



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

Препринты ИПМ • Препринт № 11 за 2024 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

П.Е. Булатов

Численное интегрирование
одномерных задач
параболического типа на
адаптивных сетках

Статья доступна по лицензии
Creative Commons Attribution 4.0 International



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Булатов П.Е. Численное интегрирование одномерных задач параболического типа на адаптивных сетках // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2024. № 11. 16 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2024-11>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2024-11>

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

П.Е. Булатов

**Численное интегрирование одномерных
задач параболического типа
на адаптивных сетках**

Москва — 2024

Булатов П.Е.

Численное интегрирование одномерных задач параболического типа на адаптивных сетках

Описан метод численного интегрирования одномерных начально-краевых задач параболического типа с контрастными структурами на подвижных адаптивных сетках по пространству. Построена разностная схема, устойчивая к ошибкам машинного округления и монотонная по времени. Предложены алгоритмы построения адаптивных сеток по пространству и по времени. Проведён ряд численных экспериментов на примере сингулярно возмущённой задачи «реакция-диффузия-адвекция».

Ключевые слова: начально-краевые задачи, контрастные структуры, численные методы, адаптивные сетки, подвижные адаптивные сетки.

Pavel Evgenievich Bulatov

Numerical integration of one-dimensioned parabolic problems using adaptive grids

A method of numerical integration of one-dimensioned parabolic initial boundary value problems with contrast structures using movable adaptive grids is described. A difference scheme which is resistant to machine rounding errors and time-monotonic is constructed. Algorithms for constructing adaptive grids in space and time are proposed. A series of numerical experiments using the example of a singularly perturbed “reaction-diffusion-advection” problem is provided.

Key words: initial boundary value problems, contrast structures, numerical methods, adaptive grids, movable adaptive grids.

Работа поддержана проектом РФФ №23-11-00069.

Оглавление

Введение	3
Постановка задачи.....	3
О численных методах интегрирования одномерных параболических задач.....	5
Адаптивные сетки	8
Шаг по времени	11
Численный эксперимент.....	12
Перспективы распараллеливания	13
Список литературы.....	15

Введение

Параболические задачи возникают при рассмотрении процессов диффузии, переноса тепла и массы (адвекция), химических реакций и других приложений.

Нередко происходящие процессы протекают с сильно разными скоростями. Например, уравнение переноса $\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = f(x, t)$ может иметь разрывные решения. Гарантировать классичность (существование, единственность и гладкость) решения и одновременно уточнить модель можно путём учёта диссипативных процессов, которые всегда существуют. Для этого добавляется вторая производная по пространству со множителем, определяющим вязкость среды. Как правило, вязкость является малой (иначе бы ею не пренебрегали в уравнении переноса), поэтому возникает дифференциальное уравнение с малым параметром при старшей производной, то есть сингулярно возмущённое. Разрыв решения превращается в так называемую *контрастную структуру* — узкую (порядка малого параметра) область с очень большим по модулю градиентом, которая может перемещаться в пространстве.

Для таких задач удаётся строить приближённые аналитические решения в виде асимптотических рядов [1, 2, 3], погрешность которых пропорциональна малому параметру в степени, равной количеству учтённых членов асимптотики. Однако для каждого частного случая это сопряжено с громоздкими выкладками и поэтому очень затруднительно, особенно в сложных многомерных областях. На практике более удобным бывает численное интегрирование. В случае сингулярно возмущённых задач оно затруднено тем, что шаг по пространству должен быть много меньше характерного размера контрастной структуры. В противном случае она не будет должным образом разрешена, и численное решение окажется разрывным. Исправить ситуацию может применение адаптивных сеток по пространству и соответствующих разностных схем.

Постановка задачи

В данной работе рассматривается одномерная, вообще говоря, нелинейная и нестационарная задача «реакция-диффузия-адвекция».

$$\begin{aligned}
 L(u) &:= B(u, x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - A(u, x, t) \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial t} = f(u, x, t); \\
 x \in X &:= (x_l, x_r), \quad t \in (t_0, +\infty); \\
 \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_l} &= h_l(t); \quad \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_r} = h_r(t); \\
 u(x, t_0) &= u_{init}(x), \quad x \in \bar{X} := [x_l, x_r].
 \end{aligned} \tag{1}$$

Будем полагать, что задача (1) не вырождается в уравнение переноса. Для этого требуем, чтобы $B(u, x, t)$ не обращалось в ноль ни при каких аргументах, т.е. считаем, что оператор $L(u)$ коэрцитивен.

Без ограничения общности полагаем, что заданы граничные условия Неймана, т.е. известна первая производная решения по координате на концах отрезка. В случае граничных условий Дирихле или III рода значение самой функции аппроксимируется тривиально.

К виду (1) легко сводится стационарная сингулярно возмущённая задача, изученная в [3, 4]:

$$\begin{aligned} L_\varepsilon(u) &:= \varepsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \varepsilon A(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} - \varepsilon \frac{\partial u}{\partial t} - f(u, x, t) = 0; \\ x \in X &:= (0, 1), \quad t \in (0, +\infty); \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} &= h_0; \quad \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=1} = h_1; \\ u(x, 0) &= u_{init}(x), \quad x \in \bar{X} := [0, 1]. \end{aligned} \tag{2}$$

Особый интерес представляет задача (2) с нелинейностью кубического типа, удовлетворяющая следующим условиям.

