnetic problem and inverse electric problem. There was proposed guideline solving of the inverse problems for complicated geometrical objects (for describing of a deposit) based on the balayage method. Development and application the guideline for the masses has place in the work V.N. Strakhov [8], for oil deposits - in work of V.G. Filatov [9], for S-approximation — in the works of I.E. Stepanovoy and D.N. Rayevsky [5]. Also, principle of balayage in defined measure has place in Yagola method of extending compacts [10] and the works A. Hasanoglu.

1 Balayage, swelling and concentration

Let us now consider Poincare balayage method. We have a body is filled of a mass and has the potential is specified on boundary of the body. The body is being filled set of intersecting spheres fit closely to boundary of the body. Further we start iterative loop. On first iteration all masses from the spheres are redistributing to the surfaces of the spheres. On next iterations we also have redistributing of the masses from the spheres filling the domain to the spheres's surfaces. Note that with second iteration all inside masses are distributed only on intersection parts of the surfaces of the spheres. This iterative process of H. Poincare is endless. By the process we search the potential of these masses on the boundary of the domain like the potential is defined in first kind boundary condition. Problem redistributing the masses had not interest for Poincare.

D. Zidarov's work [3] pay attention to outside for the boundary Γ of the body Ω potential during the balayage process and the characteristics of the body. As noted, the potential field of redistributing masses in each iteration of Poincare method is coinciding outside of the body, and the potential field is decreasing on the boundary. The

balayage process is executing until all the masses redistributed on the boundary Γ as a simple layer (in numerical realization- with some exactness). The densities of the masses during redistributing are changing. For the method of swelling some spheres with null masses adding to the body after that we are executing iteration process of balayage for the new object. So, if we have not additional conditions for a family of bodies (which we define below), we have infinity set of the bodies are received from the body with the same external (out of the body) potential, but with different (decreasing) potentials on the boundary of the body. During the balayage process the potential inside the body is decreasing.

The family of the bodies is set of the points or the bodies with equally mass are limited by the boundaries $\Gamma_i,\ i = 1, \ldots, N$ disposed on the distance $h_i(X),\ X \in \Gamma_i$ and having similar form.

For the families of the bodies we can consider the points with equally masses, the domains with equally masses are limited with the concentric spheres, the domains with equally masses are limited with the confocal ellipsoids. In the general way, the families of the bodies are the domains with equally masses are limited with Liapunov's surfaces [6].

Let us now remember some definitions [3].

The accessible simple layer is called the simple layer (on the closed surface or on the free surface) with points of which we can move to infinity not intersecting this layer in other points.

The mother body for the family is called the body in which before the balayage process is concentrated the mass evoked the anomalous gravitational potential.

The mother layer is called the accessible simple layer corresponding the boundary of the mother body on which all masses of the mother body are sweep.

We shell consider as the mother body one of limiting cases of described above the families of the bodies. For example, we can consider the point mass m as the limiting case of all bodies with defined potential m/R and the mass m. In the same way, we can consider the body is bounded the elliptical surface which is limit of the confocal ellipsoids for which the minor axis converges to zero. This mother body and the described set of the bodies have the same external potentials and the masses.

The inside point of the body T is called the point which not belongs to T and this point can not to move out of the body to infinity not intersecting the points of T.

The frame of the body T is called the set of points including the body and it's inside points.

The frame of the body is sensible for the domain which is limited no less than two surfaces of same dimension. That is we consider the bodies which have the positive distributing density and the negative inside density (the negative density corresponding parts of the domain without the masses).

For the mother body of the family, we may balayge the masses by the spheres only on the mother layer or to outside of the mother body on the accessible simple layers of the family [3]. In the general case, it can be considered the frame of the mother body. Thus we define the mother body among of the family of the bodies equivalent by the external potential by defining the mother layer. In that case the mother layer can be defined as the accessible simple layers with zero points. The zero points $X_j^0,\ j = 1, \ldots, M$ are the points of the layer with zero density $\rho(X_j^0) = 0$. However, no each family of the bodies with positive densities has unique the mother body. Therefore, it is need conditions of uniqueness for the mother body of the family. These conditions connected with the conditions of uniqueness for inverse gravimetry problem. If the mother body is defined then the iterative balayage process is unique. Example of the mother body for all bodies with potential U_m is point mass m with potential U_m.

Balayage problem is considered of D. Zidarov supposing that the external potential of the mother body $\Omega_M \equiv \Omega_M(\omega, \rho)$ in the points $X \notin \Omega_M$ is given $U_M(X) = \int\limits_{\Omega_M} \frac{\rho(\omega)}{r} d\omega$. For it $\rho(\omega)$ - distribution of the masses in Ω_M, r- distance between the point $\omega(\xi, \eta, \zeta) \in \Omega_M$ with the density $\rho(\omega)$ and the point $X \equiv (x, y, z) \notin \Omega_M$: $r = \sqrt{(x-\xi)^2 + (y-\eta)^2 + (z-\zeta)^2}$. Therefore, the point $\omega(\xi, \eta, \zeta)$ may be described by the mass $m(\omega)$ if ω is center of the small cube with volume $\Delta\omega \subset \Omega_M$. In this case $m(\omega) = \rho(\omega)\Delta\omega$. Consequently, the summarized mass of the mother body $M = \int\limits_{\Omega_M} m(\omega) d\omega$. The family for the mother body is specified. Also, low distribution of the density $\rho_1(\omega)$ for the body Ω of the family with the mother body is known. $\Omega \supset \Omega_M$ has mass M: $M = \int\limits_{\Omega} m(\omega) d\omega = \int\limits_{\Omega_M} m(\omega) d\omega$ and such external potential as the mother body. It should be found the domain Ω. Here, X - Cartesian coordinates. Instead of Cartesian coordinate system we can using polar coordinate system (for 2D case) or spherical coordinate system (for 3D case).

In view of equivalence of redistributions mass for balayage we can set the problem of the simple layer with mass M on the boundary $\Gamma = \partial\Omega$ with given the potential $V(X)|_\Gamma$ determination. Let us consider the system of equipotential surfaces with given values of the potentials $V(X) = c_k$ fitting with the potentials of the mother body in the different points K. So we have the system extending equipotential surfaces: $c_1 > c_2 > ... > c_k$. The less potential in a point of the mother body, the further lies corresponding to the potential the equipotential surface. So, we have K Dirichlet problems.

The problem concentration consist in transformation the body Ω to the body Ω_M so that by balayage of the masses from Ω_M it may be obtained Ω. Here, Ω and Ω_M have the equally masses and the external potentials. The problem of concentration can be reduced to searching the mother layer Γ_M which is the accessible simple layer. For the simple layer we use Liapunov's surface.

2 Mathematical models of balayage

As model of balayage can be considered Dirichlet problem or Neumann problem for the potential. For the model can be used Laplace equation or equation with source.

Second-order differential equations for partial derivatives (hyperbolic, parabolic, elliptic equations) are invariant ones [2] for isotropic and homogeneous medium. Let us remark here that elliptical equation is being using for closed domain. Hyperbolic and parabolic equations have boundary conditions for other than closed boundary. So, for parabolic equation may be used domain which is opened on one side (for example the layer with opened one side). Therefore, parabolic equation extends the set of studied domains. Also, in sense of analyticity of solution, parabolic equation links to elliptical one.

Let us consider now the model of balayage for the gravity field potential of the domain $\Omega \subset S$ with the mass M and the density $\rho(\omega)$. Here, S may be closed or open domain. For example, the domain is a cube or a lower half-space. The potential may be a function of time $U(X,t)$, where for 2D- $X = (x,z)$, for 3D- $X = (x,y,z)$. The model is given by:

$$\begin{aligned} \Delta U(X,t) = U_t(X,t),\ X \in S,\ t \in (0,T) \\ U(X,0) = U_0(X),\ X \in S \\ \left.\frac{\partial U(X,t)}{\partial n}\right|_\Gamma = V(X,t)|_\Gamma \end{aligned}$$

With $U_0(X)$:

$$U_0(X) = \begin{cases} U_0^{in}(X),\ X \in \Omega \\ U_0^{ex}(X) = U_0^{ex}(X'),\ X,\ X' \in S \setminus \Omega,\ X \notin \Omega, \end{cases} \tag{1}$$

where for 2D-case $X' = x$, for 3D-case $X' = (x,y)$.

$$U_0^{in}(X) > U_0^{ex}(X) \tag{2}$$

The realization of the balayage process is to construct set of the extending equipotential layers $V(X,t) = c(t)$ with the speeds $V^{max} - \delta$, $V^{max} - 2\delta, \ldots$ (δ — small positive value). The layers are approaching to the layer for maximum value of the potential $V^{max} = \max\limits_S \dfrac{\partial U_0(X)}{\partial n}$ so that the finish equipotential layer involves the domain Ω. In the process each the equipotential layer is the simple layer with mass is sweep from the domain Ω by Poincare balayage method. It is satisfying to note that the inside potential of the equipotential layer on each iteration of the balayage process decreases. In the end of each iteration the potential on the equipotential layer is more than the inside potential.

Also, as the model of balayage we can consider the model on base of Dirichlet problem:

$$\begin{aligned} \Delta U(X,t) = U_t(X,t),\ X \in S,\ t \in (0,T) \\ U(X,0) = U_0(X),\ X \in S \\ U(X,t)|_\Gamma = V_\Gamma(X,t)|_\Gamma \end{aligned}$$

In this case, the process of balayage to be executed on the set of the equipotential layers $U(X,t) = c(t)$ approaching to the layer with greatest mean of the potential inside of the domain S: $U^{max} = \max\limits_S U_0(X)$.

For described above process we can consider the model of balayage with moving boundary $\Gamma(t):\ \Gamma_0 = \Gamma(0)$ $\Gamma(t) \to \Gamma(T),\ t \to T$, where $S = S(T)$ is the domain limited by $\Gamma(T)$. In the general case $\Omega = \bigcup\limits_{i=1}^{N} \Omega_i$ and correspondingly $\Gamma^0 = \Gamma(0) = \bigcup\limits_{i=1}^{N} \Gamma_i^0$.

$$\Delta U(X,t) = U_t(X,t),\ X \in S,\ t \in (0,T) \tag{3}$$

$$U(X,0) = U_0(X),\ X \in S \tag{4}$$

$$\Gamma_0 = \Gamma(0) = \partial\Omega,\ \frac{\partial\Gamma(X,t)}{\partial t} = -D\ \frac{\partial U(X,t)}{\partial n}\bigg|_{X\in\Gamma(t)},\ \Gamma_T = \Gamma(T) = \partial S \tag{5}$$

$$\frac{\partial U(X,t)}{\partial n}\bigg|_{\Gamma(t)} = V_\Gamma(X,t) \tag{6}$$

Instead of the condition (6) it can be considered

$$\int\limits_0^T \frac{\partial U(X,t)}{\partial n}\bigg|_{\Gamma(t)} dt = V^{sum}(X,T) \tag{7}$$

It is intended that $\Gamma(t)$ involves part of the domain containing the mass. The mass is being sweeping to $\Gamma(t)$. Thus, according to N.M. Gunter researches [1] we may separate the inside for $\Gamma(t)$ mass from the outside mass also the inside for $\Gamma(t)$ potential of the mass from the outside one if there are known normal derivatives of potentials of inside and outside layers on $\Gamma(t)$-condition (6). This condition is result of the more common condition for separating the inside potential of the mass for $\Gamma(t)$ and the outside one. The common condition consists in knowing the integral normal derivative on all the surfaces $\Gamma(t)$ of the domains with mass-condition (7).

The model with moving boundary we can consider with first kind boundary condition.

$$\Delta U(X,t) = U_t(X,t),\ X \in S,\ t \in (0,T) \tag{8}$$

$$U(X,0) = U_0(X),\ X \in S \tag{9}$$

$$\Gamma_0 = \Gamma(0) = \partial\Omega,\ \frac{\partial\Gamma(X,t)}{\partial t} = -D\ \frac{\partial U(X,t)}{\partial n}\bigg|_{X\in\Gamma(t)},\ \Gamma_T = \Gamma(T) = \partial S \tag{10}$$

$$U(X,t)|_{\Gamma(t)} = V_\Gamma(X,t) \tag{11}$$

Instead of the condition (11) it can be considered the integral one:

$$\int\limits_0^T U(X,t)|_{\Gamma(t)}\, dt = U^{sum}(X,T) \tag{12}$$

Any one of (11) (or (12)) or (6) (or (7)) is Gunter condition for separating the inside potential of the mass of searching domain Ω and the outside one.

The mathematical models discussed above can be applied for several gravitating masses of the domain $\Omega = \bigcup\limits_{i=1}^{N} \Omega_i$.

3 Numerical balayage method

The numerical realization of the mathematical models discussed above is grid realization of H. Poincare balayage method for the masses. Let us cover 3D domain S by the grid with the step h. In the domain Ω_h the point lattice approximation of the sphere is 7 dot scheme type of "cross". So, the grid domain is filling with the point lattice spheres. Further, the iteration balayage process for the mass is starting. Let us consider various realizations of the numerical balayage.

Let we know the density $\rho_\Omega(\omega)$ of the domain Ω (correspondingly Ω_h) and the density $\rho_S(X)$ of the domain S (S_h). The domains Ω and S have equal the outside potential. We seek the domain S (S_h). Then for each

the dot scheme cross in Ω_h using the density in the center of the cross which is more than the preset value. We divide the excess density by 6 and sweeping one to others 6 points of the "cross". In the center of the "cross" the density $\rho_S(X_h)$ remains. If the density in the center is not excess one then this density not change. This process is performing for all crosses filling the domain Ω_h. Further we execute the next iteration. The iterative process continuing until we have the domain S_h with apriori density of mass distribution. The process of swelling defines transformation Ω to involving the domain by sweeping.

Second realization of the numerical balayage assumes that all mass will sweep to the boundary of the domain S. Therefore, on the first iteration we divide the density in the center of the cross into 6 and redistribute one to others 6 points of the cross. Iteration loop repeats until all the mass is distributed to ∂S. The result layer and the source body Ω have the same mass. The potential of the result layer is equal the outside potential Ω on ∂S. Thus, we construct the equipotential surface including the body Ω.

The iteration loop for the density ρ of the cube S_h on each the iteration consists of 3 nested loops for $i = 2, \ldots, I-1$, $j = 2, \ldots, J-1$, $k = 2, \ldots, K-1$:

$$\rho^n_{i-1,j,k} = \rho_{i-1,j,k} + 1/6\rho_{i,j,k},\ \rho^n_{i+1,j,k} = \rho_{i+1,j,k} + 1/6\rho_{i,j,k}$$

$$\rho^n_{i,j-1,k} = \rho_{i,j-1,k} + 1/6\rho_{i,j,k},\ \rho^n_{i,j+1,k} = \rho_{i,j+1,k} + 1/6\rho_{i,j,k}$$

$$\rho^n_{i,j,k-1} = \rho_{i,j,k-1} + 1/6\rho_{i,j,k},\ \rho^n_{i,j,k+1} = \rho_{i,j,k+1} + 1/6\rho_{i,j,k},\ \rho^n_{i,j,k} = 0$$

$$\rho_{i-1,j,k} = \rho^n_{i-1,j,k},\ \rho_{i+1,j,k} = \rho^n_{i-1,j,k},\ \rho_{i,j-1,k} = \rho^n_{i,j-1,k},\ \rho_{i,j+1,k} = \rho^n_{i,j+1,k}$$

$$\rho_{i,j,k-1} = \rho^n_{i,j,k-1},\ \rho_{i,j,k+1} = \rho^n_{i,j,k+1},\ \rho_{i,j,k} = \rho^n_{i,j,k}$$

The truncation condition of the iteration loop is the discrepancy between initial and final (boundary) masses less than the accuracy ϵ.

4 Method of concentration

The problem of concentration uses the inverse procedure for the balayage problem. Let us consider various realizations of the concentration. In the process of the density concentration we move from the layer on the external surface to the layer on the equipotential surface with greater potential value (the internal surface). This process has N iterations. So, we have set of N the equipotential layers: $V = c$, $V = c+\Delta V$, $\ldots, V = c+(N-1)\Delta V$. For various models we may use the set of the simple layers or the double ones. On each surface in the points with the normal derivative of the potential discontinuity it is left the part of the mass (consequently, the part of the potential). We may leave the N-th part of all mass M of first external surface.

The density continuation with the boundary performing if the conditions: $\rho(X) > 0$ and $\dfrac{\partial \rho(X)}{\partial n} < 0$ are true. If one of the conditions is not true then we leave part of the mass on the boundary (on the surface). So, for each step k if the one of the conditions is not true we leave $\rho_k(X) = \rho^{\Gamma}_k(X) + \rho^{\Phi}_k(X)$ on k-th boundary.

Let us consider some numerical realizations of the concentration. In the first realization we know distribution of the density in the enveloping body and distribution of one in the resolving body. The process using the iteration loop where for each template of cross type we move the masses. Thus, 6-th equal masses m in the nodes of the cross must be replaced with zero and the mass $6m$ must be relocated to center of the cross. If we have dissimilar masses in the cross nodes then $6m_{min}$ (m_{min} — minimal mass of the cross nodes) must be relocated to center of the cross. The masses $m_i - m_{min}$ must be remained to the cross nodes $i = 1, \ldots, 6$. The procedure must be executed for all crosses in the mesh domain S_h. For concentration with the boundary the sum of the masses of 6-th cross nodes must be relocated to center of the cross. So for anyone mesh approximation of the sphere. Finally, the algorithm of sweeping from the inside domain S may be used for obtaining the apriori potential on the boundary ∂S.

5 Results

The balayage algorithm and the concentration one are experienced on the set of the model examples in the cube $S = \{\xi, \eta, \zeta\}$, $\xi \in [0,1]$, $\eta \in [0,1]$, $\zeta \in [1/3, 4/3]$. We considered the set of the point bodies: 1, 2, 4, 8, 16 points with the density $1g/cm^3$ from the oil density segment. The set of sweepings determines hits on the levels point masses. Maximum effect of the balayage for inside point observed in three nearest points of the boundary ∂S.

The results of the model experiments is presented with tables of values. On the base of the tables constructed the balayage densities maps. The calculation time is a few seconds.

The concentration for the indicated points are executing by algorithm of iterative balayage with using the maps of the balayage densities, method Monte-Carlo for the densities and statistical regularization. Using of the maps lets reduce the calculating time. By using information about bottom and top means of the oil density $[\rho_{oil}^{bttm}, \rho_{oil}^{top}]$ we exclude non-perspective sources. In our case, the optimal iteration number of Monte-Carlo method is 300. For accurate input data and distance the average error of concentration is less than 1.5%. For input data and discrepancy the average error is fewer than 5%. The more the number of sources the more the computation time. Nevertheless for CPU frequency $1GHz$ calculating time for 16 sources is equal to 1 hour 40 minutes.

The methods are used for searching set of the oil deposits.

Conclusion

In the article the models of balayage for the potential of gravity field and the numerical method on base of Poincare balayage method are considered. This approach is convenient in solving inverse gravity, magnetic and electric problems by the method of concentration.

The author expresses his sincere appreciation to Prof. A.G. Yagola, Prof. A. Hasanoglu, Prof. I.E. Stepanova for many helpful discussions.

References

[1] Gunter N.M. Potential theory and application to main problems of mathematical physics. M.: GITTL, 1953.

[2] Zommerfeld A. Differential equations in partial derivatives of physics. Moscow: IL. 1950.

[3] Zidarov D. About some inverse problems of potential fields and their application to questions of geophysics. Sofia: BAN. 1964.

[4] H. Poincare. Selected works. Volume 3. Moscow: Nauka, 1974.

[5] Raevsky D.N. Development the new effective itarational methods of soluting the systems algebraic equations of inverse geophysical problems on base of integral representation method. Author's abstract. Moscow: IFZ. 2016.

[6] Steklov V.A. Fundamental problems of mathematical physics. Moscow: Nauka. 1983.

[7] Sveshnikov A.G., Bogolubov A.N., Kravtzov V.V. Lectures on mathematical physics. M.: Nauka. 2004.

[8] Strakhov V.N. About balayage of masses Poincare and its using for solution gravimetry dirrect and inverse problems //DAN USSR. 1977. Volume 236, N 1, P. 54–57.

[9] Filatov V.G. Stable methods interpretation of potential fields on base of regularization and concentration of the sources. Author's abstract. Kiev. 1988.

[10] Yagola A.G., Dorofeev K.Y. Sourcewise representation and a posteriori error estimates for ill-posed problems //Vestnik Moscow University. Series 3. Physics, astronomy. Moscow: Moscow University Press. N 2. P. 64–66. 1999.

[11] Yagola A.G., Wang Yanfei, Stepanova I.E., Titarenko V.N. Inverse problems and the methods of solution. Geophysics applications. Moscow: BINOM. Knowledge laboratory. 2014.

Glasko Yuri Vladlenovich — Cand. Phys. Math. Sc.,
leading mathematician of Research Computing Center
M. V. Lomonosov Moscow State University
e-mail: glaskoyv@mail.ru
Received — May 25, 2017

APPLICATION OF NONLINEAR ADAPTATION ON MANIFOLDS FOR ECONOMIC OBJECTS

S. I. Kolesnikova[1,2], N. D. Dubina[1]

[1] *National Research Tomsk State University, 634036, Tomsk, Russia*
[2] *Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, 630050, Tomsk, Russia*

UDC 51.77

An application of the method of analytical design of aggregated regulators for constructing systems of control over integrated economic entities with positive and negative feedback loops is discussed. The controlled objects are presented as a system of ordinary non-linear differential or difference equations with chaotic behavior in the case of certain combinations of parameters. A number of control problem formulations are given and the algorithms of control synthesis are reported and theoretically validated. Some illustrative examples of application of the proposed algorithms are provided along with their numerical simulation data. The results obtained would be useful in designing a smart control system and for real-time decision making in the financial policies of a variety of economic entities.

Keywords: non-linear multi-dimensional object, disturbance compensation, deterministic chaos, analytical design of aggregated regulators.

Introduction

The analysis and control approaches implementing the principle of directed self-organization and decomposition of non-linear dynamic systems is currently becoming popular in the theory of non-linear systems [1]– [7].

The attractiveness of such methods of analytical design of aggregated regulators (ADAR) proposed by the Kolesnikov school of sciences [3] as backstepping [7] and sliding-mode control [5] consists in inclusion of the physical features of a controlled object into consideration [4] in the course of synthesis, which is done via specially selected invariants forming target manifolds or desired goal attractors of a nonlinear system.

Nonlinear models of economic entities of different scales and business application areas (production, distribution, retail and/or wholesale businesses, banking institutions, etc.) are becoming increasingly more appealing to the researchers, as they approach real physical models and are described by multivariable nonlinear indices responsive to the positive and negative feedback loops.

This paper deals with an application of the techniques of nonlinear adaptation on manifolds [3, 8] for economic models; in particular, based on a unified methodology we formulate and solve a number of different control problems for the following types of objects with nonlinear models and unstable behavior: capital expansion of a corporate giant, changes in sales volumes of two competing companies producing two similar commodities, and financial operations of a small business enterprise. All of these objects are represented by systems of difference equations or ordinary nonlinear differential equations with chaotic behavior in the cases of certain parameter combinations (models of deterministic chaos). In the open-loop states, the mathematical models of economic objects are thought to be unstable, which in essence means the following: there are such initial conditions and parameter values inherent in these objects that the property of economic self-regulation is no longer valid for them [9].

The purpose of this study is to design a programmed control system for the model of a small business enterprise derived from the Lorentz model [11], which in turn accounts for a number of processes, including temporal variations in economic performance indicators and ecological indices.

For the sake of illustration, we consider here the operation and performance of a small-scale IT service company (providing services of software engineers and programmers in the field of new application design, specialized software development, etc.).

The work has been supported by the Russian foundation of basic research (grant number 17-08-00920).

1 Problem Statement

1.1 Mathematical Model of Object

Let us look at a controlled object described by the following system of equations (1):

$$\begin{aligned} \dot{x_1}(t) &= \alpha x_2 x_1 - \gamma x_1 + z_1 + u_1, \\ \dot{x_2}(t) &= \mu(x_1 + x_2) - \beta x_1 x_3, \\ \dot{x_3}(t) &= \delta x_2 - \lambda x_3 + z_2 + u_2, \end{aligned} \tag{1}$$

where $x \in R^3, u \in R^2, z \in R^2$ are the vector variables of control and unknown disturbance, respectively.

It is required to carry out control in the state space of the object transferring this object from its given initial state $x(0) = (x_1(0), x_2(0))$ into the neighborhood of the target manifold $\psi(x(t)) = (\psi_1(x(t)), \psi_2(x(t)))$, and minimizing the quality functional J, taking into account two-dimensional control variable

$$J = \sum_{i=0}^{2} \int_0^{\infty} ((\Psi_i(x(t))^2 + (\omega_i)^2 (\dot{\Psi}_i(x(t)))^2) dt \to \min \tag{2}$$

In order to solve the stabilization problem for variables x_1, x_2, macrovariables $\psi_1(x), \psi_2(x))$ can be, for instance, selected as follows:

$$\psi_1(x(t)) = x_1(t) - x_{10}, \psi_2(x(t)) = x_2(t) - x_{20} \tag{3}$$

where quantities x_{10}, x_{20} are the target values of variables x_1, x_2.

1.2 Basic Requirements to the Control Object

The control synthesis algorithm with a program-defined adaptation to a given manifold assumes that the following standard requirements be fulfilled: there is an asymptotically stable target system as a whole satisfying the desired technological tasks; all solutions of the initial system have to be limited; the initial model of the object's state has to be stabilizable; there is an attractive target manifold described by $\psi(x) = 0$ with respect to the object's initial system of equations, where $\psi(x)$ is a certain continuous differentiable vector function meeting the desired physical properties of the target state, which is referred to as a goal macro-variable, whose dimension coincides with that of the control vector, and the quality functional of the synthesized control system is given by (2).

Weighting factors ω_i, $i = 1, 2, 3$ are the parameters of the regulator settings; they are proportional to the duration of motion of the image point to the target manifold (target attractor) $\psi(x) = 0$. Given these assumptions, the mathematical formulations of all problems listed above would be transformed into the following: it is necessary to maintain control in the space of states of an object transferring this object from its predetermined initial state $x(0)$ into the neighborhood of the target manifold $\psi(x) = 0$ and minimizing the quality functional J, taking into account 2-dimension of the control variable.

Remark. Functional (2) has a clear physical meaning: it generalizes the classical quadratic functional. In particular, the first term in the expression for functional J represents different functional properties of the controlled object, and the second term the property of the synthesized control system for a dynamic object, specifically, the rate of its approach towards the stable state.

2 Solution of the control problem

Lemma. Let there exist a variational problem $J, \psi(x) = 0$ where

$$J = \int_0^{\infty} F(t, \psi, \dot{\psi}) dt \to \min, F(t, \psi, \dot{\psi}) = (\phi(\Psi(x(t)))^2 + (\omega)^2 (\dot{\Psi}(x(t)))^2, \tag{4}$$

with a restriction $\psi(x) = 0$.

If $\phi(\Psi)$ is single-valued, continuous and differentiable function for all Ψ such that $\phi(0) = 0$, $\phi(\Psi)\Psi > 0 \forall \Psi \neq 0$, the Euler–Lagrange equation for the problem (1), (2) would be given by $\omega\dot{\Psi} + \phi(\Psi) = 0$.

The proof of this lemma relies directly on the results of theoretical mechanics and follows from [10] e.g. This lemma plays the main role in finding control with predetermined target properties of an object.

2.1 Algorithm of synthesis of vector control for the object (1), (2)

1. Extend the phase space to transform the initial open-loop system into a closed-loop one

$$\begin{aligned} \dot{x_1}(t) &= \alpha x_2 x_1 - \gamma x_1 + z_1 + u_1, \\ \dot{x_2}(t) &= \mu(x_1 + x_2 x_2) - \beta x_1 x_3, \\ \dot{x_3}(t) &= \delta x_2 - \lambda x_3 + z_2 + u_2, \\ \dot{z_1}(t) &= \eta_1 \Psi_1, \\ \dot{z_2}(t) &= \eta_2 \Psi_2, \end{aligned} \tag{5}$$

   where $\eta_1 > 0, \eta_2 > 0$.

   The form of the right-hand parts of the last two equations of the system (5) is validated by the Lyapunov's second theorem.

2. Determine the first auxiliary vector macro-variable $\Psi^{(1)} = (\Psi_1^{(1)}, \Psi_2^{(1)})$:

$$\begin{aligned} \Psi_1^{(1)} &= \Psi_1 + k_1 z_1, k_1 > 0, \\ \Psi_2^{(1)} &= \Psi_2 - \varphi(x_2, z_1, z_2), \end{aligned}$$

   accurate within the unknown in this step of function $\varphi()$.

3. Formulate a variational problem given by $(J_1, \psi^{(1)})$ as follows:

$$J_1 = \sum_{i=0}^{2} \int_0^{\infty} ((\Psi_i^{(1)}(x(t))^2 + (\omega_i^{(1)})^2 (\dot{\Psi_i^{(1)}}(x(t)))^2) dt \to \min \tag{6}$$

   with a restriction $\psi^{(1)}(x) = 0$.

   A solution of $(J_1, \psi^{(1)})$ yields a system of equations for vector control $u = (u_1, u_2)$ (in accordance with lemma):

$$\omega_i^{(1)} \dot{\Psi}_i^{(1)} + \Psi_i^{(1)} = 0, i = 1, 2. \tag{7}$$

4. Solve the system of functional equations (7) for variables u_1, u_2:

$$\begin{aligned} u_1 &= (\gamma - (\omega_1^{(1)})^{-1}) x_1 - \rho_1 (\mu + (\omega_1^{(1)})^{-1}) x_2 - \rho_1 \mu x_3 + \beta \rho_1 x_1 x_3 - \alpha x_2 x_3, \\ u_2 &= (\lambda - \rho_2 \mu - (\omega_2^{(1)})^{-1}) x_3 - (\delta + \rho_2 \mu + (\omega_2^{(1)})^{-1} \rho_2) x_2 + \beta \rho_2 x_1 x_3. \end{aligned}$$

   The forms of control u_1, u_2 ensure a transfer of the object (1) into the neighborhood of the target manifold $\Psi^{(1)} = 0$, on which the following relations are fulfilled:

$$\Psi_1^{(1)} = 0 \to \Psi_1 = -k_1 z_1, \Psi_2^{(1)} = 0 \to x_3 = \varphi. \tag{8}$$

   The first relation (8) guarantees an asymptotic stability to the solutions of the fourth equation of the system (5) due to the fact that the following equality holds true $\dot{z_1} = -k_1 \eta_1 z_1$.

   Thus within this step of the algorithm, one of the target invariants $\Psi_1 = 0$ is obtained.

5. Decompose the initial system of equations (5) on manifold (8). In the neighborhood of manifold $\Psi^{(1)} = 0$ motion of the image point of the system is described by the following system of differential equations:

$$\begin{aligned} \dot{x_2}(t) &= \mu(x_2 + \varphi) - \beta(x_{10} - k_1 z_1)\varphi, \\ \dot{z_2}(t) &= \eta_2 \Psi_2, \end{aligned} \tag{9}$$

6. Assume the second scalar macro-variable $\Psi^{(2)} = \Psi_2 + k_2 z_1, k_2 > 0$ in order to define function φ from (9).

7. Pose the second variational problem given by $(J_2, \psi^{(2)})$ where

$$J_2 = \int_0^\infty ((\Psi^{(2)}(x(t))^2 + (\omega^{(2)})^2(\dot{\Psi^{(2)}}(x(t)))^2)dt \to \min \tag{10}$$

with a restriction $\psi^{(2)}(x) = 0$. Solving the problem $(J_2, \psi^{(2)})$ yields an equation for the sought-for-function φ (in accordance with the lemma):

$$\omega^{(2)}\dot{\Psi}^{(2)} + \Psi^{(2)} = 0, \tag{11}$$

8. Solve the functional equation (11) for variable φ:

$$\varphi(x_2, z_1, z_2) = ((-\mu x_2 - k_2\eta_2(x_2 - x_{20}) - (\omega^{(2)})^{-1}(\Psi_2 + k_2 z_2))(\mu - \beta(x_{10} - k_1 z_1))^{-1}, \tag{12}$$

3 Results of numerical simulation

The plots of controlled coordinates presented in Fig. 1 d), e) suggest an acceptable quality of control (Fig. 1 c)) over the object, which ensures that the goal is achieved $\psi = 0$ (in Fig. 1 f)) in terms of the global minimum of functional J and the control object is sustained in the neighborhood of the desired manifold $\psi = 0$.

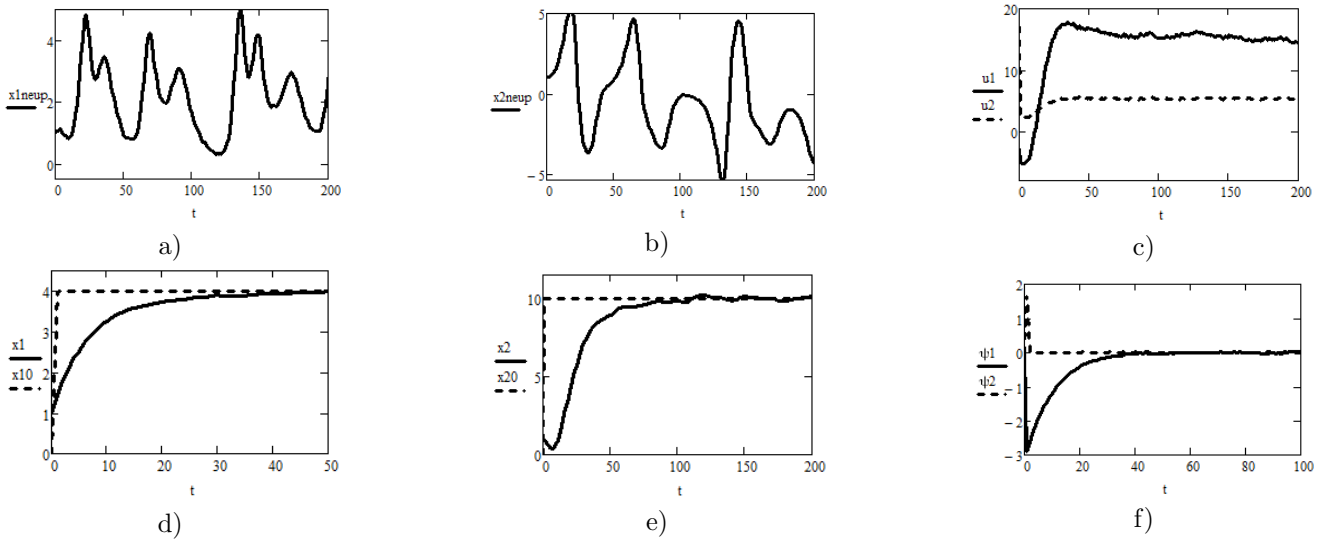


Figure 1: Results of control system simulation: a) plot of uncontrolled coordinate x_1, b) plot of uncontrolled coordinate x_2, c) plot of control variables u_1, u_2, d) plot of controlled coordinate x_1, e) plot of controlled coordinate x_2, f) plot of target macro-variables ψ_1, ψ_2.

4 Conclusion

In this study we have constructed two control systems for a dynamic model of operations of a small business enterprise, relying on the analytical design of aggregated regulators representing different methods of organizing control over an economic object. The resulting systems of control have been tested using initial data obtained from the performance indicators of a real small business enterprise.

The results obtained can be useful for solving applied economic problems in decision-making on re-distribution of the flow of funds in order to ensure stable operations of small businesses, since the proposed control law represents a procedure for a feedback with a pre-emptive impact.

References

[1] S.V. Emelyanov and S.K. Korovin. Control of Complex and Uncertain Systems: New Types of Feedback. Springer Science and Business Media, 2012.

[2] I.V. Miroshnik and V.O. Nikiforov and A.L. Fradkov. Nonlinear and adaptive control by complex dynamic systems. Moscow, Nauka, 2000.

[3] A.A. Kolesnikov. Synergetics and problems of control theory: Collected articles / edited by A.A. Kolesnikov. FISMATLIT, Moscow, 2004.

[4] A.A. Krasovskiy. Mathematical and Applied Theory. Selected works. Moscow, Nauka, 2002.

[5] V.I. Utkin. Sliding mode control in discrete-time and difference systems, Variable Structure and Lyapunov Control, A. S. Zinober, Ed. London, U.K., Springer-Verlag, 1993.

[6] H.K. Khalil. Nonlinear systems. Prentice Hall, 1996.

[7] P.V. Kokotovic and M. Arcak. Activation of Nonlinear Feedback Concepts, in System Theory: Modeling, Analysis, and Control. The Springer International Series in Engineering and Computer Science: Springer-Verlag New York, LLC, 1999.

[8] A.A. Kolesnikov and V.A. Kobzev. Flight dynamics and management: a synergetic approach. Taganrog, Publishing house of TIT SFU, 2009.

[9] Dr. Wei-Bin Zhang. Synergetic Economics. Springer, Berlin, 1991.

[10] A.S. Galiullin, Inverse problems of dynamics. Moscow, Nauka, 1981/

[11] H.W. Lorenz. Nonlinear dynamical economics and chaotic motion. Berlin, Springer Verlag, 1989.

Svetlana Ivanovna Kolesnikova — DSc., Professor of the Department of Higher Mathematics and Mathematical Modeling
Faculty of Applied Mathematics and Cybernetics; Tomsk State University
e-mail: skolesnikova@yandex.ru;
Nina Dmitrievna Dubina — student of the Tomsk State University;
e-mail: dubina-nina@mail.ru.
Received — May 26, 2017

DUALITY OF WAVE AND PARTICLE OF TURBULENCE AND CAVITATION DAMAGE

Z. C. Liu[1,2], W. J. Fan[1],

[1] *Chongqing Jiaotong University, Chongqing, 400016, Chongqing, China*
[2] *Key Laboratory of Communication Civil Waterway Regulation, 400016, Chongqing, China*

UDC 517.968

The relation between the duality of wave and particle of turbulence and the cavitation damage is studied. The nature of turbulent flow and the bubble distribution makes the cavitation show stochastic characters, so cavitation damage has random property as well. The cavitation damage seems to connect closely with zero-point energy (dark energy). A sketch model of the cavitation damage was developed, it is only a primary conceptive model at present letter.
Keywords: duality of wave and particle; turbulence; cavitation; cavitation damage.

Introduction

Cavitation is generated both water and any other kind of fluid. We concern the hydrodynamic cavitation here. When the pressure falls locally to that of the vapor pressure corresponding to the ambient temperature, then the cavitation will be caused by the voids or bubbles containing vapor and gas in fluid. The reasons of low pressure may be caused by a high speed or vibrations or others. The essential mechanism of acoustic cavitation is identical to that of hydrodynamic ones, so does the cavitation damage case caused by both.

As known that, there is no difference of the principles to govern the hydrodynamic bubble and that of acoustic ones. When a bubble collapses in the vicinity of a solid surface, then the cavitation damage may appear, and none material will be free of cavitation erosion. The problem has remained open for more than one century. The current common sense about the cavitation damage is that, it is due to the concentration of mechanical energy on very small areas of the walls exposed to cavitation to exceed the resistance of the material resulting from the collapse of vapor structures. Cavitation usually contains the phases of formation, growth, oscillation, and collapse of bubbles in a liquid. As for the acoustic cavitation, another effect is the emission of light, dubbed as sonoluminescence (SL). For research convenience, SL is often divided into single-bubble sonoluminescence and multibubble sonoluminescence. Both the turbulence and the cavitation damage remain open problems now, though there are many research results [1-17]. In present letter, we combine the turbulence and the cavitation damage together, to give a conceptive picture to study the some hydrodynamic cavitation damage properties, especially, a sketch model of the cavitation damage was developed though it is a very crude result at present.

