

Параллельная реализация задач транспорта веществ и восстановления донной поверхности на основе схем повышенного порядка точности*

А.И. Сухинов, А.Е. Чистяков, А.А. Семенякина, А.В. Никитина

Южный федеральный университет

Работа посвящена изучению дискретных аналогов операторов конвективного и диффузионного переноса четвертого порядка точности в случае частичной заполненности ячеек. Выполнено сопоставление результатов расчета задачи транспорта веществ на основе схем второго и четвертого порядков точности. Из сопоставления результатов численных экспериментов следует, что для задачи диффузии удалось повысить точность в 66.7 раз, а для задачи диффузии-конвекции в 48.7 раз. Для решения двумерной задачи диффузии-конвекции на основе схем повышенного порядка точности, была построена библиотека двухслойных итерационных методов, предназначенных для решения девятидиагональных сеточных уравнений на многопроцессорной вычислительной системе. Предложен математический алгоритм, предназначенный для восстановления рельефа дна акватории на основе гидрографической информации (глубины водоема в отдельных точках или изолиний уровня), и выполнена его численная реализация. На основе полученного метода решения задачи получена карта рельефа дна Азовского моря.

1. Введение

Одной из основных задач вычислительной математики является проблема решения систем линейных алгебраических уравнений. Для нахождения приближенного решения систем уравнений используются прямые и итерационные методы. В классе двухслойных итерационных методов одним из наиболее успешных является предложенный А. А. Самарским попеременно-треугольный метод (ПТМ) [1]. Позднее, академиком А.Н. Коноваловым был разработан адаптивный вариант ПТМ [2,3]. В работе [4] приведено описание модифицированного попеременно-треугольного итерационного метода (МПТМ) решения задачи Дирихле для уравнения Пуассона, так же приведено описание метода простой итерации в случае несамосопряженного оператора. В работе [5] продемонстрирована техника повышения скорости сходимости ПТМ с априорной информацией за счет уточнения спектральных оценок предобусловленного оператора. Часто в прикладных задачах, например при математическом моделировании гидродинамики [6-8], тепломассопереноса [9,10], геофильтрации, динамики популяций [11,12], сейсморазведки [13,14] и других процессов, возникает необходимость решать уравнения вида конвекции-диффузии. В случае использования неявных схем и схем с весами такие задачи приводят к линейным алгебраическим уравнениям с несамосопряженным оператором. Одним из подходов к решению подобных задач является метод симметризации по Гауссу [4]. Недостатком данного метода является увеличение в квадрат раз числа обусловленности оператора задачи, что приводит к уменьшению скорости сходимости итерационных методов решения сеточных уравнений. Этот факт способствовал созданию авторским коллективом варианта модифицированного итерационного попеременно-треугольного метода минимальных поправок для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором [15].

Следует отметить, что использование быстросходящихся итерационных методов является эффективным способом уменьшить время работы алгоритма, но не единственным. К увеличению быстродействия программных комплексов также приводит использование параллельных расчетов [16-19] и выбор разностных схем. Для увеличения временного шага можно использо-

* Работа выполнена при частичной поддержке проектов Программы № 43 фундаментальных исследований Президиума РАН по стратегическим направлениям развития науки "Фундаментальные проблемы математического моделирования".

вать схемы с оптимальным значением весового параметра [20]. Для увеличения точности расчетов помимо дробления расчетной сетки, что приводит к увеличению времени счета, можно использовать схемы повышенного порядка точности [21,22] и схемы, учитывающие заполненности ячеек [23,24]. Во втором случае увеличение точности происходит за счет лучшей аппроксимации границы расчетной области.

В рамках выполнения работы построена библиотека итерационных методов, предназначенных для решения сеточных уравнений с самосопряженным и несамосопряженным операторами, возникающими при решении прикладных задач, схемами повышенного порядка точности, учитывающими заполненности ячеек на многопроцессорной вычислительной системе.

2. Постановка задачи

Задача транспорта веществ может быть представлена уравнением диффузии–конвекции–реакции:

$$c'_t + uc'_x + vc'_y = (\mu c'_x)'_x + (\mu c'_y)'_y + f,$$

с граничными условиями:

$$c'_n(x, y, t) = \alpha_n c + \beta_n,$$

где u, v – компоненты вектора скорости, μ – коэффициент турбулентного обмена, f – функция, описывающая интенсивность и распределение источников.

Для численной реализации дискретной математической модели поставленной задачи вводится равномерная сетка:

$$w_h = \{t^n = n\tau, x_i = ih_x, y_j = jh_y; n = \overline{0..N_t}, i = \overline{0..N_x}, j = \overline{0..N_y}; N_t\tau = T, N_x h_x = l_x, N_y h_y = l_y\},$$

где τ – шаг по времени, h_x, h_y – шаги по пространству, N_t – верхняя граница по времени, N_x, N_y – границы по пространству.

Дискретные аналоги операторов конвективного uc'_x и диффузионного $(\mu c'_x)'_x$ переноса второго порядка погрешности аппроксимации в случае частичной заполненности ячеек могут быть записаны в следующем виде:

$$(q_0)_{i,j} uc'_x \square (q_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{2h_x} + (q_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{2h_x}, \quad (1)$$

$$(q_0)_{i,j} (\mu c'_x)'_x \square (q_1)_{i,j} \mu_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j} \mu_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h_x^2} -$$

$$- \left| (q_1)_{i,j} - (q_2)_{i,j} \right| \mu_{i,j} \frac{\alpha_x c_{i,j} + \beta_x}{h_x},$$

где q_i – коэффициенты, описывающие заполненность контрольных областей [24].