(A1) Вырожденное уравнение

$$f(u, x) = 0 \tag{3}$$

имеет ровно три ограниченных корня $\varphi^{(0, \pm)}(x)$:

$$a < \varphi^{(-)}(x) < \varphi^{(0)}(x) < \varphi^{(+)}(x) < b, \quad x \in [0, 1], \tag{4}$$

где a и b — некоторые константы, причём

$$f_u(\varphi^{(\pm)}(x), x) > 0, \quad f_u(\varphi^{(0)}(x), x) < 0 \quad \forall x \in \bar{X}. \tag{5}$$

(A2) Решение в начальный момент времени удовлетворяет условию

$$a \leq u_{init}(x) \leq b, \tag{6}$$

а уравнение

$$u_{init}(x) = \varphi^{(0)}(x) \tag{7}$$

имеет K корней x_k^{init} , $k = \overline{1, K}$, упорядоченных следующим образом:

$$0 < x_1^{init} < \dots < x_k^{init} < \dots < x_{K-1}^{init} < x_K^{init} < 1,$$

причём функция $\varphi^{(0)}(x) - u_{init}(x)$ меняет знак в этих точках.

Нетрудно видеть, что правая часть должна иметь вид полинома III степени относительно u :

$$f(u, x) = \tilde{f}(x) \left(u - \varphi^{(-)}(x) \right) \left(u - \varphi^{(0)}(x) \right) \left(u - \varphi^{(+)}(x) \right), \quad (8)$$

$$f_u(u, x) = \tilde{f}(x) \left(3u^2 - 2u \left(\varphi^{(-)}(x) + \varphi^{(0)}(x) + \varphi^{(+)}(x) \right) + \right. \\ \left. + \varphi^{(-)}(x)\varphi^{(0)}(x) + \varphi^{(0)}(x)\varphi^{(+)}(x) + \varphi^{(+)}(x)\varphi^{(-)}(x) \right), \quad (9)$$

где $\tilde{f}(x) > 0 \quad \forall x \in \bar{X}$.

Установлено [4], что в таких задачах за малое время, пропорциональное $\varepsilon |\ln \varepsilon|$, в окрестностях x_k^{init} , $k = \overline{1, K}$, формируются контрастные структуры, а в остальной расчётной области решение отличается от $\varphi^{(-)}(x)$ или $\varphi^{(+)}(x)$ на малую величину порядка $O(\varepsilon)$.

Если, кроме того, выполняется условие

(A3) Функция

$$I(x) = \int_{\varphi^{(-)}(x)}^{\varphi^{(+)}(x)} f(u, x) du \quad (10)$$

определена и знакопостоянна на \bar{X} ,

то контрастные структуры будут двигаться навстречу друг другу и/или границам расчётной области независимо от наличия адвекционного члена и за конечное время должны уничтожиться, столкнувшись друг с другом или с границей [3]. В таком случае решение задачи будет близко к $\varphi^{(-)}(x)$ или $\varphi^{(+)}(x)$, и можно говорить о том, что оно *стабилизировалось* к $\varphi^{(\pm)}(x)$. Для выполнения условия **(A3)** нужно, чтобы $\varphi^{(\pm, 0)}(x)$ были слабо меняющимися функциями (с достаточно малой C -нормой первой производной).

О численных методах интегрирования одномерных параболических задач

Разностные методы. Для решения одномерных параболических задач вводят структурированную сетку по пространству и времени, вообще говоря, с непостоянными шагами: (x_n, t_j) , $n = \overline{0, N}$, $j = \overline{0, J}$. Затем пространственные дифференциальные операторы заменяют их разностными аппроксимациями с заданным порядком. Производная по времени заменяется простым разностным оператором первого порядка, что даёт лишь первый порядок точности по времени, либо строится многошаговый метод [5]. Возможны три варианта:

1. Схема явная, то есть решение на новом слое прямо выражается через известные решения на текущем и, возможно, предыдущих слоях. Явные схемы устойчивы только при выполнении достаточно жёсткого условия на шаг по времени $\tau \leq O(h^2)$, которое быстро нарушается при сгущении

сеток, необходимо, например, для контроля точности по Ричардсону или Эйткену [6].

2. Схема полностью неявная, т.е. функции, входящие в разностное уравнение, зависят от решения на новом слое. Возникает нелинейное уравнение относительно \hat{U} , которое нужно решать итерационными методами на каждом шаге по времени. Схема становится очень трудоёмкой и, кроме того, возникает вопрос о сходимости итерационных методов.
3. Схема полуявная. Разностное уравнение является линейным относительно \hat{U} и решается прямыми методами с известным числом операций. В одномерном случае матрица системы линейных алгебраических уравнений является трёхдиагональной, и система может быть решена методом прогонки [7, 8] за $O(N)$ действий, то есть трудоёмкость как у явных схем. Как правило, полуявные схемы безусловно устойчивы.

Метод прямых. Нередко применяется следующий приём: разностная аппроксимация вводится только по пространству, после чего получается система обыкновенных дифференциальных уравнений, где неизвестными скалярами являются сеточные значения неизвестной функции. Таким образом задача оказывается сведённой к системе из $N + 1$ обыкновенных дифференциальных уравнений, которую можно решать известными схемами для задач Коши. При этом устойчивость, порядок точности и монотонность по времени будут определяться применяемой схемой, что существенно упрощает обоснование свойств численного метода.

