

УДК 519.634

## УСКОРЕНИЕ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ РЕШЕНИИ НЕОДНОРОДНОГО УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ С ПОМОЩЬЮ ПЕРЕНОРМИРОВОЧНОГО МЕТОДА

С. С. Макаров<sup>1</sup>, А. В. Исаева<sup>1</sup>, Е. А. Грачев<sup>1</sup>, М. Л. Сердобольская<sup>1</sup>

Предложен метод вычисления приближенного решения начально-краевой задачи для неоднородного уравнения диффузии (теплопроводности) в случае, когда искомое решение требуется найти с заданной точностью в области, малой по сравнению с носителем функции плотности источников. Введена процедура перенормировки функции источников в областях, далеких от исследуемой области. Показано, как применение данной процедуры позволяет оптимизировать вычислительные затраты при численном решении рассматриваемой задачи. Проведена оценка эффективности метода. Для задачи диффузии в двумерной области проанализирована зависимость погрешности метода от его параметров.

**Ключевые слова:** уравнение диффузии, численные методы, перенормировка.

**1. Введение и постановка задачи.** Эффективные алгоритмы решения начально-краевой задачи для многомерного уравнения диффузии (теплопроводности) необходимы во многих вопросах математического моделирования. Классическими методами решения таких задач являются метод конечных разностей, метод конечных объемов, а также завоевавшие с развитием вычислительной техники большую популярность методы конечных элементов и граничных элементов [1–3]. Все эти методы активно развивались в последние десятилетия, и к настоящему времени разработано множество эффективных вычислительных алгоритмов [4].

В то же время в физических задачах, в которых рассматриваемая система представляет собой однородную среду, а решение требуется найти в области, на которую мало влияют граничные условия, отпадает необходимость дискретизации пространства с помощью разностных схем или сетки из конечных элементов: в приближении бесконечной однородной среды уравнение теплопроводности имеет аналитическое решение, выражающееся через интеграл по пространству и времени от функции источников и функции влияния. Подобные физические соображения позволяют значительно сократить вычислительные затраты, поэтому вопрос об увеличении эффективности численного счета в таких условиях практически не рассматривался. Тем не менее, и в этом случае остается ряд вопросов, в первую очередь, если функция источников имеет сложный вид. Например, в задачах с чрезвычайно большим количеством точечных источников машинное время, требующееся на построение решения, может оказаться весьма значительным.

К настоящему времени методы ускорения решения подобных задач практически не разрабатывались. В то же время, если решение требуется найти в области, размер которой существенно меньше размеров всей системы, возникает возможность ускорить процесс построения решения. Эта возможность заключается в значительном упрощении вида функции источников “вдали” от исследуемой области, что позволяет тратить меньшее число арифметических операций на подсчет вклада “упрощенной” функции источников в решение уравнения диффузии (теплопроводности).

Рассмотрим следующую начально-краевую задачу для неоднородного уравнения диффузии (теплопроводности) в бесконечной однородной среде:

$$\begin{cases} \partial_t u(\mathbf{r}, t) = -a^2 \Delta u(\mathbf{r}, t) + f(\mathbf{r}, t), \\ u(\mathbf{r}, 0) = 0, \quad \mathbf{r} \in \mathbb{R}^d, \\ u(\mathbf{r}, t) = 0, \quad |\mathbf{r}| \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (1)$$

Будем считать значения функции плотности источников  $f(\mathbf{r}, t)$  отличными от нуля в заданной огра-

<sup>1</sup> Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Ленинские горы, 119991, Москва; С. С. Макаров, аспирант, e-mail: sergejsmakarov@gmail.com; А. В. Исаева, аспирант, e-mail: avisaeva@gmail.com; Е. А. Грачев, доцент, e-mail: grachevea@gmail.com; М. Л. Сердобольская, доцент, e-mail: serdobolskaya@physics.msu.ru

ниченной области  $D$ . В этом случае, как известно, решение задачи (1) может быть представлено в виде [5]

$$u(\mathbf{r}, t) = \int_0^t d\tau \int_D ds G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) f(\mathbf{s}), \quad (2)$$

где  $G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau)$  — значение функции влияния в точке  $\mathbf{r}$  источника, расположенного в точке  $\mathbf{s}$ :

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) = \begin{cases} \frac{1}{\left(2a\sqrt{\pi(t - \tau)}\right)^d} \exp\left\{-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{s}|^2}{4a^2(t - \tau)}\right\}, & t > \tau, \\ 0, & t \leq \tau. \end{cases}$$

Здесь и далее  $|\mathbf{r} - \mathbf{s}|$  — евклидово расстояние между точками  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{s}$ .