3. Схемы повышенного порядка точности для операторов конвективного и диффузионного переносов

Выражение (1)-(2) можно рассмотреть в случае $(q_1)_{i,j} = (q_2)_{i,j} = 1$. Для повышения порядка погрешностей аппроксимаций выражений (1)-(2) необходимо исследовать на точность следующие разностные схемы:

- дискретный аналог оператора конвективного переноса в случае отсутствия влияния границы области:

$$uc'_x \square u_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{2h_x} + u_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{2h_x}, \quad (3)$$

- дискретный аналог оператора диффузионного переноса в случае отсутствия влияния границы области:

$$(\mu c'_x)'_x \square \mu_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h_x^2} - \mu_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h_x^2}, \quad (4)$$

Погрешность аппроксимации выражения (3) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} & \mu_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{2h_x} + \mu_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{2h_x} = \\ & = \mu_{i,j} (c_{i,j})' + \frac{(c_{i,j})' (u_{i,j})''}{4} h_x^2 + \frac{u_{i,j} (c_{i,j})'''}{6} h_x^2 + \frac{(u_{i,j})' (c_{i,j})''}{4} h_x^2 + O(h_x^4). \end{aligned}$$

Таким образом, для аппроксимации оператора конвективного переноса uc' разностной схемой, обладающей четвертым порядком точности, необходимо аппроксимировать оператор $uc' - c'u''h^2/4 - uc'''h^2/6 - u'c''h^2/4$ схемой второго порядка точности.

Аппроксимация оператора конвективного переноса uc' разностной схемой, обладающей четвертым порядком точности, запишется в следующем виде:

$$(q_0)_i L(c) = -(q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \frac{(q_1)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} c_{i+2} - \left(-(q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} \right) + \right. \quad (5)$$

$$\left. + (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} + (q_1)_i \left(-\frac{u_{i+1/2}}{2h} + k_i^{(1)} + k_i^{(2)} \right) \right) c_{i+1} + \left(-(q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_2)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} \right) + \right.$$

$$\left. + (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_1)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}} \right) + (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{2h} - (q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{2h} - ((q_2)_i - (q_1)_i) k_i^{(1)} + ((q_2)_i + (q_1)_i) k_i^{(2)} \right) c_i +$$

$$- \left(-(q_1)_i \frac{u_{i+1/2}}{12h} \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} + (q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \left(2 + \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} \right) + (q_2)_i \left(\frac{u_{i-1/2}}{2h} + k_i^{(2)} - k_i^{(1)} \right) \right) c_{i-1} -$$

$$- \left(-(q_2)_i \frac{u_{i-1/2}}{12h} \frac{(q_2)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}} \right) c_{i-2},$$

где $k_i^{(1)} = \left(\frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} (u_{i+1} - u_i) - \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} (u_i - u_{i-1}) \right) / (8h)$, $k_i^{(2)} = \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} \frac{u_{i+1} - u_i}{8h} + \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} \frac{u_i - u_{i-1}}{8h}$.

Погрешность аппроксимации выражения (4) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} & \mu_{i+1/2,j} \frac{c_{i+1,j} - c_{i,j}}{h_x^2} - \mu_{i-1/2,j} \frac{c_{i,j} - c_{i-1,j}}{h_x^2} = \left(\mu_{i,j} (c_{i,j})' \right)' + \mu_{i,j} (c_{i,j})^{(IV)} \frac{h_x^2}{12} + \\ & + (\mu_{i,j})'' (c_{i,j})'' \frac{h_x^2}{4} + (\mu_{i,j})' (c_{i,j})''' \frac{h_x^2}{6} + (\mu_{i,j})''' (c_{i,j})' \frac{h_x^2}{6} + O(h_x^4). \end{aligned}$$

Таким образом, для аппроксимации оператора диффузионного переноса $(\mu c')'$ разностной схемой, обладающей четвертым порядком точности, необходимо аппроксимировать оператор $(\mu c')' - \mu c^{(IV)}h^2/12 - \mu''c''h^2/4 - \mu'c'''h^2/6 - \mu'''c'h^2/6$ схемой второго порядка точности.

Представление оператора диффузионного переноса $(\mu c')'$ разностной схемой, обладающей четвертым порядком точности, которая может быть записана в следующем виде:

$$(q_0)_i L(c) = -A_i c_i + B_{1,i} c_{i+1} + B_{2,i} c_{i-1} + B_{3,i} c_{i+2} + B_{4,i} c_{i-2}. \quad (6)$$

$$B_{1,i} = (q_1)_i \frac{\mu_{i+1/2}}{h^2} + (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \left(\frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} + 2 \right) + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} - (q_1)_i k_i^{(3)} - (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}'' - \mu_i''}{12},$$

$$B_{2,i} = (q_2)_i \frac{\mu_{i-1/2}}{h^2} + (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \left(\frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} + 2 \right) - (q_2)_i k_i^{(3)} - (q_2)_i \frac{\mu_i'' - \mu_{i-1}''}{12},$$

$$B_{3,i} = -(q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \frac{(q_1)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}}, \quad B_{4,i} = -(q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \frac{(q_2)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}},$$

$$A_i = (q_1)_i \frac{\mu_{i+1/2}}{h^2} + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1/2}}{h^2} - ((q_1)_i + (q_2)_i) k_i^{(3)} + (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \left(\frac{(q_2)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} + 2 \right) +$$

$$+ (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \left(\frac{(q_1)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}} + 2 \right) - (q_2)_i \frac{\mu_i'' - \mu_{i-1}''}{12} - (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}'' - \mu_i''}{12} + (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} +$$

$$+ (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} - (q_1)_i \frac{\mu_{i+1}}{12h^2} \frac{(q_1)_{i+1}}{(q_0)_{i+1}} - (q_2)_i \frac{\mu_{i-1}}{12h^2} \frac{(q_2)_{i-1}}{(q_0)_{i-1}},$$

где $k_i^{(3)} = \frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} \frac{\mu_{i+1} - \mu_i}{4h^2} - \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} \frac{\mu_i - \mu_{i-1}}{4h^2}$, $\mu_i'' = \left(\frac{(q_1)_i}{(q_0)_i} c_{i+1} - 2c_i + \frac{(q_2)_i}{(q_0)_i} c_{i-1} \right) / h^2$.

