



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 53 за 2012 г.



Бондарев А.Е., Бондаренко А.В.,
Галактионов В.А.,
Михайлова Т.Н., Рыжова И.Г.

Разработка
инструментального
программного средства
Burgers2 для оптимизации
гибридных разностных схем

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Разработка инструментального программного средства Burgers2 для оптимизации гибридных разностных схем / А.Е.Бондарев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 53. 12 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-53>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

**А.Е. Бондарев, А.В. Бондаренко, В.А. Галактионов,
Т.Н. Михайлова, И.Г. Рыжова**

**Разработка инструментального
программного средства Burgers2
для оптимизации
гибридных разностных схем**

Москва — 2012

Бондарев А.Е., Бондаренко А.В., Галактионов В.А., Михайлова Т.Н., Рыжова И.Г.

Разработка инструментального программного средства Burgers2 для оптимизации гибридных разностных схем

Данная работа содержит описание разработанного инструментального программного средства Burgers2, предназначенного для оптимизационной настройки вычислительных свойств гибридных разностных схем на основе применения уравнения Бюргерса. Программное средство реализовано на основе решения оптимизационной задачи и визуального представления результатов. Приведены примеры тестовых расчетов.

Ключевые слова: программное средство, гибридные разностные схемы, оптимизационная задача, визуализация данных

Bondarev A.E., Bondarenko A.V., Galaktionov V.A., Mihailova T.N., Ryzhova I.G.

Design of Program Tool Burgers2 for Hybrid Finite-Diference Schemes Optimization

The paper contains the description of developed program tool Burgers2. This program tool is intended to optimize the computational properties of hybrid finite-difference schemes applied to Burgers equation. The tool is based on combining of optimization problem solution and visual data presentation. The examples of test calculations are included.

Key words: program tool, hybrid finite-difference schemes, optimization problem, data visualization

Оглавление

Введение	3
Уравнение Бюргерса и гибридные разностные схемы	3
Постановка и решение оптимизационной задачи	5
Программная реализация и примеры расчетов	8
Заключение	11
Литература	12

Введение

Данная работа посвящена описанию разработанного инструментального сервисного программного средства Burgers2 (ИСПС Burgers2), предназначенного для проведения оптимизационной настройки и отладки гибридных разностных схем. Данное программное средство реализовано на основе сочетания решения оптимизационной задачи и визуального представления результатов. Приведены примеры тестовых расчетов с иллюстрациями.

Инструментальное сервисное программное средство Burgers2 основано на численном решении уравнения Бюргерса и использовании его характерных свойств. Уравнение Бюргерса является модельным уравнением, описывающим распространение возмущений в диссипативной среде. Его принято рассматривать как одномерный аналог уравнений Навье-Стокса. Уравнение Бюргерса применяется в различных областях от вычислительной математики и вычислительной физики до экономических и социальных задач, то есть всюду, где необходимо моделировать распространение возмущений в среде с диссипацией.

Характерной особенностью уравнения Бюргерса является наличие точного решения, выражаемого аналитически. Это делает его идеальным объектом для настройки и отладки вычислительных инструментов – численных методов, разностных схем. Подход настройки с помощью уравнения Бюргерса вычислительных свойств разностных схем был предложен в работах [1-3], где рассматривалось влияние счетной вязкости разностных схем на расчет области высоких градиентов в нестационарных задачах. Идеология подхода, использованного в [1-3], реализована вычислительно и программно в данной работе.

Уравнение Бюргерса и гибридные разностные схемы

Рассмотрим краевую задачу, основанную на применении линейного уравнения Бюргерса, представленного в следующем виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + f_1(x,t) \quad (1)$$

Начальные и граничные условия представляются в виде:

$$f(x, t_0) = y(x, t_0) \quad (2)$$

$$f(0, t) = y(0, t), f(1, t) = y(1, t), \quad (3)$$

где $y(x, t)$ – точное решение, описывающее функцию типа бегущей волны.

Точное решение $y(x, t)$ имеет вид

$$y(x, t) = y(\xi) = e^{-d(1-2\xi)^2}, \text{ где } \xi = \frac{t-x}{t^*} \quad (4)$$

Величины t^* и d характеризуют ширину и крутизну волны и являются параметрами задачи. Внешний вид точного решения (4) (бегущей волны) представлен на рисунке 1. Решение представлено на момент времени $t = 0.6$, что соответствует положению волны на середине отрезка $x \in [0, 1]$.

