Nikolai Nikolaevich Yanenko; A. N. Konovalov

Технологические аспекты численных методов математической физики

Acta Universitatis Carolinae. Mathematica et Physica, Vol. 15 (1974), No. 1-2, 47--53

Persistent URL: `http://dml.cz/dmlcz/142325`

1974 ACTA UNIVERSITATIS CAROLINAE - MATHEMATICA ET PHYSICA NO. 1-2 PAG. 47-53

Технологические аспекты численных методов математической физики

Н. Н. ЯНЕНКО, А. Н. КОНОВАЛОВ
Вычислительный центр Сибирского отделения АН СССР, Новосибирск

N. N. Janěnko, A. N. Konovalov: Technical Aspects of the Numerical Methods for Solution of Problems of the Mathematical Physics. — The structural analysis and synthesis is applied to the problems of mathematical physics, to obtain a uniform representation of the numerical algorithms in modular form. The global classification of the algorithmic modules is given, based on the splitting-up method and uniform representation of domains of integration and boundary conditions.

С появлением ЭВМ, которые ныне, в век научно-технической революции, все больше и больше проникают во все сферы производственной деятельности человека, выработалась вполне определенная технологическая цепочка вычислительной математики. От явления природы (производственного процесса) к математической модели явления; далее, к численному алгоритму, программе, реализующей этот алгоритм на ЭВМ, наконец, собственно к вычислениям на ЭВМ. Если имеется возможность сравнить результаты вычислений с результатами эксперимента, то в нужных случаях происходит уточнение математической модели и т.д.

Если вначале каждое звено цепочки развивалось независимо и, более того, в некоторых случаях наблюдалась даже жесткая односторонняя субординация в направлении сверху вниз, то теперь стала более явной, как прямая, так и обратная связь между звеньями. При этом связанными могут оказываться весьма, на первый взгляд, далекие звенья. Несколько иллюстраций. При расчете одномерных газодинамических течений методом инвариантов вводится так называемая аппроксимационная вязкость [14], лишь коэффициентом отличающаяся от реальной физической вязкости. Тем самым алгоритм расчета может исказить реальную математическую модель. С другой стороны, численные алгоритмы типа схемы Дюфорта-Франкела или явно-неявных схем типа В. К. Саульева [16] могут рассматриваться в зависимости от параметров алгоритма как математические модели тех или иных явлений. Безусловно, развитие средств вычислительной техники и алгоритмов вычислительной математики стимулировалось потребностями решения все более сложных задач. Однако, ныне сама конструкция современных ЭВМ влияет как на способы программирования — задача оптимального обмена массивами между оперативной и внешней памятью, так и на численные алгоритмы — поиск и осуществление алгоритмов, допускающих параллельную реализацию. В то же время существующие численные алгоритмы типа метода дробных шагов [18] привели к созданию новых аналоговых средств вычислительной техники, в основе которых лежит этот метод [12]. Таким образом, технологическая цепочка является взаимосвязанной, замкнутой и циклической. Она позволяет осуществить своеобразный итерационный процесс вычислений и конструирования моделей, алгоритмов и программ.

Существование технологической цепочки вычислений ставит задачу о ее непрерывном совершенствовании и оптимизации. Задачу глобальной оптимизации можно сформулировать различным образом. Эта формулировка существенно зависит от: а) класса рассматриваемых явлений; б) выбора вычислительных средств; в) коллектива, участвующего в вычислительном процессе. Мы ограничимся в дальнейшем следующим выбором: а) задачи математической физики; б) современные ЭВМ (3-ье поколение); в) группа вычислительных центров, использующих одни и те же языки высокого уровня, одни и те же численные алгоритмы для решения идентичных задач. В конечном счете, этот коллектив может группироваться вокруг парка ЭВМ одной или нескольких стран, которые обмениваются информацией в виде программ. После сделанных ограничений задачу глобальной оптимизации можно поставить следующим образом: *решение возможно более широкого класса задач наименьшими средствами*, наименьшими в смысле затрат человеческого труда, машинного времени, объема производимой и перерабатываемой информации.

Современное производство программ основано на труде небольших изолированных коллективов, решающих те или иные конкретные задачи науки и техники. Можно сказать, что оно является побочным продуктом решения этих задач, а не производством само по себе. Обмен информацией между коллективами, производящими программы, происходит на уровне научных публикаций и, в лучшем случае, на уровне алгоритмов. С ростом числа ЭВМ и использующих их математических коллективов происходит рост параллелизма в работе программистов, разнобой в методическом уровне алгоритмов и качестве программ. В результате рост программистской продукции сопровождается понижением суммарного КПД труда программистов. Для повышения суммарного КПД необходимо устранить параллелизм в работе программистов. Это возможно сделать только на основе принципа разделения труда, обмена и кооперации — принципа, который лежит в основе современного промышленного производства.