1 Bubble distribution

In case of pressure =1 atm and at temperature=25 $^{\circ}$C, so called in normal conditions, the radius of nuclei is often scale with ($\sim$) $R = 5 \times 10^{-6}$ m. In civil engineering, the bubble distribution formula sometime reads:

$$N(V_N) = \frac{p_\infty V}{4.838\sigma (V_N)^{2/3} + pV_N} \tag{1}$$

Here, $N(V_N)$ is the number of nuclei in interested volume V_N, σ is the surface intension, V is the total gas content, and p_∞ is the ambient pressure. If $R \in [1, 10]$ μm, then, experiences show that, $N = aR^{-n}$. Here, a and n are

The work has been supported by the Natural Science Foundation of China (41601565), Foundation of Key Laboratory of Communication Civil Waterway Regulation (NHHD-201511, NHHD-201515).

empirical coefficients. In fact, the bubble number distribution is much affected by the dissolved gas content. In cavitation study, there is a useful parameter, σ_i, which is called cavitation number, it reads:

$$\sigma_i = \frac{p_\infty - p_V(T_\infty)}{0.5\rho_L u_\infty^2} \tag{2}$$

Here, T_∞ and u_∞ are ambient or referenced temperature and velocity, respectively, ρ_L is the liquid density. In civil engineering study, the cavitation connects closely with the cavitation number.

2 A single bubble movement

Traditionally, the Rayleigh-Plesset equation is the governing equation of a spherical bubble in fluid:

$$\frac{p_B(t) - p_\infty(t)}{\rho_L} = R\frac{d^2R}{dt^2} + \frac{3}{2}(\frac{dR}{dt})^2 + \frac{4\upsilon_L}{R}\frac{dR}{dt} + \frac{2\sigma}{\rho_L R} \tag{3}$$

Where, R is bubble radius, t is time, υ_L is the kinematic viscous coefficient of the liquid, p_B(t) connects with equation of state. If there is no appreciable mass to transfer of gas to or from the liquid, and the bubble contains some quantity of contaminant gas with partial pressure p_{G_o} at size, R_o, and temperature T_∞. Then the equation of state (EOS) of gas in the bubble is:

$$p_B(t) - p_V(T_B) = p_{G_o}(\frac{T_B}{T_\infty})(\frac{R_o}{R})^3 \tag{4}$$

Where, $p_V(T_B) = p_V(T_B, \rho_V)$, $\rho_V(T_B)$ and $p_V(T_B)$ are the saturated vapor density and pressure at the bubble temperature T_B. Though this is not the real case, however, in most situations, it can grasp the essential characters. In some cases, the temperature difference, $(T_B(t) - T_\infty(t))$, leads to a different $p_V(T_B)$, and this alters the bubble dynamics, at this time, considering the equations of (3) and (4) , then we have:

$$\begin{aligned} &\tfrac{p_V(T_\infty)-p(t)}{\rho_L} + \tfrac{p_V(T_B)-p_V(T_\infty)}{\rho_L} + \tfrac{p_{G_o}}{\rho_L}(\tfrac{T_B}{T_\infty})(\tfrac{R_o}{R})^3 \\ &= R\tfrac{d^2R}{dt^2} + \tfrac{3}{2}(\tfrac{dR}{dt})^2 + \tfrac{4\upsilon_L}{R}\tfrac{dR}{dt} + \tfrac{2\sigma}{\rho_L R} \end{aligned} \tag{5}$$

In fact, in equation (5), the first term stands for the instantaneous tension or driving term determined by the conditions far from the bubble. The second term is called the thermal term which may cause very different bubble dynamic behaviors.

The above equation has been studied by many researchers to show that, it is roughly correspondence well with experimental results. If the dissipation can be neglected, then the rebound of the bubble will repeat for ever with definite story. To give a concrete model, we recommend a famous example, cited by Brenner (2002), a typical single-bubble sonoluminescence bubble containing argon with $R_0 = 4.5$ μm, driven at f=26.5 kHz and $P_a = 1.2$ atm, where, P_a is the pressure amplitude of the sound waves, and the ambient pressure P_∞=10^5 Pa $\approx$ 1 atm. However, we omit its concrete description which can be seen in Brenner's paper.

3 Cavitation

The cavitation can be classified into different types by the bubble shapes and distribution in time and space. Then, the different researchers give different results. Such as i) travelling cavitation, ii) fixed cavitation, iii) vortex cavitation, iiii) vibratory cavitation; or i) bubble cavitation, ii) tip-vortex, iii) sheet cavitation, iiii) cloud cavitation; or i) travelling bubble cavitation, ii) vortex cavitation, iii) attached or sheet cavitation; iiii) cloud cavitation; or i) bubble cavitation, ii) sheet cavitation, iii) cloud cavitation, iiii) and various forms of vortex cavitation, etc. The common basis among them lies that, how the low-pressure regions are generated. In turbulent case, all of them result from the interactions between the bubble and the fluid flow.

The intermittency shows the small scale local moving pattern. The interactions between the vortices and waves show unsteady and nonlinear manners. The vortices and waves can contain each other, and moreover, they can generate another as well. Both of them can moderate each other. The inverse U-shaped cavitation cloud is a relatively stable form to contain a strong vortex cavitation at the center surrounded by many small cavitation bubbles. The cavitation shows local and random phenomena.

Within a process of a single bubble cavitation, besides the light emission, the temperatures can be up to 20,000 K, and heating and cooling rates of $>10^{12}$ K/s, to suggest to generate high densities during bubble implosion. Cavitation is induced in vortical structures, and moreever, it is also a mechanism to generate the vorticity. In the final stages of collapse of a cavitation bubble, the pressure is very high (>1GPa), it will force the liquid near the bubble wall briefly (∼1 ns) into a metastable state of subcooling.

4 Cavitation damage

The cavitation damage show 4 stages: 1) incubation stage. This is no detectable weight loss period; 2) accumulation stage. This stage shows significant increase of erosion rate with the worn surface to become rougher with a large number of small pits and deep craters.; 3) steady stage. This stage shows a constant erosion rate; 4) attenuation stage, which exists only under certain conditions. Cavitation damage show that, both the craters and the pits do have nothing with the material nature, grain boundaries, slip lines, or any other structure feature.

Due to not only weaving together with coherent structure, stochastic bubble collapse, but also interweaving among pressure waves, vorticity wave and microjet caused by bubble collapse, cavitation spots will also be modulated by Rayleigh-Taylor and Kelvin–Helmholtz and other instabilities, and many other factors, all these factors cause cavitation damage to show random characters.

The phenomenon of cavitation erosion is complex, it connects with the gas dynamics, thermodynamics, hydrodynamic and material properties. However, there is a relationship between the increase of cavitation erosion damage and the flow velocity relatively to the wall by a power law. A pit damage and a circular damage are the basic two forms. Studies show that, the velocity of the liquid jet during the bubble collapse may exceed 1.2 km/s, even arrive at 7 km/s, as shown before, a blast wave with peak overpressure exceeding several GPas. If a cavitation event happens, it can produce a lot of tiny bubbles. If the bubble happens to collapse vicinity near the solid surface, it will cause cavitation damage.

In some cases, though the flowing field possesses strong potential cavitation damage, without a triggered mechanism, the cavitation damage will not occur. In fact, the cavitation damage process involves electronic and/or magnetic functions.

5 Cavitation damage model from the viewpoint of the duality of wave and particle of turbulence

Some scholars (Gao,1985; Liu S. D. *etal* 1993) think that turbulence possesses the duality of wave and particle characters, it is a physical process of the interaction between dissipation and dispersion of turbulent eddies to cause the random nature of small scale eddies. The concrete mechanism of vortex breakdown dominates the adjacent local flowing structures. The resonant mechanism plays an important role in the coherent structure. In fact, the stretch of vortexes will mainly dominate the cascade process of turbulent energy. The mutual actions among vortexes will make vortexes themselves become slimmer and slimmer to cause the turbulent energy to transfer from the large vortexes to the small ones, to form the energy cascade process. At the same time, there is a process to transfer the energy of the small vortexes to that of the large ones. The reason behind such cascade process is the mechanism of duality of wave and particle of turbulence.

In fully developed turbulence, there are spiral-like vorticity distributions, which wrap up around strained vortex tubes, and spirals as a function of the Reynolds number, if the Reynolds number increases to infinity, the size of bubble to cause the cavitation damage, will become very small. The maximum bubble temperature affects sonoluminescence intensity. The observation show the fact that erosion often occurs when one of the legs of a vortex cavitation touches and collapses on the solid surface. the inverse U-shaped vortex has highly cavitation ability.

A sketch picture of cavitation damage seemly suggest that, it connects closely with zero-point energy or dark energy. A sketch model of the cavitation damage may be demonstrated as follow, we should stress that the developed model at present paper is only primarily.

For fully developed turbulence, For any element in fluid flow, a fiber bundle structure exists which is composed of a direct product of 3-D space and one dimensional time.

$$M^4 = R^3 \otimes R^1 \tag{6}$$

The style of transform from the base space to the state space is as follows: 1) the spatial shift, 2) the spatial rotation, 3) the spatial distortion, and 4) the time delay. In this study, the base space takes a continuous form, and the state space takes a discrete form of which the value may be definite or countably infinite. For all elements of fluid flow, only part of them may possess cavitation character, in these elements of fluid flow which appear cavitation, only part of them can finally cause cavitation damage.

Conclusion

The relation between the duality of wave and particle of turbulence and the cavitation damage is investigated. The nature of turbulent flow and the bubble distribution makes the cavitation show stochastic characters, so cavitation damage has such property too. The cavitation damage seems to connect closely with zero-point energy (dark energy). From the viewpoint of the duality of wave and particle of turbulence, a sketch conceptive model of the cavitation damage was developed, and it is only a primarily rough one at present.

References

[1] Liu, S.D., Liu, S.K. Soliton wave and turbulence. Shanghai: Science and Technology Education Publishing House. Shanghai (in Chinese), 1993.

[2] Agui J H, Briassulis G. Shock wave turbulence interactions // Annu Rev Fluid Mech. 2000. V. 32, P. 309–345.

[3] Arndt R.E.A. Cavitation in vortical flows // Annu. Rev. Fluid Mech. 2002. V. 34, P. 143–175.

[4] Brenner M. P., Hilgenfeldt S., Lohse D. Single-bubble sonoluminescence // Reviews of Modern Physics. 2002. V. 74, iss. 2, P. 425–484.

[5] Brujan, E. A. Cavitation in Non-Newtonian Fluids. Springer-Verlag, Heidelberg, Germany, 2011.

[6] Delale C. F. Bubble dynamics and shock waves. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, Germany. 2013.

[7] Falkovich G., Gawedzki K., Vergassola M. Particles and fields in fluid turbulence // Reviews of Modern Physics. 2001. V. 73, iss. 4, P. 913–975.

[8] Franc J. P., Michel J. M. Fundamentals of cavitation, Kluwer Academic Publishers, U.S.A. 2005.

[9] Gao Ge. A theory of dissipation and dispersion cooperation of turbulence // Science in China(Series A). 1985. V. 18, iss. 6, P. 616–629.

[10] Ida M. Multibubble cavitation inception // Physics of Fluids. 2009. V. 21, iss. 11, P. 113302(1–13).

[11] Liu. Z. C. Scaling properties of Navier-Stokes turbulence // J. Zhejiang Univ. Sci. A. 2009. V. 10, iss. 3, P. 392–397.

[12] Negro O. L., O'Doherty T. Vortex breakdown: a review // Progress in Energy and Combustion Science. V. 27, P. 431–481.

[13] Plesset M. S., Prosperetti A. Bubble dynamics and cavitation // Annu. Rev. Fluid Mech. 1977. V. 9, P. 145–185.

[14] Putterman S. J., Weninger K. R. Sonoluminescence: how bubbles turn sound into light // Annu. Rev. Fluid Mech. 2000. V. 32, P. 445–476

[15] Ranjan D., Oakley J., Bonazza R., Shock-bubble interactions // Annu. Rev. Fluid Mech. 2011. V. 43, P. 117–140

[16] Suslick K. S., Flannigan D.J. Inside a collapsing bubble: sonoluminescence and the conditions during cavitation // Annu. Rev. Phys. Chem. 2008. V. 59, P. 659–683

[17] Taleyarkhan R. P., West C. D., Cho J. S. Evidence for nuclear emissions during acoustic cavitation // Science. 2002. V. 295, P. 1868–1873

ZhaoCun Liu — PhD, Professor of the Chongqing Jiaotong University, P. R. China;
e-mail: Liuzc17@aliyun.com;
Weijia Fan — Batchelor of Engineering, Senior Engineer, Chongqing Jiaotong University, P. R. China.
e-mail: Fancywj@163.com

THE OPTIMAL TWO-SAMPLE TEST WITH LIFETIME DATA UNDER THE WALD MAXIMIN MODEL OF DECISION MAKING UNDER RISK AND UNCERTAINTY

P. A. Philonenko, S. N. Postovalov

Novosibirsk State Technical University, 630073, Novosibirsk, Russia

UDC 519.234.3

In this paper, the two-sample problem with right-censored data is considered. Using the maximin Wald model of the game theory and using the Monte-Carlo method for the simulation of statistical test power, we research the two-sample tests stability on various types of an alternative hypothesis. The represented results are recommendations on the two-sample tests application on a certain type of an alternative hypothesis. Moreover, we propose a new two-sample $MIN3$ test for right-censored data that the test power is close to the corresponding Wald test statistic.
Keywords: survival analysis, right-censored data, two-sample problem, Monte-Carlo method, test power, proposed $MIN3$ test.

Introduction

In hypothesis testing, there are always such two alternative hypotheses A and B where one two-sample test is more preferable in the alternative A and less preferable in the alternative B than another two-sample test [1]. Hence, the most powerful two-sample test does not exist in the general case. However, the analysis of two-sample tests power by the Wald test [1] for decision making under risk and uncertainty can determine what the test is more preferable in a certain type of alternative hypotheses. We have constructed the types of alternative hypotheses and determined three two-sample tests complementing each other in terms of the test power [1]. They are Multiple Crossing [2], Single Corssing [3] and weighted Kaplan-Meier [4] two-sample tests. Using test statistics of these tests, we have proposed a new two-sample test MIN3 that has the test power close to the maximum of these tests power. The proposed test is a Wald optimal test and its test power do not have the difference more than 5% from the corresponding Wald test statistic.

In section 1, we consider the problem statement. In section 2, we represented applied two-sample tests for right-censored data. In section 3, we consider results of the simulations.

1 Problem Statement

Suppose that we have two samples of continues variables ξ_1 and ξ_2 respectively, $X_1 = \{t_{11}, t_{12}, ..., t_{1n_1}\}$ and $X_2 = \{t_{21}, t_{22}, ..., t_{2n_2}\}$ of two survival distributions $S_1(t)$ and $S_2(t)$. The observation $t_{ij} = \min(T_{ij}, C_{ij})$, where T_{ij} and C_{ij} are the failure and censoring times for the j-th object of the i-th group. T_{ij} and C_{ij} are i.i.d. with CDF $F_i(t)$ and $F_i^C(t)$ respectively. Survival curve means the probability of survival in the time interval $(0, t)$

$$S_i(t) = P\{\xi_i > t\} = 1 - F_i(t).$$

Then the null hypothesis is

$$H_0 : S_1(t) = S_2(t).$$

This research has been supported by Russian Ministry of Education and Science as a part of the state task (project 1.1009.2017/4.6) and by Novosibirsk State Technical University as a young scientist project (project C-15, 2017).

Further, we will suppose that the elements of samples are ordered: $t_{11} < ... < t_{1n_1}$ and $t_{21} < ... < t_{2n_2}$. Also, we pool these samples and sort their elements by ascending order $T = X_1 \cup X_2 = \{t_1, t_2, ..., t_n\}$, where $t_1 < ... < t_n$ and $n = n_1 + n_2$.

Denote the sample indicator v_i and the censoring indicators c_{ij} and c_i as

$$v_i = \begin{cases} 0, \ t_i \in X_1, \\ 1, \ t_i \in X_2 \end{cases} \quad c_{ij} = \begin{cases} 0, \ t_{ij} \text{ is failure}, \\ 1, \ t_{ij} \text{is censored} \end{cases} \quad c_i = \begin{cases} 0, \ t_i \text{ is failure}, \\ 1, \ t_i \text{is censored}. \end{cases}$$

2 Applied Methods

2.1 Two-Sample Tests

In the paper, we apply various two-sample tests for right-censored data. They are the Gehan's generalized Wilcoxon test (denoted by G) [5], Peto and Peto's generalized Wilcoxon test (denoted by P) [6], log-rank test (denoted by LG) [7], Cox-Mantel test (denoted by CM) [8], Q-test (denoted by Q) [9], maximum value test (denoted by MAX) [10], Bagdonavicius-Nikulin tests for generalized Cox [11], multiple [2] and single [3] crossing models (denoted by $BN1, BN2, BN3$ respectively), weighted Kaplan-Meier test [4] (denoted by WKM) and proposed $MIN3$ test (denoted by $MIN3$).

The $MIN3$ test statistic is

$$MIN3 = \min\left(pv_{BN2}, pv_{BN3}, pv_{WKM}\right),$$

where pv_S is a calculated p-value of two-sample test with test statistic S.

2.2 Maximin Wald Test for Decision-Making Under Risk and Uncertainty

Let r be a strategy of the statistical test application with the test statistic S on the alternative hypothesis H. Then, for every strategy r can be set the utility using the utility function $U(r|H)$ [12] (or abbreviated as $U(r)$) [1].

The Wald test is one of tests for decision-making under risk and uncertainty [12]. It is the test of a "careful observer" and the Wald test optimizes the utility (the test power) under an assumption that the environment is unfavorable for the observer, i.e. power values of all tests on the alternative hypothesis H are minimal. The decision rule is as follows:

$$W = \max_{i=1,k} \min_{j=1,m} U\left(r_i|H_j\right),$$

where k is a number of tests, m is a number of alternative hypotheses. In fact, the best test in according to the Wald test is a statistical test whose minimal test power among all alternative hypotheses is maximal among all statistical tests.

3 Simulations

In this section, we consider values of the maximin Wald test statistic for various types of alternative hypotheses. The types of alternative hypotheses are represented in Table 1. There are types with 0, 1 and 2 points of intersections between survival functions $S_1(t)$ and $S_2(t)$. Every type contains three alternative hypotheses with various distribution of failure time $F(t)$. Using the Monte-Carlo method, we simulate test power and then compute the corresponding the maximin Wald test statistic. The greater test power, the higher accuracy of statistical conclusions. The results of simulation are represented in Tables 2–10. The size of simulation is 150 000 Monte-Carlo replications. The test size α is $\alpha = 0.05$. The sample sizes n_1, n_2 are $n_1 = n_2 = 200$ observations. The distributions of censored times $F^C(t)$ are Weibull, Gamma and Exponential and censored rate in the range from 10% to 50%.

One can see that test power of the $MIN3$ test is close to the corresponding the maximin Wald test statistic. It means that the $MIN3$ test power is close to the maximum on the alternative hypothesis when values of all test power are minimal. The maximal difference between $MIN3$ test power and corresponding W statistic is less than 0.05. It makes possible to conclude the $MIN3$ two-sample test is a stable two-sample test for various types of an alternative hypothesis.

Table 1: Types of alternative hypotheses

H_i	**Type of alternative hypothesis**	$S_1 - S_2$	**Intersections**	L^1	$\lvert\mu_1 - \mu_2\rvert$	$\lvert\sigma_1 - \sigma_2\rvert$
H_{01}	Difference in early	$Exp - Exp$	-	0.099	0.10	0.10
H_{02}	time without an	$We - LgN$	-	0.096	0.10	0.66
H_{03}	intersection	$LgN - Exp$	-	0.109	0.18	0.00
H_{04}	Difference in middle	$\Gamma - Exp$	-	0.075	0.07	0.00
H_{05}	time without an	$Exp - We$	-	0.100	0.10	0.08
H_{06}	intersection	$Exp - We$	-	0.162	0.16	0.16
H_{07}	Difference in late	$Exp - \Gamma$	-	0.089	0.09	0.03
H_{08}	time without an	$We - Exp$	-	0.116	0.13	0.57
H_{09}	intersection	$We - LgN$	-	0.107	0.11	0.41
H_{11}	One point of	$Exp - Exp$	0.363	0.100	0.09	0.05
H_{12}	intersection in early	$\Gamma - \Gamma$	0.763	0.078	0.06	0.35
H_{13}	time	$We - Exp$	0.571	0.125	0.12	0.00
H_{14}	One point of	$We - \Gamma$	0.611	0.081	0.08	0.01
H_{15}	intersection	$Exp - We$	0.843	0.097	0.04	0.12
H_{16}	in middle time	$\Gamma - Exp$	1.040	0.068	0.04	0.00
H_{17}	One point of	$We - Exp$	1.346	0.099	0.01	0.00
H_{18}	intersection	$\Gamma - \Gamma$	1.878	0.132	0.03	0.15
H_{19}	in late time	$We - Exp$	3.626	0.097	0.09	0.47
H_{21}	Two points of	$LgN - We$	0.243, 0.655	0.071	0.01	0.04
H_{22}	intersections	$Exp - LgN$	0.814, 1.038	0.079	0.08	0.48
H_{23}	in early and middle	$We - Exp$	0.577, 1.327	0.105	0.09	0.53
H_{24}	Two points of	$LgN - \Gamma$	0.683, 3.074	0.095	0.06	0.13
H_{25}	intersections	$LgN - Exp$	0.232, 0.831	0.068	0.01	0.19
H_{26}	in early and late	$We - LgN$	1.018, 2.381	0.131	0.06	0.60
H_{27}	Two points of	$We - LgN$	1.254, 3.265	0.099	0.11	0.09
H_{28}	intersections	$\Gamma - LgN$	0.793, 2.994	0.088	0.07	0.11
H_{29}	in middle and late	$Exp - LgN$	1.321, 3.463	0.104	0.11	0.08

Conclusions

Thus, in the paper the types of alternative hypotheses have been represented for 0, 1 and 2 points of intersections between underlying survival functions. Every type contains three alternative hypotheses with various distributions of failure time. The results of simulation have been represented that the proposed two-sample $MIN3$ test power is close to the corresponding to the maximin Wald test statistic for decision-making under risk and uncertainty. Hence, the $MIN3$ test is a stable two-sample test for the uncertainty of a alternative hypothesis. It makes possible to recommend the $MIN3$ for applying in two-sample problem solving under right-censored data.

References

[1] P. Philonenko, S. N. Postovalov, Test power in two-sample problem testing as the utility function in the theory of decision making under risk and uncertainty // Actual problems of electronic instrument engineering (APEIE-2016) : XIII International Scientific-Technical Conference, Novosibirsk, Russia, October 03-06, 2016 : v.1, p.2. — pp.369–373, 2016 ISBN 978-5-7782-2991-4.

[2] Bagdonavicius V.B., Nikulin M., On goodness-of-fit tests for homogeneity and proportional hazards, Applied Stochastic Models in Business and Industry, vol. 22, no. 1, pp. 607–619, 2006.

[3] Bagdonavicius V.B., J. Kruopis, M. Nikulin, Nonparametric tests for censored data, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2010, 233 pp.

[4] M.S. Pepe and T.R. Fleming, Weighted Kaplan-Meier statistics: A class of distance tests for censored survival data, Biometrics 45 (1989), pp. 497–507.

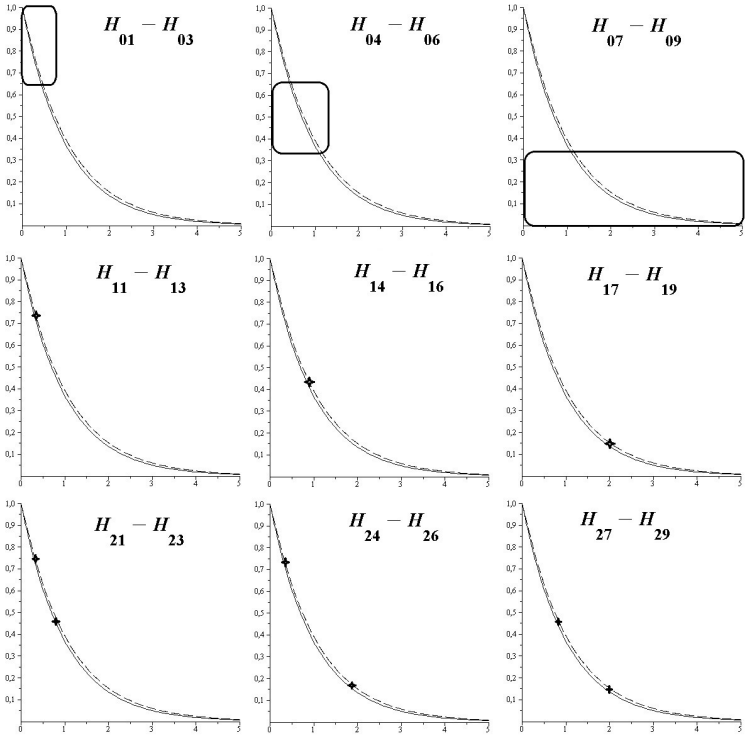


Figure 1: Types of alternative hypotheses (the star means the area of intersection)

[5] Gehan E. A. A generalized Wilcoxon test for comparing arbitrarily singly-censored samples // Biometrika. V. 52, N 1/2. P. 203–223, (1965).

[6] Peto R., Peto J. Asymptotically effcient rank invariant test procedures // J. Royal Statist. Soc. Ser. A (General). V.135, N 2. P.185–207, (1972).

[7] Lee E. T., Wang J. W. Statistical Methods for Survival Data Analysis. N. Y: Wiley, 2003. (Wiley Series in Probability and Statistics).

[8] Mantel, N., Evaluation of Survival Data and Two New Rank Order Statistics Arising in Its Consideration. Cancer Chemotherapy Reports, 50, 163–170, (1966).

[9] Ruvie Lou Maria C. Martinez A pretest for choosing between logrank and wilcoxon tests in the two-sample problem / Ruvie Lou Maria C. Martinez, Joshua D. Naranjo // International Journal of Statistics,vol.LXVIII, n.2. 111–125 pp, (2010).

[10] P. Philonenko, S. Postovalov, A new two-sample test for choosing between log-rank and Wilcoxon tests with right-censored data, Journal of Statistical Computation and Simulation, 85:14, 2761–2770, (2015).

[11] Bagdonavicius V.B., Levuliene R.J., Nikulin M.S., et al., Tests for equality of survival distributions against non-location alternatives, Lifetime Data Analysis, vol. 10, no. 4, pp. 445–460, 2004.

[12] Wald, A., Statistical decision functions which minimize the maximum risk. The Annals of Mathematics, 46(2), 265–280, (1945).

Petr Aleksandrovich Philonenko — Postgraduate student, Junior Researcher of Theoretical and Applied Informatics department Novosibirsk State Technical University; e-mail: petr-filonenko@mail.ru;

Sergey Nikolaevich Postovalov — Doctor of Science, Associated Professor of Theoretical and Applied Informatics department Novosibirsk State Technical University; e-mail: postovalov@ngs.ru.

Received date — May 31, 2017.

Table 2: The minimal values of tests power on the alternative hypotheses $H_{01} - H_{03}$

Test	**Censored rate, %**				
	10	**20**	**30**	**40**	**50**
G	0.315	0.345	0.402	0.472	0.531
P	0.315	0.318	0.346	0.376	0.427
LG	0.142	0.127	0.139	0.160	0.209
CM	0.141	0.129	0.137	0.163	0.212
Q	0.259	0.262	0.278	0.291	0.303
MAX	0.272	0.296	0.346	0.413	0.478
$BN1$	0.190	0.246	0.320	0.401	0.434
$BN2$	0.304	0.336	0.370	0.429	0.490
$BN3$	0.291	0.350	0.421	0.452	0.489
WKM	0.323	0.346	0.391	0.468	0.535
$MIN3$	0.389	0.423	0.468	0.528	0.597
W	**0.389**	**0.423**	**0.468**	**0.528**	**0.597**

Table 3: The minimal values of tests power on the alternative hypotheses $H_{04} - H_{06}$

Test	**Censored rate, %**				
	10	**20**	**30**	**40**	**50**
G	0.178	0.188	0.190	0.203	0.207
P	0.175	0.178	0.181	0.180	0.180
LG	0.101	0.109	0.115	0.129	0.132
CM	0.101	0.107	0.118	0.124	0.133
Q	0.144	0.149	0.147	0.154	0.156
MAX	0.157	0.162	0.170	0.177	0.180
$BN1$	0.146	0.148	0.148	0.150	0.148
$BN2$	0.128	0.127	0.127	0.131	0.134
$BN3$	0.158	0.160	0.160	0.157	0.156
WKM	0.182	0.188	0.194	0.200	0.206
$MIN3$	0.157	0.161	0.168	0.170	0.180
W	**0.182**	**0.188**	**0.194**	**0.203**	**0.207**

Table 4: The minimal values of tests power on the alternative hypotheses $H_{07} - H_{09}$

Test	**Censored rate, %**				
	10	**20**	**30**	**40**	**50**
G	0.089	0.083	0.077	0.071	0.066
P	0.093	0.086	0.082	0.075	0.069
LG	0.191	0.170	0.125	0.095	0.077
CM	0.192	0.170	0.126	0.095	0.077
Q	0.178	0.138	0.106	0.086	0.073
MAX	0.182	0.142	0.106	0.087	0.075
$BN1$	0.160	0.155	0.145	0.092	0.069
$BN2$	0.132	0.130	0.123	0.112	0.093
$BN3$	0.162	0.155	0.131	0.086	0.066
WKM	0.091	0.082	0.075	0.070	0.066
$MIN3$	0.165	0.164	0.127	0.100	0.083
W	**0.192**	**0.170**	**0.145**	**0.112**	**0.093**

Table 5: The minimal values of tests power on the alternative hypotheses $H_{11} - H_{13}$

Test	**Censored rate, %**				
	10	**20**	**30**	**40**	**50**
G	0.054	0.051	0.049	0.048	0.052
P	0.057	0.052	0.051	0.050	0.049
LG	0.072	0.067	0.063	0.058	0.051
CM	0.071	0.069	0.066	0.058	0.052
Q	0.063	0.061	0.057	0.053	0.051
MAX	0.064	0.062	0.060	0.058	0.057
$BN1$	0.070	0.069	0.069	0.071	0.072
$BN2$	0.067	0.068	0.069	0.072	0.079
$BN3$	0.074	0.073	0.074	0.075	0.078
WKM	0.054	0.050	0.050	0.049	0.051
$MIN3$	0.068	0.067	0.067	0.070	0.074
W	**0.074**	**0.073**	**0.074**	**0.075**	**0.079**

Table 6: The minimal values of tests power on the alternative hypotheses $H_{14} - H_{16}$

Test	**Censored rate, %**				
	10	**20**	**30**	**40**	**50**
G	0.049	0.050	0.050	0.053	0.056
P	0.051	0.049	0.050	0.049	0.052
LG	0.055	0.051	0.049	0.049	0.050
CM	0.055	0.050	0.049	0.050	0.049
Q	0.058	0.058	0.058	0.057	0.051
MAX	0.064	0.064	0.058	0.055	0.056
$BN1$	0.128	0.117	0.098	0.086	0.076
$BN2$	0.104	0.101	0.089	0.080	0.073
$BN3$	0.139	0.119	0.100	0.086	0.078
WKM	0.050	0.050	0.051	0.053	0.057
$MIN3$	0.112	0.097	0.085	0.075	0.071
W	**0.139**	**0.119**	**0.100**	**0.086**	**0.078**

Table 7: The minimal values of tests power on the alternative hypotheses $H_{17} - H_{19}$

Test	**Censored rate, %**				
	10	**20**	**30**	**40**	**50**
G	0.163	0.180	0.200	0.219	0.243
P	0.155	0.165	0.171	0.177	0.189
LG	0.052	0.064	0.083	0.100	0.115
CM	0.053	0.066	0.083	0.099	0.114
Q	0.146	0.150	0.160	0.168	0.169
MAX	0.135	0.153	0.170	0.186	0.205
$BN1$	0.207	0.202	0.201	0.195	0.196
$BN2$	0.171	0.169	0.171	0.174	0.173
$BN3$	0.227	0.223	0.218	0.211	0.209
WKM	0.164	0.180	0.199	0.223	0.242
$MIN3$	0.199	0.202	0.207	0.215	0.227
W	**0.227**	**0.223**	**0.218**	**0.223**	**0.243**

Table 8: The minimal values of tests power on the alternative hypotheses $H_{21} - H_{23}$

Test	**Censored rate, %**				
	10	**20**	**30**	**40**	**50**
G	0.050	0.049	0.051	0.052	0.051
P	0.050	0.049	0.049	0.050	0.051
LG	0.058	0.065	0.066	0.056	0.050
CM	0.060	0.065	0.067	0.055	0.051
Q	0.060	0.062	0.062	0.055	0.052
MAX	0.063	0.065	0.063	0.063	0.060
$BN1$	0.066	0.063	0.062	0.064	0.064
$BN2$	0.087	0.083	0.085	0.076	0.070
$BN3$	0.060	0.061	0.062	0.064	0.065
WKM	0.050	0.050	0.052	0.053	0.051
$MIN3$	0.093	0.081	0.074	0.068	0.063
W	**0.093**	**0.083**	**0.085**	**0.076**	**0.070**

Table 9: The minimal values of tests power on the alternative hypotheses $H_{24} - H_{26}$

Test	**Censored rate, %**				
	10	**20**	**30**	**40**	**50**
G	0.050	0.051	0.051	0.052	0.054
P	0.050	0.051	0.050	0.050	0.050
LG	0.050	0.050	0.050	0.051	0.049
CM	0.049	0.050	0.050	0.051	0.050
Q	0.049	0.049	0.048	0.051	0.052
MAX	0.050	0.052	0.054	0.058	0.059
$BN1$	0.054	0.050	0.051	0.049	0.053
$BN2$	0.124	0.115	0.109	0.100	0.097
$BN3$	0.049	0.049	0.052	0.051	0.063
WKM	0.050	0.049	0.048	0.051	0.053
$MIN3$	0.103	0.094	0.088	0.081	0.077
W	**0.124**	**0.115**	**0.109**	**0.100**	**0.097**

Table 10: The minimal values of tests power on the alternative hypotheses $H_{27} - H_{29}$

Test	**Censored rate, %**				
	10	**20**	**30**	**40**	**50**
G	0.059	0.064	0.075	0.094	0.131
P	0.060	0.060	0.062	0.070	0.083
LG	0.050	0.050	0.050	0.050	0.051
CM	0.050	0.050	0.050	0.050	0.052
Q	0.058	0.063	0.065	0.072	0.070
MAX	0.056	0.063	0.073	0.089	0.117
$BN1$	0.050	0.054	0.070	0.100	0.147
$BN2$	0.221	0.219	0.221	0.237	0.275
$BN3$	0.059	0.075	0.103	0.136	0.180
WKM	0.059	0.065	0.078	0.095	0.131
$MIN3$	0.178	0.184	0.188	0.215	0.256
W	**0.221**	**0.219**	**0.221**	**0.237**	**0.275**

THE LIMITATIONS OF SOLUTION ACCURACY FOR ELLIPSOMETRIC PROBLEMS

S. N. Svitasheva

Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, RAS, 630090, Novosibirsk

UDC 535.51;39

Contemporary nanotechnologies often require calculating of three parameters of metal films simultaneously using ellipsometric measurements at single wavelength. As a rule these measurements are needed for routine control of deposition conditions. The knowledge of exact values of film thickness and complex refractive index is highly important because they define reliability of device operation. In this paper a new algorithm of inverse ellipsometric problem solution using Mathcad platform is proposed and difficulties in obtaining accurate results are considered. The solution accuracy limiting factors are the following: measurement accuracy, quality of ellipsometer alignment and homogeneity or uniformity of object of study.

Keywords: ellipsometry, optical properties, inverse ellipsometric problem, transition metal, monitoring process.

Introduction

Ellipsometry is a nondestructive and no-disturbing method of measuring of properties of both dielectric and metallic films. Advantage of Ellipsometry method among different optical techniques consists in that both amplitude and phase of electromagnetic wave which are reflected from surface of films are extracted simultaneously when every measurement. Specific difficulties are appeared in case of strongly absorbing films, for examples, metals and some semiconductors. Aluminum films, films of most transition metals (such as Titanium, Vanadium, Magnesium, Cobalt, Nickel, and Palladium), noble metal films (such as gold and silver films) and copper films and their oxides are widely used in different micro- and nano-devices. It is well known that film morphology and film composition depend on preparation technology. Unfortunately, nomograms method of definition of the three parameters of absorbing films is inapplicable in this case. Author repeatedly focused their efforts on development of new approaches to this difficult problem of determination of properties of different materials [1, 2, 3, 4].

1 Principal questions

1.1 Survey of Methods of Film Parameters Reconstruction Based on Ellipsometric Measurements

1.1.1 Nomograms Method

Nomograms method was proposed by Archer [5] in 1962 and improved by Saxena [6] three years later, and for many years it was the only method for an interpretation ellipsometric measurements. This method is used for determination of the properties of transparent films (silicon dioxide or silicon nitride, as a rule) on silicon substrate; lines of equal film thicknesses together with lines of equal refractive indices are displayed on plane of ellipsometric angles Ψ and Δ for single wavelength and single angle of incidence of light. At first, nomograms were drawn on paper sheets stitched into an album, later personal computers allowed us to display film parameters quickly using monitor screen.

1.1.2 Computer Methods of solution of inverse ellipsometric problem (IEP)

First of all it is very useful to read paragraph 4.5 titled "Numerical inversion of the exact equation of reflection ellipsometry" in the book of R.M.A. Azzam and N.M. Bashara [7] where some aspects of IEP solutions such as:

cases of analytical solution, choice of error function (E_r), rate of convergence for E_r minimization, and hence, choice of angles of incidence, and in addition affect of experimental errors were considered. It is absolutely clear that there is no standard solution, and every task demands particular approaches.

1.1.3 Transparent Films

The solution for transparent film is the easiest case. But keep in your mind that the possibility of finding false solution still exists if the structure being analyzed consists of double dielectric layers, for instance, as in ONO (oxide-nitride-oxide)-Structure [4, 8]. The accuracy could be increased by some times when statistical processing of found solutions of inverse ellipsometric problem was done, so that to avoid finding local minimums as in [2]. Furthermore, purely mathematical specifics of determining of accurate solution were analyzed: conditionality, uniqueness, stability, and mutual dependence of solution IEP [2, 8].

1.1.4 Absorbing Films

Earlier in [1], technique of finding a great number of exact solutions using one pair of ellipsometric angles was developed, but additional measurement should be taken for removal of ambiguity. The solution could obtained in form of space (three-dimensional: n-k-d) spiral, every point of which corresponds to exact solution of ellipsometric equation. The point of intersection of two three-dimensional spirals gives us the only solution. By such way, map of film parameters (thickness, refractive index, and absorption coefficient) was created for film of mercury telluride HgTe [4]. Besides, the analysis of general ambiguity of IEP was carried out and existence of several families of IEP solutions was revealed [3] as shown on different experimental examples. All above mentioned reasoning relate to measurements at single wavelength.