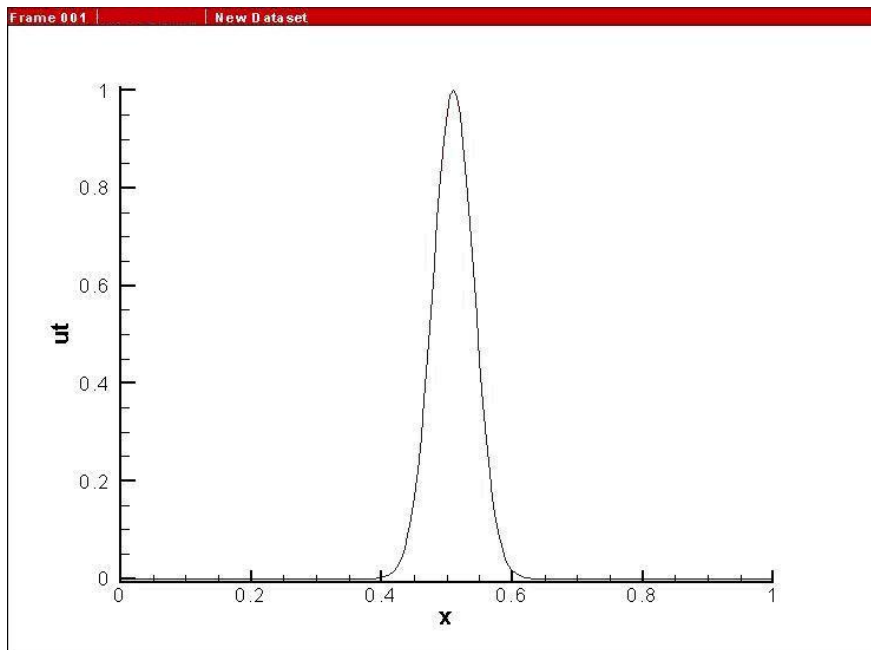


Рис. 1. Точное решение уравнения Бюргера на момент времени $t = 0.6$.

Функция $f_1(x, t)$ в правой части уравнения (1) является выражением следующего вида:

$$f_1(x, t) = -\frac{v}{t^*} [16d^2(1-2\xi)^2 - 8d] e^{-d(1-2\xi)^2} \quad (5)$$

Наличие точного решения позволяет использовать уравнение Бюргера для построения на его основе программного средства для настройки и отладки вычислительных свойств разностных схем, подобно [1-3].

Для этих целей вычисляется функция $K(x, t)$, представляющая собой модуль процента абсолютной ошибки:

$$K(x, t) = |[f(x, t) - y(x, t)] * 100\%|,$$

где $f(x, t)$ – результат расчета, $y(x, t)$ – точное решение.

Далее ищется $K_{\max} = \max K(x, t)$ – максимальное значение модуля процента абсолютной ошибки во всем диапазоне изменения аргументов функции. Анализ поведения функции $K(x, t)$ и значения K_{\max} позволяет судить о вычислительных свойствах рассматриваемой конкретной конечно-разностной схемы, подобно [1-3].

Рассматриваемые в применяемом подходе разностные схемы относятся к классу гибридных разностных схем. Гибридные разностные схемы – это схемы, соединяющие вычислительные свойства различных разностных схем. Подробное описание и классификация различных типов гибридных разностных схем приведены в обзоре [4].

Согласно [4], в простейшем случае гибридную схему можно записать как комбинацию:

$$S * G_1 + (1 - S) * G_2, \quad (6)$$

где S – коэффициент гибридности, G_1 и G_2 – разностные схемы, обладающие различными интересующими исследователя свойствами. Например, G_1 – схема первого порядка точности, а G_2 – второго порядка и т.п. Большинство применяемых для решения практических задач разностных схем являются гибридными. Согласно [4], к гибридным схемам относятся такие широко известные алгоритмы, как FCT (flux corrected transport), различные типы TVD (total variation diminishing) разностных схем, схемы типа ENO (essentially non-oscillatory) и WENO (weighted essentially non-oscillatory) и многие другие. Использование гибридных схем позволяет исследователю объединять различные разностные схемы в комбинацию, используя наилучшие свойства каждой из них. В то же время, осуществляя подобное объединение, необходимо иметь достаточно четкое представление о свойствах и ограничениях коэффициентов гибридности (весовых коэффициентов) для того, чтобы используемые свойства разностных схем соответствовали физической и математической моделям рассматриваемой задачи.