Отмечается [6], что получаемая задача является жёсткой, причём жёсткость тем сильнее, чем больше неизвестных компонент, т.е. шагов по пространству. Как известно, явные схемы не могут быть А-устойчивыми, то есть они устойчивы только при достаточно малом шаге по времени. В частности, для явной схемы Эйлера, которая легко сводится к простейшей явной разностной схеме для параболических задач, должно выполняться неравенство $\tau \leq O(h^2)$. Поэтому рекомендуется пользоваться неявными или полуявными схемами.

Одной из лучших схем II порядка точности по времени (равного порядку применяемой разностной аппроксимации по координате) является комплексная схема Розенброка CROS1 [6]. Она имеет L_2 -устойчивость, обеспечивающую быстрое затухание жёстких компонент, и монотонность по времени, то есть численное решение не будет иметь осцилляций, обусловленных только численным методом и отсутствующих у точного решения. Кроме того, эта схема является одностадийной, то есть на каждом шаге по времени требуется вычислить правую часть и якобиан только один раз, а платой за второй порядок точности и устойчивости служит только необходимость решить систему линейных алгебраических уравнений с комплексными коэффициентами. Как будет продемонстрировано ниже, матрица Якоби будет всегда иметь только три

ненулевых диагонали, и для её обращения можно применять метод немонотонной прогонки [7], имеющий сложность $O(N)$, безусловную устойчивость и корректность. Таким образом, схема CROSl является экономичной для одномерных начально-краевых параболических задач, то есть безусловно устойчивой и имеющей сложность как у явных схем. Из недостатков отмечается пространственная немонотонность [6], которая, во-первых, пренебрежимо мала, а во-вторых, осцилляции возникают на удалении от контрастных структур.

Приведём выражения для CROSl. Пусть решение на слое t известно и равно \mathbf{U} , шаг на новый слой равен $\tau = \hat{t} - t$. Тогда решение $\hat{\mathbf{U}}$ на новом слое \hat{t} равно

$$\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} + \tau \text{Re}(\mathbf{w}), \quad \left[\mathbf{E} - \frac{1+i}{2} \tau \mathbf{F}_{\mathbf{U}}(\mathbf{U}, t) \right] \mathbf{w} = \mathbf{F} \left(\mathbf{U}, t + \frac{\tau}{2} \right). \quad (11)$$

Здесь \mathbf{E} – единичная матрица, $(\mathbf{F}_{\mathbf{U}})_{n,m} = \frac{\partial F_n}{\partial U_m}$ – якобиан правой части.

Разностные операторы производных по пространству. Построим разностные операторы как минимум второго порядка аппроксимации, чтобы получить второй порядок точности схемы по пространству, совпадающий с таковым по времени. Самый простой способ сделать это – строить симметричные операторы. Это позволяет естественным образом сокращать нечётные члены разложений u_{n+1} и u_{n-1} в ряд Тейлора в окрестности u_n .

Первую производную в x_n несложно аппроксимировать со II порядком [8]:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_n} = \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{x_{n+1} - x_{n-1}} + O((x_{n+1} - x_{n-1})^2). \quad (12)$$

Чтобы получить разностный оператор для второй производной, запишем (12) в полуцелых узлах $x_{n-\frac{1}{2}}$ и $x_{n+\frac{1}{2}}$ и подставим в (12). Так как $x_n - x_{n-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_n - x_{n-1})$ и $x_{n+\frac{1}{2}} - x_n = \frac{1}{2}(x_{n+1} - x_n)$, то расстояние между полуцелыми узлами составит $\frac{1}{2}(x_{n+1} - x_{n-1})$ и разностный оператор примет вид

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x=x_n} = \frac{u'_{n+\frac{1}{2}} - u'_{n-\frac{1}{2}}}{x_{n+\frac{1}{2}} - x_{n-\frac{1}{2}}} = \left(\frac{u_{n+1} - u_n}{x_{n+1} - x_n} - \frac{u_n - u_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} \right) + O((x_{n+1} - x_{n-1})^2). \quad (13)$$

Однако симметричные операторы не годятся для аппроксимации граничных условий Неймана. Для них необходимы односторонние операторы. Их можно получить, пользуясь экстраполяционными формулами [8]:

$$u'_n = u'_{n-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}(x_n - x_{n-1})u''_{n-1} + O((x_n - x_{n-1})^2);$$

$$u'_n = u'_{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}(x_{n+1} - x_n)u''_{n+1} + O((x_{n+1} - x_n)^2).$$

Подставив в них (12) и (13), получим:

$$u'_n = \left(\frac{1}{x_n - x_{n-1}} + \frac{1}{x_n - x_{n-2}} \right) (u_n - u_{n-1}) - \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n - x_{n-2}} \frac{u_{n-1} - u_{n-2}}{x_{n-1} - x_{n-2}} + O((x_n - x_{n-2})^2), \quad (14)$$

$$u'_n = \left(\frac{1}{x_{n+1} - x_n} + \frac{1}{x_{n+2} - x_n} \right) (u_{n+1} - u_n) - \frac{x_{n+1} - x_n}{x_{n+2} - x_n} \frac{u_{n+2} - u_{n+1}}{x_{n+2} - x_{n+1}} + O((x_{n+2} - x_n)^2). \quad (15)$$