1.1.5 Spectroscopic ellipsometric measurements

Spectroscopic ellipsometry requires both particular modeling and dividing of task into two or more sub-tasks so that two parts of specter — transparency region and region of strong absorption — could be used for successful IEP solution, for instance as in [8, 9, 10]. Building of Adequate Model of film structures provides reliability of result of EIP-solution. Model has to take into account that film properties differ from its bulk properties. It needs to use Lorentz's oscillator's model for description of permittivity of each film when fitting procedure is applied, i.e. getting one-to-one correspondence of experimental data and calculations for mathematic model, using method of least-squares (such as Levenberg–Marquardt algorithm).

2 Experiment

2.1 Equipment

Measurements of optical constants and thicknesses of metallic films are important now and they will be vital question along with other questions of technology and both mathematic description and modeling. An accurate knowledge of all properties of films is needed for desired functionality of device. In our experiments, film depositions were carried out in high vacuum unit with (ALD) technique of additional layer deposition. LEP-3M (laser ellipsometer photometric) was used for ellipsometric measurements at wavelength of 633 nm.

2.2 Programming

Calculations of parameters of metallic films were carried out using the Mathcad 15 platform keeping in mind all its advantages and demerits which are listed below.

The benefits of programming using Mathcad are the following:

1. Fast and easy to write a program (you do not need knowledge of algorithmic languages).
2. Fast debugging because you can display anywhere in a program the results of intermediate calculations.
3. Quick and convenient reading data from a file and record the calculated data in the file.

Disadvantages of programming using Mathcad are the following:

1. Slow (by 1-2 orders of computation speed magnitude inferior to similar programs written using high-level languages like FORTRAN and PASCAL).

2. Lack of flexibility of the programming language.

3. No possibility to compile and link programs and, hence, run it separately from the main program block.

2.3 Calculation and Algorithm of Finding Solutions

All calculations are based on Equations which earlier had been gotten in [1]: according to [8], ellipsometric Equation for reflection coefficient of polarized light can be written by Eq. (1), where the only X is unknown variable. Multipliers of square equations A, B, C, D, E, and F are cumbersome combinations of Fresnel reflection coefficients.

$$\rho \equiv \tan\Psi e^{i\Delta} = \frac{A + BX + CX^2}{D + EX + FX^2}, \quad \text{where} \quad X = \exp\left[-\frac{4\pi d}{\lambda}(\gamma + i\beta)\right], \tag{1}$$

The roots of Equation (1) are two complex values X_1 and X_2:

$$X_{1,2} = \frac{-(B - \rho E) \pm \sqrt{(B - \rho E)^2 - 4(C - \rho F)(A - \rho D)}}{2(C - \rho F)} = |X_{1,2}|\, e^{i\theta_{1,2}}. \tag{2}$$

It is easy to show that the real and imaginary parts of X_1 and X_2 satisfy the equation of the logarithmic spiral:

$$-\frac{1}{\gamma}|X_{1,2}| = \frac{1}{\beta}\theta_{1,2}. \tag{3}$$

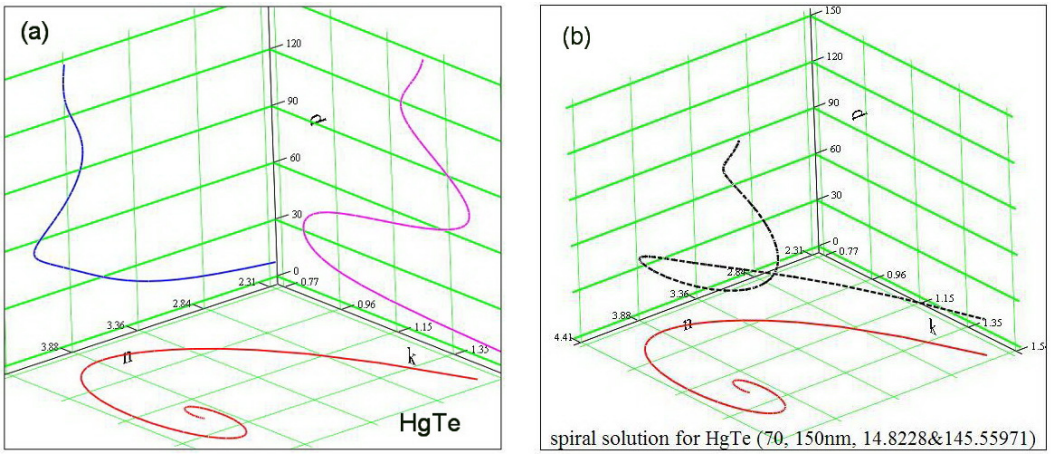


Figure 1: A full set of exact solutions in 3d-space *n-k-d* for single pair of ellipsometric angles $\Psi = 14.822$ and $\Delta = 145.55971$ measured at one incidence angle of light beam $\varphi_0 = 70°$ for mercury telluride HgTe film with thickness of 150 nm, $\lambda = 632.8$ nm. (a)-Three projections (n-k, n-d, k-d and (b)-3D spiral.

You can see it for mercury telluride in Figure 1. Analogical three projections and general solution of spiral-curve for transition metal such as palladium are demonstrated in Figure 2, unfortunately, they are less expressive than former 3-D graphic.

Values included in equation 3 do not depend on thickness *d*, so, this projection can be built on the plane n-k. Two another projections of the general solution n-d, and k-d are also shown in Figure 1; the first projection has the form of distorted (deformed) logarithmic spiral due to non-linearity transformation $X \to N = n - ik$. The three-dimensional spirals are shown in the right part of Figure 1 and of Figure 2 together with the $n - k$ projection for two materials: mercury telluride -HgTe and Palladium, respectively.

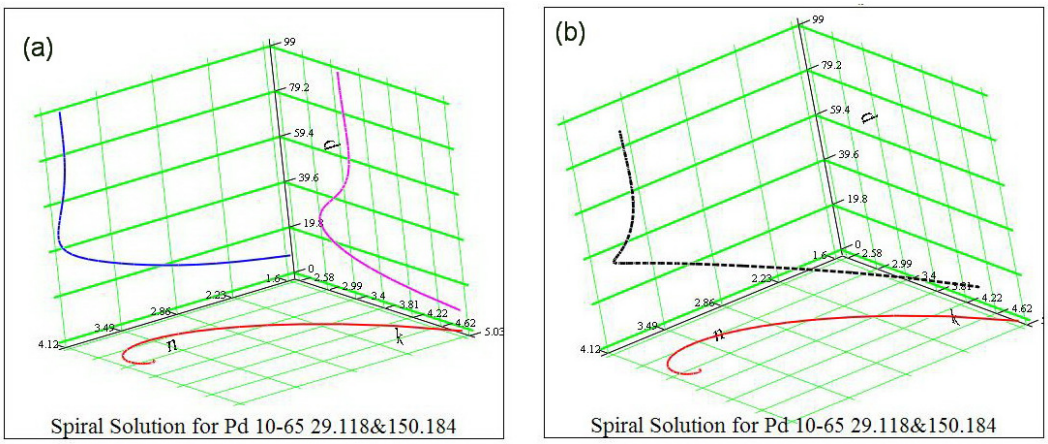


Figure 2: A full set of exact solutions in 3d-space n-k-d for single pair of ellipsometric angles $\Psi = 29.118$ and $\Delta = 150.18398$ measured at one incidence angle of light beam $\varphi_0 = 65°$ for palladium Pd film with thickness of 10 nm. $\lambda = 616.9$ nm, $N_{Si} = 3.89903 - 0.00753i$, $N_{Pd} = 1.75 - 4.21i$.

2.3.1 Elimination of an ambiguity to get exact Equations solution

The exact solution of the main ellipsometric equation for finding optical constants and thickness of thin (∼10 nm) metal films is an essential but difficult task. Multiple-angle-of-incidence (MAI)-ellipsometry could be also successful in case of absorbing films, if algorithm of calculations will be improved. Application of equations (1-3) led us to a method which could be named as analytical method of spatial-spiral or of three-dimensional spiral.

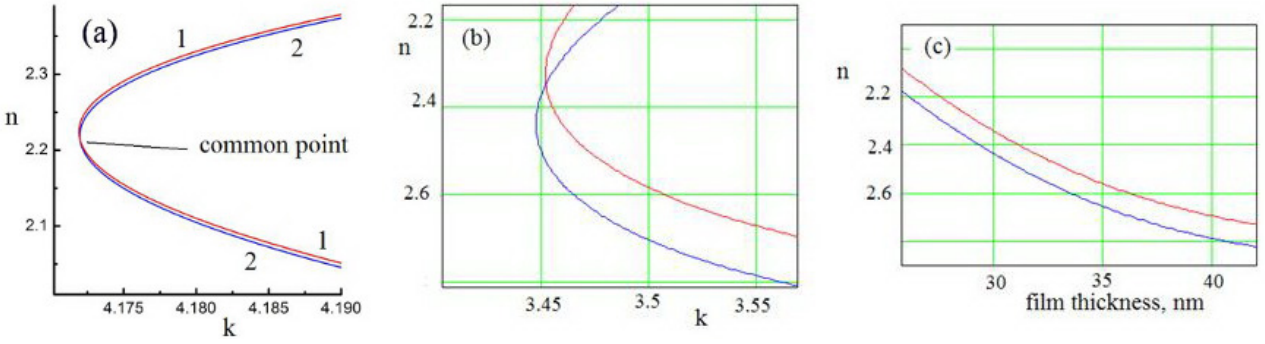


Figure 3: Common point from TOTAL SET of EXACT SOLUTIONS in 2D-spaces for two pairs of ellipsometric angles Ψ and Δ measured at TWO ANGLES of incidence of light beam φ_{01} and φ_{02} for TITANIUM films: (a)-for simulated data, (b) and (c)-for experimental data.

The main idea of the method is the following. Measurements were carried out at a number of different angles of incidence of light beam (φ_{01}, … φ_{0m}) and m-pairs of ellipsometric angles were obtained (Ψ_1, Δ_1, … Ψ_m, Δ_m). All possible exact solutions were found using equations (1-3) for every φ_{0i} in form of spatial-spiral. Since, all spatial-spirals should have only one common point of intersection which corresponds to exact solution for metallic film, as shown in Figure 3. ***The definition of this intersection point is the aim of proposed algorithm.*** The IEP should be solved step-by-step for every value of film thickness from range which contains the desired thickness; starting from maximal thickness in this range. Complex refractive index of this thick film will be close to the same index as in case of semi-infinite medium. And besides, the IEP should be independently solved for two different angles of incidence of light beam (φ_{01}, φ_{02}) to get the common intersection point of two spirals. So, curves of solutions do not contain breaks or discontinuities, therefore, every next point could be defined using value of previous point. In practice, intersection point in three-dimensional space ($n_f - k_f - d_f$) of film parameters can be lacking, due to inadequacy of model of description of structure or measurement's errors. In this case, it is possible to define intersection point in two-dimensional space, i.e. at plane ($n_f - k_f$) for two values of angles of incidence of light beam. Notice that the values of film thickness in this point will be different $d_f(\varphi_{01}) \neq d_f(\varphi_{02})$,

and the smaller their discrepancy than more accurate solution. Hence, some *approximate* solution could be defined if desired values belong to permissible intervals.

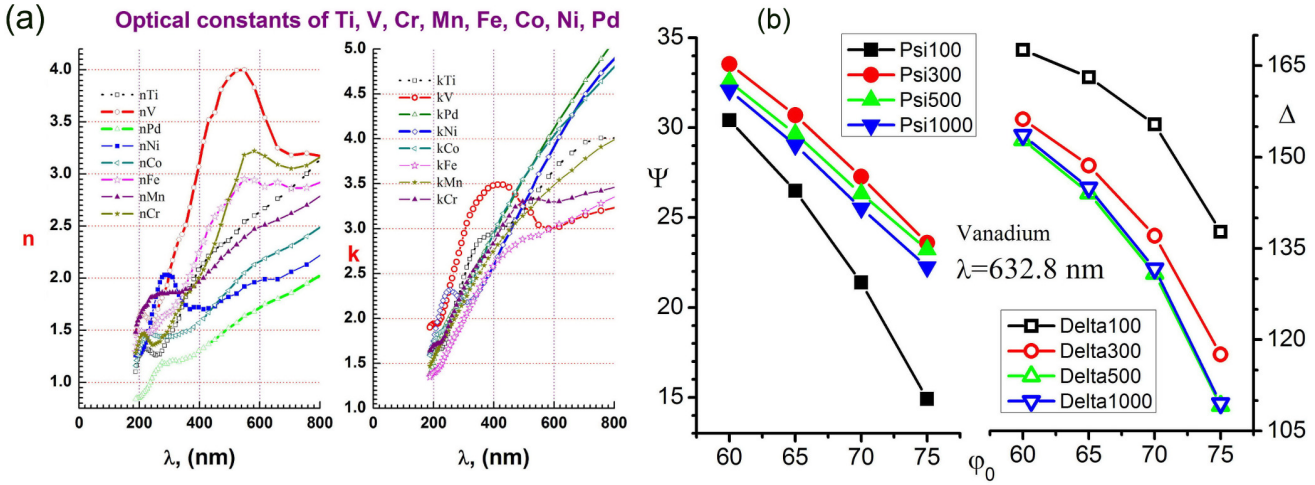


Figure 4: The optical properties of transition metals as in paper [11]; and Ellipsometric angles Ψ and Δ via angle incidence of light beam φ_0 and film thickness (in nanometers) for Vanadium film with various thicknesses.

3 Ellipsometric Angles as functions of Parameters of Metallic Films

In this section reasons of appearance of measurement errors will be investigated. Let us suggest that erroneous measurements are only introduced by object, i.e. by metallic film; and analysis of the nature of such errors will be represented. The main question: is it possible to avoid experimental errors which do not allow getting exact solution? To answer that question, a number of metal and of their optical properties had been considered. We paid attention two groups of metals: transition metals and noble metals. All metals included in these groups exhibit strong absorption of light at wavelength 633 nm. Therefore, for the following steps of reconstruction of film parameters, real experiment's measurements were substituted on simulation Data obtained using evaluation of ellipsometric angles Ψ and Δ for all materials for set of $\varphi_0 \in 60°, 65°, 70°, 75°$ and for a set of film thicknesses (10, 30, 50, 100 nm). Simulation was applied to avoid any errors. Figure 4 demonstrates optical properties of transition metal, as for instance; and variations of polarization angles of vanadium. The changes of ellipsometric angles Ψ and Δ become smaller with increasing film thickness, as shown in Figure 4. Hence, quality of IEP estimation only depends upon both algorithm of program and optical properties of metal. Above described algorithm of program was used in evaluation for the whole set of simulated ellipsometric angles. Besides, noble metals (Au, Ag, and Cu) were used for testing of proposed algorithm. The analysis revealed that estimations of the desired film parameters (n, k, d) were received with high accuracy in the range of conditions of simulation data. However, successful IEP solution requires high precision of input Data, so ellipsometric angles should be known with accuracy up to four decimal places (i.e. 0.0001°), as for Ti film, for instance. It is well known that technological conditions of film deposition could hardly provide this accuracy and, mainly, due to the inhomogeneity of the composition and structure of thin films. It is super difficult task. Precision of goniometer devices in ellipsometer could be increased but the effect of this increase would be extinguished due to variability of film properties under deposition. There are other serious obstacles related to accuracy of definition of thin film thickness in particular. Details of impact of absorption on polarization of reflected light are displayed in Figure 4, for example, for Vanadium. Vanadium film was deposited on Silicon substrate and measurement were carried out at wavelength $\lambda = 633$ nm. Notice that Vanadium film thickness of 100 nm exceeded thickness period, i.e. film phase thickness is equal or more than 2π therefore its curve (100 nm) is located below previous curves. Obviously, exact solutions could be found for film thickness which is equal to 10 nm or smaller.

Summary

Parameters of thin (nano-scale) metal films could be defined by ellipsometric method using proposed program algorithm of construction of three-dimensional exact solution. Application of Mathcad platform for implementation of this algorithm gives us possibility to study nuances of calculation procedure and to reveal restrictions preventing to get exact solution.

References

[1] S. N. Svitasheva, The exact solution of inverse equation of reflection ellipsometry problem for the absorbing films, DAN SSSR, vol. 318, No. 5 (1991) 1154–1158.

[2] Y. E. Voskoboinikov and S.N. Svitasheva, The Accuracy of Reconstruction of Film System Parameters and the Conditionality of Inverse Ellipsometric Problem, Optoelect., Instrum. &Data Process., No. 4 (1992) 80–90.

[3] V. G. Polovinkin, S.N. Svitasheva, The analysis of general ambiguity inverse ellipsometric problem, Thin Solid Films, 313–314 (1998) 128–131.

[4] V. A. Gritsenko, Svitasheva, I.P. Petrenko. S.N. and H. Wong, J.B. Hu, and I.H. Wilson, Study of Excess Silicon at Si_3N_4/Thermal SiO_2 Interface Using EELS and Ellipsometric measurements, Journal of Electrochemical Society, 146, No. 2, (1999) 780–785.

[5] R. J. Archer, Determination of the properties of films on Silicon by the method of ellipsometry, J. Opt. Soc. Am., 52, No. 9 (1962) 970.

[6] A. N. Saxena, Changes in the phase and amplitude of polarized light reflected from a film-covered surface and their relations with thickness, J. Opt. Soc. Am., 12, No. 2, (1965) 226.

[7] R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, Ellipsometry and polarized light, second ed., North-Holland, 1979.

[8] Svetlana Svitasheva, Modeling Methods of Optical Inhomogeneous Structures. Application of Ellipsometry, Lambert Academic Publishing, 2013.

[9] S. N. Svitasheva, Finding Optical Constants for MBE n-Type GaAs Films between 1.50-4.75 eV, Optoelect., Instrum. &Data Process., Vol. 47, No. 6 (2007) 571–577.

[10] S. N. Svitasheva Optical Constants of MBE n-type GaAs Films doped by Si or Te, JEMAA, Vol.**2,** No. 6, (2010) 357-361 DOI: 10.4236/jemaa.2010.26046.

[11] P. B. Johnson., R. W. Christy, Optical constants of transition metals: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni and Pd, Physical Review B, 1974, V. 9, No. 12, P. 5056–5070.

Svitasheva Svetlana Nikolaevna — Dr. Sci., senior researcher,
Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, RAS;
e-mail: Svitasheva@isp.nsc.ru;
Received — May 24, 2017

DIVERSE BLOW-UP REGIMES IN NONLINEAR DIFFUSION PROCESSES

Yu. N. Skiba[1], D. M. Filatov[2]

[1] *National Autonomous University of Mexico, Av. Universidad 3000, C.P. 04510, Mexico City, Mexico*
[2] *Institute of Physics of the Earth, 10-1 Bol'shaya Gruzinskaya St., 123242, Moscow, Russia*

UDC 519.63

Physical phenomena with critical blow-up regimes simulated by the 3D nonlinear diffusion equation in a spherical shell are studied. For solving the model numerically, the original differential operator is split along the radial coordinate, as well as an original technique of using two coordinate maps for solving the 2D subproblem on the sphere is involved. This results in 1D finite difference subproblems with simple periodic boundary conditions in the latitudinal and longitudinal directions that lead to unconditionally stable implicit second-order finite difference schemes. A band structure of the resulting matrices allows applying fast direct (non-iterative) linear solvers using the Sherman-Morrison formula and Thomas algorithm. The developed method is tested in several numerical experiments. Our tests demonstrate that the model allows simulating different regimes of blow-up in a 3D complex domain. In particular, heat localisation is shown to lead to the breakup of the medium into individual fragments followed by the formation and development of self-organising patterns, which may have promising applications in thermonuclear fusion, nonlinear inelastic deformation and fracture of loaded solids and media and other areas.

Keywords: Evolution with blow-up, nonlinear reaction-diffusion, finite difference schemes, operator splitting.

Introduction

The phenomenon of diffusion has many manifestations in nature. One of the most obvious is from gas dynamics and atmospheric environment. The air, as it is known, is a mixture of different gases, such as carbon dioxide, oxygen, hydrogen, nitrogen and particles of dust. However, due to diffusion the atmospheric composition at any given altitude is fairly homogeneous. The driving force for diffusion is the difference between the thermodynamic potentials. By means of the redistribution of the substance a system tends to equalise local differences of the potentials, and, consequently, is approximated to the thermodynamic equilibrium, and this alignment is carried out by diffusion.

For certain diffusion (heat transfer) models, the charge and momentum, taken in blow-up regimes, are the quantities able to model the formation and evolution of tornadoes and lightnings. Specifically, in [7] it is shown that in the life cycle of tornadoes experiencing in blow-up modes the tornado elephant trunk descends from the atmosphere to the ground. For atmospheric flows of regional and global scales simulation in spherical geometry is appropriate, which leads to 2D (on the sphere) or 3D (in a spherical shell) nonlinear diffusion models More information on nonlinear diffusion phenomena and applications can be found, e.g., in [1, 2, 3, 4, 5, 6, 9, 10, 11, 12, 16, 17, 18].

The development of numerical methods for solving the diffusion equation on a sphere (2D) or in a spherical shell (3D) has its own features. The point is that the sphere is not a doubly periodic domain, since it is periodic in the longitude, but is not in the latitude due to the presence of two poles. Therefore, a numerical procedure designed to solve the original 2D problem will be computationally cumbersome, because the matrix of the resulting linear system will be of a general type, hence not permitting to apply some or other fast linear solvers. As for making some or other modifications to the model prior to computing, these normally bring to the necessity of constructing mathematically and physically correct boundary conditions or involving special numerical procedures near the poles (e.g., matrix bordering). Both are always a problem, as the poles represent an artificial boundary appearing exclusively due to the latitudinal-longitudinal coordinate system, and the construction of proper artificial boundary conditions is a serious independent question.

Some of the three-dimensional nonlinear diffusion equations considered in the spherical geometry are convenient to solve by separating the diffusion operator into the spherical and radial components. The main idea consists in splitting the original differential operator by coordinates and subsequent constructing finite difference schemes for the split 1D subproblems using two different coordinate maps for the same sphere when computing in the longitudinal and latitudinal directions. The key advantage of this technique is that each split 1D equation can be equipped with a periodic boundary condition, despite the sphere being not a doubly periodic domain. Therefore, unlike the existing methods, this one does not require applying special numerical procedures for careful computing the solution near the poles, which is always a serious challenge. The developed algorithm is cheap-to-implement from the computational point of view [12, 13, 14, 15]. The theoretical results are confirmed numerically by simulating various nonlinear diffusion processes.

1 Nonlinear Diffusion Model

We consider the 3D nonlinear diffusion equation in the spherical shell written in the coordinates r (the radius), λ (the longitude), φ (the latitude)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = (A_r + A_\lambda + A_\varphi)T + f, \tag{1}$$

where

$$A_r T = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 D \frac{\partial T}{\partial r}\right), \quad A_\lambda T = \frac{1}{r\cos\varphi}\frac{\partial}{\partial \lambda}\left(\frac{D}{r\cos\varphi}\frac{\partial T}{\partial \lambda}\right), \quad A_\varphi T = \frac{1}{r\cos\varphi}\frac{\partial}{\partial \varphi}\left(\frac{D\cos\varphi}{r}\frac{\partial T}{\partial \varphi}\right). \tag{2}$$

Here $D \sim (T)^\alpha$ is the diffusion coefficient, while f is the external forcing. Using the standard method of operator splitting, we define the grid spacing in time as $\tau = t_{n+1} - t_n$ and in every double time interval (t_{n-1}, t_{n+1}) linearise (1) and then split the linearised equation by coordinates, assuming $D \sim (T^{n-1})^\alpha$ and $T^{n-1} = T(\lambda, \varphi, t_{n-1})$. The split equations are to be solved in time successively: the solution to the radial subproblem (i.e. solved in r) is the initial condition for the longitudinal subproblem; that, in turn, after being solved in λ, will provide the initial condition for the latitudinal subproblem; the latter, solved in φ, will supply the initial condition for the forcing equation. Next, in order to have the approximation order $O(\tau^2)$, the bicyclic splitting procedure is used [8] — the order of the splitting changes to the inverse one (see formulas (5)-(11) below).

Because the metric term $r\cos\varphi$ vanishes at $\varphi = \pm\frac{\pi}{2}$, the spherical operators A_λ and A_φ are meaningless at the poles. Therefore, for approximating the entire sphere S, under $\Delta\lambda = \lambda_{k+1} - \lambda_k$ and $\Delta\varphi = \varphi_{l+1} - \varphi_l$ we define on S a grid making a half step shift in φ as

$$S^{(1)}_{\Delta\lambda,\Delta\varphi} = \left\{(\lambda_k, \varphi_l) : \lambda_k \in \left[\tfrac{\Delta\lambda}{2}, 2\pi + \tfrac{\Delta\lambda}{2}\right), \varphi_l \in \left[-\tfrac{\pi}{2} + \tfrac{\Delta\varphi}{2}, \tfrac{\pi}{2} - \tfrac{\Delta\varphi}{2}\right]\right\}. \tag{3}$$

Due to the shift in φ we exclude the pole singularities, so that the resulting finite difference equations will have sense everywhere on $S^{(1)}$. For subsequent computing in the longitude one may, evidently, use the periodic boundary condition, as the sphere S is a periodic domain in λ. As for computing in the latitude, the point is that the sphere is not a periodic domain in φ. Several approaches can be used to solve the latitudinal subproblem, e.g. one could involve a matrix bordering procedure or try to paste the solution from the opposite meridians at the poles. A disadvantage of these techniques is that in the case of an implicit temporal approximation the resulting matrix will be of a general type and so no fast algorithms of linear algebra can be used for computing the solution. Alternatively, an explicit temporal discretisation can be used, but this will impose serious restrictions on the time step, especially when α is large. However, this is exactly the method of splitting that allows to avoid these undesired procedures which, if performed inaccurately, may easily result in introducing nonphysical modes into the solution. Due to the splitting, for computing the solution in φ we change the coordinate map from (3) to

$$S^{(2)}_{\Delta\lambda,\Delta\varphi} = \left\{(\lambda_k, \varphi_l) : \lambda_k \in \left[\tfrac{\Delta\lambda}{2}, \pi - \tfrac{\Delta\lambda}{2}\right], \varphi_l \in \left[-\tfrac{\pi}{2} + \tfrac{\Delta\varphi}{2}, \tfrac{3\pi}{2} + \tfrac{\Delta\varphi}{2}\right)\right\}. \tag{4}$$

Obviously, grid (4) contains the same nodes as (3). The use of the two coordinate maps $S^{(1)}$ and $S^{(2)}$ allows employing the numerical algorithm with the periodic boundary conditions in both directions, λ and φ [13, 14, 15]. The only change we have to make in A_φ if using (4) is to replace $\cos\varphi$ with $|\cos\varphi|$.

We take the second-order finite difference approximations

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 D\frac{\partial T}{\partial r}\right) \approx \frac{1}{\Delta r}\left((r^2D)_{p+\frac{1}{2}}\frac{T_{p+1}-T_p}{\Delta r} - (r^2D)_{p-\frac{1}{2}}\frac{T_p - T_{p-1}}{\Delta r}\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda}\left(D\frac{\partial T}{\partial \lambda}\right) \approx \frac{1}{\Delta \lambda}\left(D_{k+\frac{1}{2}}\frac{T_{k+1}-T_k}{\Delta \lambda} - D_{k-\frac{1}{2}}\frac{T_k - T_{k-1}}{\Delta \lambda}\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi}\left(D|\cos\varphi|\frac{\partial T}{\partial \varphi}\right) \approx \frac{1}{\Delta \varphi}\left((D|\cos\varphi|)_{l+\frac{1}{2}}\frac{T_{l+1}-T_l}{\Delta \varphi} - (D|\cos\varphi|)_{l-\frac{1}{2}}\frac{T_l - T_{l-1}}{\Delta \varphi}\right).$$

Supplementing them with the bicyclic splitting [8]

$$\frac{T_{pkl}^{n-\frac{3}{4}} - T_{pkl}^{n-1}}{\tau} = A_r\frac{T_{pkl}^{n-\frac{3}{4}} + T_{pkl}^{n-1}}{2}, \tag{5}$$

$$\frac{T_{pkl}^{n-\frac{2}{4}} - T_{pkl}^{n-\frac{3}{4}}}{\tau} = A_\lambda\frac{T_{pkl}^{n-\frac{2}{4}} + T_{pkl}^{n-\frac{3}{4}}}{2}, \tag{6}$$

$$\frac{T_{pkl}^{n-\frac{1}{4}} - T_{pkl}^{n-\frac{2}{4}}}{\tau} = A_\varphi\frac{T_{pkl}^{n-\frac{1}{4}} + T_{pkl}^{n-\frac{2}{4}}}{2}, \tag{7}$$

$$\frac{T_{pkl}^{n+\frac{1}{4}} - T_{pkl}^{n-\frac{1}{4}}}{2\tau} = f_{pkl}^{n}, \tag{8}$$

$$\frac{T_{pkl}^{n+\frac{2}{4}} - T_{pkl}^{n+\frac{1}{4}}}{\tau} = A_\varphi\frac{T_{pkl}^{n+\frac{2}{4}} + T_{pkl}^{n+\frac{1}{4}}}{2}, \tag{9}$$

$$\frac{T_{pkl}^{n+\frac{3}{4}} - T_{pkl}^{n+\frac{2}{4}}}{\tau} = A_\lambda\frac{T_{pkl}^{n+\frac{3}{4}} + T_{pkl}^{n+\frac{2}{4}}}{2}, \tag{10}$$

$$\frac{T_{pkl}^{n+1} - T_{pkl}^{n+\frac{3}{4}}}{\tau} = A_r\frac{T_{pkl}^{n+1} + T_{pkl}^{n+\frac{3}{4}}}{2}, \tag{11}$$

we achieve the second order accuracy in time in the interval (t_{n-1}, t_{n+1}), provided $D \sim (T^{(n-1)})^\alpha$.

The solution T^{n+1} to (5)-(11) converges to the solution to the unsplit 3D linearised differential problem in the interval (t_{n-1}, t_{n+1}) under $\tau \to 0$.

2 Numerical Tests

In Figure 1 we simulate a nonlinear diffusion phenomenon called temperature waves. Here $f \sim T - T^3$, which results in the following solution: while the area of the temperature is expanding, the maximum value of T does not change, i.e. the wave front is of constant value.

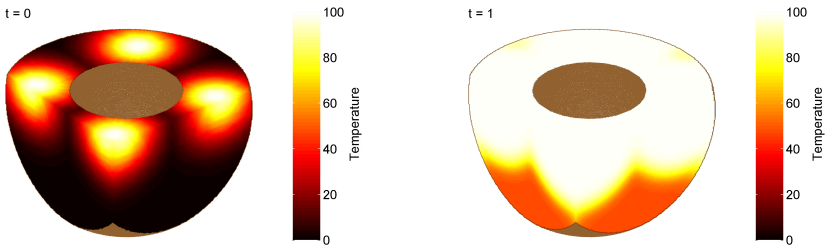


Figure 1: The initial condition ($t = 0$) and the final solution ($t = 1$) of equation (1) with $f \sim T - T^3$. This simulates the phenomenon of temperature waves with a constant front

In Figure 2 we provide the initial and final solutions of equation (1) for a more sophisticated case — the phenomenon of combustion [11]. There are three different modes of combustion depending on the parameter β

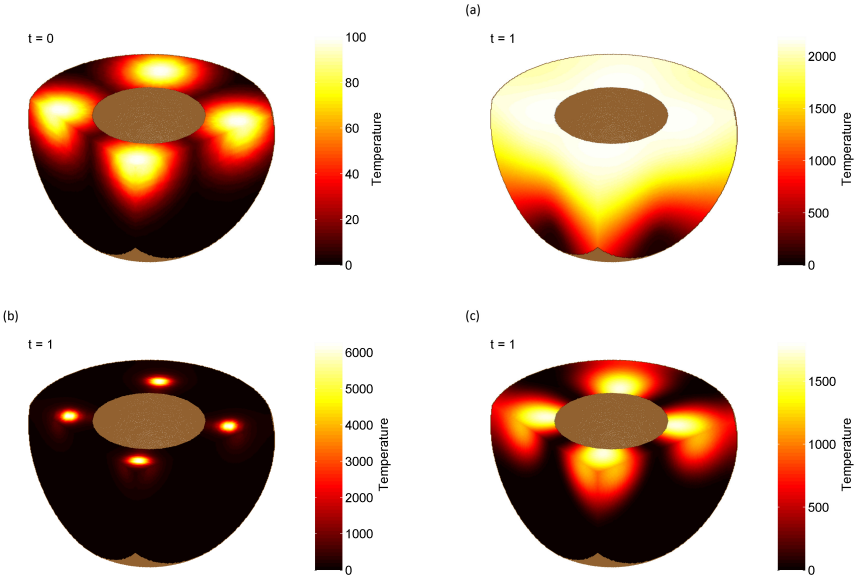


Figure 2: The initial condition ($t = 0$) and the final solution ($t = 1$) of equation (1) with $f \sim T^{\beta}$, where $\beta < \alpha + 1$ (the area of combustion is expanding, (a)), $\beta > \alpha + 1$ (the area of combustion is reducing, (b)) and $\beta = \alpha + 1$ (the area of combustion is constant, (c))

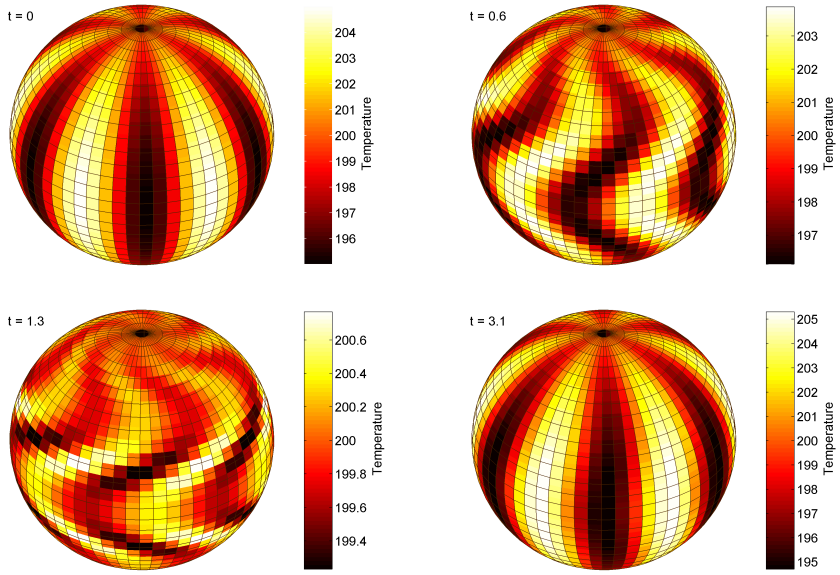


Figure 3: The initial condition ($t = 0$) and several solution of equation (1) for the spherical travelling waves phenomenon. This is an example of nonlinear interaction between diverse mechanisms of the model — external forcing and dissipation, which results in solutions with periodic breakups and renewals of complex structures via self-organisation

that introduces a nonlinearity into the sources $f \sim T^{\beta}$: the case $\beta < \alpha + 1$ corresponds to the so-called HS-regime — the area of combustion is getting expanded while burning; the case $\beta > \alpha + 1$ corresponds to the LS-regime — the area of combustion is getting narrower; the case $\beta = \alpha + 1$ corresponds to the constant area of burning (S-regime). In all the cases the nonlinear feedback due to the sources leads to an infinite increase of the

temperature T over time, that is a blow-up occurs [11].

In Figure 3 we show a yet another phenomenon — the spherical travelling waves. These are modelled by the diffusion equation with a specially chosen right-hand side function f. Specifically, the sinusoid begins travelling clockwise at the low latitudes and near the poles, while at the intermediate latitudes it goes anticlockwise. After some time the process alters, and the rotation in the opposite direction takes place (not shown). This phenomenon evinces the interaction between the nonlinearity, external forcing and dissipation, which generates solutions with periodic breakups and renewals of complex structures via the self-organisation process.

Conclusion

We have developed an efficient non-iterative implicit numerical method for the solution of the 3D nonlinear diffusion problem with a nonlinear forcing that generates unbounded solutions. Our method is based on the coordinate splitting and yields unconditionally stable finite differences schemes of second approximation order in all the directions. Three practically important blow-up regimes with an infinite growth of the solution over a finite time were successfully simulated: in the HS-regime the solution grows in an expanding domain, in the LS-regime it grows in a shrinking domain, and in the S-regime the growth takes place in a fixed-size area. Our method can be used in various applications, e.g. for simulating extremely growing solutions in rapid compression and accumulation of matter (laser fusion), chemical kinetics and magnetohydrodynamics, meteorology (tornadoes and lightnings), ecology (growth and extinction of biological populations), neurophysiology and epidemiology (infectious disease outbreaks), economics (rapid economic growth), demography (world population growth) — just to name a few.

References

[1] V.I. Agoshkov, F. Saleri, Recent developments in the numerical simulation of shallow water equations. Part III: boundary conditions and finite element approximations in the river flow calculations, Math. Modelling 8 (1996) 3–24.

[2] J. Bear, Dynamics of Fluids in Porous Media, Courier Dover Publications, 1988.

[3] F. Catté *et al.*, Image selective smoothing and edge detection by nonlinear diffusion, SIAM J. Numer. Anal. 29 (1992) 182–193.

[4] M.E. Glicksman, Diffusion in Solids: Field Theory, Solid-State Principles and Applications, John Wiley & Sons, 2000.

[5] J.R. King, 'Instantaneous source' solutions to a singular nonlinear diffusion equation, J. Engrg. Math. 27 (1993) 31–72.

[6] A.A. Lacey, J.R. Ockerdon, A.B. Tayler, 'Waiting-time' solutions of a nonlinear diffusion equation, SIAM J. Appl. Math. 42 (1982) 1252–1264.

[7] I.A. Lykov, Blow-up Modes in Atmospheric Motions: Particularities of Mathematical and Numerical Modelling by Means of Nonlinear Dynamics, PhD Thesis, Ekaterinburg, Russia, 2013 (in Russian).

[8] G.I. Marchuk, Methods of Computational Mathematics, Springer, 1982.

[9] G.A. Rudykh, E.I. Semenov, Non-self-similar solutions of multidimensional nonlinear diffusion equations, Math. Notes 67 (2000) 200–206.

[10] A.A. Samarskii, Nonlinear effects of blow-up and localization processes in burning problems, in: C.-M. Brauner and C. Schmidt-Lainé (eds.), Mathematical Modeling in Combustion and Related Topics, Martinus Nijhoff Publishers, 1988, pp. 217–231.

[11] A.A. Samarskii *et al.*, Blow-up in Quasilinear Parabolic Equations, Walter de Gruyter, 1995.

[12] Yu.N. Skiba, Dual oil concentration estimates in ecologically sensitive zones, Environ. Monit. Assess. 43 (1996) 139–151.

[13] Yu.N. Skiba, D.M. Filatov, On splitting-based mass and total energy conserving arbitrary order shallow-water schemes, Numer. Meth. Part. Diff. Eq. 23 (2007) 534–552.

[14] Yu.N. Skiba, D.M. Filatov, Conservative arbitrary order finite difference schemes for shallow-water flows, J. Comput. Appl. Math. 218 (2008) 579–591.

[15] Yu.N. Skiba, D.M. Filatov, Simulation of nonlinear diffusion on a sphere, in: Proc. of the 1st Int. Conf. on Simulation and Modelling Methodologies, Technologies and Applications (SIMULTECH 2011), Noordwijkerhout, the Netherlands, 2011, pp. 24–30.