4. Сопоставление результатов расчета задачи транспорта веществ на основе схем второго и четвертого порядков точности

На рис. 1 приведено поле, описывающее погрешность вычислений, полученное как разность между аналитическим и численным решением для задачи транспорта веществ, при этом начальное распределение задавалось функцией:

$$C(x, y) = \begin{cases} \sin(\pi(x-10)) \cos(\pi(y-10)), & \{x, y\} \in D, \quad D: \{x \in [10, 20], y \in [10, 20]\} \\ 0, & \{x, y\} \notin D, \end{cases}$$

Моделирование производилось на сетке размерами 100x100, расчетных узлов, при этом параметры задавались следующим образом: размеры расчетной области $lx=100$ м, $ly=100$ м и по времени $ht=0.001$ с; временной интервал равен 100с, горизонтальная составляющая равна 4 м/с, вертикальная – 3 м/с, коэффициент турбулентного обмена равен 2 м²/с.

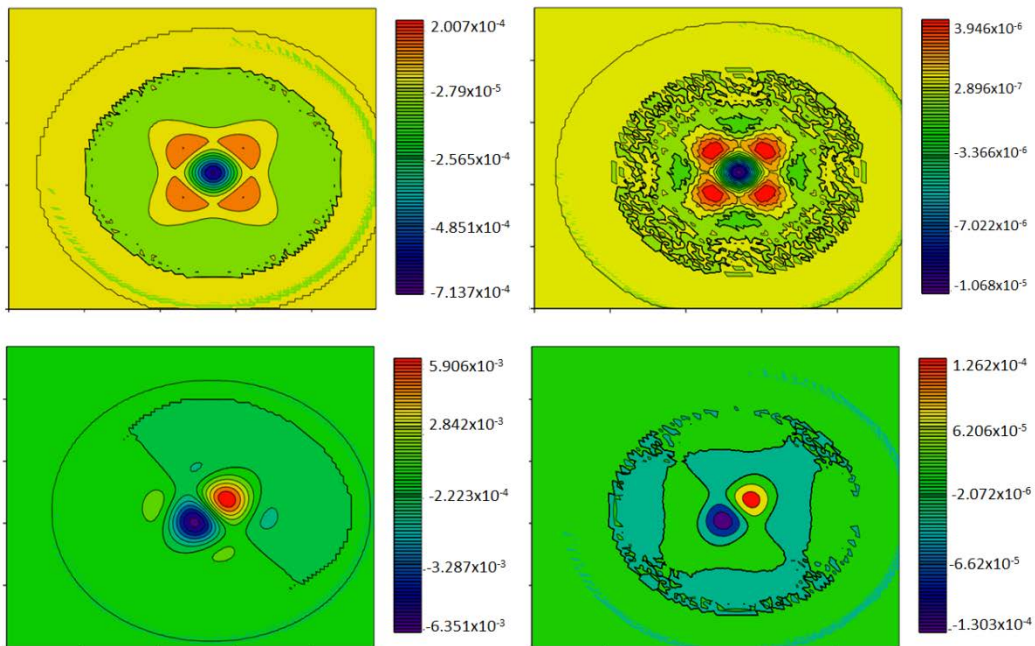


Рис. 1. Погрешность расчетов веществ: сверху – для задачи диффузии, снизу – для задачи диффузии-конвекции (слева схемы второго порядка точности, справа – четвертого)

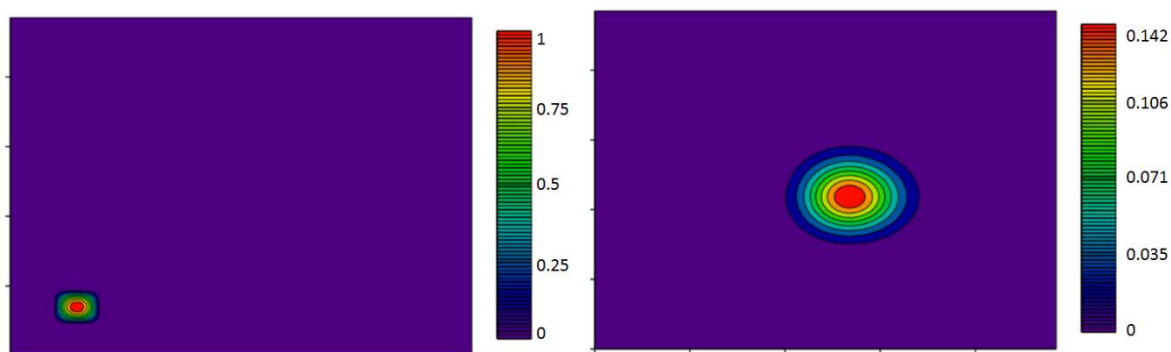


Рис. 2. Значение концентрации в начальный и конечный моменты времени

Из сопоставления результатов численных экспериментов на основе схем второго и четвертого порядков точности (рис. 1) следует, что для задачи диффузии удалось повысить точность в 66.7 раз, а для задачи диффузии-конвекции в 48.7 раз.