Если функция плотности источников  $f(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r})$  не зависит от времени, то интеграл по переменной  $\tau$  в (2) может быть выражен либо через интеграл ошибок (для нечетных значений размерности пространства  $d$ ), либо через интегральную показательную функцию (для четных  $d$ ). Интеграл по переменной  $\mathbf{s}$  зависит от вида  $f(\cdot)$  (в общем случае произвольного). Ограничим рассмотрение случаем, когда  $f(\cdot)$  интегрируема по модулю в  $D$ :

$$\int_D d\mathbf{r} |f(\mathbf{r})| = F < \infty. \quad (3)$$

Физически это означает, что в каждый момент времени в системе выделяется конечное количество вещества (энергии). В ряде прикладных задач функция источников описывает совокупность точечных источников, т. е. имеет вид  $f(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N_D} f_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ . В этом случае интеграл по  $\mathbf{s}$  в (2) может быть взят аналитически:

$$u(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^{N_D} f_i \int_0^t d\tau G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i, t - \tau). \quad (4)$$

В других задачах функция источников представляет собой непрерывную ограниченную в  $D$  функцию, описывающую плотность распределения источников, и тогда задача (1), как правило, решается численно. Наиболее распространенные методы численного интегрирования заключаются в использовании вместо области  $D$  и функции  $f(\mathbf{r})$  совокупности дискретных точек  $\mathbf{r}_i$  и значений функции  $f(\mathbf{r}_i)$  в них. Таким образом, случай непрерывной функции  $f(\mathbf{r})$  сводится к случаю, когда  $f(\mathbf{r})$  описывает совокупность точечных источников. Если число  $N_D$  источников (стоков) тепла невелико, решение задачи найти нетрудно, однако в случае больших значений  $N_D$  при вычислении  $u(\mathbf{r}, t)$  по формуле (4) могут возникнуть проблемы.

Предположим, что нас интересует поведение решения в некоторой области  $\Lambda$  в течение некоторого промежутка времени от  $t_1$  до  $t_2$ . Для полного решения всей задачи требуется  $O(N_\Lambda N_t N_D)$  арифметических операций, где  $N_\Lambda$  и  $N_t$  — соответственно число точек внутри области  $\Lambda$  и внутри промежутка от  $t_1$  до  $t_2$ , в которых необходимо найти решение. Вычислительных ресурсов компьютера может оказаться недостаточно, чтобы совершить столь большое количество операций за приемлемое время, поэтому необходимо значительно сократить это количество, минимизировав возникающую при этом ошибку решения.

Пусть размер интересующей нас области  $\Lambda$  намного меньше, чем размер области  $D$ . Функция влияния  $G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t)$  быстро убывает как функция от  $|\mathbf{r} - \mathbf{s}|$ , поэтому основной вклад в решение уравнения диффузии (теплопроводности) в области  $\Lambda$  дают источники, которые располагаются внутри или поблизости от нее. В то же время подавляющее большинство арифметических операций уходит на расчет влияния источников, расположенных “далеко” от области  $\Lambda$ . Таким образом, имеет смысл сократить количество таких вычислений, при этом, поскольку влияние таких источников мало, ошибка решения будет невелика.

Идея, лежащая в основе предлагаемого метода, заключается в следующем: нужно эффективно преобразовать исходную модель в модель “меньшего масштаба”, сохраняющую все характерные свойства исходной, но количественно несущую в себе меньше информации о системе. Во многом эта идея напоминает метод перенормировки, использованный Кадановым для исследования фазовых переходов второго рода в ферромагнетике вблизи точки Кюри [6, 7]. В рамках этого подхода выделяются блоки по  $2 \times 2 \times 2$  атомов, а каждый блок заменяется на один атом с усредненным значением магнитного момента. По аналогии мы также называем наш метод перенормировочным.