[16] A.Kh. Vorob'yov, Diffusion Problems in Chemical Kinetics, Moscow University Press, 2003 (in Russian).

[17] Z. Wu *et al.*, Nonlinear Diffusion Equations, World Scientific Publishing, Singapore, 2001.

[18] X. Zheng, P. Palffy-Muhoray, Nonlinear diffusion on a sphere, Bull. Amer. Phys. Soc. 57 (2012) #B50.007.

Yuri N. Skiba — PhD, Full Professor,
Head of laboratory of mathematical modelling of atmospheric processes at
the Center for Atmospheric Sciences, National Autonomous University of Mexico
e-mail: skiba@unam.mx
Denis M. Filatov — PhD, senior research fellow at
the Institute of Physics of the Earth, Russian Academy of Sciences
e-mail: denisfilatov@gmail.com
Received — May 22, 2017

GLOBAL SEARCH FOR OPTIMIZATION PROBLEM WITH D.C. GOAL FUNCTION AND D.C. CONSTRAINTS

A. S. Strekalovsky

Matrosov Institute for System Dynamics and Control Theory of SB RAS, 664033, Irkutsk, Russia

UDC 519.853

This paper addresses the general nonconvex problem with the goal function and constraints given by d.c. functions. We reduce this problem to a problem without constraints by the exact penalty approach. Relations between the original and the penalized problems are investigated. In addition, employing the d.c. structure of penalized problem the Global Optimality Conditions (GOCs) are developed and analyzed. We prove that the GOCs possess the constructive property. Moreover, it is shown that the point satisfying the GOCs turns out to be a KKT-vector in the original problem. Besides we establish that the verification of the GOCs consists in a solution of a family of the partially linearized problems, and consecutive verification of the principal inequality of the GOCs. The effectiveness of the GOCs is verified by a number of examples in which the GOCs confirm its ability to escape stationary points and local minima with improving the goal function.

Keywords: nonconvex optimization, d.c. functions, exact penalty, global optimality conditions.

Introduction

A little more than 50 years ago (!!!) the exact penalty method was invented by I.I. Eremin and W.I. Zangvill [1–3] ([2], p. 272–287, see Notes in p. 285) independently and almost simultaneously.

Since that time, this approach has been widely used and nowadays becomes increasingly popular. It is viewed by specialists as a very powerful and effective tool for solving difficult real-life problems, including mathematical models of conflict situations (games, equilibria, bilevel problems, hierarchical control etc.) [2, 3, 8, 11, 13–17].

On the other hand, almost all real-life optimization problems are explicitly or implicitly nonconvex, with a lot (often a huge number!) of stationary vectors and local pits [4–6].

For such problems the classical optimization methods provide only the KKT points [1–9]. On the other hand, the methods of Global Optimization (B&B, cut's method etc.) [4–6] suffer the so-called "curse of dimension", when the exponential growth of computational efforts corresponds to an increase in dimension of the problem in question [4–6].

In this paper we continue to develop the apparatus of the so-called Global Optimality Conditions (GOC) [25–30] for the nonconvex optimization problems, the goal function and inequality constraints of which are given by d.c. functions (the difference of convex functions).

This time we use popular techniques of the Exact Penalization [1–3, 10–17] to reduce the original problem to a nonconvex (penalized) problem without inequality constraints. For this purpose, we apply the well-known existence results for the threshold exact penalty parameter obtained by F. Clarke and J. Burke [11,13]. In addition, one can use the results from [1–3], which develop the corresponding theorems of S. Han and O. Mangasarian [14], as well as very interesting and original papers by professor G di Pillo et al. [15–17]. It is worth nothing that, like all specialists in optimization, we approve a considerable influence of the new mathematical apparatus created in the last two decades [10–13, 18–24] and in the end of the 20th century.

The current research develops the new GOCs [25–30] for the problem in question with the help of the exact penalty approach and reduces the original problem to a problem without inequality constraints (Section 2). After that, we represent the cost function of the penalized problem as a d.c. function. The latter helps us develop the necessary GOCs, which turn out to be related to the KKT Theorem in the original problem. In Section 3,

This research was supported by the Russian Science Foundation (project No. 15-11-20015).

we identify and explain various features of the GOC developed, in particular, the constructive property. Besides, we use illustrative examples to demonstrate that the GOCs successfully escape local pits. Finally, we give the sufficient GOCs in Theorem 3.

The next section presents the statement of the original problem.

1 Statement of the problem

Consider the following problem:

$$(\mathcal{P}):\quad \left.\begin{array}{c} f_0(x) := g_0(x) - h_0(x) \downarrow \min\limits_x, \quad x \in S, \\ f_i(x) := g_i(x) - h_i(x) \le 0, \quad i \in I = \{1, \ldots, m\} \\ f_j(x) := g_j(x) - h_j(x) = 0, \quad j \in \mathcal{E} = \{m+1, \ldots, l\}; \end{array}\right\}$$

where the functions $g_i(\cdot),\ h_i(\cdot),\ i \in I \cup \mathcal{E} \cup \{0\}$, are convex on $\mathbb{R}^n$, so that the functions $f_i(\cdot),\ i \in I \cup \mathcal{E} \cup \{0\}$, are the d.c. functions [4–6, 10, 21]. Henceforth, assume that $g_i(\cdot)$ and $h_i(\cdot)$ are differentiable on an open set Ω, and S is a convex set $S \subset \Omega \subset \mathbb{R}^n$.

Besides, suppose that the set $Sol(\mathcal{P})$ of global solutions to Problem $(\mathcal{P})$, $Sol(\mathcal{P}) = \{x \in \mathcal{F} \mid f_0(z) = \mathcal{V}(\mathcal{P})\}$, and the feasible set $\mathcal{F}$ of Problem $(\mathcal{P})$, $\mathcal{F} := \{x \in S \mid f_i(x) \le 0,\ i \in I,\ \ f_i(x) = 0,\ j \in \mathcal{E}\}$, are non-empty. In what follows the optimal value $\mathcal{V}(\mathcal{P})$ of Problem $(\mathcal{P})$ is supposed to be finite:

$$\mathcal{V}(\mathcal{P}) := \inf(f_0, \mathcal{F}) := \inf_x\{f_0(x) \mid x \in S,\ \ f_i(x) \le 0,\ \ i \in I,\ \ f_j(x) = 0,\ \ j \in \mathcal{E}\} > -\infty.$$

We have to recall that, since $g_i(\cdot),\ h_i(\cdot),\ i \in I \cup \mathcal{E} \cup \{0\}$, are convex functions, they are locally Lipschitz [10, 11, 18, 19, 22]. Therefore, $f_i(\cdot),\ i \in I \cup \{0\}$, are also locally Lipschitz functions [10, 11, 18–22].

2 Exact penalization

Introduce the penalty function $W(\cdot)$ for Problem $(\mathcal{P})$ as follows

$$W(x) := \max\{0, f_1(x), \ldots, f_m(x)\} + \sum_{j \in \mathcal{E}} |f_j(x)| = \|F_{\mathcal{I}}(x)\|_\infty + \|F_{\mathcal{E}}(x)\|_1, \tag{1}$$

where $F_{\mathcal{I}} \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ and $F_{\mathcal{E}} \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{l-m}$ are defined as $F_{\mathcal{I}}(x) := \big(f_1^+(x), \ldots, f_m^+(x)\big)^\top$, $f_i^+(x) := \max\{0, f_i(x)\}$, $i \in I$, and $F_{\mathcal{E}}(x) := (f_{m+1}(x), \ldots, f_l(x))^\top$.

Furthermore, along with Problem $(\mathcal{P})$, consider the penalized problem without the constraints:

$$(\mathcal{P}_\sigma):\qquad \theta_\sigma(x) := f_0(x) + \sigma W(x) \downarrow \min_x, \quad x \in S, \tag{2}$$

where $\sigma \ge 0$ is a penalty parameter and the penalized function.

As well-known, if $z \in Sol(\mathcal{P}_\sigma)$, and $z \in \mathcal{F}$, then $z \in Sol(\mathcal{P})$ [1–3, 10, 11, 13]. However, the inverse implication does not, in general, hold so that the principal moment of the exact penalization (EP) theory is the existence of a threshold value $\sigma_* \ge 0$ of the EP parameter $\sigma \ge 0$ such that $Sol(\mathcal{P}_\sigma) \subset Sol(\mathcal{P})\ \ \forall \sigma \ge \sigma_*$.

In other words, for $\sigma \ge \sigma_*$ Problems $(\mathcal{P})$ and $(\mathcal{P}_\sigma)$ turn out to be equivalent in the sense that $Sol(\mathcal{P}) = Sol(\mathcal{P}_\sigma)$ (see [10, Chapt. VII, Lemma 1.2.1]). Besides, the term "exact penalty" allows us to solve a single unconstrained problem instead of a sequence of unconstrained problems with $\sigma_k \to \infty$.

Hence, the proof of existence of the exact penalty threshold σ_* is a important element in the investigation of relations between Problems $(\mathcal{P})$ and $(\mathcal{P}_\sigma)$.

Definition 2.1. [1–3, 12–17, 23, 24] The constraint system $\mathcal{F} = \{x \in S \mid f_i(x) \le 0,\ i \in I,\ \ f_j(x) = 0,\ j \in \mathcal{E}\}$ satisfies the local error bound property at the point $z \in \mathcal{F}$, if there exist numbers $\varkappa > 0$ and $\rho > 0$ such that

$$dist(x, \mathcal{F}) \le \varkappa\Big(\max\{0, f_i(x), \ldots, f_m(x)\} + \sum_{j \in \mathcal{E}} |f_j(x)|\Big) \quad \forall x \in S \cap B(z, \rho),$$

where $B(z, \rho) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x - z\| \le \rho\}$.

As well-known, under some constraint qualification (CQ) conditions (RMFCQ, etc. [12, 13, 23, 24]), the local error bound property holds [1–3, 12–14, 23, 24].

On the other hand, G. di Pillo et al. [15–17] developed another approach to prove the existence of a threshold value $\sigma_* \geq 0$ of the exact penalty parameter for the case of a global solution.

Here we follow the way opened by F. Clarke [11] (Proposition 2.4.3) and J.V. Burke [13] (Corollary 2.3.1), aiming to prove the existence of the threshold value $\sigma_* \geq 0$ for a global solution as well. We also have to mention the result from [10] (Chapt. VII, Lemma 1.2.1), and of course the results from [1–3, 12, 14–17, 23, 24] and the references therein.

We say that Problem $(\mathcal{P})$ satisfies the global error bound property if there exists a number $\varkappa > 0$ such that

$$dist(x, \mathcal{F}) \leq \varkappa\Big(\max\{0, f_i(x), \ldots, f_m(x)\} + \sum_{j \in \mathcal{E}} |f_j(x)|\Big) \quad \forall x \in S \setminus \mathcal{F}. \tag{3}$$

Henceforth we assume that in Problem $(\mathcal{P})$ the following assumption holds

$(\mathcal{H})$: the global error bound property takes place.

Proposition 2.1. *Let $z \in \mathcal{F}$ be a global solution to Problem $(\mathcal{P})$, $z \in Sol(\mathcal{P})$, where the function $f_0(\cdot)$ satisfies the Lipschitz property with $L_0 > 0$.*

(i) Then, there exists $\sigma_* \geq 0$ such that z is a global solution to Problem $(\mathcal{P}_{\sigma_*})$.

(ii) Moreover, $\forall \sigma > \sigma_*$ any solution z_σ to Problem $(\mathcal{P}_\sigma)$ must belong to $\mathcal{F}$, $z_\sigma \in Sol(\mathcal{P}_\sigma) \subset \mathcal{F}$, and, therefore, z_σ is a solution to $(\mathcal{P})$, so that $Sol(\mathcal{P}_\sigma) \subset Sol(\mathcal{P})$.

(iii) The later inclusion amounts to the equality

$$Sol(\mathcal{P}) = Sol(\mathcal{P}_\sigma) \ \ \forall \sigma \geq \sigma_*, \tag{4}$$

so that Problems $(\mathcal{P})$ and $(\mathcal{P}_\sigma)$ turn out to be equivalent (in the sense of (4)).

In what follows, Proposition 2.1 or the similar results from [1–3, 14–17] lay the theoretical basis for further investigation.

3 Optimality conditions

First of all, let us show that the goal function $\theta_\sigma(\cdot)$ of the penalized Problem $(\mathcal{P}_\sigma)$ is a d.c. function. Indeed, it can be readily seen that

$$\theta_\sigma(x) \stackrel{\triangle}{=} f_0(x) + \sigma\Big(\max\{0, f_1(x), \ldots, f_m(x)\} + \sum_{j \in \mathcal{E}} |f_j(x)|\Big) = G_\sigma(x) - H_\sigma(x), \tag{5}$$

where

$$H_\sigma(x) := h_0(x) + \sigma \sum_{i \in \mathcal{I}} h_i(x) + \sigma \sum_{j \in \mathcal{E}} \big[g_j(x) + h_j(x)\big], \tag{6}$$

$$G_\sigma(x) := g_0(x) + \sigma \max\left\{\sum_{j \in \mathcal{I}} h_j(x); g_i(x) + \sum_{j \in \mathcal{I}}^{j \neq i} h_j(x), \ \ i \in \mathcal{I}\right\} + 2\sigma \sum_{j \in \mathcal{E}} \max\{g_j(x), h_j(x)\}. \tag{7}$$

Obviously, $G_\sigma(\cdot)$ and $H_\sigma(\cdot)$ are both convex functions [10, 18, 19], so that the function $\theta_\sigma(\cdot)$ is a d.c. function, as claimed. Furthermore, note that for a feasible (in $(\mathcal{P})$) point $z \in S$ we have $W(z) \stackrel{\triangle}{=} \max\{0, f_1(z), \ldots, f_m(z)\} + \sum\limits_{j \in \mathcal{E}} |f_j(z)| = 0$. Now denote $\zeta := f_0(z)$, so that

$$\theta_\sigma(z) = f_0(z) + \sigma W(z) = f_0(z) = \zeta. \tag{8}$$

Theorem 3.1. *Let a point $z \in \mathcal{F}$ be a solution to Problem $(\mathcal{P})$ and $\sigma \geq \sigma_* > 0$. Then, for every pair $(y, \beta) \in I\!R^n \times I\!R$ such that*

$$H_\sigma(y) = \beta - \zeta, \tag{9}$$

the following inequality holds

$$G_\sigma(x) - \beta \geq \langle \nabla H_\sigma(y), x - y \rangle \quad \forall x \in S. \tag{10}$$

Remark 3.1. It can be readily seen that Theorem 3.1 reduces the investigation of the nonconvex Problem $(\mathcal{P}_\sigma)$ to considering a family of the convex linearized problems

$$(\mathcal{P}_\sigma L(y)): \quad \Phi_{\sigma y}(x) := G_\sigma(x) - \langle \nabla H_\sigma(y), x\rangle \downarrow \min_x, \quad x \in S, \tag{11}$$

depending on the parameters $(y, \beta) \in I\!R^n \times I\!R$ which fulfill (9).

It is worth pointing out that the linearization is performed with respect to the "unified" nonconvexity of Problem $(\mathcal{P})$ expressed by the function $H_\sigma(\cdot)$ (see $(\mathcal{P})$–(1), (6)) that accumulates the functions $h_i(\cdot)$, $i \in \{0\} \cup I$, responsible for generating all nonconvexities in $(\mathcal{P})$.

On the other hand, the principal inequality (10) can be rewritten, for example, as follows

$$\mathcal{V}(\mathcal{P}L(y)) \geq \beta - \langle \nabla H(y), y\rangle =: \mathcal{N}(y, \beta), \tag{10'}$$

where $\mathcal{V}((\mathcal{P}_\sigma L(y)))$ is the optimal value of the linearized problem $(\mathcal{P}_\sigma L(y))$.

Remark 3.2. Let there be found a triple (y, β, u), $(y, \beta) \in I\!R^n \times I\!R$, $H_\sigma(y) = \beta - \zeta$, $u \in S$ such that the "principal" inequality (10) is violated, i.e.

$$0 > G_\sigma(u) - \beta - \langle \nabla H_\sigma(y), u - y\rangle.$$

Then, with the help of (9) and due to convexity of $H_\sigma(\cdot)$, we derive

$$0 > G_\sigma(u) - \beta - H_\sigma(u) + H_\sigma(y) = \theta_\sigma(u) - \zeta = \theta_\sigma(u) - \theta_\sigma(z),$$

or, $\theta_\sigma(z) > \theta_\sigma(u)$, $z \in \mathcal{F}$, $u \in S$. Hence, the point z can not be a solution to $(\mathcal{P}_\sigma)$.

Moreover, according to Proposition 2.1, the point z can not be a solution to $(\mathcal{P})$, if $\sigma \geq \sigma_* = \varkappa L_0$, because in this case $Sol(\mathcal{P}) = Sol(\mathcal{P}_\sigma)$.

Hence, the conditions (9)–(10) of Theorem 3.1 possess the constructive (algorithmic) property (once the conditions are violated, there is a feasible vector which is better than the point in question).

Now, let us turn our attention to the issue of relations and connections, if there are any, between the conditions (9)–(10) of Theorem 3.1 and the Classical Optimization Theory, or, more precisely, the Classical Optimality Conditions. For this purpose, assume that a feasible (in Problem $(\mathcal{P})$) point z satisfies the conditions (9)–(10).

First, set in (9)–(10) $y = z$. Then it immediately follows that $\beta = H_\sigma(z) + \zeta = G_\sigma(z)$. Furthermore, from (10) we derive that

$$G_\sigma(x) - G_\sigma(z) \geq \langle \nabla H_\sigma(z), x - z\rangle \quad \forall x \in S.$$

It implies that the point z satisfying (9)–(10) is a solution to the linearized problem as follows

$$(\mathcal{P}_\sigma L(z)): \quad G_\sigma(x) - \langle \nabla H_\sigma(z), x\rangle \downarrow \min_x, \quad x \in S. \tag{12}$$

Since $(\mathcal{P}_\sigma L(z))$ is a convex problem, then the following condition is, according to the convex optimization theory, the necessary and sufficient optimality condition for $z \in Sol(\mathcal{P}_\sigma L(z))$:

$$0_n \in \partial G_\sigma(z) - \nabla H_\sigma(z) + N(z \mid S), \tag{13}$$

where $\partial G_\sigma(z)$ is the classical (convex) subdifferential of the convex function $G_\sigma(\cdot)$ [2, 10, 18, 19] at z, and $N(z \mid S) = \{v \in I\!R^n \mid \langle v, x - z\rangle \leq 0 \ \forall x \in S\}$ is the cone of normal vectors to S at $z \in S$. Thus, conditions (9)–(10) entail the classical optimality condition (13) [1–4] for Problem $(\mathcal{P})$.

Notwithstanding the partially elucidated relations between the classical Optimization theory (the KKT theorem) and conditions (9)–(10) of Theorem 3.1, there arises a natural question whether it is possible to find a vector $(y, \beta) \in I\!R^{n+1}$ that satisfies (9) and violates the inequality (10) with some $u \in S$.

The answer is given by the result below

Theorem 3.2. *Let a feasible in Problem $(\mathcal{P})$ point z, $\zeta := f_0(z)$, be given, and, besides, the following condition be fulfilled*

$$(\mathcal{H}): \qquad \exists v \in I\!R^n : f_0(v) > f_0(z) \tag{14}$$

In addition, let the penalty parameter $\sigma > 0$ be given, and, besides, suppose that the point z is not a solution to Problem $(\mathcal{P})$.

Then, one can find a tuple $(y, \beta, u) \in I\!R^{2n+1}$, $u \in \mathcal{F}$, such that

$$\left.\begin{array}{l} (a)\ \ H_\sigma(y) = \beta - \zeta; \\ (b)\ \ G_\sigma(y) \leq \beta, \\ (c)\ \ G_\sigma(u) - \beta < \langle \nabla H_\sigma(y), u - y\rangle. \end{array}\right\} \tag{15}$$

Now we present the sufficiency of the Global Optimality Conditions (9)–(10) of Theorem 3.1 using the proof of Theorem 3.2.

Theorem 3.3. *Suppose that for a feasible (in Problem $(\mathcal{P})$) point z, $\zeta := f_0(z)$, the condition $(\mathcal{H})$–(14) is fulfilled. Additionally, let for some $\sigma > 0$ and any pair $(y, \beta) \in I\!R^n \times I\!R$, satisfying the conditions*

$$(a) \quad H_\sigma(y) = \beta - \zeta, \qquad (b) \quad G_\sigma(y) \le \beta, \tag{16}$$

the following inequality hold

$$G_\sigma(x) - \beta \ge \langle \nabla H_\sigma(y), x - y \rangle \quad \forall x \in S. \tag{17}$$

Then, the point $z \in \mathcal{F}$ is a global solution to Problem $(\mathcal{P}_\sigma)$ as well as to Problem $(\mathcal{P})$.

Example 3.1. Consider the problem ([1, Example 12.20])

$$\left.\begin{array}{c} f_0(x) = 4x_1x_2 \downarrow \min\limits_x, \quad x \in I\!R^2, \\ f_1(x) = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0. \end{array}\right\} \tag{18}$$

It is easy to see that the point $z = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}\right)^\top$, $\zeta := f_0(z) = 2$, satisfies the KKT-equation

$$\nabla f_0(z) + \lambda_1 \nabla f_1(z) = 0 \in I\!R^2$$

with $\lambda_1 = -2$. Besides, z is feasible: $f_1(z) = 0$.

However, it is not clear whether the point z is a global solution. In order to decide on it, let us apply Theorem 3.1.

Since $f_0(x) = 4x_1x_2 = (x_1 + x_2)^2 - (x_1 - x_2)^2$, it can be readily seen that

$$\left.\begin{array}{c} g_0(x) = (x_1 + x_2)^2, \quad h_0(x) = (x_1 - x_2)^2, \\ g_1(x) = x_2^2 + x_2^2, \quad h_1(x) \equiv 1. \end{array}\right\} \tag{19}$$

Besides, let set $\sigma := 3 > |\lambda_1| = 2$. Then, according to (6) and (7), we have

$$\left.\begin{array}{c} H_\sigma(x) = h_0(x) + \sigma\big[g_1(x) + h_1(x)\big] = (x_1 - x_2)^2 + 3(x_1^2 + x_2^2 + 1), \\ G_\sigma(x) = g_0(x) + 2\sigma \max\{g_1(x); h_1(x)\} = (x_1 + x_2)^2 + 6\max\{x_1^2 + x_2^2; 1\}. \end{array}\right\} \tag{20}$$

Let choose, now, $y = (-1, 0.5)^\top$ which is unfeasible in the problem (18). Then we have

$$H_\sigma(y) = (y_1 - y_2)^2 + 3(y_1^2 + y_2^2 + 1) = (-1.5)^2 + 3(1 + 0.25 + 1) = 9$$

and, as a consequence, we derive

$$\beta = H_\sigma(y) + \zeta = 9 + 2 = 11.$$

Furthermore, let choose a feasible point $u = (-0.6; 0.8)^\top$, $u_1^2 + u_2^2 = 0.36 + 0.64 = 1$, and compute $G_\sigma(u)$ (see (20))

$$G_\sigma(u) = (u_1 + u_2)^2 + 6\max\{u_1^2 + u_2^2; 1\} = (0.2)^2 + 6 = 6.04.$$

Besides, it is not difficult to compute that

$$u - y = (-0.6; 0.8)^\top - (-1; 0.5)^\top = (0.4; 0.3)^\top,$$

$$\nabla H_\sigma(y) = 2(y_1 - y_2; y_2 - y_1)^\top + 6(y_1, y_2)^\top = 2(4y_1 - y_2; 4y_2 - y_1)^\top = (-9; 6)^\top.$$

Whence we immediately derive

$$\langle \nabla H_\sigma(y), u - y \rangle = \langle (-9; 6)^\top, (0.4; 0.3)^\top \rangle = -3.6 + 1.8 = -1.8,$$

$$\beta + \langle \nabla H_\sigma(y), u - y \rangle = 11 - 1.8 = 9.2 > 6.04 = G_\sigma(u).$$

The latter inequality means that the principal inequality (10) of Theorem 3.1 is violated.

Hence, the point $z = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}\right)^\top$ is not a global solution to the problem (18) in virtue of Theorem 3.1.

Indeed, it is confirmed by the inequality

$$f_0(u) = -0.48 < \zeta = f_0(z) = 2.$$

Conclusion

We consider the general nonconvex problem with the goal function and constraints given by d.c. functions. We reduce this problem to a problem without constraints by the exact penalty approach. Relations between the original and the penalized problems are investigated. In addition, employing the d.c. structure of penalized problem the Global Optimality Conditions (GOCs) [25, 28, 29] are developed and analyzed. We prove that the GOCs possess the constructive property, i.e. when the GOCs are violated, it is possible to find a feasible (in original problem) vector which is better than the point under investigation. Moreover, it is shown that the point satisfying the GOCs turns out to be a KKT vector in the original problem. Besides we establish that the verification of the GOCs consists in a solution of a family of the partially linearized problems, and consecutive verification of the principal inequality of the GOCs. The effectiveness of the GOCs is verified by a number of examples in which the GOCs confirm its ability to escape stationary points and local minima with improving the goal function.

References

[1] Nocedal J., Wright S.J. Numerical Optimization. New York: Springer, 2006.

[2] Bonnans J.-F., Gilbert J.C., Lemaréchal C., Sagastizábal C.A. Numerical Optimization: Theoretical and Practical Aspects, 2nd edn. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2006.

[3] Izmailov A.F., Solodov M.V. Newton-Type Methods for Optimization and Variational Problems. New York: Springer, 2014.

[4] Floudas C.A., Pardalos P.M. (eds.) Frontiers in Global Optimization. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2004.

[5] Horst R., Tuy H. Global Optimization. Deterministic Approaches. Berlin: Springer-Verlag, 1993.

[6] Tuy H. D.c. Optimization: Theory, Methods and Algorithms / Horst, R., Pardalos, P.M. (eds.) Handbook of Global optimization. Dordrecht: Kluwer Academic Publisher, 1995. P. 149-216.

[7] Leyffer S., Lopez-Calva G., Nocedal J. Interior methods for mathematical programs with complementarity constraints // SIAM Journal on Optimization. 2006. V. 17. P. 52–77.

[8] Byrd R., Lopez-Calva G., Nocedal J. A line search exact penalty method using steering rules // Mathematical Programming, Ser. A. 2012. V. 133, P. 39–73.

[9] Byrd, R., Marazzi, M., Nocedal, J. On the convergence of Newton iterations to non-stationary points // Mathematical Programming, Ser. A. 2004. V. 99. P. 127–148.

[10] Hiriart-Urruty J.-B., Lemaréchal C. Convex Analysis and Minimization Algorithms. Berlin: Springer-Verlag, 1993.

[11] Clarke F.H. Optimization and Nonsmooth Analysis. New York: Wiley-Interscience, 1983.

[12] Robinson S. Stability theory for systems of inequalities, part II: differentiable nonlinear systems // SIAM Journal on Numerical Analysis. 1976. V. 13, P. 497–513.

[13] Burke J. An exact penalization viewpoint of constrained optimization // SIAM Journal on Control and Optimization. 1991 V. 29. P. 968–998.

[14] Han S., Mangasarian O. Exact penalty functions in nonlinear programming // Mathematical Programming. 1979. V. 17, P. 251–269.

[15] Di Pillo G., Lucidi S., Rinaldi F. An approach to constrained global optimization based on exact penalty functions // Journal of Global Optimization. 2012. V. 54. P. 251–260.

[16] Di Pillo G., Lucidi S., Rinaldi F. A derivative-free algorithm for constrained global optimization based on exact penalty functions // Journal of Optimization Theory and Applications. 2015. V. 164. P. 862–882.

[17] Di Pillo G., Grippo L. Exact penalty functions in constrained optimization // SIAM Journal on Control and Optimization. 1989. V. 27. P. 1333–1360.

[18] Rockafellar R.T., Wets R.J.-.B. Variational Analysis. New York: Springer, 1998.

[19] Rockafellar R.T. Convex Analysis. Princeton: Princeton University Press, 1970

[20] Demyanov V.F., Rubinov A.M. Constructive Nonsmooth Analysis. Frankfurt: Peter Lang, 1995.

[21] Hiriart-Urruty J.-B. Generalized Differentiability, Duality and optimization for Problems dealing with Difference of Convex Functions / In: Ponstein, J. (ed.) Convexity and Duality in Optimization. Lecture Notes in Economics and Mathem. Systems. V. 256. Berlin: Springer-Verlag, 1985. P.37–69.

[22] Hiriart-Urruty J.-B. Optimisation et Analyse Convex. Paris: Presses Universitaires de France, 1998.

[23] Kruger A., Minchenko L.,Outrata J. On relaxing the Mangasarian-Fromovitz constraint qualiffcation // Positivity. 2014. V. 18. P. 171–189.

[24] Kruger A. Error bounds and metric subregularity // Optimization. 2015. V 64. P. 49–79/.

[25] Strekalovsky A.S. On Solving Optimization Problems with Hidden Nonconvex Structures / In: Rassias, T.M., Floudas, C.A., Butenko, S. (eds.) Optimization in Science and Engineering. New York: Springer, 2014. P. 465–502.

[26] Strekalovsky A.S. Global optimality conditions for optimal control problems with functions of A.D. Alexandrov // Journal of Optimization Theory and Applications. 2013. V. 159. P. 297–321.

[27] Strekalovsky A.S. On local search in d.c. optimization problems // Applied Mathematics and Computation. 2015. V. 255. P. 73–83.

[28] Strekalovsky A.S. Global Optimality Conditions in Nonconvex Optimization // Journal of Optimization Theory and Applications. 2017. V. 173. P. 770–792.

[29] Strekalovsky A.S. Elements of Nonconvex Optimization. Novosibirsk: Nauka, 2003 (In Russian).

[30] Strekalovsky A.S. On the minimization of the difference of convex functions on a feasible set // Comput. Math. and Math. Physics. 2003. V. 43. P. 399–409.

Alexander S. Strekalovsky — D.Sc., Head of Laboratory of Matrosov Institute for System Dynamics and Control Theory of SB RAS;
e-mail: strekal@icc.ru.
Received — May 30, 2017

MULTISCALE WAVELET ANALYSIS OF THE RADARGRAM TRACE

N. Uzakkyzy, K. T. Iskakov, S. A. Boranbayev

L. N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

UDC 517.6

The results of the wavelet analysis of the radargram trace are given in the article. The analysis and purification of the signal from noise was carried out with the help of wavelets from Haar and Daubechy. The graphs of the approximating and detail coefficients of the wavelet decomposition of the signal are presented.

Keywords: radarogram, Daubechies wavelets, Haar wavelets.

Introduction

The essence of processing of georadar locating data consists, first of all, in allocation of a useful signal against a background of interference waves and noise. To distinguish useful signals, the characteristics of these signals differ from the corresponding characteristics of noise and interference waves [1]. One way to process the radargram is wavelet transformation. With help of wavelet transformation of a digital signal in a radargram, high-frequency components can be removed from the signal spectrum. It is well known that the analysis of non-stationary signals by the wavelet transformation method is better than the filters based on the Fourier transform. After the wavelet clearing of the traces, the radargram more clearly shows the local features of the subsurface. The discrete wavelet transform of the radargram trace is obtained using low-frequency (LF) and high-frequency (HF) filters. Applying a low-frequency filter, we obtain the approximation coefficients and, decomposing the trace, with high-frequency filter we get detailed coefficients. Removing high-frequency components from the signal spectrum is one of the ways to suppress noise. Applied to wavelet decompositions, this can be realized directly by removing the detailed coefficients of the high-frequency levels [2].

The object of the study is an iron barrel with a diameter of 59 cm buried at a depth of 220 cm. (Figure 1).



Figure 1: Iron barrel object

Figure 2 shows a sketch of the “Iron Barrel” object.

The work is supported by the grant of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan under the contract No. 266 of 09.03.2017.

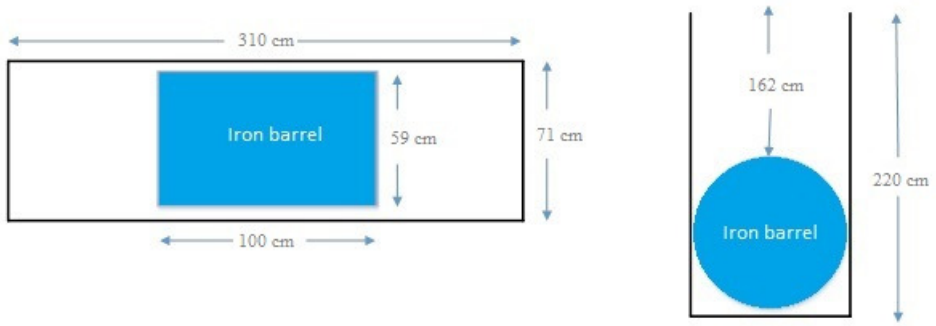


Figure 2: Location map of the iron barrel

The result of the georadar survey is a set of single traces (signals) registered by the receiving antenna at each position of the radar. The radargram of the barrel scanning was obtained by the georadar "Loza". The single trace of this radargram (Figure 3) is processed by the Wavelet Toolbox of the MatLab numerical-mathematical modeling system [2].

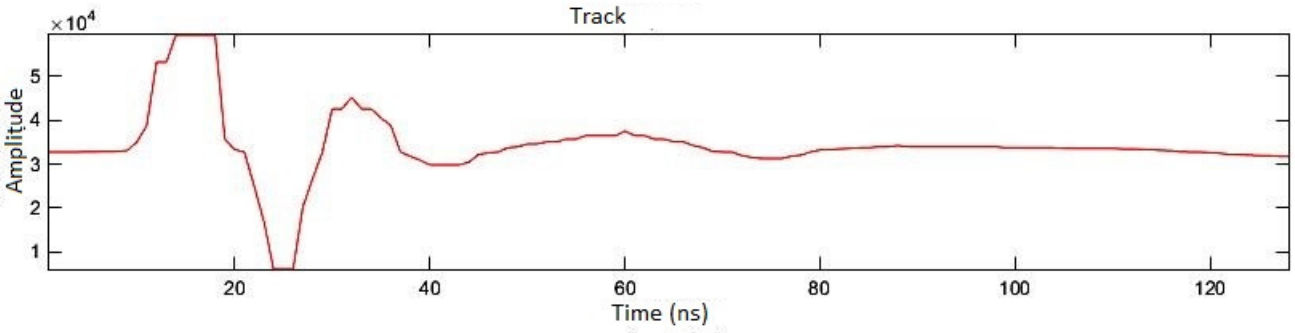


Figure 3: The graph of the radargram trace

1 Processing of the trace by Haar wavelets

The discrete wavelet Haar transformation for the one-dimensional signal s is calculated as follows [3]:

$$a_j = \frac{s_{2j} + s_{2j+1}}{2}, \qquad d_j = \frac{s_{2j} - s_{2j+1}}{2}$$

A similar operation is applied to the signal a_j and it also receives two signals, one of which is an approximate version of a_j, and the other contains the detailed information necessary to reconstruct the a_j.

Multiple application of wavelet processing of the georadar signal is possible, which leads to an increase in the detail of the original signal up to the frequency of the wavelet itself. In practice, excessive detailing makes the signal less visible. For most georadar tracking signals, 5 repetitions of wavelet processing are sufficient to increase the resolving power of the signal without loss of the envelope of the pulse.

The inverse Haar transformation is as follows:

$$s_{2j} = a_j + d_j, \qquad s_{2j+1} = a_j - d_j$$

The results of the transformation of the trace by Haar wavelets are shown in figure 4.

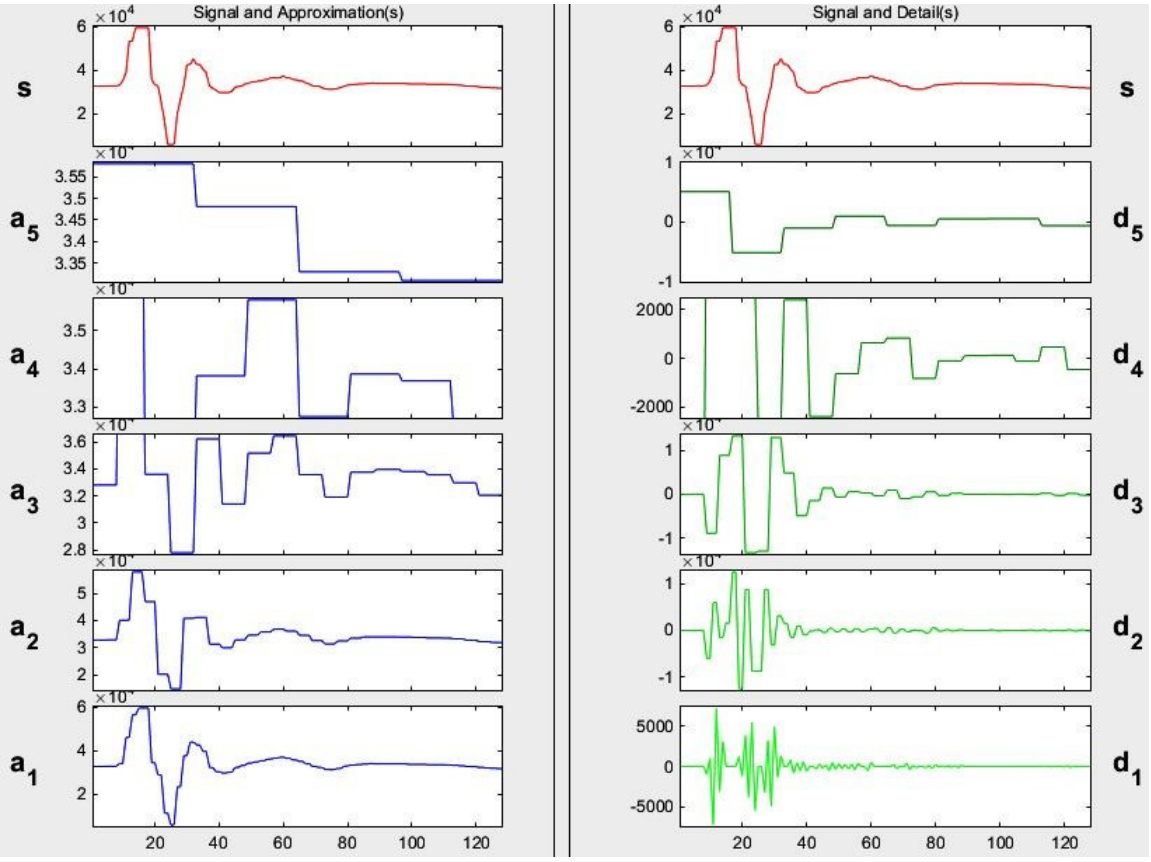


Figure 4: Results of processing the trace by Haar wavelets

A discrete wavelet transform can be used to easily and quickly remove noise from a noisy signal. If we take only a limited number of the highest coefficients of the spectrum of the discrete wavelet transform, and carry out the inverse wavelet transform (with the same basis), we can get a signal cleared of noise (Figure 5).