При этом следует учитывать характерные черты математического «производства»: а) наличие абстрактного, высокоразвитого и сильно дифференцированного математического языка; б) индивидуальность профессиональной деятельности математиков; степень индивидуальности повышается с квалификацией и творческим потенциалом математика; в) узкую специализацию в теоретической математике; г) процессы дифференциации и специализации в вычислительной математике, которые приближают ее по структуре к теоретической математике. Задачей организации математического производства является создание гибкой организационной основы технологической цепочки, которая способствовала бы, а не препятствовала рациональному использованию творческой инициативы математиков. Развитие специализации в вычислительной математике и внедрение принципа разделения труда и кооперации несомненно будет способствовать решению этой задачи.

Обмен готовыми, узко ориентированными программами и создание с этой целью фонда программ не могут полностью решить задачу повышения КПД. Действительно, такой фонд разнородных и узкоспециализированных программ не обладает должной гибкостью и экономичностью. Программы фонда неизбежно содержат алгоритмистские повторы (неэкономичность). Малейшее изменение целевого назначения, как правило, требует полной переделки программы (негибкость). Для повышения эффективности фонда необходимо придать программам фонда *модульную структуру*. Тогда элементом информации является модуль, а узкоориентированная программа является комплексом модулей.

Мы, тем самым, подходим к модульному описанию не только программы, но и вычислительного алгоритма [10]. И здесь задачи математической физики (класс рассматриваемых явлений) представляют, пожалуй, наиболее благоприятные возможности для создания программ, построенных на модульном принципе. Эти задачи описываются, в основном, единообразной системой уравнений, которые выражают законы сохранения в той или иной форме. Индивидуальность каждой такой задачи, как правило, определяется различием в выборе модели среды (уравнение состояния), исходной системы координат и искомых функций, области и предельных условий задачи. При реализации задач математической физики на ЭВМ в виде программ уже сейчас используется один и тот же набор так называемых сервисных программ: а) программы РНД, построения сетки, классификации узлов сетки; б) программы интерполяции, как самих величин, так и их производных с различной степенью гладкости, сплайн-интерполяция и т.п.; в) различные программы выдачи и обработки результатов: выдачи разрезов, изолиний, положения разрывов (дифференциальный анализатор); выдача на график и т.п.; г) программы вычисления контрольных балансовых соотношений, характеризующих интегральную точность расчета; д) стандартная программа отладки. Поскольку реальные задачи математической физики предъявляют повышенные требования к общему числу расчетных точек, то в качестве сервисных программ все большее распространение получают программы: а) стыковки, сегментации программ; б) упаковки и распаковки (для счета с пониженной точностью); в) транспонирования матрицы как специфического способа подготовки массивов для применения метода расщепления в многомерных задачах математической физики; г) сегментация числовых массивов для оптимальной организации обменов с внешней памятью ЭВМ. Следует также иметь в виду, что развитие теоретической математики уже в настоящее время дает возможность создания эффективной системы тестов проверки численных методов решения целых классов задач математической физики.

Все вышесказанное свидетельствует о том, что в настоящее время уже имеются все предпосылки для качественно новой, *модульной* организации программ решения задач математической физики, т.е. для создания *пакета программ* решения задач математическиой физики. Независимо от класса задач математической физики, решаемого с помощью пакета, последний непременно включает в себя библиотеку так называемых модулей, управляющую программу и входной язык. В нашем понимании библиотека модулей — это тот набор «неделимых» кирпичиков, с помощью которых может быть построен любой допустимый алгоритм решения задачи, входящей в класс исходных и, следовательно, любая допустимая реализация этого алгоритма на ЭВМ. Тем самым, мы должны попытаться дать определение модуля. Прежде всего перечислим те его свойства, которые, по нашему мнению, являются определяющими: а) модуль — есть содержательная часть вычислительного алгоритма; б) функции, которые выполняет модуль, не зависят от реально применяемой ЭВМ; в) модуль всегда имеет вход и выход, тем самым он определяется вместе с входной информацией; г) работа модуля не зависит от его окружения; д) алгоритмический размер модуля должен способствовать наиболее экономичному представлению, как можно большего числа алгоритмов, рассматриваемого класса. Перечисленным свойствам удовлетворяют упомянутые выше сервисные программы, а также стандартные программы типа $\ln x$, $\cos x$ и т.п., если только дать расширенное определение вычислительного алгоритма, как реализацию его в виде программы.