Постановка и решение оптимизационной задачи

Рассмотрим применение подхода [1-3] к конкретному варианту построения гибридной разностной схемы. В качестве гибридной разностной схемы использовалась гибридная разностная схема [3], где в качестве G_1 в выражении (6) используется схема Крэнка-Никольсона, а в качестве G_2 – схема Лакса.

Рассмотрим подробно построение разностной схемы [3] в применении к уравнению Бюргера, записанному в общей форме:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial x} = v \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (7)$$

Введем обозначения конечно-разностных операторов для аппроксимации пространственных переменных как

$$\delta_1 f_i^n = f_{i+1}^n - f_{i-1}^n, \quad \delta_2 f_i^n = f_{i+1}^n - 2f_i^n + f_{i-1}^n \quad (8)$$

С помощью операторов (8) конечно-разностная схема (WW-схема), предложенная в [3], может быть записана для уравнения (7) с помощью весовых параметров S_1 и S_2 следующим образом:

$$f_i^{n+1} = S_1 f_i^n + \frac{1}{2}(1-S_1)(f_{i+1}^n + f_{i-1}^n) - \frac{c\Delta t}{2\Delta x} [S_2 \delta_1 f_i^{n+1} + (1-S_2) \delta_1 f_i^n] + \frac{v\Delta t}{(\Delta x)^2} [S_2 \delta_2 f_i^{n+1} + (1-S_2) \delta_2 f_i^n], \quad (9)$$

где $\Delta t, \Delta x$ – шаги по времени и пространственной переменной.

Нетрудно заметить, что при выборе $S_1 \in]0;1[$, $S_2 = 0.5$ разностная схема (9) является линейной комбинацией схемы Крэнка-Никольсона, обладающей вторым порядком точности по времени и пространству, и схемы Лакса, обладающей существенной искусственной вязкостью. Представив весовой параметр S_1 в виде $S_1 = 1 - S_k \Delta t$, можно записать добавочный член с искусственной вязкостью как

$$S_k \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (10)$$

Таким образом, WW-схема (9) представляет собой неявную безусловно устойчивую гибридную схему второго порядка по времени и пространству, обладающую искусственной вязкостью, позволяющей устранять нефизические осцилляции вблизи разрывов. Управление искусственной вязкостью осуществляется путем выбора весов. Несомненным достоинством данной разностной схемы является то обстоятельство, что искусственной вязкостью можно управлять, непосредственно задавая соответствующее значение весового коэффициента S_k .

Данная разностная схема успешно использовалась для решения широкого круга модельных и практических задач вычислительной аэрогазодинамики. Основное достоинство схемы (9) – возможность объединения свойств схемы Крэнка-Никольсона и схемы Лакса.

Схема Крэнка-Никольсона обладает вторым порядком аппроксимации по времени и пространству, обеспечивая тем самым повышенную точность, но, в то же время, порождает нежелательные осцилляции в области высоких

градиентов, уничтожая решение. Схема Лакса имеет первый порядок аппроксимации по времени, «размазывая» решение в области высоких градиентов, но обладает свойством подавлять нежелательные осцилляции.

Целью данного исследования является нахождение таких значений весовых параметров, которые обеспечивали бы достижение повышенной точности (минимальная ошибка), но не допускали бы возникновения осцилляций. Таким образом, уже в постановке задачи заложен конфликт целевых функций.

Для реализации этой цели нужно решать оптимизационную задачу и, следовательно, провести формальную постановку многокритериальной многопараметрической задачи оптимизации, согласно [5].

Оптимизационная задача в данном случае формулируется как поиск следующих величин:

$$\begin{aligned} \min K_{\max}(\nu, S_k), \text{ для всех } \nu \in [\nu_1, \nu_2], S_k \in [0, 1] \\ \min S_k, \text{ так чтобы выполнялось } N \leq N_k \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь N – количество знаков перемен второй производной $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$. Этот параметр определяет возникновение нежелательных осцилляций. При их возникновении он начинает неконтролируемо расти. Используя это свойство, в процессе решения данный параметр постоянно сравнивается с некоторым эталоном гладкости решения, определяемым пользователем программы с помощью задания значения параметра N_k .