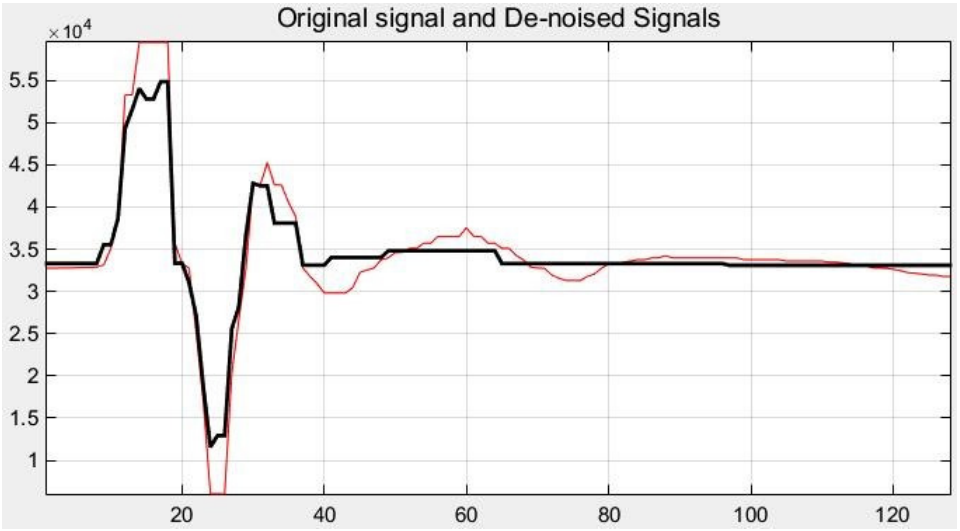


Figure 5: Trace cleared by Haar wavelets

2 Track processing with Daubechies wavelets

The Daubechies wavelets have no analytical expression and are determined only by filters. In practical applications, detailed h_k and g_k-approximating wavelet coefficients are used, without computing the specific form of the wavelets [3].

The decomposition into components of the discrete wavelets of Daubechies is carried out according to the formulas:

$$s_{j+1,k} = \sqrt{2}\sum_i h_i s(j, 2k+i),$$

$$d_{j+1,k} = \sqrt{2}\sum_i g_i s(j, 2k+i),$$

in which $s_{j,k}, d_{j,k}$ — are the coefficients of approximation and detalization of the decomposition, j is the number of the decomposition level, k is the sequence number of the coefficients, the vectors h, g are the coefficients of the scaling and wavelet filters.

$$h_0 = \frac{1+\sqrt{3}}{4\sqrt{2}}, \quad h_1 = \frac{3+\sqrt{3}}{4\sqrt{2}}, \quad h_2 = \frac{3-\sqrt{3}}{4\sqrt{2}}, \quad h_3 = \frac{1-\sqrt{3}}{4\sqrt{2}}$$

or

$h0 = 0.4829629131445341;$
$h1 = 0.8365163037378097;$
$h2 = 0.2241438680420134;$
$h3 = -0.1294095225512604;$
$g0 = h3;$
$g1 = -h2;$
$g2 = h1;$
$g3 = -h0;$

the details of the high-frequency filter h_k coefficients and the approximating g_k coefficients of the low-pass filter determine the Daubechies wavelets of 2-order.

The results of the transformation and clearing of the path by Daubechies wavelets are shown in figures 6, 7.

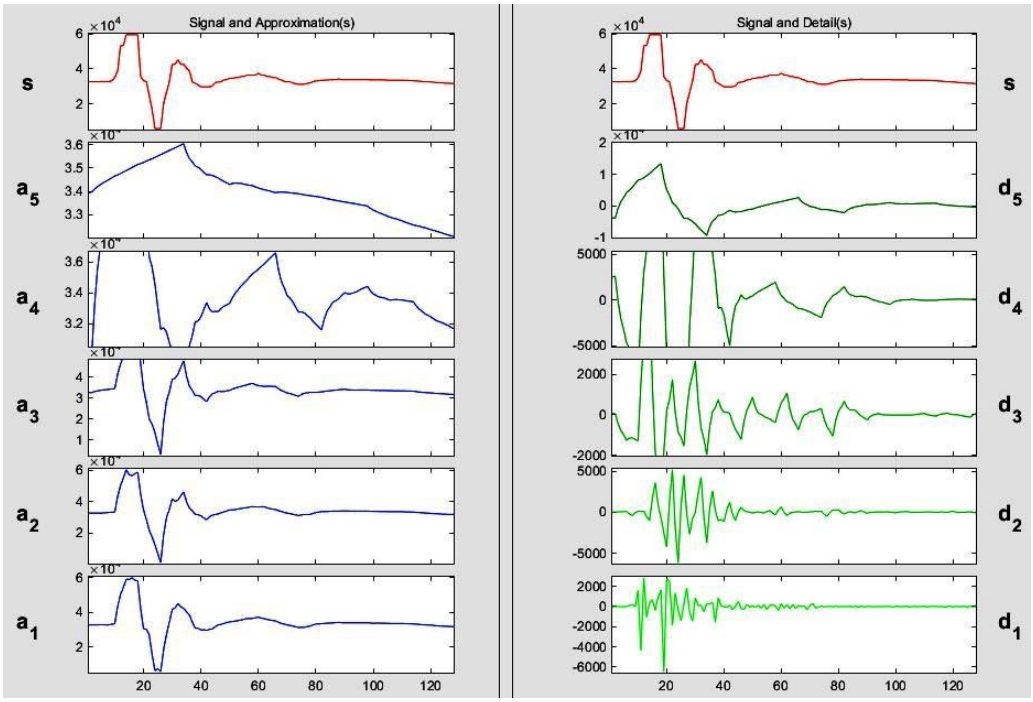


Figure 6: Results of the processing of the trace by Daubechies wavelets

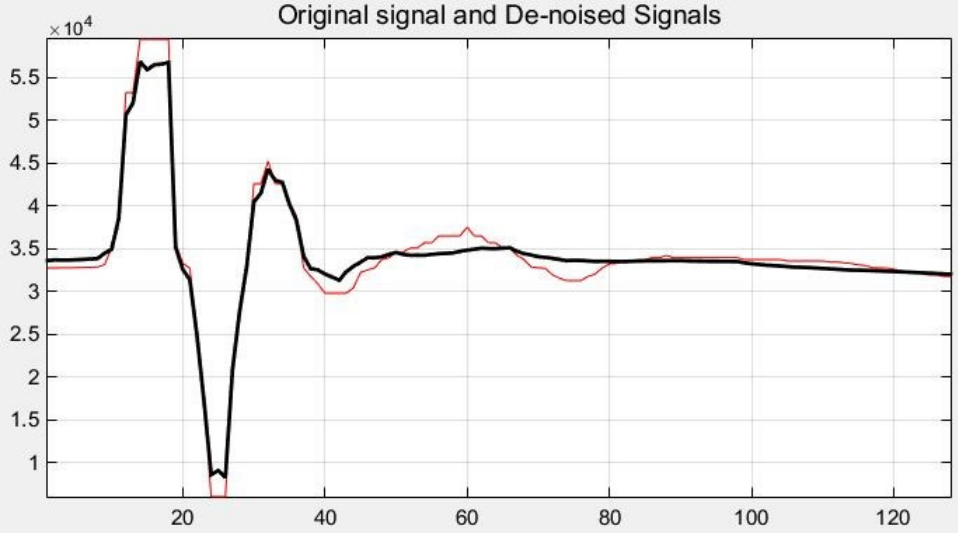


Figure 7: Trace cleared by Daubechies wavelets

3 Conclusions

1. Based on the analysis of existing approaches to the purification of georadar signals, a multiscale wavelet analysis is chosen as a mathematical apparatus, the application of which allows one to isolate and preserve the local features of georadar signals.

2. The mother wavelet for a radargram must have the property of orthogonality and the possibility of signal reconstruction. The paper used the Haar wavelet and Daubechies wavelets db2.

3. Developed programs in the MatLab environment, which realize the purification of the signal from noise using wavelet transform.

4. The conducted researches showed that the best result is given by the wavelet of Daubechy of the 2nd order.

The work is supported by the grant of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan under the contract No. 266 of 09.03.2017.

References

[1] Vladov M.L., Starovoytov A.V. Introduction to GPR. Tutorial. Moscow: Publishing house of the Moscow State University, 2004. P. 153.

[2] Smolentsev N.K. Fundamentals of the theory of wavelets. Wavelets in Matlab. Moscow: DMK Press, 2008. P. 448.

[3] Daubechies I. Wavelet Ten lectures. Izhevsk: NITs "Regular and Chaotic Dynamics", 2001. P. 464.

Nurgul Uzakkyzy — doctoral student of L.N.Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan;
e-mail: nurgalek13@gmail.com;
Kazizat Takuadinovich Iskakov — doctor of physic and mathematical sciences, professor of L.N.Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan;
e-mail: kazizat@mail.ru;
Samat Akshabaevich Boranbayev — senior Lecturer of L.N.Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan;
e-mail: boranbaevsa@mail.ru.
Received — May 31, 2017.

АЛГОРИТМ РАСЧЕТА ОБТЕКАНИЯ КРУГОВОГО КОНУСА РЕАЛЬНЫМ ГАЗОМ

Э. А. Бибердорф[1,2], А. М. Блохин[1,2]

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

[1] *Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.62, 533.6.011

Работа посвящена математическому моделированию обтекания кругового конуса газом Ван-дер-Ваальса, которое можно описать краевой задачей для системы ОДУ при том, что одна из границ области (угол ударной волны) также является неизвестной. Создан алгоритм вычисления углов ударных волн и характеристик течения между конусом и ударной волной, основанный на итерационном уточнении решения краевой задачи с помощью одного из краевых условий.

Ключевые слова: газ Ван-дер-Ваальса, ударная волна.

Введение

Настоящая работа посвящена классической задаче нахождения стационарных решений уравнений газовой динамики, описывающих обтекание кругового конуса сверхзвуковым потоком газа. В данном случае используются уравнения состояния газа Ван-дер-Ваальса, которые (см. [1]) достаточно хорошо описывают жидкое, газообразное, а также двухфазное (газообразная и жидкая фаза сосуществуют вместе) состояния реального вещества. Заметим, что эта задача имеет большое практическое значение для авиации и ракетной техники (подробнее см. в литературе, указанной в библиографии к [1], [2]).

В работе предлагается оригинальный численный метод для нахождения приближенных решений специфической краевой задачи для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. В отличие от реализованного ранее подхода [2] в данном случае мы представляем алгоритм, который полностью автоматизируется и требует гораздо меньше вычислительного времени и ресурсов.

1 Предварительные сведения

Газ Ван-дер-Ваальса характеризуется уравнениями состояния

$$p = \frac{RT}{V - V_0} - \frac{A}{V^2}, \qquad e = c_V^* T \left(1 - \frac{A_1 T}{2}\right) - \frac{A}{V}.$$

Здесь p, V и T — давление, удельный объем и температура газа соответственно, R — газовая постоянная, e — внутренняя энергия, V_0 ($V > V_0$), A, c_V^* и A_1 — некоторые константы. Пусть $\theta = a$ — уравнение поверхности конуса, $\theta = b$ — уравнение фронта ударной волны, $\delta = b - a$. Тогда для данной задачи уравнения газовой динамики после учета симметрии и обезразмеривания образуют систему ОДУ на интервале $0 < s < \delta$

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 17-01-00791_а).

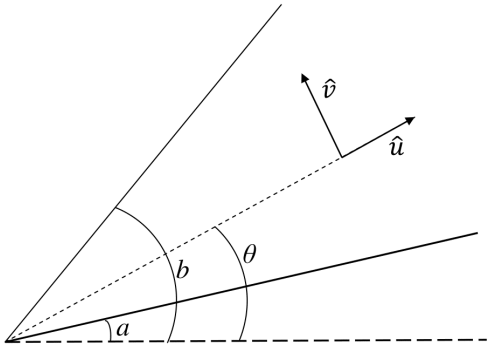


Рис. 1: Схема обтекания кругового конуса с присоединенной ударной волной.

(процесс обезразмеривания подробно описан в [2])

$$\begin{aligned}
&\widetilde{u}'(s) = \widetilde{v}(s),\\
&\widetilde{v}'(s) + \widetilde{u}(s) = \frac{\widetilde{R}(s)}{M_\theta^2 - 1},\\
&\widehat{V}(s)\widehat{p}'(s) = -\widehat{v}(s)\frac{U_\infty^2}{\widehat{p}_\infty \widehat{V}_\infty}\frac{\widetilde{R}(s)}{M_\theta^2 - 1},\\
&\widehat{V}'(s) = \frac{\widehat{V}(s)\widehat{v}(s)U_\infty^2}{\widehat{c}^2(s)}\frac{\widetilde{R}(s)}{M_\theta^2 - 1},
\end{aligned} \tag{1}$$

удовлетворяющую краевым условиям

$$\widetilde{v}(0) = \sin(a), \tag{2}$$

$$\widetilde{u}(\delta) = 0, \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
&\widetilde{v}(\delta) = k\sin(b),\\
&\widehat{p}(\delta) = 1 + \widetilde{M}_\infty^2 \sin^2(b)k,\\
&\widehat{V}(\delta) = 1 - k,
\end{aligned} \tag{4}$$

где k — нуль функции $Q(k)$:

$$Q(k,b) = \Lambda\left(1 + \frac{\alpha_1}{2}\Lambda\right) - \Lambda_\infty\left(1 + \frac{\alpha_1}{2}\Lambda_\infty\right) - (\gamma^* - 1)k\left(\frac{\alpha}{1-k} + \frac{\widehat{p}(\delta) + 1}{2}\right) = 0. \tag{5}$$

$$0 < k < 1 - \beta, \qquad 0 < \beta < 1. \tag{6}$$

Замечание. Равенство (5) вместе с условием (6) задает некую неявную функцию

$$k = \bar{k}(b), \tag{7}$$

и именно в таком виде они будут использоваться в дальнейшем.

При этом

$$\widehat{u}(s) = \widetilde{u}(s) + \cos(s + a), \qquad \widehat{v}(s) = \widetilde{v}(s) + \sin(s + a)$$

— компоненты скорости газа (см. рис. 1);

$$\widetilde{R}(s) = \widetilde{u}(s) + \widetilde{v}(s)\operatorname{ctg}(s + a);$$

$\widehat{p}$, $\widehat{\rho}$ — обезразмеренные давление и плотность;

$$M_\theta^2(s) = \frac{\widetilde{M}_\infty^2 \widehat{v}^2(s)}{\mathbf{C}(s)}, \qquad \widetilde{M}_\infty^2 = M_\infty^2\left(\gamma_\infty \frac{1+\alpha}{1-\beta} - 2\alpha\right),$$

$M_\infty > 0$ — число Маха набегающего потока;
функции $\mathbf{C}(s)$, $\widehat{\Lambda}(s)$ определяются формулами

$$\mathbf{C}(s) = \frac{\widehat{p}(s) + \alpha\widehat{\rho}^2(s)}{\widehat{\rho}(s)(1 - \beta\widehat{\rho}(s))}\left(1 + \frac{\gamma^* - 1}{1 + \alpha_1\widehat{\Lambda}(s)}\right) - 2\alpha\widehat{\rho}(s),$$

$$\widehat{\Lambda}(s) = (1 - \beta\widehat{\rho}(s))(\widehat{p}(s) + \alpha\widehat{\rho}^2(s))/\widehat{\rho}(s), \qquad \widehat{\Lambda}(\delta) = \Lambda;$$

константы α, β, γ_∞, γ^*, α_1 выражаются через давление $\widehat{p}_\infty$ и удельный объем набегающего потока $\widehat{V}_\infty$:

$$\alpha = \frac{A}{\widehat{p}_\infty\widehat{V}_\infty^2}, \qquad \beta = \frac{V_0}{\widehat{V}_\infty}, \qquad 0 < \beta < 1,$$

$$\gamma_\infty = 1 + \frac{R}{c_V^*(1 - A_1\widehat{T}_\infty)}, \qquad \widehat{T}_\infty = \frac{\widehat{p}_\infty\widehat{V}_\infty}{R}\Lambda_\infty, \qquad \Lambda_\infty = (1 - \beta)(1 + \alpha),$$

$$\gamma^* = 1 + \frac{R}{c_V^*}, \qquad \gamma^* > \gamma_\infty > 0, \qquad \alpha_1 = \frac{\gamma^* - \gamma_\infty}{(\gamma_\infty - 1)\Lambda_\infty}.$$

Краевое условие (2) представляет собой условие непротекания на поверхности конуса, а условия (3), (4) — следствия условий Рэнкина-Гюгонио на фронте ударной волны. Краевая задача (1)–(4) имеет нестандартный вид. С одной стороны краевых условий на одно больше, чем неизвестных функций, но при этом угол ударной волны b, а значит расположение правой границы расчетного интервала δ, также является неизвестной величиной.

2 Обоснование алгоритма

В дальнейшем нам будет удобнее иметь дело с другой формулировкой задачи (1)–(4). После замены

$$\begin{aligned} W(s) &= \sin(s + a)\widetilde{u}(s) + \cos(s + a)\widetilde{v}(s), \\ U(s) &= \cos(s + a)\widetilde{u}(s) - \sin(s + a)\widetilde{v}(s) \end{aligned} \tag{8}$$

задача (1)–(4) перепишется так

$$\begin{aligned} &W'(s) = \frac{\operatorname{ctg}(s + a)}{M_\theta^2 - 1}W(s), \\ &U'(s) + \operatorname{tg}(s + a)W'(s) = 0, \\ &\widehat{p}'(s) = -\widehat{\rho}(s)\widetilde{M}_\infty^2\left[\frac{W^2(s) + U^2(s)}{2} + U(s)\right], \\ &\widehat{\rho}'(s) = \frac{\widehat{p}'(s)}{\mathbf{C}(s)} \end{aligned} \tag{1'}$$

с краевыми условиями

$$\cos(a)W(0) - \sin(a)U(0) = \sin(a), \tag{2'}$$

$$\sin(b)W(\delta) + \cos(b)U(\delta) = 0, \tag{3'}$$

$$\begin{aligned} W(\delta) &= \cos(b)\sin(b)k, \\ \widehat{p}(\delta) &= 1 + \widetilde{M}_\infty^2\sin^2(b)k, \\ \widehat{\rho}(\delta) &= \frac{1}{1 - k}, \end{aligned} \tag{4'}$$

После интегрирования двух первых уравнений системы (1′) получаем следующие соотношения:

$$\begin{aligned} W(s) &= \frac{\sin^2(a)\widehat{\mu}}{\sin(s + a)\widetilde{I}(s)}, \\ U(s) &= \frac{\widetilde{\mu}}{\cos(a)} + \sin^2(a)\widehat{\mu}R(s) - \operatorname{tg}(s + a)W(s), \end{aligned} \tag{9}$$

где

$$\begin{aligned}
\widetilde{I}(s) &= \exp\left\{\int_0^s \frac{\operatorname{ctg}(\tau+a)M_\theta^2(\tau)}{1-M_\theta^2}d\tau\right\},\\
R(s) &= \int_0^s \frac{d\tau}{\sin(\tau+a)\cos^2(\tau+a)\widetilde{I}(\tau)},\\
\widetilde{\mu} &= -\frac{\cos^2(a)\sin^2(a)R(\delta)}{1+\cos(a)\sin^2(a)R(\delta)},\\
\widehat{\mu} &= -\frac{\cos(a)}{1+\cos(a)\sin^2(a)R(\delta)},
\end{aligned} \tag{10}$$

Заметим, что согласно этим формулам в простейшем частном случае $M_\theta(s)\equiv 0$ нетрудно установить, что

$$\begin{aligned}
&M_\theta^{(0)}(s)\equiv 0, \qquad \widetilde{I}^{(0)}(s)\equiv 1,\\
&R^{(0)}(s) = \frac{1}{2}\ln\frac{1-\cos^2(a)}{1-\cos^2(a+s)} + \frac{1}{\cos(a+s)} - \frac{1}{\cos(a)},\\
&\widetilde{\mu}^{(0)}(s) = -\frac{\cos^2(a)\sin^2(a)R^{(0)}(a+s)}{1+\cos(a)\sin^2(a)R^{(0)}(a+s)},\\
&\widehat{\mu}^{(0)}(s) = -\frac{\cos(a)}{1+\cos(a)\sin^2(a)R^{(0)}(a+s)}.
\end{aligned} \tag{11}$$

Так как $M_\theta^{(0)}(s)$ как и остальные функции (11) определены для всех $s\in[a,\pi/2]$, то можно выбрать $b^{(0)}=\pi/2$. Эти явные выражения удобно использовать для вычисления начального приближения решения (см. ниже).

В терминах равенств (10) условия (3) и (3′) преобразуются к виду

$$k = \frac{\sin^2(a)\widehat{\mu}}{\cos(b)\sin^2(b)\widetilde{I}(\delta)}. \tag{12}$$

Если $k=\bar{k}(b)$ (7), а функция $k=\bar{\bar{k}}(b)$ определена в соответствии с формулой (12), то краевая задача (1′), (2′), (4′) может быть решена в том случае, если будет найдена пара (b,k), представляющая собой точку пересечения графиков $\bar{k}(b)$ и $\bar{\bar{k}}(b)$.

Для определения начальных приближений для итерационного процесса при достаточно больших числах Маха M_∞ используется та же идея. В качестве $b^{(1)}$ выбирается значение b, при котором кривые $k=\bar{k}(b)$ и $k=\bar{\bar{k}}^{(0)}(b)$ пересекаются, где

$$\bar{\bar{k}}^{(0)}(b) = \frac{\sin^2(a)\widehat{\mu}^{(0)}(\delta)}{\cos(b)\sin^2(b)\widetilde{I}^{(0)}(\delta)}. \tag{13}$$

Причем эмпирически установлено, что для достаточно большого числа Маха M_∞ данные кривые пересекаются в двух точках (см. рис. 2). При небольших числах Маха присоединенной ударной волны не существует. Минимальное число Маха, при котором возникает присоединенная ударная волна, может быть вычислено при применении описанного ниже метода для последовательности $M_\infty^{[i]}$, $i=1,2,\ldots$, $M_\infty^{[i+1]}<M_\infty^{[i]}$.

3 Описание алгоритма

Входные данные
a — угол полураствора конуса, $M_\infty,\alpha,\beta,\gamma_\infty,\gamma^*$ — параметры набегающего потока,
n,h, $nh=1^\circ$ — параметры дискертизации,
ε — параметр сходимости итераций.
Начальное приближение
$M_\theta^{(0)}(s)$, $\widetilde{I}_\theta^{(0)}(s)$, $R_\theta^{(0)}(s)$, $\widehat{\mu}^{(0)}(s)$, $\widetilde{\mu}^{(0)}(s)$ определяются по формулам (11).
$b^{(0)}=\pi/2$ (см. предыдущий раздел), $\delta^{(0)}=b^{(0)}-a$.
Итерации Итерации выполняются до тех пор, пока не будет выполнено условие

$$|b^{(j)}-b^{(j-1)}|<\varepsilon.$$

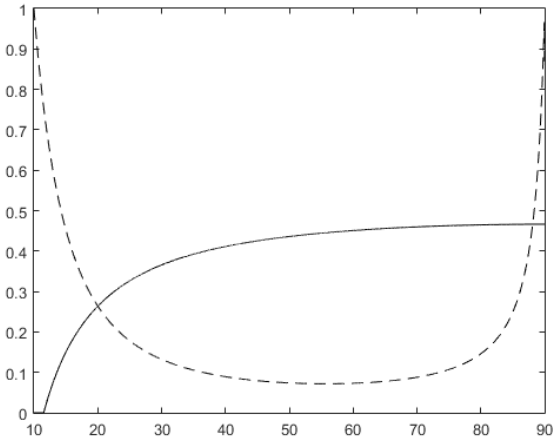


Рис. 2: Пример пересечения кривых $\bar{k}(b)$ (сплошная линия) и $\bar{\bar{k}}^{(0)}(b)$ (прерывистая линия) при $M_\infty = 5$, $\gamma_\infty = 1.8$, $\gamma^* = 1.9$, $\alpha = 4$, $\beta = 1/3$, $a = 10^\circ$.

Вычисляем на заданной сетке j-е приближение угла ударной волны $b^{(j)} = N^{(j)}h$ как ближайшее к $b^{(j-1)}$ пересечение графика функции $\bar{k}(b)$ (7) с графиком

$$\bar{\bar{k}}^{(j-1)}(b) = \frac{\sin^2(a)\widehat{\mu}^{(j-1)}(\delta^{(j-1)})}{\cos(b))\sin^2(b)}\widetilde{I}^{(j-1)}(\delta^{(j-1)}).$$

Полагаем $\delta^{(j)} = b^{(j)} - a$.

На сетке $s_i = ih$, $0 < s_i \le \delta^{(j)}$ вычисляем функции $W_i^{(j)} = W^{(j)}(s_i)$, $U_i^{(j)} = U^{(j)}(s_i)$, причем, если $s_i \le \delta^{(j-1)}$, то используются равенства (9). А в случае $\delta^{(j-1)} < s_i \le \delta^{(j)}$ мы строим непрерывное продолжение этих функций, удовлетворяющее правым граничным условиям:

$$W_i^{(j)} = \begin{cases} \dfrac{\sin^2(a)\widehat{\mu}^{(j-1)}}{\sin(s_i+a)\widetilde{I}^{(j-1)}(s_i)}, & \text{если } s_i \le \delta^{(j-1)}, \\ W^{(j)}_{N^{(j-1)}}\dfrac{\sin(b^{(j-1)})}{\sin(s_i+a)}, & \text{если } \delta^{(j-1)} < s_i \le \delta^{(j)}, \end{cases}$$

$$U_i^{(j)} = \begin{cases} \dfrac{\widetilde{\mu}^{(j-1)}}{\cos(a)} + \sin^2(a)\widehat{\mu}^{(j-1)}R^{(j-1)}(s_i) - \mathrm{tg}(s_i+a)W_i^{(j)} & \text{если } s_i \le \delta^{(j-1)}, \\ -W^{(j)}_{N^{(j-1)}}\dfrac{\sin(b^{(j-1)})}{\cos(s_i+a)}, & \text{если } \delta^{(j-1)} < s_i \le \delta^{(j)}, \end{cases} \tag{14}$$

Сеточные функции $\widehat{p}_i^{(j)} = \widehat{p}^{(j)}(s_i)$ и $\widehat{\rho}_i^{(j)} = \widehat{\rho}^{(j)}(s_i)$ сначала определяем на правой границе $s = \delta^{(j)} = N^{(j)}h$ (см. (4′))

$$\begin{aligned} \widehat{p}^{(j)}_{N^{(j)}} &= \widehat{p}^{(j)}(\delta^{(j)}) = 1 + \widetilde{M}_\infty^2\sin^2(b^{(j)})k^{(0)}, \\ \widehat{\rho}^{(j)}_{N^{(j)}} &= \widehat{\rho}^{(j)}(\delta^{(j)}) = \frac{1}{1-k^{(j)}}. \end{aligned} \tag{15}$$

Для нахождения их значений в точках $s_i = ih, 0 \le i < N^{(j)}$, запишем конечно-разностный аналог уравнений (1′):

$$\begin{aligned} \widehat{p}_i^{(j)} - \widehat{p}_{i-1}^{(j)} &= -\widetilde{M}_\infty^2\frac{\widehat{\rho}_i^{(j)} + \widehat{\rho}_{i-1}^{(j)}}{2}\left[\frac{(W_i^{(j)})^2 + (U_i^{(j)})^2}{2} + U_i^{(j)} - \frac{(W_{i-1}^{(j)})^2 + (U_{i-1}^{(j)})^2}{2} - U_{i-1}^{(j)}\right], \\ \widehat{\rho}_{i-1}^{(j)} &= \widehat{\rho}_i^{(j)}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{1}{D_i^{(j)}} + \frac{1}{D_{i-1}^{(j)}}\right)\left(\widehat{p}_i^{(j)} - \widehat{p}_{i-1}^{(j)}\right)\right]. \end{aligned} \tag{16}$$

Здесь

$$D_i^{(j)} = \frac{\widehat{p}_i^{(j)} + \alpha(\widehat{\rho}_i^{(j)})}{1 - \beta\widehat{\rho}_i^{(j)}} \left(1 + \frac{\gamma^* - 1}{1 + \alpha_1(\widehat{\Lambda}_i^{(j)})}\right) - 2\alpha(\widehat{\rho}_i^{(j)})^2, \qquad \widehat{\Lambda}_i^{(j)} = (1 - \beta\widehat{\rho}_i^{(j)})(\widehat{p}_i^{(j)} + \alpha(\widehat{\rho}_i^{(j)}))/\widehat{\rho}_i^{(j)}.$$

Система (16) приближенно решается итерациями по нелинейности.

Для перехода к следующей итерации вычисляем функцию

$$(M_\theta^{(j)}(s))^2 = \frac{\widetilde{M}_\infty^2}{\mathbf{C}^{(j)}(s)} \left(W^{(j)}(s)cos(a+s) - U^{(j)}(s)\sin(a+s)\right),$$

где

$$\mathbf{C}^{(j)}(s_i) = \frac{\widehat{p}_i^{(j)} + \alpha(\widehat{\rho}_i^{(j)})^2}{\widehat{\rho}_i^{(j)}(1 - \beta\widehat{\rho}_i^{(j)})} \left(1 + \frac{\gamma^* - 1}{1 + \alpha_1\widehat{\Lambda}_i^{(j)}}\right) - 2\alpha\widehat{\rho}_i^{(j)},$$

а также

$$\widetilde{I}^{(j)}(s) = \exp\left\{\int_0^s \frac{\mathrm{ctg}(\tau + a)(M_\theta^{(j)}(\tau))^2}{1 - (M_\theta^{(j)}(\tau))^2} d\tau\right\}, \qquad R^{(j)}(s) = \int_0^s \frac{d\tau}{\sin(\tau + a)\cos^2(\tau + a)\widetilde{I}^{(j)}(\tau)},$$

$$\widetilde{\mu}^{(j)} = -\frac{\cos^2(a)\sin^2(a)R^{(j)}(\delta)}{1 + \cos(a)\sin^2(a)R^{(j)}(\delta)}, \qquad \widehat{\mu}^{(j)} = -\frac{\cos(a)}{1 + \cos(a)\sin^2(a)R^{(j)}(\delta)},$$

4 Пример

Рассмотрим пример работы алгоритма при следующих значениях входных параметров: $M_\infty = 5$, $\gamma_\infty = 1.8$, $\gamma^* = 1.9$, $\alpha = 4$, $\beta = 1/3$, $a = 10°$. В качестве параметра дискретизации выберем $h = 0.01°$. В результате получаем два варианта для угла ударной волны $b_1 = 19.29°$, $b_2 = 88.34°$. В рамках заданной точности алгоритм сходится за две итерации (рис. 3). На рис. 4–5 приведены обезразмеренные параметры течений.

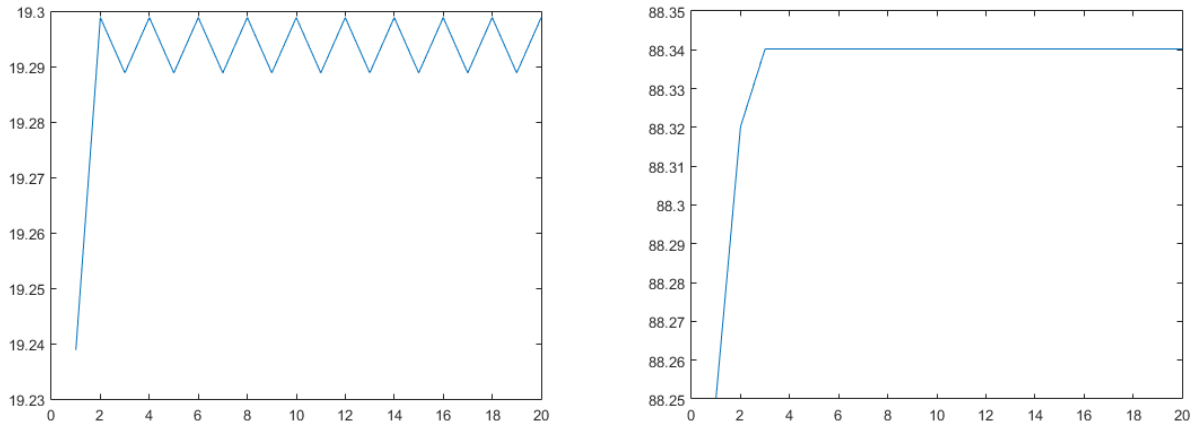


Рис. 3: Расчетное значение угла ударной волны $b°$ в зависимости от номера итерации.

Заключение

В работе представлен численный метод моделирования обтекания кругового конуса реальным газом. Преимущества данного метод заключаются в том, что он полностью автоматизируется и быстро сходится.

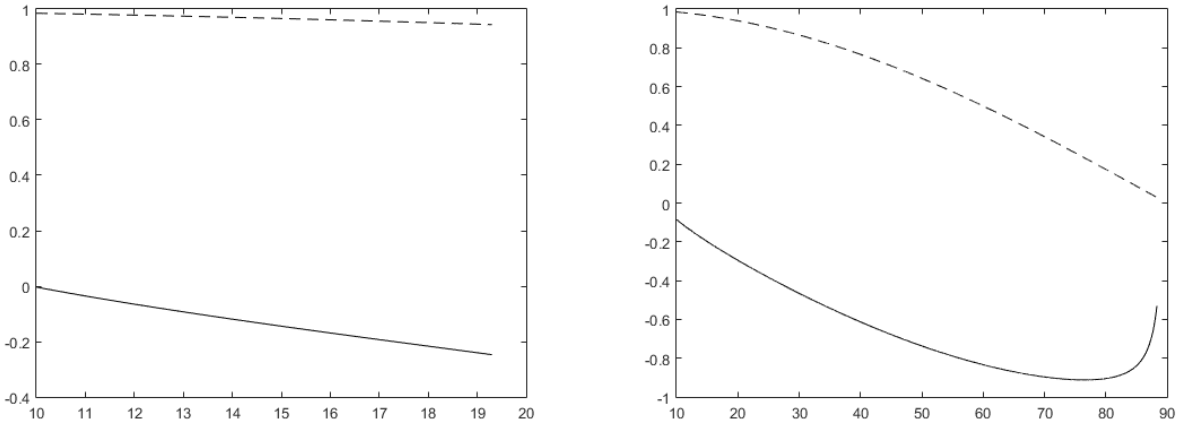


Рис. 4: Графики обезразмеренных функций $\widehat{u}(s)$ (прерывистая линия), $\widehat{v}(s)$ (сплошная линия), $a < s < b$, при $b = 19.29°$ (слева), $b = 88.34°$ (справа).

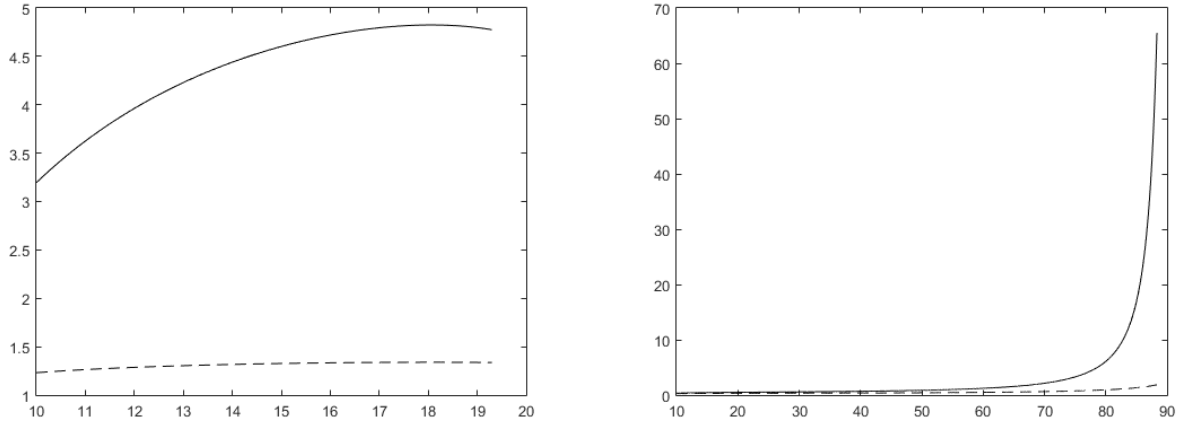


Рис. 5: Графики обезразмеренных функций $\widehat{\rho}(s)$ (прерывистая линия), $\widehat{p}(s)$ (сплошная линия), $a < s < b$, при $b = 19.29°$ (слева), $b = 88.34°$ (справа).

Список литературы

[1] Блохин А.М., Голдин А.Ю. Построение промежуточных областей для обобщенного газа Ван-дер-Ваальса // Журн. тех. физ. Т. 86. № 12, 2016, с. 49–55.

[2] Блохин А.М., Бибердорф Э.А. Численное решение задачи о стационарном обтекании конуса реальным газом// Журн. выч. техн., Т.20, № 2, 2015, с. 29–43.

Элина Арнольдовна Бибердорф — к.ф.-м.н., ст. науч.сотр. Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН; доцент Новосибирского государственного университета;
e-mail: biberdorf@ngs.ru;
Александр Михайлович Блохин — д.ф.-м.н., зав. лаб. Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН; зав. кафедрой Новосибирского государственного университета;
e-mail: blokhin@math.nsc.ru.
Дата поступления — 31 мая 2017 г.

ПРЯМОЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ СЕЙСМИКИ

Н. С. Новиков[1,2]

[1] *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

[2] *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 517.968

В работе рассматривается коэффициентная обратная задача для системы динамических уравнений теории упругости, в предположении, что искомые коэффициенты (параметры Ламе и плотность среды) изменяются только с глубиной, что соответствует горизонтально-слоистым моделям сред. Для решения этой задачи используется метод Гельфанда — Левитана — Крейна во временной области, что позволяет свести задачу к решению нескольких семейств линейных интегральных уравнений.

Ключевые слова: обратные задачи, интегральные уравнения.

Введение

Предметом рассмотрения данной работы является коэффициентная обратная задача для системы динамических уравнений теории упругости. В общем случае задачи подобного рода заключаются в определении плотности и модулей упругости, являющихся коэффициентами системы дифференциальных уравнений нестационарной линейной теории упругости, если известна дополнительная информация о решении такой системы. В рассматриваемом здесь изотропном случае модули упругости выражаются через параметры Ламе, и задача, тем самым, заключается в определении этих двух параметров и плотности среды. Различные постановки обратных задач динамической теории упругости рассматривались в работах А.С. Благовещенского, В.Г. Романова, Ю.Е. Аниконова и других авторов [17, 20–22, 24]. Поскольку эта система уравнений соответствует моделированию распространения в среде упругих волн, а коэффициенты этих уравнений (параметры Ламе и плотность среды) связаны со свойствами среды и на практике являются неизвестными, то разработка методов решения подобных задач представляет большой интерес.

В настоящее время существуют различные методы решения подобных задач, хотя наиболее популярна ситуация, когда соответствующая математическая модель строится на уравнении акустики. К числу распространённых алгоритмов можно отнести кинематические методы, лучевую сейсмическую томографию, методы, основанные на линеаризации задачи. Подробный обзор этих алгоритмов можно найти, например, в работе [4]. Отдельно стоит отменить метод полного обращения волновых полей [1,3] (full waveform inversion), один из наиболее популярных на сегодняшний день подходов.

Данная работа посвящена методу И.М. Гельфанда — Б.М. Левитана — М.Г. Крейна. Одной из основных его особенностей является тот факт, что метод не требует многократного прямого моделирования. Эти характеристики позволяют рассматривать метод Гельфанда — Левитана как инструмент для разработки средств первичной обработки сейсмических наблюдений и получения первого приближения для искомых параметров. С различными результатами, связанными с методом, а также с кратким обзором других алгоритмов, относящихся к классу прямых методов, можно ознакомиться в работах [6, 9–13]. Различные варианты численных алгоритмов можно найти в [5, 7, 8, 14]. Что касается использования подхода Гельфанда-Левитана-Крейна для решения задач сейсмики и теории упругости, то необходимо отметить работы А.С. Алексеева, М.Н. Бородаевой, В.Г. Яхно, В.С. Белоносова. [2, 15, 16, 18, 19, 23].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проектов 16-29-15120, 15-01-09230).