5. Параллельная реализация решения задачи диффузии-конвекции

Для решения двумерной задачи диффузии-конвекции на основе схем повышенного порядка точности построена библиотека двухслойных итерационных методов, предназначенных для решения девятидиагональных сеточных уравнений. Данная библиотека решателей систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) состоит из: метода Якоби; метода минимальных поправок; метода скорейшего спуска; метода Зейделя; метода верхней релаксации; адаптивного МПТМ вариационного типа.

В таблице 1. приведены зависимости количества итераций, необходимых для решения модельной задачи от шага по временной переменной.

Таблица 1. Зависимости количества итераций решения СЛАУ итерационными методами от шага по временной переменной

Шаг по временной переменной	Количество итераций					
	Метод Якоби	Метод минимальных поправок	Метод скорейшего спуска	Метод Зейделя	Метод верхней релаксации	МПТМ
0.001	6	6	6	5	43	5
0.005	8	8	8	8	43	6
0.01	10	10	10	8	45	6
0.05	23	23	23	15	56	10
0.1	37	36	37	22	61	12
0.5	138	134	138	70	60	27
1	256	247	256	126	60	28
5	1138	1077	1138	558	131	50
10	2233	2110	2233	1073	246	72
50	10160	9523	10160	4774	1074	158
100	19966	18625	19966	9320	2096	218
500	99651	92789	99651	46383	10399	1281
1000	199295	185529	199295	92739	20781	4382

Идею параллельного варианта алгоритма итерационных методов с предобуславливателями треугольного вида [15] (Зейделя, верхней релаксации, попеременно-треугольного метода) на системе с распределенной памятью можно описать следующим образом. На первом шаге каждый процессор получает подобласть, полученную путем разбиения исходной области на части

по одному или нескольким координатным направлениям с пересечением в двух узлах по каждому из направлений. Затем осуществляется решения СЛАУ с верхнетреугольной оператором, в результате чего рассчитывается вектор решений на следующей итерации. На рис 3. стрелками показан порядок обхода узлов сетки при вычислениях и обменах данными в случае декомпозиции по одному пространственному направлению. На следующем шаге рассчитывается вектор невязки и его равномерная норма (максимальный по модулю элемент) при этом каждый процессор определяет максимальный по модулю элемент вектора невязки и передает его значение всем остальным процессорам. После обменов данными процессоры рассчитывают максимальный элемент, в котором будет храниться норма вектора невязки. В случае если норма вектора невязки больше заданной погрешности, то выполняется возврат к расчету невязки.

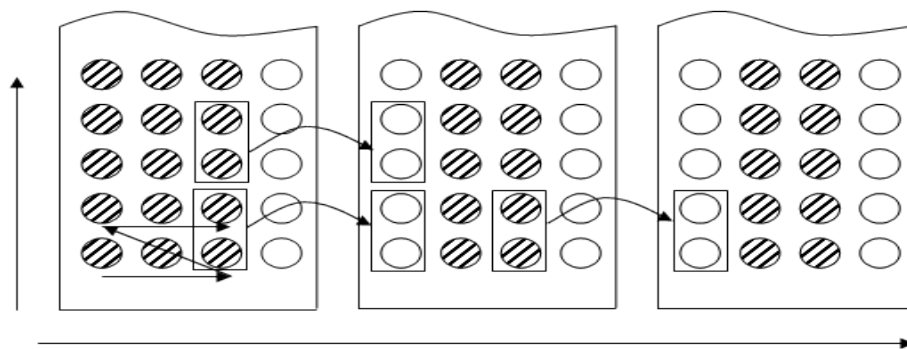


Рис. 3. Схема для расчета значения вектора решения на следующем временном слое

При расчете значения вектора решения только первый процессор не требует дополнительной информации и может независимо от других вычислителей обработать свою часть области, остальные процессоры ждут передачи данных от предыдущего вычислителя.

Передача данных по одному элементу не оптимальна, т.к. появляются временные затраты, связанные с организацией передач, их можно минимизировать путем увеличения объема пакета передаваемых данных, но при этом растет время задержек старта процессоров. Таким образом, возникает задача расчета (подбора) оптимального объема пакета передачи данных.

В таблице 2 приведены значения ускорения и эффективности параллельной реализации программного комплекса, предназначенного для решения двумерной задачи диффузии-конвекции на основе схем повышенного порядка точности. Сеточные уравнения решены модифицированным попеременно-треугольным методом. Расчетная сетка составляла 2000x2000 узлов. Параллельная реализация разработанных алгоритмов выполнена на основе технологий Message Passing Interface (MPI). Пиковая производительность многопроцессорной вычислительной системы (МВС) составляет 18.8 TFlops. В качестве вычислительных узлов используется 128 однотипных 16-ядерных Blade-серверов HP ProLiant BL685c, каждый из которых оснащен четырьмя 4-ядерными процессорами AMD Opteron 8356 2.3GHz и оперативной памятью в объеме 32ГБ.

Таблица 2

Количество процессоров	Время, с.	Ускорение	Эффективность
1	1447.415	1	1
2	734.728	1.97	0.985
4	387.009	3.74	0.935
8	199.643	7.25	0.906
16	109.653	13.2	0.825
32	62.659	23.1	0.722
64	36.643	39.5	0.617

Из таблицы 2 видно, что параллельный алгоритм модифицированного попеременно-треугольного методом может быть применен для реальных задач, и применение параллельных технологий вносит существенный вклад в уменьшение времени расчета.