При постоянном шаге по пространству h для (12), (13), (14) и (15) имеем вид

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_n} &= \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h} + O(h^2); & \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x=x_n} &= \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2} + O(h^2); \\ \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_n} &= \frac{4u_{n+1} - 3u_n + u_{n+2}}{2h} + O(h^2); & \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=x_n} &= \frac{3u_n - 4u_{n-1} + u_{n-2}}{2h} + O(h^2). \end{aligned} \quad (16)$$

Адаптивные сетки

Предложенные численные методы работают на произвольных сетках как по x , так и по t . Если известно, в какие моменты времени решение быстро меняется, то можно уменьшить шаг в их окрестности за счёт увеличения шагов по времени на интервалах, когда решение меняется медленнее. Аналогично, если известно, что решение имеет контрастные структуры – u или u_x претерпевает резкий скачок в определённых точках – можно измельчить в их окрестности шаг по координате и увеличить его в областях, где решение слабо зависит от x .

Более сложной является ситуация, когда решение имеет подвижные контрастные структуры. В таком случае сетка по пространству должна быть разной на разных слоях, то есть зависеть от времени. Кроме того, схема должна предусматривать возможность изменения координат узлов пространственной сетки. Наконец, нужен алгоритм, который будет отслеживать местоположение контрастных структур и на основе этой информации на каждом шаге по времени строить сетку для нового слоя.

Схема. В данной работе применён подход, изложенный в [9]. Вводится новая переменная ξ , по которой будет введён постоянный шаг и относительно которой будет проведена разностная аппроксимация и записана схема. Тогда переменная x становится функцией ξ и времени $x = x(\xi, t)$, которая, вообще говоря, неизвестна и её нужно найти вместе с решением $u(\xi, t)$.

Сделаем замену x на ξ в (1). Будем иметь:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x}; \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}; \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{du}{dt} - \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t}.$$

Подставив эти выражения в (1), получим:

$$\frac{du}{dt} = B(u, x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial u}{\partial \xi} \left\{ B(u, x, t) \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial \xi}{\partial x} \left(\frac{\partial x}{\partial t} - A(u, x, t) \right) \right\} - f(u, x, t). \quad (17)$$

Теперь введём некоторую равномерную сетку по ξ : $\xi_n = \xi_0 + nh, n = \overline{0, N}, h = \frac{\xi_N - \xi_0}{N}$. Перейдём к разностной аппроксимации по ξ и по x в (17), воспользовавшись выражениями (12), (13) для x и (16) для ξ . При этом величина ξ будет присутствовать только в виде разностей, представимых через h , а он в свою очередь сократится, и переменная ξ будет полностью исключена из уравнений. Член $\frac{\partial x}{\partial t}$ выразим через (12), воспользовавшись предыдущим слоем \check{t} , то есть фактически получим двухшаговую схему. В начале счёта нам понадобится (-1) -й слой. В данной работе использовалось $t_{-1} = t_0 - (t_1 - t_0)$, что обеспечивает максимальную точность разностного оператора (12), сетка на этом слое берётся с постоянным шагом.

В граничных условиях не делаем никаких замен и аппроксимируем их разностными операторами (14) и (15). Получатся линейные уравнения относительно u_n , которые легко решаются аналитически и позволяют выразить значение решения в граничных узлах u_0 и u_N через значения во внутренних узлах и известную из условий Неймана производную на границе.

После всех преобразований начальная задача принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{du_n}{dt} &= \mathbf{F}(\mathbf{U}, \mathbf{X}, t, \hat{x}_n, \hat{t}, \check{x}_n, \check{t}) = 4B(u_n, x_n, t) \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{(x_{n+1} - x_{n-1})^2} - \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{x_{n+1} - x_{n-1}} \times \\ &\times \left\{ B(u_n, x_n, t) \frac{x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}}{(x_{n+1} - x_n)(x_n - x_{n-1})} - \frac{\hat{x}_n - \check{x}_n}{\hat{t} - \check{t}} + A(u_n, x_n, t) \right\} - f(u_n, x_n, t), n = \overline{1, N-1}; \\ u_0 &= \frac{(x_2 - x_0)^2 u_1 - (x_1 - x_0)^2 u_2}{(x_2 + x_1 - 2x_0)(x_2 - x_1)} - \frac{(x_1 - x_0)(x_2 - x_0)}{x_2 + x_1 - 2x_0} h_l; \\ u_N &= \frac{(x_N - x_{N-2})^2 u_{N-1} - (x_N - x_{N-1})^2 u_{N-2}}{(2x_N - x_{N-1} - x_{N-2})(x_{N-1} - x_{N-2})} - \frac{(x_N - x_{N-1})(x_N - x_{N-2})}{2x_N - x_{N-1} - x_{N-2}} h_r; \\ u|_{t=t_0} &= u_{init}(x_n), \quad n = \overline{0, N}. \end{aligned} \quad (18)$$

Задачу (18) решаем комплексной схемой Розенброка (11).