Предлагаемый метод можно разложить на две составляющих его процедуры: разбиение исходной области на подобласти  $\Omega_i, i = 0, \dots, N$ , и последующее “сложение” источников в каждой подобласти  $\Omega_i$ , кроме  $\Omega_0$ , в один эффективный источник. Методика разбиения областей представляет собой одну из вариаций метода декомпозиции областей [8], широко применяемого для построения эффективных алгоритмов численных решений уравнений в частных производных. В работе [9] можно найти пример, каким образом метод декомпозиции областей позволяет строить алгоритмы разной степени подробности в различных областях пространства для увеличения эффективности конечно-разностных схем решения уравнений в частных производных с малым параметром при производных высшего порядка.

Методика “сложения” источников в рамках предлагаемого нами метода имеет общие черты с методикой объединения частиц при реализации метода конечно-размерных частиц в ячейке [10]. Необходимость в объединении частиц в указанной работе возникает в том случае, когда две или более одинаковых частиц оказываются в одной относительно небольшой ячейке пространства. Во избежание избыточной информации, замедляющей работу ЭВМ, авторы объединяли все частицы в ячейке в одну, исходя из законов сохранения объема, массы, импульса и энергии частицы. В настоящей работе мы придерживаемся этого “консервативного” подхода: объединяя источники в каждой области  $\Omega_i$  в один общий источник, мы будем требовать сохранения суммарной интенсивности источников.

Предлагаемый в настоящей статье метод также напоминает методику построения адаптивных сеток в методе конечных элементов, в соответствии с которой в областях наибольшего интереса выбираются элементы наименьшего размера [11]. Основное отличие состоит в том, что при построении адаптивных сеток в методе конечных элементов задача заключается в упрощении носителя искомой функции  $u$ . В предлагаемом нами методе рассматривается процедура упрощения носителя функции источников, в то время как в упрощении носителя искомой функции нет необходимости.

**2. Перенормировочный метод решения неоднородного уравнения диффузии.** Выделим некоторую область  $\Omega_0$  ( $\Lambda \subset \Omega_0$ ), размер которой много меньше размера области  $D$ . Внутри области  $\Omega_0$  оставим функцию источников в прежнем виде. В области  $D \setminus \Omega_0$  изменим функцию источников следующим образом. Разобьем область  $D \setminus \Omega_0$  на конечное число подобластей  $\Omega_i, i = 1, \dots, N$ , в каждой из которых заменим совокупность всех точечных источников на один точечный источник, расположенный в некоторой точке  $\mathbf{r}_i \in \Omega_i$  (поскольку поиск оптимального положения  $\mathbf{r}_i$  затруднителен, можно выбирать в качестве  $\mathbf{r}_i$ , например, геометрические центры  $\Omega_i$ ). Мощности  $\tilde{f}_i$  этих источников определим следующим образом:

$$\tilde{f}_i = \int_{\Omega_i} d\mathbf{s} f(\mathbf{s}), \quad i = 1, \dots, N. \tag{5}$$

Другими словами, мощность источника, помещенного в точку  $\mathbf{r}_i$ , равняется интегральной мощности функции источников по  $\Omega_i$ . Таким образом, суммарное количество энергии (вещества), производимое всеми источниками, остается неизменным после процедуры перенормировки. Перенормированная функция источников  $\tilde{f}$  примет вид

$$\tilde{f}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})\chi_{\Omega_0}(\mathbf{r}) + \sum_{i=1}^N \tilde{f}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i),$$

где  $\chi_{\Omega_0}(\cdot)$  — характеристическая функция области  $\Omega_0$ . Заменим задачу (1) на задачу с перенормированной функцией источников, взяв  $\tilde{f}(\mathbf{r})$  в правой части уравнения вместо  $f(\mathbf{r})$ . Решение данной задачи с учетом (5) можно записать в форме

$$\tilde{u}(\mathbf{r}, t) = \int_0^t d\tau \int_{\Omega_0} d\mathbf{s} G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) f(\mathbf{s}) + \sum_{i=1}^N \int_{\Omega_i} d\mathbf{s} f(\mathbf{s}) \int_0^t d\tau G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i, t - \tau). \tag{6}$$

Численный расчет правой части (6) требует  $O(N_0 + N)$  операций, где  $N_0$  — число источников, расположенных в области  $\Omega_0$ . Чтобы найти решение в  $N_t$  моментов времени в  $N_\Lambda$  точках области  $\Lambda$ , требуется  $O(N_\Lambda N_t (N_0 + N))$  операций. Мы пренебрегли количеством арифметических операций, необходимых для расчета  $\tilde{f}_i$ , поскольку их нужно выполнить только один раз, а при достаточно больших  $N_\Lambda$  и  $N_t$  это количество пренебрежимо мало. Общую вычислительную эффективность метода можно оценить как  $O(N_D / (N_0 + N))$ . Эффективность зависит от того, какая доля от всех точечных источников в  $D$  расположена в области  $\Omega_0$ , и может составить несколько порядков (например, в случае равномерного распределения точечных источников в  $D$ ).