6. Применение схем повышенного порядка точности для восстановления донной поверхности и сопоставление результатов интерполяции с другими алгоритмами

Одной из актуальных задач, которые возникают при математическом моделировании гидродинамики мелководных водоемов [10], является задача обработки гидрографической информации. Как правило, глубина водоема задается в отдельных точках или изолиниями уровня (как показано на рис. 4).

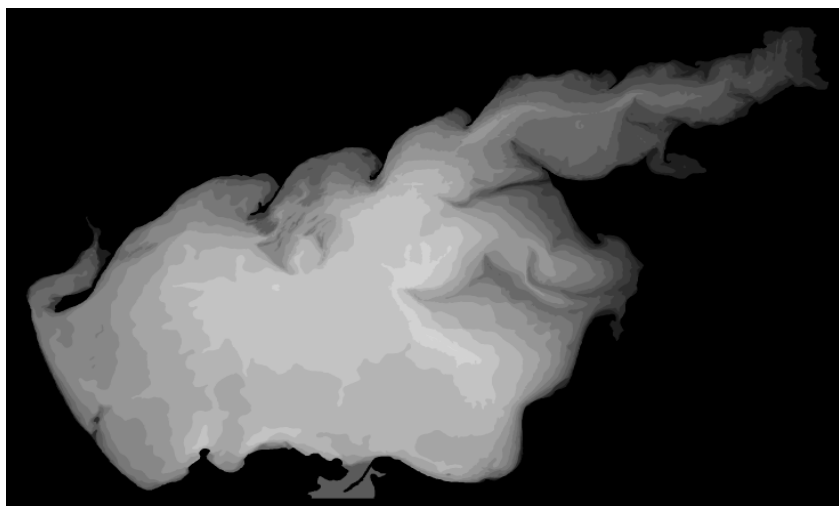


Рис. 4. Исходное изображение рельефа дна Азовского моря

Использование подобных карт для построения расчетных сеток нежелательно, т.к. появляются погрешности вычислений, связанные с «грубым» заданием геометрии расчетной области. Таким образом, для повышения точности расчетов гидродинамических процессов необходимо приблизить функцию двух переменных, описывающую рельеф дна водоема более гладкими функциями.

Постановка задачи восстановления донной поверхности. Для получения функции рельефа дна используем решение уравнения диффузии, к которому сводится уравнение Сен-Венана, описывающее транспорт донных материалов [26]. Решение задачи диффузии на длительные интервалы времени сводится к решению уравнения Лапласа:

$$\Delta H = 0, \quad (7)$$

где H - глубина водоема.

Данный подход обладает существенным недостатком, связанным с отсутствием гладкости в точках, где задаются значения поля глубин. Для устранения данной проблемы можно использовать решения следующего уравнения:

$$\Delta^2 H = 0. \quad (8)$$

К недостаткам этого подхода относят большие выбросы (отклонение от линейной функции). При помощи первых двух подходов можно получать функции, которые не обладают выделенностью направлений, но каждый из подходов обладает недостатками.

Для получения гладкой функции рельефа дна также можно использовать решение уравнения, применяемого для получения схем повышенного порядка точности для уравнения Лапласа:

$$\Delta H - \frac{h^2}{12} \Delta^2 H = 0. \quad (9)$$

Не трудно заметить, что оператор для третьей задачи можно записать как линейную комбинацию операторов для первой и второй задачи.

Фундаментальной системой решений уравнения (7) является следующая функция:

$$H_1(x) = 1, H_2(x) = x, \quad (10)$$

для уравнения (8):

$$H_1(x) = 1, H_2(x) = x, H_3(x) = x^2, H_4(x) = x^3, \quad (11)$$

для уравнения (9):

$$H_1(x) = 1, H_2(x) = x, H_3(x) = ch(kx), H_4(x) = sh(kx), k = \sqrt{12} / h. \quad (12)$$

В первом случае интерполяция осуществляется отрезками прямых, проходящих через соседние точки. Во втором случае интерполяция выполняется на основе кубических сплайнов. В третьем случае – на основе сплайнов функции (12). Ниже описан алгоритм, предназначенный для одномерной интерполяции на основе функции (12), и проведено сравнение предложенных подходов.

Задача одномерной интерполяции функций. Пусть на отрезке $a \leq x \leq b$ задана сетка $\omega = \{x_i : x_0 = a < x_1 < \dots < x_i < \dots < x_n = b\}$ и в её узлах заданы значения функции $y(x)$, равные $y(x_0) = y_0, \dots, y(x_i) = y_i, \dots, y(x_n) = y_n$. Требуется построить интерполянту — функцию $f(x)$, совпадающую с функцией $y(x)$ в узлах сетки:

$$f(x_i) = y_i, i = \overline{0, n}. \quad (13)$$

Основная цель интерполяции — получить быстрый (экономичный) алгоритм вычисления значений $f(x)$ для значений x , не содержащихся в таблице данных.