Матрицу Якоби \mathbf{F}_U нетрудно найти аналитически. Она равна

$$\begin{aligned} (\mathbf{F}_U)_{n,n-1} &= \frac{1}{x_{n+1} - x_{n-1}} \left\{ \frac{4B(u_n, x_n, t)}{x_{n+1} - x_{n-1}} + B(u_n, x_n, t) \frac{x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}}{(x_{n+1} - x_n)(x_n - x_{n-1})} - \frac{\hat{x}_n - \check{x}_n}{\hat{t} - \check{t}} + A(u_n, x_n, t) \right\}; \\ (\mathbf{F}_U)_{n,n+1} &= \frac{1}{x_{n+1} - x_{n-1}} \left\{ \frac{4B(u_n, x_n, t)}{x_{n+1} - x_{n-1}} - B(u_n, x_n, t) \frac{x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}}{(x_{n+1} - x_n)(x_n - x_{n-1})} + \frac{\hat{x}_n - \check{x}_n}{\hat{t} - \check{t}} - A(u_n, x_n, t) \right\}; \\ (\mathbf{F}_U)_{n,n} &= -\frac{8B(u_n, x_n, t)}{(x_{n+1} - x_{n-1})^2} - f_u(u_n, x_n, t) - \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{x_{n+1} - x_{n-1}} A_u(u_n, x_n, t) + \\ &+ \frac{4B_u(u_n, x_n, t)}{x_{n+1} - x_{n-1}} \left\{ \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{x_{n+1} - x_{n-1}} - \frac{(u_{n+1} - u_{n-1})(x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1})}{4(x_{n+1} - x_n)(x_n - x_{n-1})} \right\}; \\ (\mathbf{F}_U)_{n,m} &\equiv 0, \quad m \neq n-1, n+1. \end{aligned} \quad (19)$$

Матрица (19) является трёхдиагональной, что позволяет решать систему линейных алгебраических уравнений (11) методом немонойтонной прогонки [7].

Строго говоря, система (18) является дифференциально-алгебраической, а не чисто дифференциальной, так как правая часть F определена только для внутренних узлов, а значения u в граничных узлах определяются алгебраическими соотношениями. Но эту проблему легко решить: по (11) находим \hat{U} во всех внутренних узлах, после чего можно сразу вычислить решение в граничных узлах по формулам, полученным из граничных условий, и приступить к нахождению решения на следующем слое.

Построение сеток. Как отмечалось выше, в задаче (2) с нелинейностью кубического типа возникают контрастные структуры, которые впоследствии движутся по известному закону. Эта априорная информация может быть использована для построения адаптивной сетки для каждого слоя (см., например, [10]). Однако этого следует избегать. Во-первых, для каждого начального условия и правой части будут своё количество контрастных структур и свой закон движения, для применения которых, вообще говоря, необходимо редактировать программу. Во-вторых, класс задач (2) с условиями (A1) – (A3) достаточно узок, и если решение в начальный момент времени, например, касается $\varphi^{(0)}(x)$ или нелинейность в правой части имеет более высокий порядок (у вырожденного уравнения больше корней), то теория движения фронтов [3] становится неприменимой. Асимптотический анализ таких усложнённых моделей затруднителен. В-третьих, точка локализации контрастной структуры известна отнюдь не точно, а с погрешностью $O(\varepsilon)$. Поэтому необходим алгоритм, который будет без каких-либо априорных сведений отслеживать области с большой по модулю первой производной решения по координате и измельчать там сетку за счёт её разрежения в областях с малым градиентом решения. Число узлов на каждом слое должно при этом оставаться постоянным.

Очевидно, для адаптации сетки на новом слое алгоритму нужно иметь решение на нём, заданное на некоторой сетке. Иными словами, это будет итерационный процесс, в котором мы с помощью разностной схемы ОДУ находим решение на новом слое на некоторой сетке начального приближения (например, на сетке с n -го слоя), после чего строим нашим алгоритмом сетку следующего приближения. Процесс повторяется до выполнения некоторого критерия (например, до достижения достаточно малой нормы разности сеток последнего и предпоследнего приближений).

В качестве алгоритма построения адаптивной сетки по известной функции (назовём её *мониторной*) можно использовать метод равномерного распределения весовой функции [11, 12]. Суть его в том, что каждой ячейке сетки (в одномерном случае — каждой паре соседних узлов (x_n, x_{n+1}) , их количество на слое составляет N) ставится в соответствие некоторая величина — весовая

функция $\omega_{n+\frac{1}{2}}$, которую можно прямо вычислить, зная координаты узлов и значения функции в них. Должно выполняться условие нормировки:

$$x_r - x_l = C \sum_{n=0}^{N-1} \frac{1}{\omega_{n+\frac{1}{2}}}, \quad (20)$$

где C — нормировочная константа. Цель — подобрать такую сетку, чтобы выполнялось условие

$$\omega_{n+\frac{1}{2}} \cdot (x_{n+1} - x_n) = C \quad \forall n = \overline{0, N-1}. \quad (21)$$

Весовая функция $\omega_{n+\frac{1}{2}}$ должна быть тем больше, чем меньше должен быть шаг (x_n, x_{n+1}) . В зависимости от её выбора уравнение (21) приводит к системе нелинейных алгебраических уравнений. В случае если мониторинговая функция задана аналитически, эту систему нетрудно решить методом Ньютона или простых итераций. В нашем случае мониторинговой функцией будет служить решение на новом слое, заданное сеточными значениями на неоптимальной сетке, а её якобиан придётся находить численно на этой сетке, не имея возможности уменьшать шаг. За счёт этого алгоритм становится ненадёжным.