Данная оптимизационная задача решается с помощью применения простого в реализации сеточного метода [5]. Суть этого простого и эффективного метода заключается в сеточном разбиении определяющих параметров оптимизационной задачи (аргументов целевой функции) и вычислении значений целевой функции в каждой точке полученной сетки. Наименьшее из этих значений приближенно принимается за минимум функции во всей области. Ранее традиционно считалось, что для задач большой размерности данный метод непригоден из-за больших вычислительных затрат. Однако современные вычислительные средства позволяют применять его успешно и эффективно, а применение параллельных вычислений позволяет ускорять процессы расчетов на порядки даже при самой безыскусной параллелизации. Это обстоятельство делает самые неприхотливые и простые методы реально применимыми к практическим задачам. Более того, их простота и надежность создают им в этом случае значительные преимущества.

Для рассматриваемой задачи сеточное разбиение проводится в диапазонах $\nu \in [\nu_1, \nu_2], S_k \in [0, 1]$. Для каждой точки сетки вычисляется максимальная ошибка K_{\max} . Каждая точка проверяется на возможное появление осцилляций с

помощью блока-анализатора. Если осцилляции возникают, то эти точки отбрасываются, путем задания в них заведомо большой отрицательной величины. Как результат, мы получаем поверхность $K_{\max}(v, S_k)$. С помощью полученной поверхности определяется нужный нам минимум. Сама поверхность представляется визуалью в целях контроля решения и наглядности.

Программная реализация и примеры расчетов

Построение программной реализации описанных в предыдущих разделах алгоритмов проводится по модульному принципу. Общая структура построения приведена в схеме, представленной на рисунке 2.

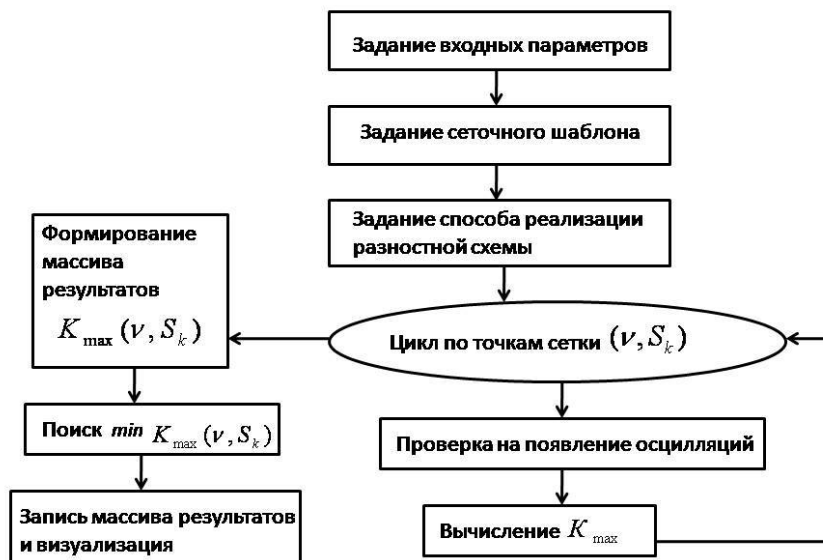


Рис.2. Схема взаимодействия программных модулей.

Сначала в соответствующем модуле задаются входные параметры оптимизационной задачи и, таким образом, проводится сеточное разбиение определяющих параметров. В качестве входных параметров служат: nt – число точек по x , $anupn$ – значение v_1 , $anufin$ – значение v_2 , m – число точек разбиения отрезка $[v_1, v_2]$, ski – значение Sk_1 , skf – значение Sk_2 , n – число точек разбиения отрезка $[Sk_1, Sk_2]$, а также величины tz и d – соответствующие параметрам t^* и d , описывающим бегущую волну в точном решении.

Задание сеточного шаблона проводится в отдельном программном модуле. Это сделано для того, чтобы повысить гибкость программного средства, т.к. построение гибридной схемы может проводиться не только по простейшему принципу (6), но и с использованием более сложной линейной комбинации.

Реализация конечно-разностной схемы предусмотрена в соответствующем модуле, как для явных, так и для неявных схем. Неявные схемы реализуются с помощью скалярной прогонки.

Далее реализуется цикл по точкам сетки (ν, S_k) . Для каждого набора значений (ν, S_k) проводится решение уравнения Бюргера с помощью рассматриваемой разностной схемы. Решение проверяется на наличие нежелательных и неконтролируемых осцилляций. Проводится сравнение с точным решением и вычисляется значение K_{\max} . Таким образом формируется искомый массив результатов $K_{\max}(\nu, S_k)$ и проводится поиск положительного минимума данного массива.