**3. Оценка точности перенормировочного метода решения уравнения диффузии со сложной функцией источников.** Разность между точным (2) и приближенным (6) решениями с учетом представления области  $D$  как объединения непересекающихся областей  $\Omega_0, \Omega_1, \dots, \Omega_N$  можно записать в виде

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r}, t) - \tilde{u}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{i=0}^N \int_0^t d\tau \int_{\Omega_i} d\mathbf{s} G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) f(\mathbf{s}) - \\ &\quad - \int_0^t d\tau \int_{\Omega_0} d\mathbf{s} G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) f(\mathbf{s}) \sum_{i=1}^N \int_0^t d\tau \int_{\Omega_i} d\mathbf{s} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i, t - \tau) f(\mathbf{s}) = \\ &= \sum_{i=1}^N \int_0^t d\tau \int_{\Omega_i} d\mathbf{s} f(\mathbf{s}) (G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i, t - \tau)). \end{aligned}$$

Определим погрешность метода как “наихудшее” значение ошибки решения в промежутке времени от  $t_1$  до  $t_2$  в области  $\Lambda$ :  $\epsilon = \sup_{t \in [t_1, t_2]} \sup_{\mathbf{r} \in \Lambda} |u(\mathbf{r}, t) - \tilde{u}(\mathbf{r}, t)|$ .

Для упрощения расчетов оценим погрешность сверху:

$$\begin{aligned} \epsilon &\leq \sup_{t \in [t_1, t_2]} \sup_{\mathbf{r} \in \Lambda} \sum_{i=1}^N \int_{\Omega_i} d\mathbf{s} |f(\mathbf{s})| \int_0^t d\tau |G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i, t - \tau)| \leq \\ &\leq \sup_{t \in [t_1, t_2]} \sup_{\mathbf{r} \in \Lambda} \left\{ \max_i \int_0^t d\tau \max_{\mathbf{s} \in \Omega_i} |G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i, t - \tau)| \sum_{i=1}^N \int_{\Omega_i} d\mathbf{s} |f(\mathbf{s})| \right\} \leq \quad (7) \\ &\leq F \sup_{t \in [t_1, t_2]} \sup_{\mathbf{r} \in \Lambda} \max_i \int_0^t d\tau \max_{\mathbf{s} \in \Omega_i} |G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i, t - \tau)|. \end{aligned}$$

Здесь в последнем неравенстве мы воспользовались (3).

Найдем

$$\max_{\mathbf{s} \in \Omega_i} |G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i, t - \tau)| \quad (8)$$

при фиксированных  $\mathbf{r}, \mathbf{r}_i, t$  и  $\tau$ . Поскольку функция  $G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau)$  монотонно зависит от  $|\mathbf{r} - \mathbf{s}|$ , максимум по  $\mathbf{s} \in \Omega_i$  достигается “в крайних точках” значения расстояния  $|\mathbf{r} - \mathbf{s}|$ , т.е. в точке  $\mathbf{s}$  из области  $\Omega_i$ , либо наиболее близкой, либо наиболее удаленной от (фиксированной) точки  $\mathbf{r}$ . Искомый максимум (8) равен большему из двух значений функции  $|G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i, t - \tau)|$  в двух указанных точках. Заметим, что области знакопостоянства разности  $(G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t - \tau) - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i, t - \tau))$  определяются только знаком разности  $(|\mathbf{r} - \mathbf{s}| - |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|)$  и, следовательно, не зависят от  $t, \tau$ . Таким образом, точка  $\mathbf{s} = \mathbf{r}_i^*$ , в которой достигается максимум (8), не зависит от  $\tau$ .

Дальнейшее аналитическое исследование оценки погрешности затруднительно, поэтому в рассмотренном ниже численном примере мы искали точные верхние грани в правой части (7) простым перебором по выбранным заранее в области  $\Lambda$  и в промежутке времени  $[t_1, t_2]$  точкам.