В данной работе применён метод, предложенный в [13] и основанный на идее равномерного распределения весовой функции. В качестве весов берётся величина

$$\omega_{p+\frac{1}{2}}(\hat{x}^s) = |\hat{u}_{p+1}^s - \hat{u}_p^s| + \delta, \quad (22)$$

где \hat{x}^s и \hat{u}^s — сетка s -го приближения и решение на ней соответственно, δ — величина, определяющая концентрацию узлов на участках, где решение равно константе. Сетка на новом слое вычисляется методом простых итераций с применением релаксационного члена:

$$\hat{x}_n^{s+1} = (1 - \sigma)\hat{x}_n^s + \sigma \left(\sum_{p=0}^{N-1} \omega_{p+\frac{1}{2}}^{-1}(\hat{x}^s) \right)^{-1} \sum_{p=0}^{n-1} \omega_{p+\frac{1}{2}}^{-1}(\hat{x}^s). \quad (23)$$

В данной работе в качестве начального приближения \hat{x}^0 бралась сетка с текущего слоя x . Полагалось $\delta = \varepsilon$, $\sigma = 0.1 - 0.01$.

Шаг по времени

Решение может сильно неравномерно меняться не только по пространству, но и по времени. Например, в задаче (2) с кубической нелинейностью «хорошее» начальное условие превращается в функцию координаты с контрастными структурами за малое время, пропорциональное $\varepsilon |\ln \varepsilon|$. Это

означает, что в этом интервале в окрестностях точек формирования контрастных структур производная по времени очень велика, и для уменьшения соответствующей ошибки необходимо уменьшить шаг по времени. Кроме того, на вычислительном эксперименте счёт нередко разваливался из-за недостаточно малого шага по времени на этапах формирования и уничтожения контрастных структур.

В данной работе предлагается отслеживать эти процессы через изменения полной длины дуги решения на слое:

$$\hat{t} - t = \frac{\tau_0}{1 + \Delta|\hat{L} - L|}, \quad L = \sum_{n=0}^{N-1} \sqrt{(x_{n+1} - x_n)^2 + (u_{n+1} - u_n)^2}. \quad (24)$$

Здесь τ_0 — шаг по времени при отсутствии процессов формирования или уничтожения контрастных структур, Δ — множитель, регулирующий интенсивность измельчения шага.

Численный эксперимент

Для исследования предложенного в данной работе численного метода решалась задача (2) со следующими параметрами:

$$\begin{aligned} \varphi^{(+)}(x) &\equiv 1; \quad \varphi^{(0)}(x) \equiv \frac{1}{4}; \quad \varphi^{(-)}(x) \equiv -1; \quad f(u, x) = (u^2 - 1) \left(u - \frac{1}{4}\right); \\ f_u(u, x) &= 3u^2 - \frac{1}{2}u - 1; \quad \varepsilon = 10^{-4}; \quad \tau_0 = 7 \cdot 10^{-5}; \quad \Delta = \frac{4}{\sqrt{\varepsilon}}; \\ u_{init}(x) &= \frac{1}{2} \sin(4\pi x); \quad h_0 = 2\pi; \quad h_1 = 2\pi; \quad x_l = 0; \quad x_r = 1. \end{aligned} \quad (25)$$

Решение $u(x, t)$ на слое изображено на рисунках 1, 2 и 3 сплошной линией. Штрихпунктиром обозначено решение $u(\xi, t)$ в зависимости от параметра ξ , пунктиром — корни вырожденного уравнения $\varphi^{(0, \pm)}(x)$, а штриховой линией — отношение постоянного шага по x к адаптивному в данной точке. Сетка по координате измельчена в контрастных структурах и переходных областях около них, в которых велика кривизна интегральной кривой на слое, а также у границ расчётной области, где заданы неоднородные условия Неймана (слабые погранслои). В численных экспериментах удалось измельчить шаг внутри контрастных структур в 160 раз по сравнению с постоянным шагом по пространству $h = \frac{x_r - x_l}{N}$ при общем числе шагов $N = 2048$, при этом на каждом слое сетка строилась за одну итерацию. Если бы мы считали с постоянным шагом, то для такого же разрешения контрастных структур понадобилось бы 327680 шагов, что сопряжено с очень большими вычислительными затратами.

На рисунке 2 изображено решение на начальном слое. Видно, что оно расположено между $\varphi^{(-)}(x)$ и $\varphi^{(+)}(x)$ и пересекает $\varphi^{(0)}(x)$ в точках, в которых формируются контрастные структуры. Под решение на начальном слое также

строится адаптивная сетка, что актуально в случае, если оно уже содержит контрастные структуры.

Отметим, что вычисления на адаптивных сетках и на сетках с постоянным шагом давали заметно различные значения времени, при которых происходили схлопывание контрастных структур и стабилизация к устойчивому решению сингулярно возмущённой задачи (2), (25), равному $\varphi^{(-)}(x)$ или $\varphi^{(+)}(x)$ [3, 4]. Более того, на сетках с постоянным шагом (и на плохих адаптивных сетках) пары контрастных структур, движущихся навстречу друг другу, могли схлопываться в существенно разные моменты времени. Из вида начального условия точки формирования контрастных структур в обеих парах равноудалены друг от друга, а из построения асимптотики для скоростей движения фронтов [3, 4] скорости сближения для каждой пары контрастных структур должны совпадать. Следовательно, и схлопнуться они должны одновременно. Таким образом, применение адаптивных сеток позволяет существенно повысить точность определения местоположения контрастных структур. Это особенно важно в задачах гидро- и газодинамики, где моделируется распространение ударных волн, являющихся контрастными структурами функции плотности или давления.