Вывод данных осуществляется на экран и в текстовый файл (по умолчанию C:\res1.txt). Для каждого значения ν в строке приведено значение минимальной ошибки и соответствующее значение Sk . Отрицательное значение минимальной ошибки свидетельствует о наличии нежелательных осцилляций. Пример такой записи отражен ниже:

nu= 1.000000E-03	minerr= 2.761018	sk= 8.000001E-01
nu= 2.000000E-03	minerr= 1.280981	sk= 3.000000E-01
nu= 3.000000E-03	minerr= 4.440367E-01	sk= 1.000000E-01
nu= 4.000000E-03	minerr= -1.000000	sk= 9.000001E-01
nu= 5.000000E-03	minerr= 5.271882E-01	sk= 1.000000E-01
nu= 6.000000E-03	minerr= 7.957876E-01	sk= 1.000000E-01
nu= 7.000000E-03	minerr= 1.002550	sk= 1.000000E-01
nu= 8.000000E-03	minerr= 1.165241	sk= 1.000000E-01
nu= 9.000001E-03	minerr= 1.295036	sk= 1.000000E-01
nu= 1.000000E-02	minerr= 1.401329	sk= 1.000000E-01

В программе предусмотрена запись данных в виде массива, предназначенного для визуального представления с помощью программы TecPlot. По умолчанию запись производится в C:\result.txt.

С помощью разработанного инструментального программного средства был проведен ряд расчетов для различных разностных схем и шаблонов. Ниже приведены два характерных примера результатов подобных расчетов.

В первом примере использовался сеточный шаблон (9) с выбором весовых коэффициентов $S_1 \in [0;1]$, $S_2 = 0.5$, обеспечивающий гибрид схем Лакса и Крэнка-Никольсона. На рисунке 3 приведен вид поверхности абсолютной ошибки. Область отрицательных данных отмечает места появления осцилляций.

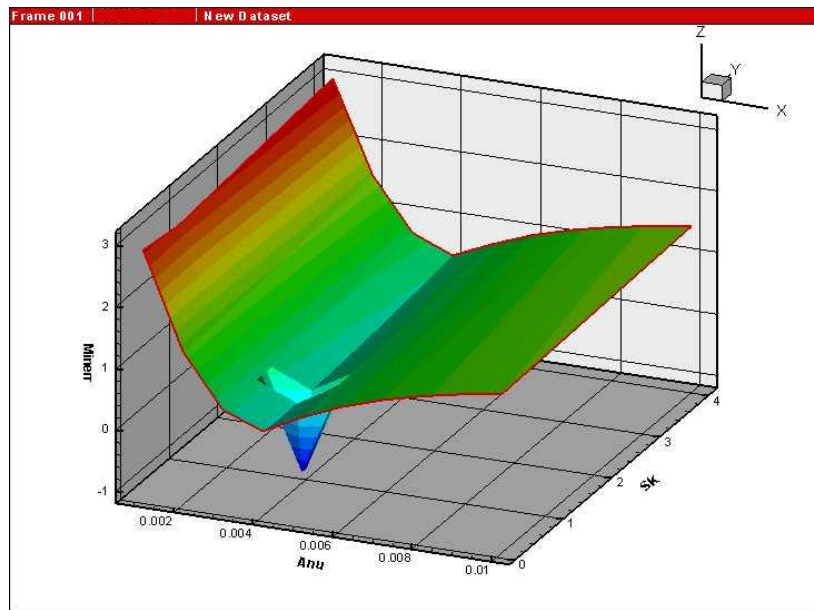


Рис. 3. Поверхность абсолютной ошибки при выборе весовых коэффициентов $S_1 \in]0;1[$, $S_2 = 0.5$.