**4. Решение модельной задачи диффузии в двумерной области.** Предположим, что область  $\Lambda$ , в которой нам необходимо найти решение, представляет собой круг с радиусом  $\rho_\Lambda$  (если область  $\Lambda$  имеет другую форму, то ее можно заменить минимальным кругом, содержащим в себе  $\Lambda$ ). Для простоты будем считать, что область  $D$  расположения источников также является кругом с радиусом  $R$ . Поскольку функция  $G(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t)$  радиально-симметрична относительно  $(\mathbf{r} - \mathbf{s})$ , область  $\Omega_0$ , в которой мы не перенормируем функцию источников, также определим как круг радиуса  $\rho_0$ ,  $\rho_\Lambda < \rho_0$ . Считаем, что центры областей  $\Lambda, \Omega_0$  и  $D$  совпадают. Выберем полярную систему координат с центром в общем центре трех кругов и разобьем  $D \setminus \Omega_0$  на  $N_\rho N_\phi$  областей  $\Omega_{ij}$ , определяемых следующим образом:

$$\begin{aligned} \Omega_{ij} &= \left\{ \mathbf{r} = (\rho, \phi) : \rho_{i-1} < \rho \leq \rho_i, \phi_{i-1} < \phi \leq \phi_i \right\}, \quad \rho_i = \rho_0 + i \frac{R - \rho_0}{N_\rho}, \\ \phi_j &= j \frac{2\pi}{N_\phi}, \quad i = 1, \dots, N_\rho, \quad j = 1, \dots, N_\phi. \end{aligned}$$

В соответствии с изложенным в разделе 2 методом заменим непрерывную функцию  $f(\cdot)$  в каждой из областей  $\Omega_{ij}$  на дельта-функцию:

$$\tilde{f}(\mathbf{r}) = \tilde{f}_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ij}), \quad \tilde{f}_{ij} = \int_{\Omega_{ij}} ds f(\mathbf{s}).$$

Здесь  $\mathbf{r}_{ij}$  — геометрический центр области  $\Omega_{ij}$ .

Пусть  $\mathbf{r}_{ij}^*$  — точка, в которой достигается максимум (8) (с учетом замены  $\Omega_i \rightarrow \Omega_{ij}$ ). Как уже отмечалось, точка  $\mathbf{r}_{ij}^*$  не зависит от  $\tau$ , поэтому можно взять интеграл по  $\tau$  в правой части (7), в результате получим

$$\epsilon \leq F \sup_{t \in [t_1, t_2]} \sup_{\mathbf{r} \in \Lambda} \left\{ \frac{1}{4a^2\pi} \max_{i,j} \left| \text{Ei} \left( -\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ij}^*|^2}{4a^2t} \right) \text{Ei} \left( -\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ij}|^2}{4a^2t} \right) \right| \right\},$$

где  $\text{Ei}(x) = \int_{-\infty}^x d\xi e^\xi / \xi$  — интегральная показательная функция. Далее мы выбираем достаточно много точек внутри области  $\Lambda$  (симметрия задачи позволяет это сделать внутри половины одного из секторов в круге  $\Lambda$ ) и в промежутке времени  $[t_1, t_2]$ , а затем, заменяя точные верхние грани по  $\mathbf{r} \in \Lambda$  и  $t \in [t_1, t_2]$  максимумом по всем выбранным точкам, рассчитываем оценку погрешности.

Ниже приведены некоторые результаты исследования предложенного в разделе 2 метода построения численного решения задачи (1), полученные в вычислительном эксперименте. Расчет выполнялся в двумерном случае с учетом описанной выше радиальной симметрии. В таблице приведены значения параметров модели: оценка суммарной мощности источников  $F$ , коэффициент диффузии  $a$ , радиусы  $\rho_\Lambda$ ,  $R$  и  $\rho_0$  областей  $\Lambda$ ,  $D$  и  $\Omega_0$ , а также количество областей, на которые производится разбиение области  $D \setminus \Omega_0$  по радиусу ( $N_\rho$ ) и по углу ( $N_\phi$ ), и границы временного интервала  $[t_1, t_2]$ . Все величины считаются безразмерными.