На рисунке 3 изображена пара контрастных структур непосредственно перед схлопыванием. Несмотря на то что между ними ещё остаётся небольшая область, где решение приблизительно равно константе, алгоритм (22), (23) уже измельчил там сетку как минимум в 2 раза по сравнению с постоянным шагом по пространству. Таким образом алгоритм «подготовился» к столкновению контрастных структур и позволил благополучно его смоделировать.

Перспективы распараллеливания

Слой с решением на них строятся последовательно. В рамках построения каждого слоя происходит, вообще говоря, несколько последовательных итераций для нахождения шага по времени. Каждая из них состоит из нескольких итераций по построению адаптивной сетки на слое. Каждая такая итерация состоит из двух этапов: нахождения решения на новом слое на сетке текущего приближения (11) и построения сетки нового приближения (23). Нахождение решения состоит из двух этапов: вычисления правой части и якобиана и прогонки.

Всё, кроме прогонки, распараллеливается следующим образом: диапазон $\overline{0, N}$ или $\overline{1, N - 1}$ делится на интервалы по числу процессоров и каждый процессор вычисляет элементы массива из своего интервала. Для немонотонной прогонки существует модификация [14], трудоёмкость которой выше на постоянный множитель, чем у обычной немонотонной прогонки, но подлежащая распараллеливанию.

Автор благодарит д.ф.-м.н. Попова И.В., проф. Полякова С.В. и проф. Нефёдова Н.Н. за ценные замечания и помощь в поиске литературы.