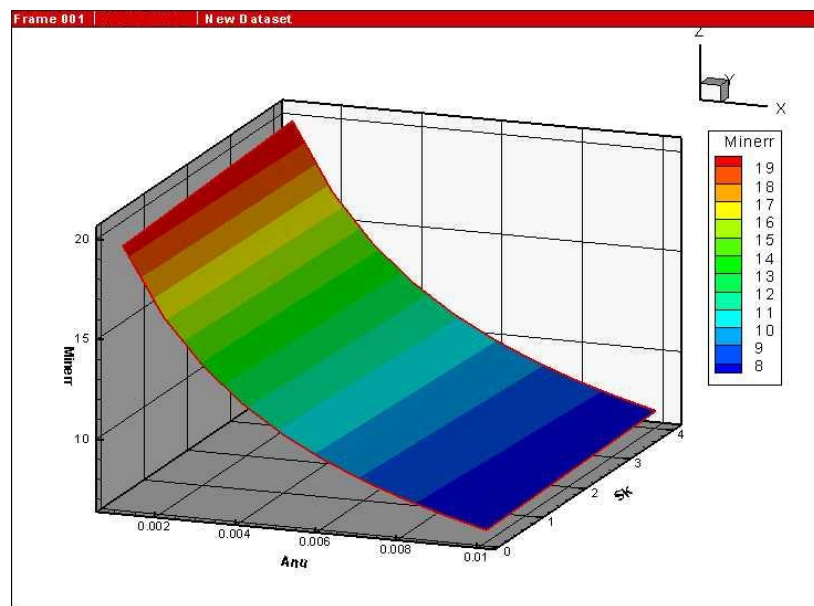


Рис. 4. Поверхность абсолютной ошибки при выборе весовых коэффициентов $S_1 \in]0;1[$, $S_2 = 1$.

С помощью полученных данных для любого значения ν легко подобрать значение весового коэффициента S_k , обеспечивающее минимальную ошибку, а, следовательно, максимальную точность рассматриваемой гибридной разностной схемы.

Второй пример рассматривает также шаблон (9) при выборе весовых коэффициентов $S_1 \in]0;1[$, $S_2 = 1$. Такой выбор весовых коэффициентов подразумевает отказ от использования второго порядка аппроксимации для

пространственной переменной и переход к схеме первого порядка. Вид поверхности абсолютной ошибки приведен на рисунке 4.

Данный рисунок дает точное представление об изменении поведения абсолютной ошибки при переходе к разностной схеме первого порядка аппроксимации по пространственной переменной. Меняется структура поверхности, значение ошибки резко увеличивается во всем поле определяющих параметров.

Программа Burgers2 реализована на языке Fortran90 на основе системы Microsoft Fortran Power Station 4.0. Данная версия является прототипной и разработана для реализации алгоритма. В дальнейшем данная версия нуждается в создании интерфейса, удобного для конечного пользователя и обеспечивающего:

- удобную организацию ввода-вывода данных;
- сопряжение с внешними устройствами;
- сопряжение с системами визуализации.

Также следует заметить, что решение рассматриваемой оптимизационной задачи реализовано в данной программе с помощью последовательного алгоритма. Однако здесь возможна организация надстройки для проведения параллельных вычислений для наборов определяющих параметров вместо цикла по точкам сетки. Подобный подход к решению оптимизационной задачи был предложен и опробован в работе [6].

Заключение

Разработано инструментальное сервисное программное средство Burgers2 (ИСПС Burgers2), предназначенное для проведения оптимизационной настройки и отладки гибридных разностных схем. Программное средство позволяет отлаживать вычислительные свойства гибридных разностных схем на модельном уравнении Бюргерса, описывающем распространение возмущений в диссипативной среде. Основой алгоритма является сочетание решения оптимизационной задачи и визуального представления результатов. Данное программное средство может служить инструментом отладки и настройки вычислительных свойств разностных схем, а также использоваться для образовательных целей. Разработанная версия программы является прототипом, в дальнейшем предполагается создание интерфейса для удобства конечного пользователя и разработка данного программного средства в варианте, предназначенном для проведения параллельных расчетов.

Литература

1. Русаков С.В. Влияние счетной вязкости некоторых разностных схем на расчет области высоких градиентов в нестационарных задачах / Численные методы в аэродинамике: сб.трудов. М.: Изд.МГУ. 1980. вып. 4. С. 58-67.
2. Русаков С.В. О некотором классе схем повышенного порядка точности по пространственным переменным / Численные методы в аэродинамике: сб. трудов. М.: Изд. МГУ. 1980. вып. 5. С. 3-13.
3. Бондарев А.Е. Численное решение уравнения Бюргерса в области высоких градиентов // Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша. 1990. № 12. 13 с.
4. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2001, 608 с.
5. Штойер Р. Многокритериальная оптимизация. Теория, вычисления и приложения. М.: Радио и связь. 1992. 504 с.
6. Бондарев А.Е. Решение задачи оптимизационного анализа с помощью параллельных вычислений // Новые информационные технологии в автоматизированных системах: материалы пятнадцатого научно-практического семинара. М.: МГИЭМ. 2012. С. 89-93. URL: <http://nps.itas.miem.edu.ru/programma-seminara/sbornik15.pdf>