Теперь можно дать и определение модуля. Модуль есть «черный ящик», содержащий программную реализацию некоторого абстрактного математического, логически замкнутого (имеющего замкнутый логический смысл) алгоритма. В применении к задачам математической физики это определение можно сделать более конкретным. Модуль есть черный ящик, представляющий собой программную реализацию алгоритма численного решения некоторой элементарной задачи математической физики. Такое определение модуля существенно сужено, но в рассматриваемом классе задач все же является достаточно широким. Остается определить понятие элементарной задачи математической физики. В нашем понимании таковой может, например, являться одномерная задача Коши. Ниже мы покажем как сложная задача математической физики может быть сведена к последовательному решению более простых задач. Тем самым мы получим возможность анализа модульной структуры вычислительных алгоритмов в задачах математической физики.

Итак, пусть в заданной фиксированной области ищется решение корректно поставленной дифференциальной задачи. Для упрощения будем считать, что расчетная область остается неизменной в течение всего времени расчета. Дабы не связывать себя пока вопросом построения сетки, будем считать, что заданная область является стандартной (прямоугольник, прямоугольный параллелепипед). Численное решение исходной задачи будем осуществлять с помощью следующих методов:

1. *Метод расщепления по физическим процессам* [2], [3], [7], [13]. Этот метод сведет исходную задачу к серии последовательных задач, каждая из которых учитывает только одну сторону реального физического процесса. Например, в задаче о конвективном теплообмене с учетом теплопроводности, мы получим задачу «чистого» конвективного теплообмена и задачу «чистой» теплопроводности. Точно так же и в задачах фильтрации двухфазной несжимаемой жидкости возможно вести определение насыщенности в два этапа: на первом этапе учитывается только перенос достигнутых значений насыщенности под действием гидродинамических сил, на втором этапе — собственное изменение насыщенности под действием капиллярных сил. Число подобных примеров легко продолжить.

2. *Метод расщепления по пространственным переменным* [15], [18]. Этот метод сводит решение многомерной задачи к последовательному решению только одномерных задач.

3. *Метод установления* [15], [18]. Этот метод позволяет трактовать с единой точки зрения эволюционные и неэволюционные задачи. В ряде случаев этот метод допускает и физическую интерпретацию: выход на стационарный режим, введение малой сжимаемости и т.п., после чего возможно применение методов типа 1—2.

4. *Методы типа предиктор-корректор*. Их назначение может быть самым различным: обеспечение полной консервативности, повышение порядка точности, избавление от итераций по нелинейности и т.п. Важно отметить, что методы этого типа также сводят исходную задачу к последовательному решению некоторых вспомогательных задач, каждая из которых может иметь и самостоятельное значение.

5. *Метод сведения сложной краевой задачи к задаче Дирихле* [1], [6], [18]. Этот метод позволяет разделить оператор шага исходной задачи на два: стандартный оператор решения задачи Дирихле, стандартный оператор решения задачи Коши, с помощью которого «исправляются» краевые условия. В теоретическом плане обоснование этих методов для широкого класса задач математической физики дано в цитированных выше работах, а соответствующие теоремы здесь не приводятся лишь в целях сокращения изложения.

Поскольку вычислительный алгоритм решения исходной задачи строится на основе методов 1—5, то решение исходной задачи свелось к последовательному решению *простых* вспомогательных задач. Эти задачи естественно назвать базисом (их программная реализация и составляет библиотеку модулей пакета), а последовательность решения этих задач, обеспечивающую решение исходной задачи — представлением исходной задачи в данном базисе. Основанием для такого определения базиса служит то обстоятельство, что в рамках некоторого фиксированного базиса может быть представлен довольно широкий класс *различных* задач. С другой стороны, восполнение класса рассматриваемых задач может быть произведено за счет незначительного расширения базиса. Безусловно, *представление исходной задачи в том или ином базисе полностью определяется методами решения исходной задачи.*

С этой точки зрения интересно сравнение излагаемого здесь подхода с *методом конечных элементов* [4], [5]. Основным достоинством метода конечных элементов является возможность его использования для произвольной области. Однако, этот метод по сути своей является бесструктурным и, можно даже сказать, безразмерным. *Любая* задача с помощью этого метода редуцируется к решению системы линейных алгебраических уравнений. Лишь в ряде случаев (наличие вариационного принципа) удается доказать сходимость метода. Противоречие между точностью и устойчивостью — основное противоречие современных численных методов, присуще и методу конечных элементов, однако, до сих пор это противоречие не получило здесь законченной математической формулировки типа теоремы эквивалентности П. Лакса. И конечно же, с точки зрения модульного представления вычислительного алгоритма и, следовательно, с точки зрения оптимизации технологической цепочки, методы типа 1—5 представляются в настоящее время наиболее перспективными.