В случае интерполяции сплайнам между любыми двумя соседними узлами функция его коэффициенты на каждом интервале определяются из условий сопряжения в узлах:

$$f(x_i) = y_i, f'(x_i - 0) = f'(x_i + 0), f''(x_i - 0) = f''(x_i + 0), i = \overline{1, n-1}. \quad (14)$$

Кроме того, на границе при $x = x_0$ и $x = x_n$ ставятся условия

$$f''(x_0) = 0, f''(x_n) = 0. \quad (15)$$

На каждом отрезке $x \in [x_i, x_{i+1}]$, $i = \overline{0, n-1}$ будем искать интерполирующую функцию $f(x)$ в виде линейной комбинации следующих функций: $1, x, ch(kx), sh(kx)$, где k - заданная постоянная. Тогда функцию $f(x)$ может быть записана в виде:

$$f(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i ch(k(x - x_i)) + d_i sh(k(x - x_i)). \quad (16)$$

Из условия $f(x_i) = y_i$ имеем $y_i = a_i + c_i$ или

$$a_i = y_i - c_i, i = \overline{0, n-1} \quad (17)$$

Обозначим $h_i = x_{i+1} - x_i$, $i = \overline{0, n-1}$ и подставим $x = x_{i+1}$ в выражение (16) в результате чего получим:

$$y_{i+1} = a_i + b_i h_i + c_i ch(kh_i) + d_i sh(kh_i), i = \overline{0, n-1} \quad (18)$$

Подставим (17) в выражение (18)

$$y_{i+1} = y_i - c_i + b_i h_i + c_i ch(kh_i) + d_i sh(kh_i). \quad (19)$$

Вычислим производные:

$$f'(x) = b_i + kc_i sh(k(x - x_i)) + kd_i ch(k(x - x_i)),$$

$$f''(x) = k^2 c_i ch(k(x - x_i)) + k^2 d_i sh(k(x - x_i)), x \in [x_i, x_{i+1}]$$

и потребуем их непрерывности при $x = x_{i+1}$:

$$b_i + kc_i sh(kh_i) + kd_i ch(kh_i) = b_{i+1} + kd_{i+1}, i = \overline{0, n-2}, \quad (20)$$

$$c_i ch(kh_i) + d_i sh(kh_i) = c_{i+1}, i = \overline{0, n-2}. \quad (21)$$

Общее число неизвестных коэффициентов, очевидно, равно $4n$, число уравнений (17), (18), (20) и (21) равно $4n - 2$. Недостающие два уравнения получаем из условия (3) при $x = x_0$ и $x = x_n$: $c_0 = 0$, $c_{n-1} ch(kh_{n-1}) + d_{n-1} sh(kh_{n-1}) = 0$.

Выражение из (21) $d_i = (c_{i+1} - c_i ch(kh_i)) / sh(kh_i)$, подставляя выражение в (19) получим:

$$b_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} + \frac{c_i - c_{i+1}}{h_i}. \quad (22)$$

Подставив теперь выражения для $b_i, d_i, b_{i+1}, d_{i+1}$ и формулу (20) в результате чего получаем

$$\begin{aligned} & \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} + \frac{c_i - c_{i+1}}{h_i} + kc_i \operatorname{sh}(kh_i) + k \frac{c_{i+1} - c_i \operatorname{ch}(kh_i)}{\operatorname{sh}(kh_i)} \operatorname{ch}(kh_i) = \\ & = \frac{y_{i+2} - y_{i+1}}{h_{i+1}} + \frac{c_{i+1} - c_{i+2}}{h_{i+1}} + k \frac{c_{i+2} - c_{i+1} \operatorname{ch}(kh_{i+1})}{\operatorname{sh}(kh_{i+1})}, \quad i = \overline{0, n-2}. \end{aligned}$$

После не сложных преобразований получаем разностное уравнение второго порядка для определения c_i

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{h_{i-1}} - \frac{k}{\operatorname{sh}(kh_{i-1})} \right) c_{i-1} + \left(k \frac{\operatorname{ch}(kh_{i-1})}{\operatorname{sh}(kh_{i-1})} + k \frac{\operatorname{ch}(kh_i)}{\operatorname{sh}(kh_i)} - \frac{1}{h_{i-1}} - \frac{1}{h_i} \right) c_{i+1} + \\ & + \left(\frac{1}{h_i} - \frac{k}{\operatorname{sh}(kh_i)} \right) c_{i+1} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}, \quad i = \overline{1, n-1}. \end{aligned} \quad (23)$$

С краевыми условиями

$$c_0 = 0, \quad c_n = 0. \quad (24)$$

Условие $c_n = 0$ эквивалентно условию $c_{n-1} \operatorname{ch}(kh_{n-1}) + d_{n-1} \operatorname{sh}(kh_{n-1}) = 0$. Разностное уравнение (23) с условиями (24) можно решить методом прогонки.

Пример работы разработанного алгоритма. Построим интерполянту для функции $f(x)$, заданной следующим образом:

Таблица 3

x	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
f(x)	0	0	0	1	0	0	1	1	0	1	0

В результате интерполяции были рассчитаны следующие коэффициенты интерполянты (параметр $k = \sqrt{12}$):

Таблица 4

a_i	b_i	c_i	d_i	отрезок
0	0.0238	0	0.001492	$0 \leq x < 1$
-0.0238	-0.1264	0.0238	-0.01444	$1 \leq x < 2$
-0.1502	1.503	0.1502	-0.1726	$2 \leq x < 3$
1.353	-1.531	-0.3527	0.3646	$3 \leq x < 4$
-0.178	-0.0209	0.178	-0.1659	$4 \leq x < 5$
-0.1989	1.399	0.1989	-0.2118	$5 \leq x < 6$
1.2	-0.0165	-0.1999	0.1888	$6 \leq x < 7$
1.183	-1.503	-0.1834	0.2038	$7 \leq x < 8$
-0.3196	1.674	0.3196	-0.3424	$8 \leq x < 9$
1.354	-1.354	-0.3541	0.3548	$9 \leq x < 10$

Результат работы предложенного алгоритма приведен на рис 5.