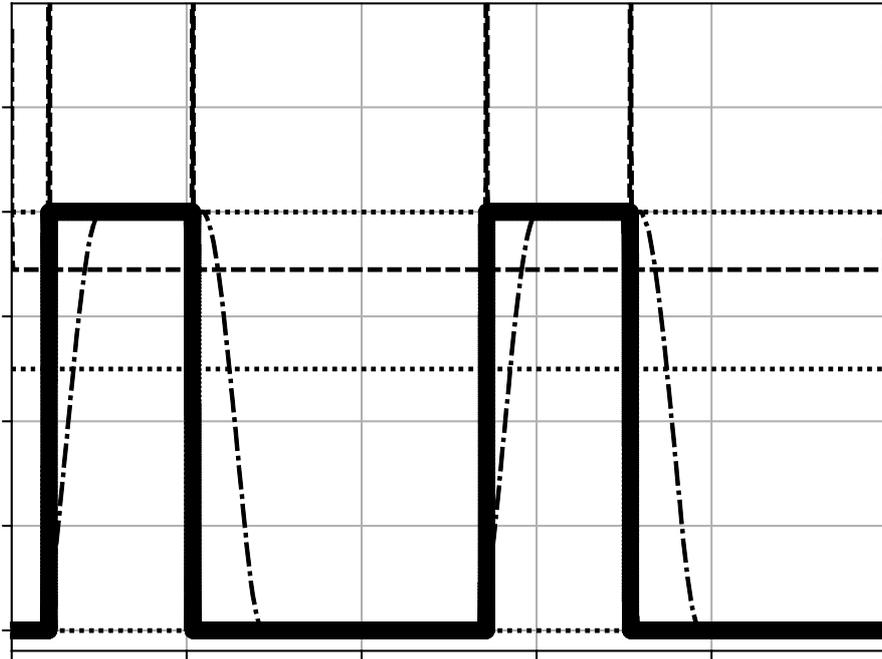


Рис. 1. Решение на слое

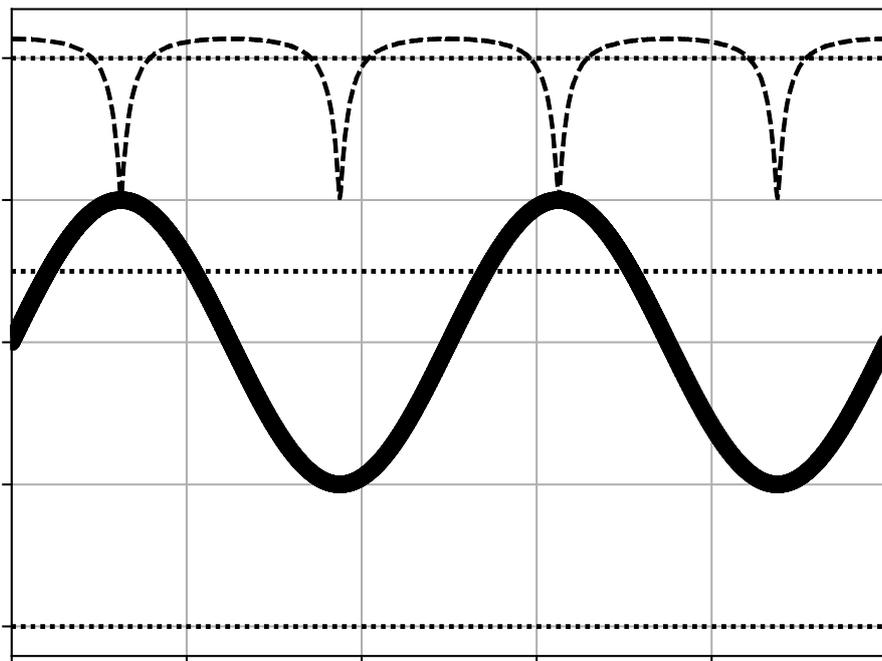


Рис. 2. Решение на начальном слое

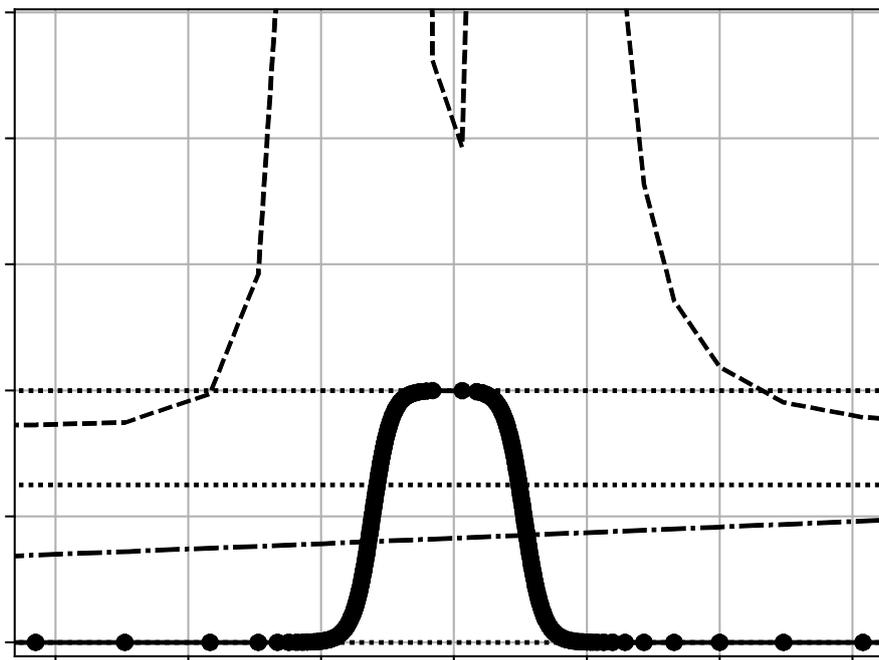


Рис. 3. Сближение контрастных структур

Список литературы

1. Васильева А.Б., Бутузов В.Ф. Асимптотические методы в теории сингулярных возмущений. М.: Высшая школа, 1990.
2. Нефедов Н.Н. Метод дифференциальных неравенств для некоторых классов нелинейных сингулярно возмущенных задач с внутренними слоями // Дифференц. уравнения. 1995. **31**, №7. 1142–1149. https://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=de&paperid=9455&option_lang=rus.
3. Божевольнов Ю.В., Нефедов Н.Н. Движение фронта в параболической задаче реакция-диффузия // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2010. **50**, №2. 276–285. https://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=zvmmf&paperid=4827&option_lang=rus.
4. Бутузов В.Ф., Нефедов Н.Н., Шнайдер К.Р. О формировании и распространении резких переходных слоев в параболических задачах // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 2005. №1. 9–13. <http://vmu.phys.msu.ru/ru/abstract/2005/1/05-1-09/>.
5. Саульев В.К. Интегрирование уравнений параболического типа методом сеток. М.: Физматгиз, 1960.
6. Калиткин Н.Н., Корякин П.В. Численные методы. Книга 2. Методы математической физики. М.: Издательский центр «Академия», 2013.

7. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
8. Калиткин Н.Н., Альшина Е.А. Численные методы. Книга 1: Численный анализ. М.: Издательский центр «Академия», 2013.
9. Дегтярёв Л.М., Иванова Т.С. Метод адаптивных сеток в одномерных нестационарных задачах конвекции-диффузии // Дифференц. уравнения. 1993. **29**, №7. 1179–1192.
https://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=de&paperid=8148&option_lang=rus.
10. Lukyanenko D.V., Shishlenin M.A., Volkov V.T., Bryndin L.S., Kirillov P.I. 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. #54. 233–247. DOI: [10.1016/j.cnsns.2017.06.002](https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2017.06.002).
11. Тишкин В.Ф. Методы построения расчетных сеток. М.: ВМК МГУ, 2013.
https://keldysh.ru/math-center/prj-reports/EPrij-02_lectures.pdf.
12. Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Mastin C.W. Numerical grid generation: Foundations and Applications. North Holland, 1985.
13. Похилко В.И., Тишкин В.Ф. Однородный алгоритм расчета разрывных решений на адаптивных сетках // Мат. моделирование. 1994. **6**, №11. 25-40.
https://www.mathnet.ru/php/archive.phtml?wshow=paper&jrnid=mm&paperid=1926&option_lang=rus.
14. Поляков С.В. Решение пространственно одномерных краевых задач. https://polyakov.imamod.ru/arc/stud/parallel/lecture_10.pdf. (Дата обращения: 13.02.2024).