1 Постановка задачи

Рассмотрим полупространство $z \geq 0$ декартовой системы координат $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$, заполненное упругой средой. В случае изотропной среды общая система динамических уравнений теории упругости, описывающая распространение упругих волн в среде, выглядит следующим образом [15]:

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} = (\lambda + \mu)\text{grad div}\mathbf{U} + \mu \Delta \mathbf{U} + \text{grad}\lambda \text{div}\mathbf{U} + \sum_{i=1}^{3} \text{grad}\mu(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_i} + \text{grad}U_{x_i})\mathbf{e}_i; \tag{1}$$

Данная система описывает распространение сейсмических волн в пространстве, заполненном упругой средой. Здесь $\mathbf{e}_i$ — орт соответствующей координатной оси x_i, $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$, $\mathbf{U} = (U_x, U_y, U_z)^T$ — вектор смещения точек среды. Упругие свойства среды заданы параметрами Ламе λ, μ, а также плотностью среды ρ. Отметим, что зачастую в задачах сейсмики вместо параметров Ламе рассматриваются скорости распространения продольных и поперечных волн:

$$v_p = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}, \quad v_s = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}. \tag{2}$$

В дальнейшем мы будем предполагать, что параметры среды меняются только при изменении глубины: $\lambda = \lambda(z), \mu = \mu(z), \rho = \rho(z)$. В этом случае система (1) сводится к следующей системе уравнений:

$$(\lambda + \mu)\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z}\right] + \mu\left(\frac{\partial^2 U_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U_x}{\partial z^2}\right) + \frac{\partial \mu}{\partial z}\left(\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x}\right) = \rho \frac{\partial^2 U_x}{\partial t^2}; \tag{3}$$

$$(\lambda + \mu)\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z}\right] + \mu\left(\frac{\partial^2 U_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U_y}{\partial z^2}\right) + \frac{\partial \mu}{\partial z}\left(\frac{\partial U_y}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial y}\right) = \rho \frac{\partial^2 U_y}{\partial t^2}; \tag{4}$$

$$(\lambda + \mu)\frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z}\right] + \mu\left(\frac{\partial^2 U_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U_z}{\partial z^2}\right) + \frac{\partial \lambda}{\partial z}\left[\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z}\right] + 2\frac{\partial \mu}{\partial z}\frac{\partial U_z}{\partial z} = \rho \frac{\partial^2 U_z}{\partial t^2}; \tag{5}$$

Далее, будем предполагать, что среда находится в состоянии покоя до момента приложения нагрузки:

$$\mathbf{U}(x, y, z, t)|_{t<0} \equiv 0; \tag{6}$$

Для определения параметров среды на границе $z = 0$ с помощью взрывов или ударных воздействий реализуют следующие граничные условия:

$$\sigma_z|_{z=0} = \lambda_0\left[\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z}\right] + 2\mu_0 \frac{\partial U_z}{\partial z} = g_1(x, y, t); \tag{7}$$

$$\tau_{xz}|_{z=0} = \mu_0\left(\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x}\right) = g_2(x, y, t); \tag{8}$$

$$\tau_{yz}|_{z=0} = \mu_0\left(\frac{\partial U_y}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial y}\right) = g_3(x, y, t); \tag{9}$$

Здесь предполагается, что значения параметров среды $\lambda_0, \mu_0, \rho_0 = \lambda, \mu, \rho|_{z=0}$ на поверхности являются известными. Приложенная нагрузка вызывает в среде волновой процесс, который регистрируется расположенными на поверхности $z = 0$ приёмниками:

$$U_x(x, y, 0, t) = f_1(x, y, t); \quad U_y(x, y, 0, t) = f_2(x, y, t); \quad U_z(x, y, 0, t) = f_3(x, y, t) \tag{10}$$

Таким образом, одномерная обратная задача сейсмики заключается в определении параметров $\lambda(z), \mu(z)$ (что эквивалентно определению скоростей продольных и поперечных волн $v_p(z), v_s(z)$) и плотности ρ среды с помощью одного или нескольких экспериментов, описываемых соотношениями (4)–(10).

2 Определение скорости поперечных волн и плотности среды

Предположим теперь, что поверхностный момент сил, приложенных к границе $z = 0$ удовлетворяет после перехода к цилиндрической системе координат $r = \sqrt{x^2 + y^2}, \theta = arctg(\frac{y}{x})$ следующим условиям:

$$\sigma_z = 0, \quad \tau_{rz} = 0, \quad \tau_{\theta z} = a(t)b(r).$$

В таком случае, как показано А.С. Алексеевым [16], в среде возникают волны типа SH, вектор смещений $\mathbf{U}(r, z, \theta, t)$ которых состоит только из компоненты U_θ соответствующей координате θ, при этом $U_\theta = U_\theta(r, z, t)$ удовлетворяет следующему уравнению

$$\frac{\partial^2 U_\theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial U_\theta}{\partial r} - \frac{U_\theta}{r^2} + \frac{\partial^2 U_\theta}{\partial z^2} + \frac{\mu'(z)}{\mu(z)}\frac{\partial U_\theta}{\partial z} = \frac{\rho(z)}{\mu(z)}\frac{\partial^2 U_\theta}{\partial t^2}, \tag{11}$$

а также следующим начальным и краевым соотношениям:

$$U_\theta|_{t<0} \equiv 0; \tag{12}$$

$$\frac{\partial U_\theta}{\partial z} = \frac{1}{\mu_0}a(t)b(r). \tag{13}$$

В дальнейшем будем считать, что значение компоненты $U_\theta(r, z, t)$ при $z = 0$ есть некоторая известная функция $\hat{f}(r, t)$. Кроме того, выберем функции $a(t), b(r)$ следующим образом:

$$a(t) = \delta(t), \quad b(r) = \frac{1}{4\pi}\int\limits_0^\infty k^2 J_1(kr)dk = -\frac{1}{4\pi}\frac{d}{dr}\left[\frac{\delta(r)}{r}\right].$$

Имеет место соотношение:

$$\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^\infty b(r)r^2 dr = 1,$$

в силу чего условие (13) соответствует поверхностному моменту вращения интенсивности $\delta(t)$. Далее, положим

$$U_\theta(r, z, t) = \int\limits_0^\infty U(z, t; k)J_1(kr)k^2 dk, \tag{14}$$

При этом в силу формул обращения преобразования Ханкеля

$$U(z, t; k) = \int\limits_0^\infty U_\theta(r, z, t)J_1(kr)\frac{r}{k}dk, \tag{15}$$

Используя преобразование Ханкеля, обратная задача для системы (11)–(13) сводится к следующему однопараметрическому семейству задач относительно функций $U(z, t; k)$:

$$\frac{1}{v_s^2}\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} + \frac{\partial ln(\mu)}{\partial z}\frac{\partial U}{\partial z} - k^2 U; \tag{16}$$

$$U(z, t; k)|_{t<0} \equiv 0; \tag{17}$$

$$\frac{\partial U}{\partial z}|_{z=0} = \frac{1}{4\pi\mu_0}\delta(t); \tag{18}$$

$$U(z, t; k)|_{z=0} = f_k(t). \tag{19}$$

Здесь, как и раньше, $v_s = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$ — скорость поперечных волн. Перейдём теперь от переменной z к переменной x, используя преобразование годографа:

$$x = \int\limits_0^z \frac{d\xi}{v_s(\xi)}$$

В переменных x, t задача (16)–(19) может быть переписана следующим образом:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \frac{\sigma'(z)}{\sigma(z)}\frac{\partial U}{\partial x} - k^2 v_s^2 U; \tag{20}$$

$$U(x,t;k)|_{t<0} \equiv 0; \tag{21}$$

$$\frac{\partial U}{\partial x}|_{x=0} = \frac{1}{4\pi\sigma_0}\delta(t); \tag{22}$$

$$U(x,t;k)|_{x=0} = f_k(t). \tag{23}$$

Здесь $\sigma(x) = \sqrt{\mu\rho}$. При $k = 0$ уравнение принимает вид

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \frac{\sigma'(z)}{\sigma(z)}\frac{\partial U}{\partial x}$$

Тем самым система (20)–(23) сводится к обратной задаче для уравнения акустики. Используя метод Гельфанда — Левитана — Крейна для решения задачи (20)–(23), можно свести задачу к уравнению М.Г. Крейна [11, 12]:

$$-2f_0(+0)V(x,t) - \int_{-x}^{x} V(x,s)f_0'(t-s)ds = 1, t \in (-x,x) \tag{24}$$

Уравнение (24) при каждом фиксированном значении параметра x является линейным интегральным уравнением второго рода. Решив это семейство уравнений и вычислив функцию $V(x,t)$, можно восстановить $\sigma(x)$ может быть вычислена по формуле:

$$\sigma(x) = \frac{V(0,0)}{2V^2(x,x)}.$$

Будем теперь считать, что функция $\sigma(x)$ является известной. Зафиксируем $k \neq 0$ и сделаем ещё одну замену, перейдя от функции $U(x,t;k)$ к функции V, связанной с U следующим равенством:

$$U(x,t;k) = V(x,t;k)\sqrt{\frac{\sigma(x)}{\sigma(0)}}\frac{4\pi\sigma_0}{v_s(0)}.$$

Введём теперь функцию

$$q(x;k) = k^2 v_s^2 - \frac{1}{2}\frac{\sigma''}{\sigma} + \frac{3}{4}(\frac{\sigma'}{\sigma})^2. \tag{25}$$

Тогда функция $V(x,t;k)$ удовлетворяет следующей системе соотношений:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - q(x;k)U; \tag{26}$$

$$U(x,t;k)|_{t<0} \equiv 0; \tag{27}$$

$$\frac{\partial U}{\partial z}|_{z=0} = \delta(t); \tag{28}$$

$$U(x,t;k)|_{x=0} = \hat{f}_k(t). \tag{29}$$

Как показано в работе В.Г. Романова [25], решение обратной задачи (26)–(29) эквивалентно решению уравнения Гельфанда — Левитана:

$$\tilde{w}_k(x,t) + \int_{-x}^{x} \hat{f}_k'(t-\tau)\tilde{w}_k(x,\tau)d\tau = -\frac{1}{2}[\hat{f}_k'(t-x) + \hat{f}_k'(t+x)], \quad x > 0, t \in (-x,x). \tag{30}$$

При этом решение $\tilde{w}(x,t)$ связано с $q(x)$ следующим соотношением:

$$q(x;k) = 4\frac{d}{dx}w_k(x,x-0)$$

Если функции $q(x)$ и $\sigma(x)$ известны, то соотношение (25) позволяет восстановить скорость поперечных волн в координатах годографа $v_s(x)$. Далее, знание функций $\sigma(x) = \sqrt{\mu\rho}$ и $v_s(x) = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$ позволяет вычислить плотность среды $\rho(x)$. Кроме того, используя значения скорости поперечных волн, можно обратить преобразование годографа и перейти от переменной x к исходной переменной z:

$$z = \int_0^x v_s(\xi)d\xi$$

3 Определение скорости продольных волн.

Будем теперь считать, что после использования результатов раздела 2 нам известны значения функций $v_s(z), \rho(z)$ (что равносильно знанию $\mu(z), \rho(z)$ — двух из трёх параметров Ламе), то для получения полной информации о строении среды необходимо вычислить последний неизвестный параметр Ламе $\lambda(z)$, или скорость распространения продольных волн $v_p(z)$. Для этого А.С. Алексеевым был предложен эксперимент, основанный на воздействии на среду источника вида нормальной сосредоточенной силы интенсивности $\delta(t)$ [16] (отметим, что аналогичный метод был также предложен А.С. Благовещенским в [24]):

$$\sigma_z|_{z=0} = \lambda_0\left[\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z}\right] + 2\mu_0\frac{\partial U_z}{\partial z} = \delta(x)\delta(y)\delta(t); \tag{31}$$

$$\tau_{xz}|_{z=0} = \mu_0\left(\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x}\right) = 0; \tag{32}$$

$$\tau_{yz}|_{z=0} = \mu_0\left(\frac{\partial U_y}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial y}\right) = 0; \tag{33}$$

В этом случае, как показано в [16], система уравнений теории упругости (1) сводится, с учетом симметрии среды и источника колебаний, к следующему уравнению:

$$\frac{\rho}{\lambda+2\mu}\frac{\partial^2 W}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} + \frac{\partial\left(\ln(\lambda+2\mu)\right)}{\partial z}\frac{\partial W}{\partial z}; \tag{34}$$

Здесь функция $W(x,t)$ связана с компонентами вектора смещений следующим образом:

$$W(x,t) = \iint U_z(x,y,z,t)dxdy$$

При этом остальные моменты остальных компонент вектора смещений равны нулю в силу симметричности задачи:

$$U(x,t) = \iint U_x(x,y,z,t)dxdy = 0, \quad V(x,t) = \iint U_y(x,y,z,t)dxdy = 0.$$

При этом граничное условие (31) может быть переписано в виде

$$\frac{\partial W}{\partial z}|_{z=0} = \frac{1}{\lambda_0+2\mu_0}\delta(t) \tag{35}$$

Начальные данные имеют вид

$$W|_{t=0} = \frac{\partial W}{\partial t}|_{t=0} = 0 \tag{36}$$

Данные обратной задачи получены в результате измерения на поверхности $z = 0$ компонент смещения и могут быть переписаны в следующем виде:

$$W(0,t) = \iint U_z(x,y,0,t)dxdy = G(t) \tag{37}$$

Соотношения (34)–(37) образуют обратную задачу, целью которой является восстановление скорости продольных волн

$$v_p(x) = \sqrt{\frac{\lambda+2\mu}{\rho}}$$

Для решения этой задачи применим, также, как и в случае определения скорости поперечных волн, преобразование годографа и перейдём к переменной

$$y = \int_0^z \frac{d\xi}{v_p(\xi)} \tag{38}$$

Задача после данной замены принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 W}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} + \frac{\partial \ln \sigma_p(y)}{\partial y}\frac{\partial W}{\partial y}; \\ W|_{t<0} \equiv 0, \\ \frac{\partial W}{\partial y}|_{y=0} = \frac{1}{\sigma_{0p}}\delta(t), \\ W|_{y=0} = G(t). \end{aligned} \tag{39}$$

Здесь неизвестной является функция $\sigma_p(y) = \rho(y)v_p(y)$. Формулировка задачи (39) с точностью до умножения на постоянную совпадает с обратной задачей (20)–(23), что позволяет аналогичным образом свести её к решению семейства интегральных уравнений М.Г. Крейна:

$$-2f_0(+0)V_p(x,t) - \int_{-x}^{x} V_p(x,s)G'(t-s)ds = 1, t \in (-x,x) \tag{40}$$

Функция $\sigma_p(y)$ при этом вычисляется на основе соотношения, аналогичного (2).
Далее, вычислив значения функции $\sigma_p(y)$, можно, в предположении, что значения плотности среды известны, восстановить скорость продольных волн $v_p(z)$ в исходных переменных. Для этого нужно воспользоваться следующим соотношением, вытекающим из (38):

$$\frac{dy}{\sigma_p(y)} = \rho(z)dz \tag{41}$$

Тем самым описанная методика позволяет получить всю информацию об упругом строении среды в одномерном случае.

Заключение

В работе предложен алгоритм решения одномерной обратной задачи теории упругости на основе метода Гелфьанда — Левитана — Крейна во временной области. Переопределённость постановки позволяет свести исходную нелинейную обратную задачу сводится к решению линейных интегральных уравнений (24), (30), (40). В отличие от аналогичных подходов в частотной области, предложенный метод отражает локальную зависимость параметров среды от данных обратной задачи. Результаты численных расчётов на основе предложенного алгоритма будут опубликованы позднее.

Список литературы

[1] Tarantola A. Inverse problem theory and methods for model parameter estimation. Cambridge University Pr.; 2005.

[2] Belonosov V.S., Skazka V.V. The inverse dynamic problem of seismic sounding low-frequency regularization. Applied Mathematics Letters, 21(1), pp. 95-100, 2008

[3] Fichtner A. Full seismic waveform modelling and inversion. Springer Science & Business Media; 2010

[4] Аникиев Д. В. и др. Методы обращения сейсмических волновых полей //Seismic Technology. — 2014. — Т. 11. — №. 1. — С. 38–58.

[5] Kabanikhin, S.I., Novikov, N.S., Oseledets, I.V., Shishlenin, M.A. Fast Toeplitz linear system inversion for solving two-dimensional acoustic inverse problem // (2015) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 23 (6), pp. 687–700.

[6] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Two-dimensional analogs of the equations of Gelfand, Levitan, Krein, and Marchenko // (2015) Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications, 3 (2), pp. 70–99.

[7] Kabanikhin, S.I., Sabelfeld, K.K., Novikov, N.S., Shishlenin, M.A. Numerical solution of the multidimensional Gelfand-Levitan equation // (2015) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 23 (5), pp. 439–450.

[8] Kabanikhin, S.I., Sabelfeld, K.K., Novikov, N.S., Shishlenin, M.A. Numerical solution of an inverse problem of coefficient recovering for a wave equation by a stochastic projection methods. // (2015) Monte Carlo Methods and Applications, 21 (3), pp. 189–203.

[9] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Numerical algorithm for two-dimensional inverse acoustic problem based on Gel'fand-Levitan-Krein equation // (2011) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 18 (9), pp. 979–995.

[10] Kabanikhin, S., Shishlenin, M. Quasi-solution in inverse coefficient problems // (2008) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 16 (7), pp. 705–713.

[11] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Boundary control and Gel'fand-Levitan-Krein methods in inverse acoustic problem // (2004) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 12 (2), pp. 125–144.

[12] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Comparative analysis of boundary control and Gel'fand-Levitan methods of solving inverse acoustic problem // (2003) Inverse Problems in Engineering Mechanics IV, pp. 503–512.

[13] Kabanikhin, S.I., Scherzer, O., Shishlenin, M.A. Iteration methods for solving a two dimensional inverse problem for a hyperbolic equation // (2003) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 11 (1), pp. 87–109.

[14] Н.С. Новиков, Сравнительный анализ численных методов решения двумерного аналога уравнения Гельфанда — Левитана // Сибирские электронные математические известия, Труды 5-й международной молодёжной научной школы — конференции "Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач с. 132–144, 2014

[15] Алексеев А.С. Некоторые обратные задачи теории распространения волн // Изв. АН СССР. Сер. геофизика, 11–12 (1962), с. 65–72

[16] Алексеев А.С. Обратные динамические задачи сейсмики // Некоторые методы и алгоритмы интерпретации геофизических данных, 1967, стр. 9–84, Москва.

[17] Яхно В.Г. Линеаризованная обратная задача Лэмба // Доклады АН СССР, 276(2), стр. 314–318, 1984

[18] Яхно В.Г., Одномерные обратные динамические задачи для анизотропных упругих сред // ВЦ СО АН СССР, 1985, Новосибирск.

[19] Бородаева Н.М. О численном решении одномерной динамической задачи сейсмики // Некоторые методы и алгоритмы интерпретации геофизических данных, 1967, с. 85–91, Москва.

[20] Романов В.Г. Обратная задача Лэмба в линейном приближении // Численные методы в сейсмических исследованиях, 1983, с. 170–192, Новосибирск.

[21] Аниконов Ю.Е., Москвитин В.Н. Об одной задаче для системы динамических уравнений теории упругости // Доклады АН СССР, 253(5), стр. 1086–1087, 1980.

[22] Волкова Е.А. Об одной одномерной обратной задаче для системы уравнений теории упругости анизотропных сред // Препринт №330, Новосибирск, 1981.

[23] Белоносова А.В., Белоносов В.С. Прямые и обратные задачи акустического зондирования дна водоемов // Сибирские электронные математические известия, Т. 10, с. 10–15, 2013.

[24] Благовещенский А.С. Об обратной задаче теории распространения сейсмических волн // Проблемы мат. физики, Т. 1, с. 68–81, 1966.

[25] Романов В.Г. Обратные задачи математической физики. Москва, Наука, 1984.

Никита Сергеевич Новиков — м.н.с. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН; Новосибирский государственный университет;
e-mail: novikov-1989@yandex.ru.
Дата поступления — 1 сентября 2017 г.

ОНТОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ МОНИТОРИНГА НАУЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СОТРУДНИКОВ ВУЗА

Л. Р. Сулейменова, С. Ж. Рахметуллина

Восточно-Казахстанский государственный технический университет имени Даулета Серикбаева, 070010, Усть-Каменогорск, Казахстан

УДК 004.42

С каждым годом быстрым темпом растет объем информации, относящейся к научно-исследовательской деятельности. С ростом объемов информации актуальной задачей является повышение эффективности использования этих информационных ресурсов. Были разработаны множество моделей для решения этой проблемы. В этой статье, после сравнения некоторых из этих моделей, была выбрана модель SWRC.

Ключевые слова: онтологическая модель научной деятельности, ЕНИП, Dublin Core, CERIF, SWAN, SPAR, SWRC.

Введение

Управление вузом ориентировано на достижение университетом стратегических целей. Принятие рациональных и обоснованных решений в процессе управления вузом возможно только на основе обработки больших объемов различной информации с применением информационных технологий. Эти данные помогают организации в сборе идей и видений, распознавании и использовании возможностей и угроз для доступа к конкурентным преимуществам. Обработка больших объемов данных предполагает создание единого интерфейса для некоторой совокупности независимых друг от друга источников данных. Одной из основных проблем является гетерогенность обрабатываемых данных. Их гетерогенность проявляется на различных уровнях: системном, синтаксическом, структурном, семантическом, а также применении различных форматов и моделей представления данных. Некоторые источники имеют свойство расширяться со временем. Эти проблемы делают задачу интеграции данных трудоёмкой, необходимо учитывать не только структурные и синтаксические различия информационных ресурсов, а также семантику. Авторы статьи [1] предлагают сосредоточить внимание на семантической обработке данных, а не на обработке данных. В Послании Президента РК Н. Назарбаева народу Казахстана «Третья модернизация Казахстана: глобальная конкурентоспособность» 2017 года были обозначены важные приоритеты в области развития, в том числе образования. Для дальнейшего развития республики он делает ставку на развитие научного потенциала на базе вузов. Поэтому создание структурной базы знаний с учетом особенностей данных о образовательно-научной деятельности ППС для принятия эффективных решений необходимо для каждой организации образования.

1 Онтологии

Многие страны и вузы разработали свои системы управления научной информацией на основе SEmabtic Web. Semantic Web предназначен для создания стандартного представления, которое может обеспечить значимые связи между различными наборами данных для содействия интеграции и коммуникации. Как семантический инструмент, онтология определяется как структурированные знания в определенной области, которое разрабатывается по концептам этой предметной области и отношениями между ними. Онтология — это четкое и формальное определение базы знаний, состоящее из понятий (или классов), ролей (или свойств) между экземплярами и ограничениями, с набором элементов и индивидами или экземплярами, которые определяют базу знаний [2]. Данное понимание полностью согласуется с известным определением онтологии Тома Грубера [3]. Существует множество моделей описывающих научную деятельность организации. В

этих моделях учитывается публикационная активность и индексы цитирования, также патенты и авторские свидетельства, участие в НИОКР. Были рассмотрены существующие онтологические модели описывающие научные труды ЕНИП, Dublin Core, CERIF, SWAN, SPAR, SWRC.

ЕНИП

В рамках российской инициативы по организации Единого Научного Информационного Пространства (ЕНИП) была разработана модель ЕНИП для интеграции разнородных научных информационных и программных ресурсов отдельных научных учреждений, предоставлении пользователям более эффективных средств интеграции и поиска информации, научной коммуникации, сотрудничества и совместной работы. Система ЕНИП работает такими ресурсами, как персоны, публикации, организации, подразделения и проекты [4]– [5].

Dublin Core

Dublin Core относится к классу онтологии, которые не в прямую описывают научную деятельность, а к классу онтологии, которые используются при описании результатов публикационной деятельности. Стандарт метаданных Dublin Core — это набор, предназначенный для описания широкого спектра ресурсов. Он был разработан в ответ на необходимость улучшения поиска информационных ресурсов, особенно во Всемирной паутине [6].

CERIF

CERIF (Common European Research Information Format) это стандарт для управления и обмена исследовательскими данными, то есть информацией об исследователях, организациях, проектах, результатах и финансировании, вытекающих из исследовательского процесса. Он предоставляет модель данных, которая может использоваться для описания области исследования, включая отношения между составными частями, и как они изменяются со временем [7]. CERIF начали разрабатывать в начале 1980-х годов, который исследовал связывание баз данных исследовательской информации. Информация об исследовании — это информация об исследовательских организациях, таких как люди, проекты, организации, публикации, патенты, продукты, финансирование или оборудование и т.д. и отношении между ними. Со временем модель была расширена и является открытой. Информационные системы позволяют структурировать, хранить, поддерживать, обмениваться, получать доступ, распространять или оценивать содержащуюся в них информацию. CERIF — мощный инструмент для создания масштабируемых и ориентированных на качество информационных систем. Здесь большое внимание уделяется описанию процессов исследовательской деятельности и фиксированию хозяйственной стороны данного процесса — формальное фиксирование проведенных измерений, используемое и закупаемое оборудование, место проведения исследований, размер исследовательской группы, описание навыков каждого из сотрудников, финансирование и премирование, участие в подотчетных конференциях, публикации трудов и их цитирование, отслеживание формальных результатов исследований. Классы имеют большое количество связей для детального описания исследовательской деятельности [8].

SWAN

SWAN (Semantic Web Applications in Neuromedicine) представляет собой набор онтологических модулей для представления научного дискурса в биомедицинских исследованиях [9]. Данная онтология также как и Dublin Core относится к классу онтологии, которые описывают публикационную деятельность. Изначально онтология SWAN была разработана для удовлетворения требований проекта SWAN. Проект SWAN направлен на разработку практической, общей, семантически-структурированной основы для научных рассуждений в области биомедицины, в частности в нейро-медицине. Онтология рассуждений в основе SWAN — это онтология о том, что сказано, а не о согласованных объективных фактах. Онтология SWAN была интегрирована с Science Collaboration Framework [SCF]. Она предназначена для поддержки междисциплинарных ученых в публикации, аннотации, обмене и обсуждении контента, таких как статьи, перспективы, интервью и новости, а также утверждение личных биографий и научных интересов. Эти веб-материалы затем могут быть связаны с внешними гетерогенными хранилищами знаний ресурсов. Существующая архитектура позволяет заинтересованным сторонам принимать значимые компоненты. Онтология SWAN для представления научного дискурса, довольно широко, во многих других областях науки, обеспечивая при

этом важный уровень интеграции со всеми приложениями на основе информации SWAN. Онтология SWAN написана в OWL. Подъязык OWL-DL был выбран так, как он предлагает большую выразительность, не теряет вычислительной полноты и разрешимости (все вычисления завершаются за конечное время) систем рассуждений. Резонеры полезны для выявления ошибок и несоответствий в онтологии, а также ошибок и противоречий в наборах данных. Более того, в OWL онтологии могут быть модульными. Онтология SWAN организована в трех типах модулей: Basic: базовые модули представляют собой стандартный блок онтологии. Они охватывают темы, которые являются достаточно общими для включения в каждое распределение онтологии; Extension: модули расширения охватывают темы, которые могут быть связаны только с некоторыми областями науки; Distribution: дистрибутивы представляют собой модули, которые включают в себя все базовые модули и расширения, необходимые для обслуживания определенного домена [10].

SPAR

SPAR (Semantic Publishing and Referencing Ontologies) — это набор из 8 независимых онтологий OWL 2 DL для создания машиночитаемых метаданных в RDF для всех аспектов семантической публикации и перекрестных ссылок: описание документов, идентификаторы библиографических ресурсов, типы Цитат, библиографические ссылки, роли агентов, библиометрические данные. Все онтологии SPAR могут использоваться вместе или независимо друг от друга. Он обеспечивает достаточно детальную категоризацию отношений, которые могут возникать между научными материалами в электронном виде, и воплощающими их связями. Все онтологии SPAR были разработаны в соответствии со следующими принципами:

- решение требований участников;
- должен существовать обширный диалог с издателями и членами академических сообществ с целью уточнения их требований;
- интерактивные онтологические модули;
- минимальные логические ограничения;
- логические ограничения, например ограничения домена и диапазона для свойств, должны добавляться только там, где они строго необходимы;
- повторное использование существующих словарей [11].

SWRC

Онтология SWRC (Semantic Web Research Community) описывает ключевые сущности в научном сообществе. Трудно найти четкую документацию по SWRC онтологии. Онтология SWRC в целом моделирует ключевые субъекты, относящиеся к типичным научным сообществам и отношениям между ними. Текущая версия онтологии включает в общей сложности более 70 понятии в таксономии и более 70 свойств объекта. Все объекты обогащены дополнительной информацией. SWRC включает в себя шесть концепций высшего уровня, а именно концепции Person, Publication, Event, Organization, Topic и Project [12].

2 Сравнительный анализ

Анализируя выше описанные онтологические модели, которые описывают научные труды или научную деятельность для разработки системы мониторинга наиболее подходят онтологии CERIF и SWRC. Данные онтологии имеют много общих классов. Обе онтологии являются открытыми. Но онтология CERIF описывает научно-исследовательские работы с точки зрения финансирования и, следовательно, отчетности, а онтология SWRC направлена на описание с позиции общих характеристик научно-образовательной деятельности.

Основные преимущества SWRC:

- выразительность;
- возможность задания порядка следования авторов публикации;

- его сущности и атрибуты охватывают большинство объектов и атрибутов, представляющие интерес для научно-образовательной организации;

- SWRC обеспечивает межоперационную и легкую интеграцию данных между различными приложениями, например между различными порталами. Сравнительный анализ моделей приведен в таблице.

Таблица 1: Сравнение онтологических моделей

Модели	Назначение	Основные классы				
		Организация	Персона	Публикации	События	Проекты
ЕНИП	Поддержка и управление научной информацией	+	+	+	-	+
SPAR	Детальная категоризация отношении между научными материалами (цитирование, библиографические ссылки и т.п.)	+	+	+	-	-
SWAN	Детальная категоризация отношении между научными материалами (цитирование, библиографические ссылки и т.п.)	-	+	+	-	-
Dublin Core	Поиск информационных ресурсов	-	-	+	-	-
CERIF	Поддержка и управление научной информацией	+	+	+	+	+
SWRC	Поддержка и управление научной информацией	+	+	+	+	+

Главное преимущество SWRC в том, что там уже имеются классы и свойства, описывающие не только научную, но и образовательную деятельность. Онтология SWRC наиболее полно подходит для описания деятельности вуза. Данная модель будет дополнена некоторыми классами и свойствами, которые описывают образовательную деятельность сотрудника, а именно читаемые дисциплины их цикл и содержание. Так как, анализе деятельности ППС главным фактором, который оказывает влияние на научный результат является не только количественный объем нагрузки, также качественный состав читаемых дисциплин.

3 Результаты

Достоинствами онтологии являются их потенциальные свойства для решения таких задач, как формализация, интеграция, анализ данных и обмен знаниями и их повторное использование. Для создания модели позволяющей оценивать научные достижения сотрудников SWRC будет расширена с добавлением новых классов, свойств и отношений.

Заключение

В статье рассматриваются различные модели, описывающие научные труды и научную деятельность. Проведено сравнение между онтологиями CERIF и SWRC, определены их схожие свойства и отличительные особенности каждой онтологии. Для создания онтологической модели за основу была выбрана модель SWRC.

Список литературы

[1] J. Brank, M. Grobelnic, and D. Mladenic, "A survey of Ontology evaluation techniques," in In Proceedings of the Conference on Data Mining and Data Warehouses(SiKDD 2005), Ljubljana, Slovenia, 2005.

[2] Q. Lu, "OntoKBEval: a support tool for OWL Ontology evaluation," Unpublished master's thesis, Concordia University, Montreal, Quebec, Canada, 2006.

[3] Гаврилова Т.А. Базы знаний интеллектуальных систем / Т.А. Гаврилова, В.Ф. Хоро-шевский. — Спб.: Питер, 2000. — 384 с.

[4] А.А.Бездушный, А.Н.Бездушный, В.А.Серебряков, В.И.Филиппов. Интеграция метаданных Единого Научного Информационного Пространства РАН. Вычислительный центр РАН. Москва, 2006, 238 с.

[5] Кулагин М.В., Серебряков В.А. Информационное пространство РАН (Проекты и реализация, 1998-2013) // Научный сервис в сети Интернет: труды XVIII Всероссийской научной конференции (19–24 сентября 2016 г., г. Новороссийск). — М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2016. — С. 194–222.

[6] DCMI Home: Dublin Core® Metadata Initiative (DCMI). http://dublincore.org/

[7] An introduction to CERIF: http://www.ukoln.ac.uk/rim/documents/Introduction_to_CERIF_1.0.pdf

[8] CERIF-1.6 EuroCRIS: http://www.eurocris.org/cerif/feature-tour/cerif-16 (дата обращения 23 мая 2017 г.)

[9] P. Ciccarese, ed., Semantic Web Applications in Neuromedicine (SWAN) Ontology. W3C Interest Group Note 20 October 2009, http://www.w3.org/2001/sw/hcls/notes/swan/

[10] Semantic Web Applications in Neuromedicine (SWAN) Ontology: https://www.w3.org/TR/hcls-swan/

[11] Галимов А.А. Разработка онтологической модели публикаций // NB: Кибернетика и программирование. — 2015. — № 2. — С.98–106.

[12] York Sure, Stephan Bloehdorn, Peter Haase, Jens Hartmann, Daniel Oberle: The SWRC Ontology - Semantic Web for Research Communities. Portuguese Conference on Artificial Intelligence (EPIA) 2005: 218–231

Сулейменова Лаура Рахметоллановна — докторант 2 года обучения Восточно-Казахстанского государственного технического университета имени Даулета Серикбаева;
e-mail: laurasruk@mail.ru;
Рахметуллина Сауле Жадыгеровна — к.т.н., Директор Департамента стратегии развития и мониторинга Восточно-Казахстанского государственного технического университета имени Даулета Серикбаева;
e-mail: SRakhmetullina@ektu.kz.
Дата поступления — 30 мая 2017 г.

ON THE SOLVABILITY OF THE DISCRETE ANALOGUE OF GELFAND — LEVITAN EQUATION

G. B. Bakanov[1], S. I. Kabanikhin[2,3,4], N. S. Novikov[2,4], M. A. Shishlenin[2,3,4]

[1] *Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkestan, Kazakhstan*
[2] *Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS, 630090, Novosibirsk*
[3] *Sobolev Institute of Mathematics SB RAS, 630090, Novosibirsk*
[4] *Novosibirsk State University, 630090, Novosibirsk*

UDC 517.962.8, 519.633.6, 519.642.4

The two-dimensional coefficient inverse problem for the wave equation is considered. We investigate 2D analogue of Gelfand — Levitan equation on the discrete level to reduce the inverse problem to the family of linear integral equations. We consider the solvability conditions for the discrete version of Gelfand — Levitan equation.
Keywords: Coefficient inverse problems, Gelfand — Levitan equation, linear regularization, discrete analogue.

Introduction

Aleekseev and Dobrinskii [3] used the discrete analogy of the Gelfand — Levitan method while investigating the numerical algorithms for a one-dimensional dynamic inverse problem of seismics (see also [1, 2, 5, 8, 9]). The comparison of the Gel'fand-Levitan method with others intended for solving one-dimensional inverse problems can be found in [7]. Pariiskii [4] analyzed the numerical algorithms for solving the Gelfand — Levitan equations. We also should mention another works, that considered numerical solution of 1D and 2D Gelfand — Levitan equations [13, 22, 24, 25]. In Kabanikhin [12, 15] the multi-dimensional analogy of the Gelfand — Levitan equation was obtained. We mention also Berryman and Greene [6], Case and Kack [10], Bube [11], Gladwell and Willms [14], Natterer [16], and a series of more recent works [17–21, 23].

1 Discrete analogue of the Gelfand — Levitan equation

In this paper we consider the following inverse problem:

$$\frac{\partial^2 u^{(m)}}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u^{(m)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^{(m)}}{\partial y^2} - q(x,y)u^{(m)}, \qquad x \in \mathbb{R}, \quad y \in \mathbb{R}, \quad t > 0; \tag{1}$$

$$u^{(m)}(x,y,0) = 0, \quad \frac{\partial u^{(m)}}{\partial t}(x,y,0) = \delta(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}my}, \qquad x \in \mathbb{R}, \quad y \in \mathbb{R}; \tag{2}$$

$$u^{(m)}(0,y,t) = f^{(m)}(y,t), \quad \frac{\partial u^{(m)}}{\partial x}(0,y,t) = 0, \qquad y \in \mathbb{R}, \quad t > 0. \tag{3}$$

We suppose that $q(x,y)$ is even for all variables, and functions $u^{(m)}(x,y,t)$ and $q(x,y)$ are 2π periodical with respect to y. The problem is to recover the unknown function $q(x,y)$ by using the set of measurements data $f^{(m)}(y,t), m \in \mathbb{Z}$.
Such problem arises in geophysics, when the two-dimensional inverse problem for some hyperbolic equation is considered. The idea, used in this paper, is to apply the Gelfand — Levitan method. Gelfand — Levitan — Krein approach is well-studied in one-dimensional case (see introduction), but the two-dimensional case is yet to be fully

The work was supported by RFBR (grants 16-29-15120 and 15-01-09230) and the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan, grant MES 1746/GF4 (project NTP 04.03.02).

investigated.
We will use the discrete version of the approach [17,18], which fits well into the applied nature of inverse problems (due to the fact, that in practice we have only the finite number of time points, where the data of inverse problems are measured). Let us continue functions $u^{(m)}(x,y,t), f^{(m)}(y,t)$ as odd functions for $t<0$ and denote $(\tilde{f}_j^k)_{\overset{\circ}{t}}^m = (f_j^k)_{\overset{\circ}{t}}^m - \delta_h^k \mathrm{e}^{\mathrm{i}mjh_1}$, where

$$(f_j^k)_{\overset{\circ}{t}}^m = \begin{cases} 1/h, & k=0, \\ 0, & k=\pm 1, \\ (f_j^{|k|+1} - f_j^{|k|-1})/2h, & k=\pm 2, \pm 3, \ldots. \end{cases}$$

We consider then the discrete analogue of inverse problem (1)–(3): find the grid function $\tilde{q}_{i,j}$ from

$$\tilde{v}_{t\bar{t}}^m = \tilde{v}_{x\bar{x}}^m + \tilde{v}_{y\bar{y}}^m + \frac{1}{2}\left[\delta_{i+k}^h + \delta_{i-k}^h\right]\left[(\mathrm{e}^{\mathrm{i}mjh_1})_{y\bar{y}} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}mjh_1}\tilde{q}_{i,j}\right] - \tilde{q}_{i,j}(\tilde{v}_{i,j}^k)^m, \qquad i\in\mathbb{Z}, \quad k\geq 1, \quad j,m=\overline{1,2N_1}; \tag{4}$$

$$(\tilde{v}_{i,j}^0)^m = 0, \quad (\tilde{v}_{i,j}^1)^m = 0, \quad i\in\mathbb{Z}, \quad j,m=\overline{1,2N_1}; \tag{5}$$

$$(\tilde{v}_{0,j}^0)^m = 0, \quad (\tilde{v}_{0,j}^1)^m = 0, \quad (\tilde{v}_{0,j}^k)^m = (\tilde{f}_j^k)_{\overset{\circ}{t}}^m, \qquad k>1, \quad j,m=\overline{1,2N_1}. \tag{6}$$

Here over-bar over v corresponds to the finite-difference operators. We will prove that the discrete analogue of inverse problem (1)–(3) is equivalent to the finite set of systems of algebraic equations. Suppose that grid functions $\tilde{q}_{i,j}$, $\tilde{v}_{i,j}^k$ are $2N_1$-periodical with respect to j. Now we reduce to the two-dimensional discrete inverse problem to the system one-dimensional discrete inverse problems by applying Fourier series expansion with respect to discrete variable j. Let us denote number N_1, that describes the number of the Fourier coefficients, that we need to restore (that means, that N_1 describes the number of the sources and receivers). Let us introduce matrices $\tilde{V}$, Q, $\tilde{W}$ — square matrices of $2N_1$ degree, which corresponds to Fourier coefficients of the functions $\tilde{v},\tilde{q}$, $\tilde{F}$ — matrix, that consists of $[\tilde{f}_{(n)}^k]_{\overset{\circ}{t}}^m = [f_{(n)}^k]_{\overset{\circ}{t}}^m - \delta_k^h\delta_{m,n}$, O, E — null and unitary matrix correspondingly. Then the problem (4)–(6) can be reduced [17] to the following systems of discrete one dimensional inverse problems:

$$\tilde{W}_i^k + h\sum_{j=-i+1}^{i-1}\tilde{W}_i^j\tilde{F}_{\overset{\circ}{t}}^{k-j} = -\frac{1}{2}\left[\tilde{F}_{\overset{\circ}{t}}^{k-i} + \tilde{F}_{\overset{\circ}{t}}^{k+i}\right], \quad 0\leq|k|<i, \; i=\overline{2,N}. \tag{7}$$

This discrete version of Gelfand — Levitan equation allows to obtain the solution of inverse problem Q_i by using the function W_i^k, calculated from (7), according to the ratio below:

$$\tilde{W}_{i+1}^i = \frac{1}{2}h\sum_{s=0}^{i}Q_s, \qquad i=1,2,\ldots \tag{8}$$

The connection between solvability of the discrete inverse problem and the equation (7) is given by the following theorem:
Theorem [17,18]: Let us suppose that the solution of discrete inverse problem (4)–(6) exists. The for any $i=\overline{2,N}$ system (7) has unique solution. On the other hand, if the system (7) has unique solution $\tilde{W}_i^k$, then the solution of discrete inverse problem (4)–(6) exists and is unique.
We should also mention several remarks. First, according to the structure of the matrix Q, it is possible to recover $\tilde{q}_{(n)i}$, $n=\overline{0,2N_1-1}$ by using only the first column or the last line of matrix Q_i. Second, we should note, that the parameter $N_1>0$, which describes the accuracy of Fourier transform, is arbitrary. Therefore if $f^m(y,t)$ is smooth that we can pass to limit under $N_1\to\infty$ and obtain the solution of the initial inverse problem.