Что же касается проблемы произвольной области, то здесь следует указать на метод *фиктивных областей* [8], [9], [11], [17]. Суть этого метода заключается в следующем. Фиктивной областью $\mathscr{D}_1$ исходная область $\mathscr{D}$ с границей Γ дополняется до другой области $\mathscr{D}_0$ с границей Γ_0. Обычно выбирают $\mathscr{D}_1$ дополнением $\mathscr{D}$ до прямоугольника или прямоугольного параллелепипеда, имея в виду неоспоримые практические достоинства такой области при численном решении задач математической физики методом сеток. Каким-либо образом, в зависимости от типа краевого условия на Γ продолжают коэффициенты исходной задачи в $\mathscr{D}_1$, а на Γ ставят некоторые условия согласования (например, условия непрерывности самой функции и потока при переходе через Γ). Тогда отыскание решения исходной задачи в $\mathscr{D}$ сведется к отысканию решения вспомогательной задачи с разрывными коэффициентами, но в более простой области. Что же касается численного решения вспомогательной задачи, то построение консервативной разностной схемы [15] всегда обеспечивает выполнение некоторых условий согласования, в частности, тех, о которых упомянуто выше. Но тогда расчет можно вести единообразным способом без выделения линий разрывов. Тем самым, обоснование метода фиктивных областей сведется к доказательству близости в $\mathscr{D}$ решений основной и вспомогательной задач.

Соответствующие теоремы можно найти в цитированных выше работах. Метод фиктивных областей органически примыкает к методам типа 1—5 и для довольно широкого класса задач математической физики позволяет решить проблему произвольной области.

В заключение отметим, что изложенный здесь подход позволяет выявить структуру вычислительного алгоритма, тем самым, открывает возможности для оптимизации технологической цепочки и может быть положен в основу при создании пакетов программ для численного решения задач математической физики.

Литература

[1] Алмуханбетов Н.: Численная реализация краевых условий в задачах теории упругости. «Числ. методы механики спл. среды». Новосибирск, т. 3, № 5, (1972).

[2] Анучина Н. Н., Петренко В. Е., Шокин Ю. И., Яненко Н. Н.: Численные методы решения задач газовой динамики с большими деформациями. Trans. Fluid Dynamics 5, Part 1, Polish Academy of Sci., Warsaw (1970).

[3] Белов, Ю. Я.: О методе слабой аппроксимации для первой краевой задачи. «Числ. методы механики спл. среды». Новосибирск, т. 4, № 2 (1973).

[4] Зенкевич (Zienkiewicz, O.): The Finite Element Method in Structural and Continuum Mechanics. Mc. Graw-Hill, London (1967).

[5] Зламал (Zlámal M.): On the Finite Element Method. Numer. Math. 12, 5 (1968).

[6] Коновалов А. Н.: Численное решение задач теории упругости. Новосибирск, НГУ (1968).

[7] Коновалов, А. Н.: Задачи фильтрации многофазной несжимаемой жидкости. Новосибирск, НГУ (1972).

[8] Коновалов, А. Н.: Метод фиктивных областей в задачах фильтрации двухфазной несжимаемой жидкости с учетом капиллярных сил. «Числ. методы механики спл. среды», Новосибирск, т. 3, № 5 (1972).

[9] Коновалов А. Н.: Метод фиктивных областей в задачах кручения. «Числ. методы механики спл. среды». Новосибирск, т. 4, № 2 (1973).

[10] Коновалов, А. Н., Яненко, Н. Н.: Модульный принцип построения программ как основа создания пакета прикладных программ решения задач механики сплошной среды. В сб. Комплексы программ математической физики. Новосибирск (1972).

[11] Копченов, В. Д.: Приближение решения задачи Дирихле методом фиктивных областей. Диф. уравнения т. IV, № 1 (1968).

[12] Лукьянов, А. Т., Яненко, Н. Н.: Изобретение: «Устройство для решения дифференциальных уравнений». Авторское свидетельство № 251259 от 12. 6. 1969.

[13] Марчук, Г. И.: Численные методы в прогнозе погоды. Гидрометиздат, Ленинград (1967).

[14] Рождественский, Б. Л., Яненко, Н. Н.: Системы квазилинейных уравнений. «Наука», Москва (1968).

[15] Самарский, А. А.: Введение в теорию разностных схем. «Наука». Москва (1971).

[16] Саульев, В. К.: Интегрирование уравнений параболического типа методом сеток. Физматгиз, Москва (1960).

[17] Саульев, В. К.: О решении некоторых краевых задач на быстродействующих вычислительных машинах методом фиктивных областей. Сиб. мат. журнал, т. IV, № 4 (1963).

[18] Яненко, Н. Н.: Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. «Наука», Новосибирск (1967).