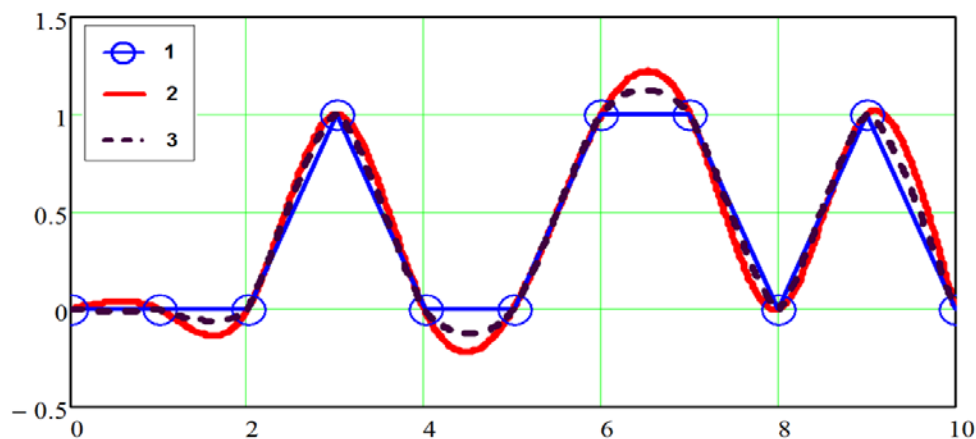


Рис. 5. Результат интерполяции: 1 – линейная интерполяция, 2– кубический сплайн, 3 – на основе предложенного алгоритма

Из рис. 5 видно, что интерполяция, полученная на основе предложенного алгоритма, имеет меньшее отклонение от линейной интерполяции по сравнению с кубическим сплайном и обладает достаточной степенью гладкости в точках склейки функций.

Результаты восстановления донной поверхности. Для предложенного математического алгоритма, предназначенного для восстановления рельефа дна акватории, выполнена численная реализация. На основе разработанного программного комплекса получена карта рельефа дна Азовского моря (рис 6).

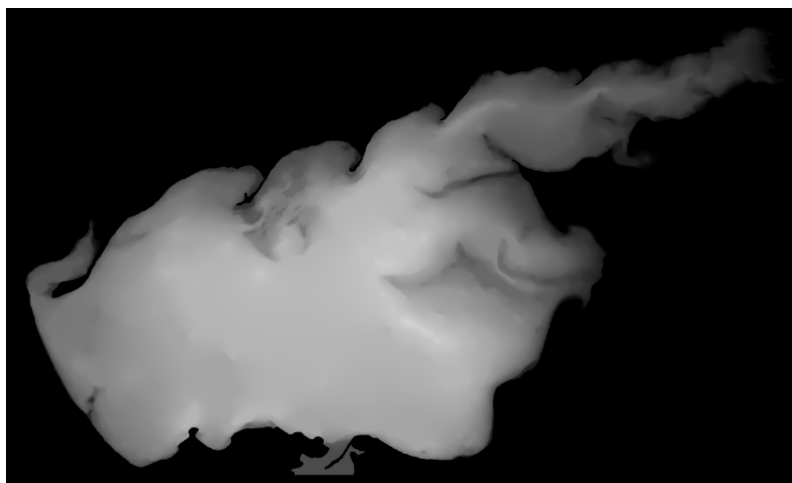


Рис. 6. Восстановленная поверхность дна Азовского моря

Отметим, что предложенный алгоритм обладает достаточной степенью гладкости в точках склейки функций и обладает меньшими выбросами по сравнению с кубической функцией, использованной в расчетах.

7. Заключение

Построены схемы повышенного (четвертого) порядка точности для операторов конвективного и диффузионного переносов, учитывающие заполненность ячеек. Для решения двумерной задачи диффузии-конвекции на основе схем повышенного порядка точности была построена библиотека двухслойных итерационных методов, предназначенная для работы на многопроцессорной вычислительной системе. Выполнено сопоставление результатов расчета задачи транспорта веществ на основе схем второго и четвертого порядков точности. Из сопоставления результатов численных экспериментов следует, что для задачи диффузии удалось повысить

точность в 66.7 раз, а для задачи диффузии-конвекции в 48.7 раз. Приведено описание параллельной реализации алгоритмов итерационных методов с предобуславливателями треугольного вида и значения ускорения и эффективности работы параллельного варианта алгоритма модифицированного попеременно-треугольного метода. Предложен математический алгоритм, предназначенный для восстановления рельефа дна акватории на основе гидрографической информации (глубины водоема в отдельных точках или изолиний уровня), и выполнена его численная реализация. На основе полученного метода решения задачи получена карта рельефа дна Азовского моря. Разработанный алгоритм обладает достаточной степенью гладкости в точках склейки функций и обладает меньшими выбросами в одномерном случае по сравнению с кубической функцией, использованной в расчетах. Следует отметить, что предложенные схемы были так же применены для разработки программного комплекса, предназначенного для расчета трехмерных полей скоростей течений в мелководных водоемах [10]. В дальнейшем планируется внедрение разработанных схем в программные комплексы, предназначенные для расчета задач биологической кинематики [11,12] и транспорта донных материалов [26,27].