2 Solvability conditions

In this section we obtain the solvability condition for the discrete version of the method. As it was mentioned, for every given set of measurements the solvability of leads to solvability of initial inverse problem. Therefore, due to the practical nature of the data of inverse problem, it is important to study the criteria for the existence of Gelfand — Levitan equation's solution (as well as the uniqueness). When one considers the numerical solution of inverse problem both in model case or in case of the real data, one have to work with the finite set of measurements, possesed by measurement's errors, and the criteria mentioned could be used to process data (in the manner, that

would allow us to solve the inverse problem) .
We start from one-dimensional case. Then matrices $\tilde{W}$, $\tilde{F}$ reduces to numbers, and we can rewrite (7) in the following form:

$$D_i^f w \leftrightarrows w_i^k + h \sum_{j=-i+1}^{i-1} w_i^j f'^{k-j} = -\frac{1}{2}\left[f'^{k-i} + f'^{k+i}\right], 0 \le |k| < i. \tag{9}$$

Because discrete function f'^k is even function with respect to k, we can consider the discrete Fourier transform of the function f'^k on the interval $t_k \in (-2T, 2T)$:

$$f'^k = \sum_{l=-N}^{N} a_l \cos\frac{l\pi t_k}{2T}, \qquad t_k \in (-2T, 2T). \tag{10}$$

Here

$$a_l = \frac{1}{2T}\sum_{k=-N}^{N} f'^k \cos\frac{k\pi t_l}{2T}. \tag{11}$$

We also assume, that

$$w_i^k = \sum_{l=-N}^{N} \varphi_l \cos\frac{\pi l x_k}{ih}, \qquad x_k = kh, \quad 0 \le |k| < i;$$

$$\varphi_l = \frac{1}{ih}\sum_{k=-i}^{i} w_i^k \cos\frac{\pi k x_l}{ih}.$$

The solvability's condition for the equation (9) can be rewritten in the following form:

$$(D_i^f w, w) > 0 \quad \forall i = 1, \dots N, \quad \forall w \neq 0. \tag{12}$$

Using the discrete Fourier transform, we rewrite this condition in the following form:

$$(D_f^i w, w) = \frac{1}{ih}\sum_{k=-i}^{i} D_f^i w_i^k \cdot w_i^k = \frac{1}{ih}\sum_{k=-i}^{i}(w_i^k)^2 + \frac{1}{(ih)^2}\sum_{j=-i+1}^{i-1}\sum_{k=-i}^{i} w_i^j w_i^k f'^{k-j} =$$

$$= \frac{1}{ih}\sum_{k=-i}^{i}(w_i^k)^2 + \sum_{j=-i+1}^{i-1}\sum_{k=-i}^{i} w_i^j w_i^k \sum_{l=-N}^{N} a_l \cos\frac{l\pi t_{k-j}}{2T} =$$

$$= \frac{1}{ih}\sum_{k=-i}^{i}(w_i^k)^2 + \sum_{l=-i}^{i} a_l \left[\left(\frac{1}{ih}\sum_{k=-i}^{i} w_i^k \cos\frac{l\pi t_k}{2T}\right)^2 + \left(\frac{1}{ih}\sum_{k=-i}^{i} w_i^k \sin\frac{l\pi t_k}{2T}\right)^2\right]. \tag{13}$$

Using the (13), we can ensure the inequality (12) either by requiring that

$$a_l > 0 \quad \forall l = -N, \dots N$$

or

$$1 + 2ih\sum_{l=-N}^{N} a_l \theta(-a_l) > 0. \tag{14}$$

Another approach, that could be used, relies on the Toeplitz structure of the matrix (9). Let us introduce the generating function Φ — function, which provides diagonals $\{f'^{k-j}\}$ of the matrix as its Fourier coefficients (which corresponds to the inverse Fourier transform):

$$f'^k = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Phi(x) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \mathrm{d}x. \tag{15}$$

We should mention, that because of identity matrix in the left hand side of (9), we suppose, that $f'^0 = 1$ in the formula above.

According to Grenander-Szegö theorem [26], values of generating function Φ describes the behaviour of the eigenvalues of the matrix of the system (9). More precisely, the following theorem holds:
Theorem. Let us assume, that the generating function $\Phi(x)$ belongs to $C[-2\pi, 2\pi]$. Denote $\lambda_{min}(D_N), \lambda_{max}(D_N)$ — minimal and maximal eigenvalues of the matrix of the system (9), when $i = N$. Then

$$\Phi_{min} \leq \lambda_{min}(D_N) \leq \lambda_{max}(D_N) \leq \Phi_{max} \tag{16}$$

Moreover, the eigenvalues $\lambda_j(D_N)$ of the system are equally distributed as $\Phi(\frac{2\pi j}{2N})$:

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{2N-1} \left[h(\lambda_j(D_N)) - h(\Phi(\frac{2\pi j}{2N})) \right] = 0$$

for any $h \in C[-2\pi, 2\pi]$.

Therefore, if

$$\Phi_{min} > 0, \tag{17}$$

then the matrix of the system (9) is positive definite, which leads to the existence and uniqueness of the solution of (9), and the inverse problem as well. If we have large enough number of data points, then we can calculate the generating function $\Phi(x)$ as the inverse Fourier transform with sufficient accuracy and use the condition (16).
We should mention, that both conditions (14) and (17) can be used together or independently from each other in order to estimate the ability to obtain accurate approximation of inverse problem's solution from the given data. We should also mention, that both results can be modified for the two-dimensional case in the same manner. Accurate modification of considered methods will be published later elsewhere.

References

[1] Goupillaud, P. (1961). An approach to inverse filtering of nearsurface layer effects from seismic record. *Geophysics* **26**, 754–760.

[2] Kunetz, G. (1961). Essai d'analyse de traces sismiques. *Geophysical Prospecting* **9**, No. 3, 317–341.

[3] Alekseev, A. S. and Dobrinskii, V. I. (1975). Questions of practical application of dynamical inverse problems of seismology. In: *Mathematical Problems of Geophysics*, Vol. 6, No. 2. Computer Center, Siberian Branch of USSR Academy Sci., Novosibirsk, pp. 7–53 (in Russian).

[4] Pariiskii, B. S. (1978). An economical method for the numerical solution of convolution equations. *USSR Computational Math. and Math. Phys.* **17**, No. 2, 208–211.

[5] Symes, W. W. (1979). Inverse boundary value problems and a theorem of Gel'fand and Levitan. *J. Math. Anal. Appl.* **71**, 378–402.

[6] Berryman, J. G. and Greene, R. R. (1980). Discrete inverse methods for elastic waves. *Geophys.* Vol. 45, 213–233.

[7] Burridge, R. (1980). The Gelfand — Levitan, the Marchenko and the Gopinath-Sondhi integral equation of inverse scattering theory, regarded in the context of inverse impulse-response problems. *Wave Motion* **2**, 305–323.

[8] Symes, W. W. (1981). Stable solution of the inverse reflection problem for a smoothly stratified elastic medium. *SIAM J. Math. Anal.* **12**, No. 3, 421–453.

[9] Santosa, F. (1982). Numerical scheme for the inversion of acoustical impedance profile based on the Gelfand — Levitan method. *Geophys. J. Roy. Astr. Soc.* **70**, 229–244.

[10] Case, K. M. and Kack, M. (1983). A discrete version of the inverse scattering problem. *J. Math. Phys.*. Vol 4, 594–603.

[11] Bube, K. (1984). Convergence of discrete inversion solutions. In: *Inverse Problems of Acoustic and Elastic Waves*, SIAM pp. 20–47.

[12] Kabanikhin, S. I. (1988a). *Linear Regularization of Multidimensional Inverse Problems for Hyperbolic Equations.* Preprint No. 27. Institute Math., Siberian Branch of USSR Academy Sci., Novosibirsk (in Russian).

[13] Belonosov V.S., Skazka V.V. The inverse dynamic problem of seismic sounding low-frequency regularization. Applied Mathematics Letters, 21(1), pp. 95-100, 2008

[14] Gladwell, G. M. L. and Willms, N. B. (1989). A discrete Gel'fand-Levitan method for band-matrix inverse eigenvalue problems. *Inverse Problems.* Vol. 5, 165–179.

[15] Kabanikhin, S. I. (1990). On linear regularization of multidimensional inverse problems for hyperbolic equations. *Sov. Math. Dokl.* **40**, No. 3, 579–583.

[16] Natterer, F. (1994). A discrete Gelfand — Levitan theory. *Technical report, Institut fuer Numerische und instrumentelle Mathematik.* Universitaet Muenster, Muenster, Germany.

[17] Kabanikhin S.I., Bakanov G.B. A discrete analogue of the gel'fand-levitan method // (1997) Doklady Mathematics. T. 56, No 2. C. 670–673.

[18] Kabanikhin S. I. and Bakanov, G. B. (1999). A discrete analogue of the Gelfand — Levitan method in a two-dimensional inverse problem for a hyperbolic equation // *Siberian Math. J.* **40**, no. 2, 262–280.

[19] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Boundary control and Gelfand — Levitan — Krein methods in inverse acoustic problem // (2004) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 12 (2), pp. 125–144.

[20] Kabanikhin S. I., Satybaev A. D., Shishlenin M. A. Direct methods of solving inverse hyperbolic problems. 2004. VSP/BRILL, the Netherlands.

[21] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Numerical algorithm for two-dimensional inverse acoustic problem based on Gelfand — Levitan — Krein equation // (2011) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 18 (9), pp. 979–995.

[22] Kabanikhin, S.I., Novikov, N.S., Oseledets, I.V., Shishlenin, M.A. Fast Toeplitz linear system inversion for solving two-dimensional acoustic inverse problem // (2015) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 23 (6), pp. 687–700.

[23] Kabanikhin, S.I., Shishlenin, M.A. Two-dimensional analogs of the equations of Gelfand, Levitan, Krein, and Marchenko // (2015) Eurasian Journal of Mathematical and Computer Applications, 3 (2), pp. 70–99.

[24] Kabanikhin, S.I., Sabelfeld, K.K., Novikov, N.S., Shishlenin, M.A. Numerical solution of the multidimensional Gelfand — Levitan equation // (2015) Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 23 (5), pp. 439–450.

[25] Kabanikhin, S.I., Sabelfeld, K.K., Novikov, N.S., Shishlenin, M.A. Numerical solution of an inverse problem of coefficient recovering for a wave equation by a stochastic projection methods. // (2015) Monte Carlo Methods and Applications, 21 (3), pp. 189–203.

[26] Chan, R. and Jin, X. An Introduction to Iterative Toeplitz Solvers, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007

Galitdin Bakanov — Dr. Phys.-Math.Sci.,
Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University;
e-mail:galitdin.bakanov@ayu.edu.kz;
Sergey Kabanikhin — Dr. Phys.-Math.Sci., director of ICMMG SB RAS;
e-mail: ksi@sscc.ru;
Nikita Novikov — junior research fellow of ICMMG SB RAS;
e-mail: novikov-1989@yandex.ru;
Maxim Shishlenin — Dr. Phys.-Math.Sci., senior research fellow of ICMMG SB RAS;
e-mail: mshishlenin@ngs.ru.
Received — May 30, 2017.

ОЦЕНКА УПОРЯДОЧЕНИЙ ДЛЯ ПЕРЕПОСТРОЕНИЯ БАЗИСОВ ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ.

Г. И. Забиняко

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 519.852.61

Рассматриваются версии упорядочений для перепостроения базисов, реализованные в пакете программ линейного программирования. На основе решения тестовых задач линейного программирования и решения систем линейных алгебраических уравнений проводится сравнительный анализ алгоритмов упорядочения. Рассматриваются упорядочения ориентированные на обеспечение численной устойчивости и разреженности результирующих LU-разложений базисов.

Ключевые слова: линейное программирование, модифицированный симплекс-метод, перепостроение базисных матриц, LU-мультипликативное представление базисных матриц, упорядочения базисных матриц.

Введение

Рассматривается применение модифицированного симплекс-метода [1] для решения задач линейного программирования (ЛП): $\min(c,x)$ при условиях $Ax = b, \alpha \le x \le \beta$, где A — матрица размера $m \times n, n \ge m$, а векторы $x, \alpha, \beta \in R^n, b \in R^m$. Предполагается, что матрица A — разреженная. На итерациях модифицированного симплекс-метода при замещении базисного столбца небазисным осуществляется рекурентный пересчет LU представления текущей базисной матрицы, либо рекурентный пересчет матрицы, обратной к текущей базисной $U^{-1}L^{-1}$. В результате выполнения итерации накапливаются ошибки округления, увеличивается объем памяти, занятой мультипликативным представлением базисных матриц. Поэтому наступает момент когда нужно заново построить LU либо $U^{-1}L^{-1}$ — разложения согласно списка базисных переменных на данный момент. На этапе перепостроения базиса к мультипликативному представлению LU можно предъявить некоторые требования по устойчивости и разреженности.

Пакет программ ЛП-ВЦ [2] кроме процедур численного решения задач содержит программное обеспечение по логическому контролю и преобразованию входного MPS-формата [1] во врутренний — столбцовый разреженный формат. Таким образом пользователям пакета представляется некоторый технологический цикл решения задач ЛП.

В пакете ЛП-ВЦ обновление на итерациях LU мультипликативного представления осуществляется по алгоритму Форреста-Томлина [3].

Первоначально на этапе перепостроения базисов у нас использовалась процедура P^3 (Preassigned Pivot Procedure). Процедура P^3, предложенная в [4], представляет собой эвристический метод приведения с помощью перестановок строк и столбцов базисную матрицу B к виду, по возможности наиболее близкому нижней треугольной матрице. При этом делается попытка минимизировать как число столбцов, имеющих ненулевые элементы над главной диагональю, так и количество ненулей в этих столбцах над главной диагональю. Столбцы, которые не имеют ненулевых элементов над главной диагональю, называются нормальными, а которые имеют — столбцами-выступами.

После упорядочения строк, столбцов ведущих элементов выбираются на главной диагонали в порядке сверху вниз. При этом мультипликаторы нормальных столбцов полностью определяются с помощью ссылки на номер столбца и ведущей строки исходной матрицы A. Мультипликаторы столбцов-выступов получаются после их умножения справа на матрицу $\bar{L} = L_k^{-1}, \ldots, L_1^{-1}$, где L_i^{-1} — мультипликаторы, построенные на предыдущих шагах ($i = 1, \ldots, k$).

Обеспечить численную устойчивость разложения в процедуре P^3 достаточно трудно. После получения списка ведущих элементов перед формированием мультипликаторов можно воспользоваться стандартным

контролем ведущих элементов на устойчивость и отложить использование нормального столбца или столбца-выступа, если ведущий элемент α_i не удовлетворяет неравенству $|\alpha_i| \geq u\alpha_{\max},\ 0 < u < 1,\ \alpha_{\max} = \max\limits_{k \in K} |\alpha_k|$, K — множество индексов, которые не использовались для назначения ведущих элементов. В конце процесса разложения отложенные столбцы следует обработать, используя частичный выбор в столбце. В результате возрастает заполненность мультипликативного представления, и растут временные затраты на решение задач.

Далее в пакете ЛП-ВЦ на этапе перепостроения базисов был реализован подход принятый, в настоящее время, для решения СЛАУ с разреженными матрицами. Предварительное назначение ведущих элементов получается решением задачи назначения [5], которое обеспечивает определение максимального произведения модулей элементов $\max \bigcap\limits_{i,j \in T} |b_{ij}|$, где индексы i, j принадлежат искомой трансверсали T, а $b_{i,j}$ — элементы текущей базисной матрицы.

Обновление мультипликативного LU представления на итерациях симплекс-метода по методу Форреста-Томлина в вопросе численной устойчивости уступает методу Бартелса-Голуба [6]. Метод Бартелса-Голуба в программной реализации требует использования сложных динамических структур данных.

Повысить численную устойчивость расчетов на итерациях симплекс-метода можно с помощью алгоритма симплекс-метода с использованием двойного базиса. В этом алгоритме на итерациях не требуется в явном виде обновлений LU-разложений. Решения, полученные с фиксированными факторами LU (полученными на этапе перепостроения базисов), корректируются с помощью небольших вспомогательных матриц. Этот алгоритм впервые был предложен [7] и там же рассмотрена программная реализация, в которой на каждой итерации требуется четыре обращения к B_0^{-1} вместо двух обращений к B_k^{-1} в стандартном модифицированном симплекс-методе (здесь B_0^{-1} получена на этапе перепостроения, а B_k^{-1} — в результате k обновлений на итерациях симплекс-метода). В [8] рассмотрена реализация в которой за счет использования дополнительных массивов оперативной памяти не требуется два дополнительных обращения к B_0^{-1}. Нами также был реализован [9] экспериментальный вариант программы алгоритма с использованием двойного базиса. Алгоритм симплекс-метода с использованием двойного базиса в программной реализации не требует сложных структур данных, LU-факторы представляются в стандартном столбцовом разреженном формате. Алгоритм обладает хорошим быстродействием. Единственным ограничивающем фактором для применения в практике являются повышенные требования к объемам оперативной памяти.

Дальше рассмотрим алгоритмы упорядочения, отвечающие за численную устойчивость и разреженность LU-разложений на этапе перепостроения базисов, реализованные в пакете программ ЛП-ВЦ. На основе численных экспериментов проанализируем эффективность алгоритмов. Все численные эксперименты, рассмотренные в этой заметке, выполнялись в Сибирском суперкомпьютерном центре на сервере SL390sG7 с тактовой частотой процессорных элементов 2.93 Ггц. Все вычисления проведены в однопроцессорном режиме.

1 Предварительное определение ведущих элементов

Поиск номеров ведущих элементов осуществляется на основе построения трансверсали из условия максимизации произведения модулей ее элементов [8]. Множество пар индексов из трансверсали обозначим через T. Если $|T| = m$, то, используя набор индексов T можно построить матрицу перестановок P по правилу $p_{ij} = 1$ для $i, j \in T$ и $p_{ij} = 0$, если $i, j \notin T$. Тогда матрица $\bar{A} = P^\top A$ имеет главную диагональ, составленную из элементов a_{ij} для $i, j \in T$.

Задача построения трансверсали T, отвечающей максимуму $\Pi_{i,j \in T} |a_{ij}|$, сводится к решению задачи назначения. Рассмотрим случай выбора ведущих элементов в столбцах. Сформируем вектор $\bar{a}$ из компонент $\bar{a}_j = \max_{i=1,\ldots,m} |a_{ij}|$ для $j = 1, \ldots, m$. Построим вспомогательную матрицу C с элементами:

$$c_{ij} = \begin{cases} \log \bar{a}_j - \log |a_{ij}|, & \text{если } a_{ij} \neq 0, \\ +\infty & \text{иначе.} \end{cases}$$

Задача определения трансверсали сводится к решению следующей задачи назначения:

$$\begin{aligned} &\text{найти} && \min \textstyle\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} c_{ij} x_{ij} \\ &\text{при ограничениях} && \sum_{j=1}^{m} x_{ij} = 1,\ i = 1, \ldots, m; \\ & && \sum_{i=1}^{m} x_{ij} = 1,\ j = 1, \ldots, m; \\ & && x_{ij} \in \{0, 1\} \text{ для } i, j = 1, \ldots, m. \end{aligned}$$

Для выбора алгоритма решения задач назначения мы использовали обзор [10]. Для тестирования выбрали прямо-двойственные алгоримы назначения, теоретическая оценка трудоемкости у которых для плотных матриц одинаковая и составляет $O(n^3)$. В этом классе алгоритмов выделяется фраза предварительной обработки для определения допустимого двойственного решения и начального (частного) решения по исходным переменным.

Если в приведенной выше задаче булева программирования ослабить требования $x_{ij} = 0$ или 1 для $i, j = 1, \ldots, n$, заменив их на $x_{ij} \geq 0$, то придем к следующей двойственной задаче:

$$\begin{aligned} &\text{максимизировать} && \sum_{i=1}^{n} u_i + \sum_{j=1}^{n} v_j, \\ &\text{при ограничениях} && c_{ij} - u_i - v_j \geq 0 \end{aligned}$$

для $i, j = 1, \ldots, n$. Таким образом, двойственная задача состоит в максимизации сумм двойственных переменных при условиях неотрицательности приведенных затрат. Приведенные затраты на отдельных этапах алгоритма выступают в качестве новых цен, т.е. c_{ij} заменяются на $\bar{c}_{ij} = c_{ij} - u_i - v_j$.

Первым прямо-двойственным алгоритмом с полиномиальной оценкой трудоемкости является венгерский алгоритм [11]. В венгерском алгоритме вначале определяются оценки $u_i = \min\limits_{j=1,\ldots,n} c_{ij}$ для $i = 1, \ldots, m$; затем $v_j = \min\limits_{i=1,\ldots,n} (c_{ij} - u_i)$ для $j = 1, \ldots, n$. Начальное решение по исходным переменным: $x_{ij} := 1$, если $c_{ij} - u_i - v_j = 0$. Пусть таким образом удалось задать k переменных с $x_{ij} = 1$, если $k = n$, то задача решена. В случаях, когда $k < n$ для решения задачи необходимо $L = n - k$ раз обратится к процедуре определения кратчайшего увеличивающегося пути [10].

В прямо-двойственных алгоритмах [11] вводится понятие допустимых преобразований матрицы C. Преобразование S матрицы $C = \{c_{ij}\}$ в матрицу $\tilde{C} = \{\tilde{c}_{ij}\}$ называется допустимой, если для любых подстановок $\phi(i)$ из $\{1, 2, \ldots, n\}$ имеет место равенство $\sum\limits_{i=1}^{n} c_{i\phi_{(i)}} = \sum\limits_{i=1}^{n} \tilde{c}_{i\phi_{(i)}} + z(s)$, где $z(s)$ — постоянная зависящая только от преобразования S.

Для использования в ЛП-ВЦ был выбран алгоритм [12]. В этом алгоритме на начальном этапе делается попытка с помощью допустимых преобразований максимизировать количество назначений. Пусть уже получено некоторое допустимое двойственное решение и некоторое частное решение по исходным переменным. Для каждой назначенной строки i такой, что для этой строки предписан столбец j_1 приводятся следующие преобразования: определяется $\mu = \min\limits_{j \neq j_1} c_{ij} - v_j$ и переопределяются двойственные переменные v_{ij} и u_i следующим образом: $v_{j_1} = v_{j_1} - (\mu - u_i), u_i = \mu_i$. Аналогичные преобразования проводятся для неназначенных строк, в результате которых переопределяются двойственные переменные и, возможно, пополняется количество назначенных строк. На сайте [13] помещена для свободного доступа процедура на Фортране, в которой реализован алгоритм [12] для целочисленных матриц. Эта процедура была нами адаптирована для вещественных матриц.

Для этого алгоритма масштабирование, которое получается в результате построения матрицы C из базисной матрицы B, позволяет назначить большинство x_i на предварительном этапе. В таблице на примере тестовых матриц из [14] показывается различие в количестве назначенных x_i на начальном этапе для исходных матриц A и полученных из них матриц C.

В табл. 1 иллюстрируется применение прямо-двойственного метода решения задач назначения.

Таблица 1: Зависимость алгоритма назначения от масштабирования матриц.

Исходная матрица A						Матрица C		
название	n	nz	$\max\|a_{ij}\|$	L	t_a	$\max\|c_{ij}\|$	L	t_c
e40r5000	17281	553956	$0.41 \cdot 10^2$	6819	14.29	46.1	1338	5.48
fidap035	19716	218308	$0.10 \cdot 10^9$	1211	13.38	36.9	50	0.83
fidapm11	22294	623554	$0.53 \cdot 10^0$	3787	45.93	10.4	1185	6.98
rim	22560	1014951	$0.27 \cdot 10^5$	3582	75.35	55.5	56	0.82
sme3Db	29067	2081063	$0.32 \cdot 10^5$	1262	36.73	51.2	0	0.02
mixtank_new	29957	1995041	$0.10 \cdot 10^2$	7925	35.83	10.6	126	1.79
invextr1	30412	1793881	$0.30 \cdot 10^9$	4489	462.21	60.6	136	10.93
twotone	120750	1.224224	$0.64 \cdot 10^4$	3448	43.58	51.8	566	0.53
FEM_3D_therm	147900	3489300	$0.29 \cdot 10^0$	13315	449.84	9.0	0	0.04
freescale1	3428755	18920347	$0.62 \cdot 10^2$	428456	32651.18	35.6	0	0.53
circuit5m	5558328	59524291	$0.10 \cdot 10^4$	5161001	8470.88	42.0	13	5.23

В последней строке табл. 1 приведены результаты для матрицы с $n = 5558328$, где решение задачи назначения с коэффициентами исходной матрицы A требует выполнить $L = 5161001$ обращений к процедуре определения кратчайшего увеличивающего пути, а для построенной из A матрицы C достаточно было $L = 13$. В некоторых примерах получено $L = 0$, т.е. решение задачи получено на начальном этапе. При решении задачи ЛП средней размерности $n \times m = 3000 \times 5000$ максимальное значение для величины L колеблется в интервале 30–60 притом, что в некоторых задачах ЛП требуется выполнить сотни обращений к задачам назначения.

2 Симметрические перестановки обеспечения разреженности

Симметрические перестановки предназначены для определения очередности использования предварительно назначенных ведущих элементов с целью уменьшения заполненности LU-мультипликативного представления базисных матриц на этапе перепостроения. В пакете ЛП-ВЦ для этих целей использовалась процедура из библиотеки пакета программ METIS [15].

Пакет программ METIS ориентирован на использование в UNIX-системах. Для применения в WINDOWS нужно провести дополнительную работу по адаптации среды. Кроме того, при эксплуатации пакета программ ЛП-ВЦ на компьютерах PC использование METIS требует дополнительно достаточно больших объемов оперативной памяти. В связи с этим была осуществлена попытка заменить пакет METIS на компактную процедуру минимальной степени [16]. Примеры применения алгоритмов в решении тестовых задач ЛП приведены в табл. 2.

Таблица 2: Сопоставление упорядочений в ЛП с помощью МЕТИС и алгоритма минимальной степени.

				metis		mmd	
N пп	m	n	%	K	V_0	K	V_0
1	626	1376	0.70	54	21920	54	19901
2	820	1571	0.81	96	29574	90	29932
3	940	1988	0.80	51	29255	50	26120
4	1000	8806	0.32	120	14312	127	13858
5	1090	1880	0.33	6	5877	7	6077
6	1309	1681	0.31	11	7104	12	7257
7	1480	2480	0.24	9	7885	9	8057
8	2324	3489	0.17	110	22865	112	19881
9	3068	3678	0.12	53	25462	48	24488
10	3516	4067	0.10	71	26065	93	21071

В этой таблице:
— K – указывает количество обращений к перепостроению базисов за все время решения ЛП;
— V_0 – максимальный объем данных занятый LU-мультипликативным представлением по всем перепостроениям базисов, выполненным для данной задачи.

Результаты табл. 2 показывают, что оба алгоритма упорядочения при решении задач ЛП небольшой и средней размерности обеспечивают примерно одинаковые объемы данных, занятые LU-мультипликативным представлением на этапе перепостроения базисов.

Можно предположить, что для разных видов структур заполненности алгоритмы будут давать разные результаты. В пакете METIS на основе эвристик определяется минимальный разделитель [17]. В алгоритме минимальной степени на основе исходного графа, используя понятие достижимых множеств, на очередном шаге выбирается вершина минимальной степени. Применение неразличных вершин позволяет экономить на количестве обращений к вычислению степеней вершин графа [16].

В табл. 3 на примерах решения СЛАУ иллюстрируются различия в применении алгоритмов из пакета METIS и минимальной степени.

Таблица 3: Сопоставление упорядочений в СЛАУ с помощью МЕТИС и алгоритма минимальной степени.

N пп	название	m	nz	$\%nz$	Алгоритм минимальной степени			Подпрограмма METIS		
					t_{sec}	K	$\|V\|$	t_{sec}	K	$\|V\|$
1	psmigr_1	3140	543162	5.51	1.97	1	5385105	0.08	3	5665747
2	heart1	3557	1387773	10.97	0.01	4	3077775	0.02	14	3978359
3	vibrobox	12328	177578	0.12	0.05	0	650413	0.10	0	635260
4	shermAC	18510	145149	0.04	0.25	87	360122	0.07	57	328870
5	nmos3	18588	386594	0.11	0.01	4803	27195920	0.07	2674	9224594
6	tsopf	18696	4396289	1.26	8.55	1	9669146	1.32	0	13905773
7	fidap035	19716	218308	0.06	0.02	43	1084069	0.11	50	1072812
8	chipool	20082	281150	0.04	0.04	0	9233863	0.17	0	6616613
9	ns3Da	20414	1679599	0.40	0.09	16	10610358	0.23	11	16220422
10	rim	22560	1014951	0.20	0.10	4108	22978004	0.17	4181	21989901
11	af23560	23560	484256	0.09	0.09	10	10160550	0.28	11	8708760
12	zahao2	33861	166453	0.01	0.11	0	3791316	0.13	0	2983091
13	rajat15	37261	443573	0.03	0.18	104	1738815	0.31	117	1730298
14	epb3	84617	463625	0.03	0.02	0	4342086	0.30	0	3617287
15	rajat20	86916	605045	0.06	0.96	42	1004189	0.93	44	1141720
16	to2so2b	115976	1033473	0.18	0.03	0	4589278	0.47	0	5156241
17	ben1	245874	6698185	2.06	0.14	0	34810105	0.31	0	34292142

Обозначения табл. 3:
— K – количество отложенных столбцов для их разложения с использованием частичного выбора в столобце;
— V – объем памяти занятый мультипликаторами.

Следует пояснить возникновение показателя K. Использование методологии из [8] позволяет строить современные пакеты программ решения СЛАУ без использования динамических массивов. Для этого после упорядочений на устойчивость и разреженность проводится символическое разложение которое дает точные значения необходимого объема оперативной памяти. При перестроении LU-разложении базисов такой универсальности достичь не удается [18]. Если очередной предписанный упорядочениями столбец базисной матрицы не удовлетворяет стандартным условиям на устойчивость, то полученное разложение запоминается, а в конце процесса все отложенные столбцы обрабатываются с использованием частичного выбора в столбце. Отсюда следует, что при больших значениях величины K, трудно сравнить эффективность алгоритмов упорядочения.

Сравнение результатов из табл. 3 в строке 6 (матрица fsopf) и строке 9 (матрица ns3Da) наглядно показывают что для разных типов заполненности эффективность этих алгоритмов различна.

Заключение

В этой заметке анализируется эффективность и удобство программной реализации упорядочений, направленных на обеспечение численной устойчивости и разреженности на этапе перепостроения LU-разложений базисов ЛП.

Список литературы

[1] Муртаф Б. Современное линейное программирование. Теория и практика. М.: Мир, 1984.

[2] Забиняко Г.И., Котельников Е.А., Кобкова Т.М., Рожин В.Е. Программы линейного программирования ЛП-ВЦ. — Новосибирск, 1995. — (Отчет / ВЦ СО РАН; № ГР.01.9.30001317; Инв. № 02.9.50003757).

[3] Forrest J.J.H. , Tomlin J.A. Updating triangular factors of the basis to maintain sparsity in the product form simplex method // Math. Program., 1972, **2**, p. 263–278.

[4] Hellerman E., Rarick D. C. Reinversion with the preassigned pivot procedure // Math. Prog. 1971. N 1. P. 195–216.

[5] Olschowka M., Neumaier A. A new pivoting strategy for Gaussian elimination // Linear Algebra Appl. 1996. V. 240. No 1–3. P. 131–151.

[6] Bartels R.H., Golub G.H.. The simplex method of linear programming using the LU decomposition // Commun. ACM, 1969, 12, p. 266–268.

[7] Bisschop J., Meeraus F. Matrix augmentation and partitioning in the updating of the basis inverse // Math. Program., 1977, **13**, p. 241–254.

[8] Eldersveld S.K., Saunders M.A. A block-LU update for large-scale linear programming // SIAM J. Matrix Anal. Appl., 1992, V. 13, № 1, p. 191–201.

[9] Забиняко Г. И. Алгоритм симплекс-метода с использованием двойного базиса // СибЖВМ. 2015. Т. 18, № 4. С. 349–359.

[10] Dell'Amico M., Toth P. Algorithms and codes for dense assignment problems: the state of the art // Discrete Appl. Math. 2000. V. 100. P. 17–48.

[11] Burkard R.E., Qela E. Linear Assignment Problems and Extensions // Handbook of combinatorial optimization D.-Z. Du and P.M. Pardalos (Eds.), 1999, pp. 75–149

[12] Jonker R., Volgenant A. A shortest augmenting path algorithm for dense and sparse linear assignment problems // Computing. 1987. V. 38. P. 325–340.

[13] Jonker R., Volgenant A. Linear Assignment Problem.
URL: `http://www.assignmentproblems.com/LAPJV.htm`.

[14] Davis T.A. University of Florida sparse matrix collection.
URL: `http://www.cise.ufl.edu/~davis/sparse`.

[15] Karypis G., Kumar V. METIS. A software package for partitioning unstructured graphs, partitioning meshes, and computing fill-reducing orderings of sparse matrices (Version 4.0).
URL: `http://www.cs.umn.edu/~karypis`.

[16] Liu J.W.H. Modification of the Minimum-Degree Algorithm by Multiple Elimination // ACM Transactions on Mathematical Software, Vol. 11, No. 2, June 1985.

[17] А.Джордж, Дж.Лю Численное решение больших разреженных систем уравнений. М.: Мир, 1984.

[18] Забиняко Г.И. Перепостроение обратных матриц // Сиб.журн.индустр.матем. 2009. Т. 12, № 3. С. 41–51.

Герард Идельфонович Забиняко — к.т.н., вед. науч.сотр. Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: zabin@rav.sscc.ru.

Дата поступления — 24 мая 2017 г.