Литература

1. Самарский А. А., Гулин А. В., Численные методы, Наука, М., 1989
2. Коновалов А.Н. Метод скорейшего спуска с адаптивным попеременно-треугольным переобуславливателем// Дифференциальные уравнения. 2004. Т. 40. № 7. С. 953.
3. Коновалов А.Н. К теории попеременно-треугольного итерационного метода// Сибирский математический журнал. 2002. Т. 43. № 3. С. 552.
4. Самарский А. А., Николаев Е. С., Методы решения сеточных уравнений, Наука, М., 1978
5. Сухинов А. И., “Модифицированный попеременно-треугольный метод для задач теплопроводности и фильтрации”, Вычислительные системы и алгоритмы, 1984, 52-59
6. Гушин В.А., Матюшин П.В. Математическое моделирование и визуализация трансформации вихревой структуры течения около сферы при увеличении степени стратификации жидкости// Журнал вычислительной математики и математической физики. 2011. Т. 51. № 2. С. 268-281.
7. Гушин В.А., Миткин В.В., Рождественская Т.И., Чашечкин Ю.Д. Численное и экспериментальное исследование тонкой структуры течения стратифицированной жидкости вблизи кругового цилиндра// Прикладная механика и техническая физика. 2007. Т. 48. № 1 (281). С. 43-54.
8. Белоцерковский О.М., Гушин В.А., Щенников В.В. Метод расщепления в применении к решению задач динамики вязкой несжимаемой жидкости// Журнал вычислительной математики и математической физики. 1975. Т. 15. № 1. С. 197.
9. Сухинов А. И., Чистяков А. Е., Алексеенко Е. В., “Численная реализация трехмерной модели гидродинамики для мелководных водоемов на супервычислительной системе”, Математическое моделирование, 23:3 (2011), 3-21
10. Сухинов А.И., Чистяков А.Е. Параллельная реализация трехмерной модели гидродинамики мелководных водоемов на супервычислительной системе//Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии. -2012. -Т.13. -С. 290-297.
11. Сухинов А.И., Никитина А.В., Чистяков А.Е., Семенов И.С. Математическое моделирование условий формирования заморозов в мелководных водоемах на многопроцессорной вычислительной системе//Вычислительные методы и программирование. -2013. -Т. 14.-С. 103-112.
12. Сухинов А.И., Никитина А.В., Чистяков А.Е. Моделирование сценария биологической реабилитации Азовского моря//Математическое моделирование. -2012. -Т. 24, № 9. -С. 3-21.

13. Беклемышева К.А., Петров И.Б., Фаворская А.В. Численное моделирование процессов в твердых деформируемых средах при наличии динамических контактов с помощью сеточно-характеристического метода// Математическое моделирование. 2013. Т. 25. № 11. С. 3-16.
14. Муратов М.В., Петров И.Б. Расчет волновых откликов от систем субвертикальных макротрещин с использованием сеточно-характеристического метода// Математическое моделирование. 2013. Т. 25. № 3. С. 89-104.
15. Сухинов А. И., Чистяков А. Е. Адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод для решения сеточных уравнений с несамосопряженным оператором//Математическое моделирование. 2012. Т. 24. № 1. С. 3-20.
16. Воеводин В.В., Гергель В.П. Суперкомпьютерное образование: третья составляющая суперкомпьютерных технологий//Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. 2010. Т. 11, № 2. С.117-122.
17. Антонов А.С., Артемьева И.Л., Бухановский А.В., Воеводин В.В., Гергель В.П., Демкин В.П., Коньков К.А., Крукиер Л.А., Попова Н.Н., Соколинский Л.Б., Сухинов А.И. Проект "Суперкомпьютерное образование": 2012 год//Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2013. N 1-1. С. 12-16.
18. Chetverushkin B., Gasilov V., Iakobovski M., Polyakov S., Kartasheva E., Boldarev A., Abalakin I., Minkin A. Unstructured mesh processing in parallel CFD project GIMM// Вкниге: Parallel Computational Fluid Dynamics 2005 2006. С. 501-508.
19. Якобовский М.В. Инкрементный алгоритм декомпозиции графов// Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Серия: Математическое моделирование и оптимальное управление. 2005. № 1. С. 243.
20. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Шишня А.В. Оценка погрешности решения уравнения диффузии на основе схем с весами// Математическое моделирование. 2013. Т. 25. № 11. С. 53-64.
21. Петров И.Б., Фаворская А.В., Санников А.В., Квасов И.Е. Сеточно-характеристический метод с использованием интерполяции высоких порядков на тетраэдральных иерархических сетках с кратным шагом по времени// Математическое моделирование. 2013. Т. 25. № 2. С. 42-52.
22. Ладонкина М. Е., Неклюдова О. А., Тишкин В. Ф., Чеванин В. С. Об одном варианте существенно неосциллирующих разностных схем высокого порядка точности для систем законов сохранения, Матем. моделирование, 21:11 (2009), 19–32
23. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Тимофеева Е.Ф., Шишня А.В. Математическая модель расчета прибрежных волновых процессов//Математическое моделирование. 2012. Т. 24. № 8. С. 32-44.
24. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Фоменко Н.А. Методика построения разностных схем для задачи диффузии-конвекции-реакции, учитывающих степень заполненности контрольных ячеек//Известия Южного федерального университета. Технические науки. 2013. № 4 (141). С. 87-98.
25. Чистяков А.Е., Семенякина А.А. Применение методов интерполяции для восстановления донной поверхности// Известия ЮФУ. Технические науки. –2013. №4. – С 21-28.
26. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежной зоне мелководных водоемов//Математическое моделирование. 2013. Т. 25. № 12. С. 65-82.
27. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. Математическое моделирование транспорта наносов в прибрежных водных системах на многопроцессорной вычислительной системе// Вычислительные методы и программирование. -2014. -Т. 15.-С. 610-620.