Содержание

СРАВНЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ДВУХ БЫСТРЫХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ВИХРЕВОГО ВЛИЯНИЯ ПРИ РАСЧЕТЕ ДВУМЕРНЫХ НЕСЖИМАЕМЫХ ТЕЧЕНИЙ ВИХРЕВЫМИ МЕТОДАМИ
Е. Н. Авдеева, К. С. Кузьмина, И. К. Марчевский ... **3**

СТАТИСТИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ СТОХАСТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ПУАССОНОВСКОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ
Т. А. Аверина, К. А. Рыбаков ... **10**

ИССЛЕДОВАНИЕ АЛГОРИТМОВ И МЕТОДОВ БАЛАНСИРОВКИ НАГРУЗКИ И ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ СЕТЕЙ МАССОВОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ
К. А. Айдаров, Г. Т. Балакаева ... **17**

ЭЛЕКТРОДИНАМИКА ЕСТЕСТВЕННОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ И ЕЁ ПРИЛОЖЕНИЯ
В. В. Аксёнов ... **22**

ЧИСЛЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ В ЗАДАЧЕ ГЕОЭЛЕКТРИКИ ЛИНИЕЙ С ПОТЕРЯМИ
Ю. В. Анищенко, А. Дж. Сатыбаев ... **28**

ОЦЕНКА ЧИСЛА ОБУСЛОВЛЕННОСТИ БОЛЬШОЙ ПЛОХО ОБУСЛОВЛЕННОЙ МАТРИЦЫ МЕТОДОМ МОНТЕ — КАРЛО
В. С. Антюфеев ... **34**

ОБ ОДНОЙ МОДЕЛИ ФОРМИРОВАНИЯ НЕЛОКАЛЬНОСТЕЙ В АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ
Н. С. Аркашов, В. А. Селезнев ... **40**

АНАЛИЗ РЕШЕНИЙ СТОХАСТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БЮРГЕРСА МЕТОДОМ МОНТЕ — КАРЛО
С. С. Артемьев, А. А. Иванов ... **45**

МЕТОДЫ ОЦЕНКИ ПРОЕКТОВ И РЫНКОВ СО СВОБОДНЫМ ВЫБОРОМ ОСНОВНЫХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ
С. Н. Астраков, А. Г. Квашнин, Ю. С. Отмахова ... **51**

СУРРОГАТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРАБОТКИ НЕФТЯНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ ПРИ ЗАБОЙНОМ ДАВЛЕНИИ НИЖЕ ДАВЛЕНИЯ НАСЫЩЕНИЯ
И. В. Афанаскин, С. Г. Вольпин, П. В. Ялов ... **58**

О ТИПАХ СКРЫТЫХ ДЕФЕКТОВ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ВИДОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОКРЫТИЯ И ОСНОВАНИЯ
О. М. Бабешко, Е. М. Горшкова, А. Г. Федоренко, О. В. Евдокимова, Д. А. Хрипков, С. Б. Уафа ... **66**

О ХАРАКТЕРЕ НАРАСТАНИЯ НАПРЯЖЕНИЙ ДЛЯ РАЗНЫХ ТИПОВ СТАРТОВЫХ ЗЕМЛЕТРЯСЕНИЙ
В. А. Бабешко, А. Г. Федоренко, Е. М. Горшкова, О. В. Евдокимова, А. С. Мухин и др. ... **73**

ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУХ АЛГОРИТМОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОДНОРОДНЫХ СЛУЧАЙНЫХ ПОЛЕЙ С ЧЕТЫРЕХПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИЕЙ
Г. А. Бабичева, Н. А. Каргаполова ... **78**

О ПОГРЕШНОСТИ АППРОКСИМАЦИИ ПРОИЗВОДНЫХ ДЛЯ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ, ПОСТРОЕННЫХ НА СИМПЛЕКСАХ РАЗМЕРНОСТЕЙ 3 И 4
Н. В. Байдакова ... **83**

ЦИКЛЫ ДИСКРЕТНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ ЦИРКУЛЯНТНОГО ТИПА
Ц. Ч.-Д Батуева ... **88**

АНАЛИЗ ДАННЫХ В ПРОБЛЕМЕ ДЕШИФРОВКИ ЗНАМЕННЫХ ПЕСНОПЕНИЙ
И. В. Бахмутова, В. Д. Гусев, Л. А. Мирошниченко, Т. Н. Титкова ... **93**

ОБ ИНТЕРПОЛИРОВАНИИ L-СПЛАЙНАМИ ФУНКЦИЙ С БОЛЬШИМИ ГРАДИЕНТАМИ В ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ
И. А. Блатов, А. И. Задорин, Е. В. Китаева ... **100**

ПРИЛОЖЕНИЕ ДИХОТОМИИ МАТРИЧНОГО СПЕКТРА К ИССЛЕДОВАНИЮ УСТОЙЧИВОСТИ ТЕЧЕНИЙ
М. А. Блинова, Н. И. Попова, Э. А. Бибердорф ... **106**

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С НЕНУЛЕВЫМ УГЛОМ ВСТРЕЧИ
М. А. Боронина, В. А. Вшивков ... **113**

СЕРВИСЫ НАУЧНОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ «АКТИВНАЯ СЕЙСМОЛОГИЯ»
Л. П. Брагинская, А. П. Григорюк, В. В. Ковалевский ... **119**

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОЦЕНКИ ПО СТОЛКНОВЕНИЯМ ПРИ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ СМОЛУХОВСКОГО МЕТОДОМ МОНТЕ — КАРЛО
А. В. Бурмистров, М. А. Коротченко ... **126**

КОНТРОЛИРУЕМАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ ГИПЕРСПЕКТРАЛЬНЫХ ДАННЫХ ДИСТАНЦИОННОГО ЗОНДИРОВАНИЯ ЗЕМЛИ
А. А. Бучнев, В. П. Пяткин ... **133**

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ТРЕХМЕРНЫХ ТЕПЛОВЫХ ПОЛЕЙ В ГРУНТЕ ОТ РАЗЛИЧНЫХ ИНЖЕНЕРНЫХ ОБЪЕКТОВ ФУНКЦИОНИРУЮЩИХ В ЗОНЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВЕЧНОЙ МЕРЗЛОТЫ
Н. А. Ваганова, М. Ю. Филимонов ... **137**

РЕГУЛЯРИЗИРОВАННОЕ ОБРАЩЕНИЕ ПОЛНЫХ ТЕНЗОРНЫХ МАГНИТНО-ГРАДИЕНТНЫХ ДАННЫХ
Я. Ван, Д. В. Лукьяненко, А. Г. Ягола ... **147**

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПРИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЯХ СКВАЖИН
В. В. Васин, Г. Г. Скорик ... **153**

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРИНЦИПА ЭКВИРАСПРЕДЕЛЕНИЯ В СТОХАСТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМАХ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ
А. В. Войтишек, Д. А. Прасол ... **160**

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ЧИСЛЕННОГО ПРОГНОЗА ОБЛЕДЕНЕНИЯ
М. А. Волкова, Н. К. Барашкова, И. В. Кужевская, Л.И. Кижнер, А. В. Старченко, А. А. Барт ... **167**

АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ ТОКА И ФОРМА ЯДРА ЧАСТИЦЫ В МЕТОДЕ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ
В. А. Вшивков, Е. А. Генрих ... **173**

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ ОПТИЧЕСКИХ ВИХРЕЙ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ПУЧКА СВЕТА ЧЕРЕЗ СЛОЙ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА
Р. В. Галёв, А. Н. Кудрявцев, С. И. Трашкеев **179**

ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУХФАЗНОЙ БЕСКОНЕЧНОЛИНЕЙНОЙ СИСТЕМЫ МАССОВОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ ТРЕБОВАНИЙ СЛУЧАЙНОГО ОБЪЕМА С ВХОДЯЩИМ ПРОСТЕЙШИМ ПОТОКОМ
А. А. Галилейская, Е. Ю. Лисовская **186**

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТОРМОЗНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ПОГЛОЩЕНИЕ АЛЬФВЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ ДИССИПАТИВНОЙ ПЛАЗМОЙ
М. Б. Гавриков, А. А. Таюрский **191**

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ГЕОФИЗИЧЕСКОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ
А. В. Глазунов, Е. В. Мортиков, В. Н. Лыкосов **197**

ИНТЕГРАЛЬНЫЙ ПОДХОД К РАЗРАБОТКЕ АЛГОРИТМИЧЕСКОГО И ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ЭКЗАФЛОПСНЫХ СУПЕРЭВМ: НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ
Б. М. Глинский, И. Г. Черных, И. М. Куликов, А. В. Снытников, А. Ф. Сапетина, Д. В. Винс **204**

КОМПАКТНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ — СТОКСА НА НЕРАВНОМЕРНЫХ СЕТКАХ
А. С. Глуховский, В. И. Паасонен **211**

УСЛОВИЯ СУЩЕСТВОВАНИЯ УСТОЙЧИВОГО ЦИКЛА В ОДНОЙ МОДЕЛИ ГЕННОЙ СЕТИ
В. П. Голубятников **218**

МЕЗОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТМОСФЕРНЫХ ПРОЦЕССОВ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРЕ ТГУ СКИФ CYBERIA
В. П. Горбатенко, А. В. Старченко **224**

БИКРИТЕРИАЛЬНЫЙ ГЛОБАЛЬНЫЙ ПОИСК В ЗАДАЧЕ ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССА ФЛОТАЦИИ МЕДНО-МОЛИБДЕНОВЫХ РУД
Т. В. Груздева, А. В. Ушаков **230**

СРАВНЕНИЕ БЛИЗКИХ СИМВОЛЬНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ
В. Д. Гусев, Л. А. Мирошниченко, Т. Н. Титкова **237**

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА СЛУЧАЙНОГО БЛУЖДАНИЯ ПО СФЕРАМ В СОЧЕТАНИИ С МЕТОДОМ ЭЙЛЕРА ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕПЛОВОГО СОСТОЯНИЯ СОТОВЫХ ТЕПЛОЗАЩИТНЫХ КОНСТРУКЦИЙ
С. А. Гусев, В. Н. Николаев **244**

УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ГЕМОДИНАМИКИ
С. Г. Давыдова, Э. А. Бибердорф **250**

МОДЕЛЬ ЛИНЗЫ ДЛЯ ТРАССИРОВКИ ЛУЧЕЙ С УЧЕТОМ ПОЛЯРИЗАЦИИ
В. А. Дебелов, К. Г. Кушнер **256**

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАКРУЧЕННЫХ ТУРБУЛЕНТНЫХ СТРУЙНЫХ ТЕЧЕНИЙ
А. Г. Деменков, Г. Г. Черных, С. Н. Яковенко **262**

ЧИСЛЕННЫЕ ОПЕРАЦИИ НАД ЯДЕРНЫМИ ОЦЕНКАМИ В ЗАДАЧЕ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ФУНКЦИИ ПЛОТНОСТИ ВЕРОЯТНОСТИ
Б. С. Добронец, О. А. Попова **269**

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ, ПОЛУЧАЕМЫХ В РЕЗУЛЬТАТЕ КОНЕЧНОЭЛЕМЕНТНОЙ АППРОКСИМАЦИИ ТРЕХМЕРНЫХ ЗАДАЧ МАГНИТОТЕЛЛУРИЧЕСКОГО ЗОНДИРОВАНИЯ
П. А. Домников **276**

О МОДЕЛЯХ ГОРНЫХ ВЫРАБОТОК С МНОЖЕСТВЕННЫМИ ШТОЛЬНЯМИ И МАТЕРИАЛОВ С МНОЖЕСТВЕННЫМИ ПОЛОСТЯМИ
О. В. Евдокимова, А. Г. Федоренко, В. А. Бабешко, Г. Н. Уафа, А. В. Плужник и др. **282**

АЛГОРИТМЫ ИНТЕРПРЕТАЦИИ И ВИЗУАЛИЗАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ПОСТОЯННО ДЕЙСТВУЮЩЕГО МОНИТОРИНГА МЕСТОРОЖДЕНИЙ УГЛЕВОДОРОДОВ
Г. Н. Ерохин, К. С. Алсынбаев, В. М. Брыксин, В. В. Савеленко, В. И. Строков и др. **289**

ТЕХНОЛОГИЯ 3D МОДЕЛИРОВАНИЯ ГИДРОТОРМОЗНЫХ УСТРОЙСТВ ПУШЕЧНЫХ УСТАНОВОК
В. Р. Ефремов, А. С. Козелков, В. В. Курулин, Ю. Г. Нечепуренко, А. В. Саразов, А. С. Кривонос. **296**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКЕ ВРАЩАЮЩИМСЯ ПЛАСТИНЧАТЫМ ЭЛЕКТРОДОМ-ИНСТРУМЕНТОМ
В. П. Житников, Р. Р. Муксимова, А. А. Соколова **303**

УНИФИКАЦИЯ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОГО ПРОГРАММНО-АППАРАТНОГО КОМПЛЕКСА ТЕСТИРОВАНИЯ ПРОГРАММ УПРАВЛЕНИЯ НА ПРИМЕРЕ ЗАДАЧИ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ПРИКЛАДНОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ АСУ ТП ШАХТНЫМ КОНВЕЙЕРНЫМ ТРАНСПОРТОМ
С. С. Журавлев, В. В. Окольнишников, С. В. Рудометов, С. Р. Шакиров **308**

К ОПРЕДЕЛЕНИЮ НАПРЯЖЕННОСТИ РАЗНОТИПНЫХ БЛОКОВ ЛИТОСФЕРНЫХ ПЛИТ
М. В. Зарецкая **314**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ РАСЧЕТЕ КОНСТРУКЦИЙ, СОДЕРЖАЩИХ СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ МАТЕРИАЛЫ
А. В. Зеленский, И. М. Ступаков **318**

ИНФОРМАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ КИБЕРФИЗИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ
Д. Н. Зырянов, Н. Ф. Денисова **323**

РАЗНОСТНЫЙ АНАЛОГ ЭНТРОПИЙНОГО НЕРАВЕНСТВА ДЛЯ СХЕМЫ КАБАРЕ
Н. А. Зюзина, В. В. Остапенко **329**

КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ ОДНОЙ ПЕРЕОПРЕДЕЛЕННОЙ СТАЦИОНАРНОЙ СИСТЕМЫ, ВОЗНИКАЮЩЕЙ В ДВУХЖИДКОСТНОЙ СРЕДЕ
Х. Х. Имомназаров, М. В. Урев **336**

АНАЛИЗ РАДАРОГРАММ ОПЫТНОГО ОБРАЗЦА ГЕОРАДАРА НА МИШЕНЯХ В ЛАБОРАТОРНЫХ И ПОЛЕВЫХ УСЛОВИЯХ
К. Т. Искаков, С. А Боранбаев, А. Т. Кусаинова, О. К. Туенбаев **343**

О МЕТОДЕ ВЫСОКОГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРЯМЫХ И ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ГРАВИТАЦИОННОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ В СФЕРИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ
С. И. Кабанихин, И. М. Куликов, М. А. Шишленин **348**

ОБ ОДНОЙ МОДИФИКАЦИИ УРАВНЕНИЯ ГЕЛЬФАНДА — ЛЕВИТАНА
С. И. Кабанихин, Н. С. Новиков, М. А. Шишленин **357**

ВОССТАНОВЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ, ЗАВИСЯЩИХ ОТ ВРЕМЕНИ, В ДИНАМИЧЕСКИХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧАХ ПО НЕЛОКАЛЬНЫМ ДАННЫМ
С. И. Кабанихин, М. А. Шишленин **364**

КОЭФФИЦИЕНТНЫЕ ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ С ДАННЫМИ ВНУТРИ ОБЛАСТИ
С. И. Кабанихин, М. А. Шишленин **370**

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПЕРЕНОСА СОЛНЕЧНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ВОДНОЙ СРЕДЕ, ОБУСЛОВЛЕННЫХ МНОГОКРАТНЫМ РАССЕЯНИЕМ С УЧЕТОМ МОРСКОГО ВОЛНЕНИЯ
Е. Г. Каблукова, С. М. Пригарин **373**

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СЕЙСМИЧЕСКИХ ВОЛН ДЛЯ УПРУГИХ СРЕД С СУЩЕСТВЕННО НЕОДНОРОДНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ЗНАЧЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ
Д. А. Караваев **381**

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСА МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ С УЧЕТОМ ИХ ГОДОВОЙ НЕСТАЦИОНАРНОСТИ
Н. А. Каргаполова, В. А. Огородников **388**

РЕШЕНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ — КАРЛО ЗАДАЧ АЭРОКОСМИЧЕСКОГО ОПТИЧЕСКОГО ЗОНДИРОВАНИЯ ОКЕАНА
А. Б. Каргин, Б. А. Каргин, С. М. Пригарин **394**

МНОГОСПЕКТРАЛЬНЫЕ ПРОЕКЦИИ В ЗАДАЧЕ УТОЧНЕНИЯ ГРАНИЦ НА ИЗОБРАЖЕНИЯХ В ТОМОГРАФИИ
И. Г. Казанцев **401**

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ, УЛУЧШАЮЩИХ СХОДИМОСТЬ АНСАМБЛЕВОГО ФИЛЬТРА КАЛМАНА
Е. Г. Климова **405**

ВОССТАНОВЛЕНИЕ МАТРИЦЫ АЭРОЗОЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ ПО НАЗЕМНЫМ НАБЛЮДЕНИЯМ ПОЛЯРИЗОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
А. С. Корда, С. А. Ухинов **412**

ОСОБЕННОСТИ РАСЧЕТА ПРОЦЕССА ВЫТЕСНЕНИЯ НЕФТИ ГАЗОМ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ВЕРСИИ ПРОГРАММЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ
А. В. Королев, В. А. Бахтин, Н. В. Поддерюгина **419**

АЛГОРИТМЫ РАСЩЕПЛЕНИЯ В МЕТОДЕ КОНЕЧНЫХ ОБЪЕМОВ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ — СТОКСА
В. М. Ковеня **428**

ПРИМЕНЕНИЕ СХЕМЫ КАБАРЕ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ
О. А. Ковыркина, В. В. Остапенко **434**

СУПЕРВЫЧИСЛЕНИЯ В ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ ГЕОФИЗИКИ — ЦУНАМИ
А. С. Козелков, Р. М. Шагалиев, С. М. Дмитриев, Ю. Н. Дерюгин, А. А. Куркин и др. **441**

ГРАДИЕНТНЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ СОВМЕЩЕННОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ
О. И. Криворотько, С. И. Кабанихин **449**

ГЕОИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА КАЗАХСТАНА. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ГЕОИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ КАЗАХСТАНА.
О. И. Криворотько, С. И. Кабанихин, А. Т. Турарбек, М. А. Бектемесов, И. В. Маринин и др. **455**

КЛИЕНТ-СЕРВЕРНАЯ СИСТЕМА ВИЗУАЛИЗАЦИИ БОЛЬШИХ ОБЪЕМОВ ТРЕХМЕРНЫХ ДАННЫХ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
Е. О. Кривошеин, Н. В. Снытников **463**

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕУСТАНОВИВШЕГОСЯ ДВИЖЕНИЯ ВОДЫ В ДЕЛЬТЕ Р. ЛЕНЫ
А.И. Крылова, Е.А. Антипова **470**

ОБ УЧЕТЕ КРИВИЗНЫ ГРАНИЦЫ ОБТЕКАЕМОГО ПРОФИЛЯ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ РАСЧЕТНОЙ СХЕМЫ ВИХРЕВОГО МЕТОДА ПОВЫШЕННОЙ ТОЧНОСТИ
К. С. Кузьмина, И. К. Марчевский **477**

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ ЭКМАНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЯВНОЙ АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТУРБУЛЕНТНОСТИ
Л. И. Курбацкая, А. Ф. Курбацкий **484**

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОНИКАЮЩЕЙ ТУРБУЛЕНТНОЙ КОНВЕКЦИИ ОТ ПОВЕРХНОСТНОГО ИСТОЧНИКА ТЕПЛА В УСТОЙЧИВОЙ АТМОСФЕРЕ
Л. И. Курбацкая, А. Ф. Курбацкий **491**

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДВУХ АЛГОРИТМОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИКИ ЗАРЯЖЕННЫХ ПУЧКОВ
К. В. Лаговская, М. А. Боронина **498**

РАСЧЁТ ТЕПЛООТВОДА РЯДОМ С ТРЕЩИНАМИ, ОБРАЗОВАВШИМИСЯ ПРИ ИМПУЛЬСНОЙ ТЕПЛОВОЙ НАГРУЗКЕ
Г. Г. Лазарева, А. С. Аракчеев, А. А. Касатов, В. А. Попов, А. А. Васильев, Л. Н. Вячеславов и др. **504**

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КИНЕТИЧЕСКИ-СОГЛАСОВАННЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ С РЯДОМ СЕТОЧНЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ
Г. Г. Лазарева, А. Г. Максимова **509**

ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА КОМПЛЕКСНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ПЛАСТ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ ТГХВ БС
Г. Г. Лазарева, М. А. Шишленин, Р. А. Идиятуллин, Е. А. Федоров, В. Б. Заволжский и др. **514**

ВЕСОВЫЕ ОЦЕНКИ МЕТОДА МОНТЕ — КАРЛО ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРЯМЫХ И ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ОПТИКИ МУТНЫХ СРЕД
А. В. Лаппа, А. Е. Анчугова **521**

ИДЕНТИФИКАЦИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ КОИНФЕКЦИИ ТУБЕРКУЛЕЗА И ВИЧ В ЭНДЕМИЧНЫХ РАЙОНАХ
В. А. Латышенко, В. Н. Каштанова, О. И. Криворотько, С. И. Кабанихин **528**

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК СРЕДСТВО ОБЕСПЕЧЕНИЯ КОРРЕКТНОСТИ ВЫВОДОВ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ КРИТЕРИЕВ ОДНОРОДНОСТИ ДИСПЕРСИЙ В НЕСТАНДАРТНЫХ УСЛОВИЯХ
Б. Ю. Лемешко, И. В. Веретельникова **536**

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРИРОДНЫХ ПОЖАРОВ
Н. Э. Лепп **543**

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИВЫХ БЛЕСКА ЗАТМЕННОЙ ДВОЙНОЙ СИСТЕМЫ С АККРЕЦИОННЫМ ДИСКОМ
В. В. Лукин, М. П. Галанин, В. М. Чечеткин, К. Л. Маланчев **549**

РЕШЕНИЕ ЭВОЛЮЦИОННОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УТОЧНЕНИЯ ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ В ОБЛАСТЯХ СОЛЯНОЙ ТЕКТОНИКИ
Б. В. Лунёв, В. В. Лапковский, М. С. Канаков, А. С. Застрожнов **556**

СЕТЕВЫЕ МОДЕЛИ СТРАТЕГИЧЕСКОГО ПЛАНИРОВАНИЯ ПРОЕКТОВ
О. А. Ляхов **563**

НЕЛИНЕЙНОЕ УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ С ОПЕРАТОРОМ ЛИЗЕГАНГА НА ОТРЕЗКЕ
Б. А. Марков **568**

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КОНФОРМНЫХ И НЕКОНФОРМНЫХ КОНЕЧНОЭЛЕМЕНТНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕСЖИМАЕМЫХ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ — СТОКСА
С. И. Марков, Н. Б. Иткина **574**

РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНОЙ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ НА МУЛЬТИКОМПЬЮТЕРАХ
В. П. Маркова, М. Б. Остапкевич **581**

РАСПРЕДЕЛЕННОЕ ЧИСЛЕННОЕ СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЕТВЯЩИХСЯ ПРОЦЕССОВ С УЧЕТОМ АРХИТЕКТУРЫ СУПЕР-ЭВМ
М. А. Марченко **588**

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ В ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЁТАХ ГЕНЕРАЦИИ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЦУНАМИ
А. Г. Марчук **595**

СЛЕДЫ ПРИРОДНЫХ КАТАСТРОФ: ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ИЗОБРАЖЕНИЙ НА ОСНОВЕ ШИАРЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ
А. Г. Марчук, А. Г. Зотин, М. А. Курако, К.В. Симонов **601**

ВЕКТОРНЫЕ АЛГОРИТМЫ МЕТОДА МОНТЕ — КАРЛО С КОНЕЧНОЙ ТРУДОЕМКОСТЬЮ
И. Н. Медведев **606**

ЧИСЛЕННЫЕ СТОХАСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ ТЕМПЕРАТУРЫ С ПЕРИОДИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ
А. М. Медвяцкая, В. А. Огородников **614**

НОВЫЕ АЛГОРИТМЫ ОЦЕНКИ ФЛУКТУАЦИЙ ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА РАЗМНОЖЕНИЯ ЧАСТИЦ В СЛУЧАЙНОЙ СРЕДЕ МЕТОДОМ МОНТЕ — КАРЛО
Г. А. Михайлов, Г. З. Лотова **620**

КОМПЬЮТЕРНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ГЕОДИНАМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ДАННЫХ О ПРИРОДНЫХ КАТАСТРОФАХ ЗЕМЛИ
А. В. Михеева **627**

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕВЕКТОРИЗУЕМЫХ КЛАССОВ ЦИКЛОВ НА SIMD-АРХИТЕКТУРАХ С КОРОТКИМИ ВЕКТОРНЫМИ РЕГИСТРАМИ
О. В. Молдованова, М. Г. Курносов **634**

АСИМПТОТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ДВУХФАЗНОЙ RQ-СИСТЕМЫ M|M|1 В УСЛОВИИ БОЛЬШОЙ ЗАДЕРЖКИ НА ОРБИТЕ
А. А. Назаров, А. А. Анисимова **641**

КОНСТРУИРОВАНИЕ ВЕРОЯТНОСТНЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ АНАЛИЗА ЭФФЕКТИВНОСТИ МЕТОДОВ КЛАССИФИКАЦИИ ЭФФЕКТИВНЫЕ ЧИСЛЕННЫЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ
В. М. Недельк о **648**

УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СТОХАСТИЧЕСКОЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ЦЕНОВОГО РЯДА
А. В. Новиков, А. В. Бурмистров **654**

АДАПТИВНЫЕ КОМПАКТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ ОСНОВНЫХ ТИПОВ ЭВОЛЮЦИОННЫХ УРАВНЕНИЙ С ОДНОЙ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ПЕРЕМЕННОЙ
В. И. Паасонен **659**

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ШРЁДИНГЕРА И ГИНЗБУРГА — ЛАНДАУ С ПОВЫШЕННЫМ ПОРЯДКОМ ТОЧНОСТИ
В. И. Паасонен, М. П. Федорук **666**

О ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДА ФИКТИВНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В РЕШЕНИИ ЗАДАЧ О ВИБРАЦИИ ШТАМПОВ, ПЛОСКИХ ЖЕСТКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ И ПОЛОСТЕЙ
А. В. Павлова **673**

К КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНЫМ МОДЕЛЯМ КОНВЕКЦИОННО-ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ
А. В. Павлова, С. Е. Рубцов **677**

ВАРИАЦИОННАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ КОРРЕКТНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ПРЯМЫХ, СОПРЯЖЕННЫХ И ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ
В. В. Пененко **680**

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫНУЖДЕННЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ КОЛЕБАНИЙ В ОДНОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МИКРОРЕЗОНАТОРА
Д. О. Пиманов, С. И. Фадеев, Э. Г. Косцов **684**

РАСПОЗНАВАНИЕ ИНТЕНЦИЙ ПОКУПАТЕЛЕЙ В СООБЩЕНИЯХ СОЦИАЛЬНЫХ СЕТЕЙ (НА ПРИМЕРЕ СЕТИ “В КОНТАКТЕ”)
И. С. Пименов, Н. В. Саломатина **691**

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГИБЕЛИ КЛЕТОК В ЖИВОМ ОРГАНИЗМЕ
Н. Д. Плотников, Ч. А. Цгоев, О. Ф. Воропаева **697**

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕБИТА СКВАЖИНЫ И ОБВОДНЕННОСТИ ПО ДОПОЛНИТЕЛЬНЫМ ИЗМЕРЕНИЯМ ДАВЛЕНИЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ
А. Ю. Приходько, М. А. Шишленин **705**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ВОЗДУШНОГО БАССЕЙНА ГОРОДСКОГО ПОСЕЛЕНИЯ, РАСПОЛОЖЕННОГО В ГОРНОЙ КОТЛОВИНЕ (НА ПРИМЕРЕ Г. ЧИТЫ)
Э. А. Пьянова, Л. М. Фалейчик, А. А. Фалейчик **711**

АНАЛИЗ РАДИОАКТИВНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ И ОНКОЗАБОЛЕВАЕМОСТИ НАСЕЛЕНИЯ ПОСЁЛКОВ ТОМСКОЙ ОБЛАСТИ В ЗОНЕ ВЛИЯНИЯ ВЫБРОСОВ СИБИРСКОГО ХИМИЧЕСКОГО КОМБИНАТА
В. Ф. Рапута, Т. В. Ярославцева **718**

МОДЕЛИ РЕКОНСТРУКЦИИ ПОЛЕЙ ВЫПАДЕНИЙ РАДИОНУКЛИДОВ ОТ ЯДЕРНЫХ ВЗРЫВОВ И АВАРИЙ
В. Ф. Рапута, Т. В. Ярославцева **723**

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ ПРОЕКЦИОННОГО МЕТОДА ДЛЯ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА
С. В. Рогазинский **728**

ГРАНИЦЫ ОБЛАСТЕЙ РЕШЕНИЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ВОЗМУЩАЮЩИМИ ВОЗДЕЙСТВИЯМИ
А. Н. Рогалев **734**

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ОЦЕНКИ ОШИБКИ ЧИСЛЕННЫХ РЕШЕНИЙ
А. Н. Рогалев **739**

ОБОБЩЕННАЯ ОНТОЛОГИЯ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ИМИТАЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЕСТЕСТВЕННОГО ЯЗЫКА
С. В. Рудометов, В. В. Окольнишников **744**

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ С ВЫРОЖДЕНИЕМ НА ВСЕЙ ГРАНИЦЕ ОБЛАСТИ
В. А. Рукавишников, А. С. Рябоконь, Е. И. Рукавишникова **750**

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА НАНОВИСКЕРОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ С УЧЕТОМ КОАЛЕСЦЕНЦИИ
К. К. Сабельфельд, Е. Г. Каблукова **756**

СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕКОМБИНАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК ПРИ НАЛИЧИИ ДИФФУЗИИ И ДРЕЙФОВОЙ СКОРОСТИ, ОБУСЛОВЛЕННОЙ ВНЕШНИМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ
К. К. Сабельфельд, А. Е. Киреева **763**

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ДЕКОМПОЗИЦИИ С ПЕРЕСЕЧЕНИЕМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ВНЕШНЕЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА
А. О. Савченко **770**

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СЕЙСМИКИ С МГНОВЕННЫМ И ШНУРОВЫМ ИСТОЧНИКАМИ
А. Дж. Сатыбаев, А. А. Алимканов **777**

ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА МИНИМИЗИРУЕМОГО ФУНКЦИОНАЛА НА ТОЧНОСТЬ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ИЗМЕРЕНИЙ
С. Н. Свиташева **782**

МЕТОД СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ В МОДЕЛИРОВАНИИ СУБДИФФУЗИИ
В. А. Селезнев, Л. В. Пехтерева, Е. В. Исаева **789**

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ДИАГНОСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ p53-ЗАВИСИМЫХ МИКРОРНК
С. Д. Сенотрусова, О. Ф. Воропаева **795**

ИССДЕДОВАНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ КУСОЧНО-ЛИНЕЙНЫХ ПРОЦЕССОВ НА ПУАССОНОВСКИХ ТОЧЕЧНЫХ ПОТОКАХ
О. В. Сересева, В. А. Огородников **803**

ИЕРАРХИЧЕСКИЙ КЛАСТЕРНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ ТЕКСТУРНЫХ ДАННЫХ ПОВЕРХНОСТИ ЗЕМЛИ
В. С. Сидорова **809**

ОЦЕНКИ СТАТИСТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НЕОДНОРОДНЫХ МЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ ПО ВЫБОРКАМ МАЛОГО ОБЪЕМА
С. С. Скворцов, О. В. Сересева, Н. А. Каргаполова **814**

О РЕАЛИЗАЦИИ НА GPU БАЗОВЫХ АССОЦИАТИВНЫХ ПРОЦЕДУР ЯЗЫКА STAR
Т. В. Снытникова, А. Ш. Непомнящая **821**

ЭФФЕКТИВНЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ДЛЯ ЗАДАЧИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УПРУГИХ ВОЛН В ДВУХМЕРНОЙ ФРАКТАЛЬНОЙ СЛУЧАЙНОЙ СРЕДЕ
О. Н. Соболева **828**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕЙСТВИЯ АТАК НА БЕСПРОВОДНЫЕ СЕНСОРНЫЕ СЕТИ
О. Д. Соколова, В. В. Шахов, А. Н. Юргенсон **835**

ЭКОНОМИЧНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ЛАПЛАСА
С. Б. Сорокин **841**

ЭКОНОМИЧНЫЕ МЕТОДЫ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ЖЕСТКИХ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ПЫЛИ В ОКОЛОЗВЕЗДНЫХ ДИСКАХ
О. П. Стояновская, В. Н. Снытников, Э. И. Воробьев, Т. В. Маркелова **845**

О ЛОКАЛЬНОМ ПОИСКЕ В ЗАДАЧЕ С D.C. ОГРАНИЧЕНИЯМИ
А. С. Стрекаловский, И. М. Минарченко **852**

АЛГОРИТМЫ ЧИСЛЕННОГО ПРЯМОГО ТРЁХМЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАДАЧ МАГНИТОРАЗВЕДКИ
И. В. Суродина **860**

О РЕШЕНИИ НЕКОРРЕКТНО ПОСТАВЛЕННОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ВТОРОГО ПОРЯДКА
Е. В. Табаринцева **867**

К ИССЛЕДОВАНИЮ ПОВЕДЕНИЯ СОСТАВНЫХ ПОКРЫТИЙ ПРИ ВИБРАЦИОННЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ
И. С. Телятников **873**

ФОРМУЛЫ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ ФУНКЦИЙ С БОЛЬШИМИ ГРАДИЕНТАМИ
С. В. Тиховская, А. И. Задорин **878**

МАСШТАБИРОВАНИЕ КВАДРАТНЫХ РЕШЕТОК С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНО ШИРОКИМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ КОНДАКТАНСОВ СВЯЗЕЙ
О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко **885**

ПРОВЕРКА ПОЛУЧЕНИЯ РЕГУЛЯРНОЙ НАНОРЕШЕТКИ СЛУЧАЙНЫХ СОПРОТИВЛЕНИЙ
В. А. Ткаченко, О. А. Ткаченко **892**

ПРОГНОЗ ЗАТВОРНО-УПРАВЛЯЕМОГО ПОВЕДЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ИСКУССТВЕННОГО ГРАФЕНА
О. А. Ткаченко, В. А. Ткаченко **900**

МЕТОД ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИСПОЛНЕНИЯ МОДЕЛЕЙ С МАССИРОВАННЫМ ПОТОКОМ СОБЫТИЙ
К. В. Ткачёв **907**

ПРОЕКЦИОННЫЕ ОЦЕНКИ МЕТОДА МОНТЕ — КАРЛО ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ УГЛОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛЯРИЗОВАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
Н. В. Трачева, С. А. Ухинов **911**

СТАТИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНССПЕКТРАЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕТА С ВОДНОЙ СРЕДОЙ С УЧЕТОМ ВОЛНЕНИЯ ВОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ
О. С. Ухинова **917**

О ВАРИАЦИОННОМ ИНТЕРПОЛИРОВАНИИ РЕЗУЛЬТАТОВ РЕШЕНИЯ НЕСКОЛЬКИХ ОПОРНЫХ ЗАДАЧ
В. В. Учайкин, В. А. Литвинов, Е. В. Кожемякина, И. И. Кожемякин **924**

УСТОЙЧИВОЕ АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ ВОЛНОВЫХ ПОЛЕЙ В ШАРЕ ПРОИЗВОЛЬНОГО РАЗМЕРА
А. Г. Фатьянов **930**

ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ: МОДЕЛИ И ТЕХНОЛОГИИ
А. М. Федотов, О. А. Федотова **936**

О СВОЙСТВАХ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ С ДИСПЕРСИЕЙ
З. И. Федотова, О. И. Гусев, Н. Ю. Шокина, Г. С. Хакимзянов **943**

ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ СРЕДСТВА РАЗРАБОТКИ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ПАКЕТОВ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ НА ОСНОВЕ МОДУЛЬНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ
А. Г. Феоктистов, И. А. Сидоров, С. А. Горский **950**

ДИСКРЕТНО-АНАЛИТИЧЕСКИЕ АППРОКСИМАЦИИ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ МОДЕЛИ МНОГОФАЗНОЙ СИСТЕМЫ ГИДРОТЕРМОДИНАМИКИ ОЗЕРА БАЙКАЛ
Е. А. Цветова **957**

РАЗРАБОТКА НАДЕЖНОГО ЧИСЛЕННОГО МЕТОДА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ ДЛЯ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННОГО ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ РЕАКЦИИ–ДИФФУЗИИ В ДВУСВЯЗНОЙ ОБЛАСТИ
И. В. Целищева, Г. И. Шишкин **961**

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СВОЙСТВ ГИДРАВЛИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПОРИСТОЙ СРЕДЫ ПО КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ПОТЕНЦИАЛА НА ОСНОВЕ СТОХАСТИЧЕСКОГО МЕТОДА КОЛЛОКАЦИЙ
И. А. Шалимова, К. К. Сабельфельд **968**

ИНТЕРВАЛЬНАЯ РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ
С. П. Шарый **975**

РАЗРАБОТКА РОБАСТНЫХ РАЗНОСТНЫХ СХЕМ ДЛЯ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА
Г. И. Шишкин, Л. П. Шишкина **983**

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МИКРОЦИРКУЛЯТОРНЫХ ПРОЦЕССОВ С УЧЕТОМ ЛИМФАТИЧЕСКОГО ДРЕНАЖА
И. В. Шваб, В. В. Нимаев **990**

О ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИИ КУБИЧЕСКИХ СПЛАЙНОВ НА НЕРАВНОМЕРНЫХ СЕТКАХ
Б. М. Шумилов **997**

АНАЛИЗ СМЕШАННЫХ ВАРИАЦИОННЫХ ПОСТАНОВОК НА БАЗЕ НЕКОНФОРМНЫХ КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНЫХ МЕТОДОВ
Э. П. Шурина, С. А. Трофимова, Н. Б. Иткина **1004**

РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ АЛГОРИТМЫ С ЛОКАЛЬНЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ДАННЫМИ В СИСТЕМЕ ФРАГМЕНТИРОВАННОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ LuNA
Г. А. Щукин **1011**

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГРАВИТАЦИОННЫХ ПОТОКОВ В СТРАТИФИЦИРОВАННОЙ АТМОСФЕРЕ С ИНВЕРСИЕЙ
М. С. Юдин **1018**

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЦЕНАРИЕВ ПЕРЕХОДА К ТУРБУЛЕНТНОСТИ В ОБЛАСТИ ОБРУШЕНИЯ ВНУТРЕННИХ ВОЛН В РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ
С. Н. Яковенко **1023**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ ИЗ УЗКОЙ ЩЕЛИ ПРИ НЕБОЛЬШИХ ЧИСЛАХ РЕЙНОЛЬДСА
С. Н. Яковенко **1028**

АНАЛИЗ СТОХАСТИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ МЕТОДОМ СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
М. А. Якунин **1033**

ОПТИМИЗАЦИОННЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ
М. В. Янулевич, А. С. Стрекаловский **1039**

ЗАКОНОМЕРНОСТИ РЕГИОНАЛЬНЫХ ВЫПАДЕНИЙ АЭРОЗОЛЬНЫХ ПРИМЕСЕЙ ОТ ПРОМЫШЛЕННЫХ ИСТОЧНИКОВ ПО НАЗЕМНЫМ И СПУТНИКОВЫМ НАБЛЮДЕНИЯМ
Т. В. Ярославцева, В. Ф. Panyma **1046**

H. POINCARE BALAYAGE METHOD AND NUMERICAL REALIZATION OF THE METHOD ON BASE OF POTENTIAL THEORY
Y. V. Glasko **1051**

APPLICATION OF NONLINEAR ADAPTATION ON MANIFOLDS FOR ECONOMIC OBJECTS
S. I. Kolesnikova, N. D. Dubina **1057**

DUALITY OF WAVE AND PARTICLE OF TURBULENCE AND CAVITATION DAMAGE
Z. C. Liu, W. J. Fan **1062**

THE OPTIMAL TWO-SAMPLE TEST WITH LIFETIME DATA UNDER THE WALD MAXIMIN MODEL OF DECISION MAKING UNDER RISK AND UNCERTAINTY
P. A. Philonenko, S. N. Postovalov **1067**

THE LIMITATIONS OF SOLUTION ACCURACY FOR ELLIPSOMETRIC PROBLEMS
S. N. Svitasheva **1074**

DIVERSE BLOW-UP REGIMES IN NONLINEAR DIFFUSION PROCESSES
Yu. N. Skiba, D. M. Filatov **1080**

GLOBAL SEARCH FOR OPTIMIZATION PROBLEM WITH D.C. GOAL FUNCTION AND D.C. CONSTRAINTS
A. S. Strekalovsky **1086**

MULTISCALE WAVELET ANALYSIS OF THE RADARGRAM TRACE
N. Uzakkyzy, K. T. Iskakov, S. A. Boranbayev **1093**

АЛГОРИТМ РАСЧЕТА ОБТЕКАНИЯ КРУГОВОГО КОНУСА РЕАЛЬНЫМ ГАЗОМ
Э. А. Бибердорф, А. М. Блохин **1098**

ПРЯМОЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ СЕЙСМИКИ
Н. С. Новиков **1105**

ОНТОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ МОНИТОРИНГА НАУЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СОТРУДНИКОВ ВУЗА
Л. Р. Сулейменова, С. Ж. Рахметуллина **1113**

ON THE SOLVABILITY OF THE DISCRETE ANALOGUE OF GELFAND — LEVITAN EQUATION
G. B. Bakanov, S. I. Kabanikhin, N. S. Novikov, M. A. Shishlenin **1118**

ОЦЕНКА УПОРЯДОЧЕНИЙ ДЛЯ ПЕРЕПОСТРОЕНИЯ БАЗИСОВ ЛИНЕЙНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ.
Г. И. Забиняко **1123**