Значения параметров численного решения

$F$	$a$	$\rho_\Lambda$	$\rho_0$	$R$	$N_\rho$	$N_\phi$	$t_1$	$t_2$
1	2	1	5	100	20	10	1	2

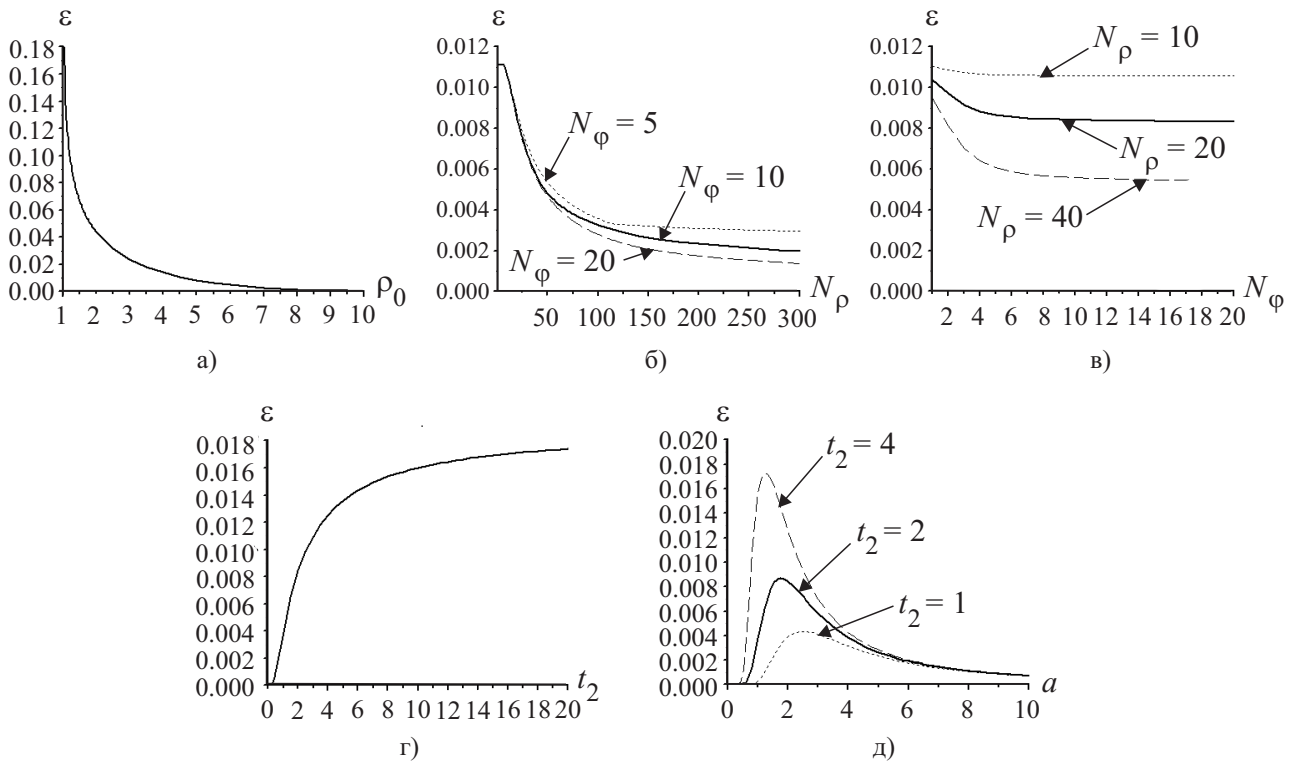


Рис. 1. Зависимость погрешности  $\epsilon$  от параметров задачи

На рис. 1 показано изменение величины погрешности метода при варьировании одного из параметров модели (значения прочих параметров фиксировались). Так, для рис. 1а варьруемым параметром является радиус  $\rho_0$  области  $\Omega_0$ . Видно, что погрешность быстро убывает с ростом  $\rho_0$ , поскольку влияние

источников резко падает при удалении от исследуемой области. Можно сделать вывод, что при численном решении уравнения диффузии (теплопроводности) нецелесообразно выбирать  $\rho_0$  большим.

На рис. 1б в качестве варьируемого параметра выбрано  $N_\rho$ . При малых значениях аргумента здесь также наблюдается заметное убывание погрешности с ростом  $N_\rho$ , а при больших значениях погрешность стремится к постоянному ненулевому значению, которое определяется величиной  $N_\phi$ .

Зависимость погрешности от  $N_\phi$  выглядит аналогично (рис. 1в): при больших  $N_\phi$  погрешность стремится к ненулевому значению, определяемому значением  $N_\rho$ . Таким образом, оптимальные значения  $N_\rho$  и  $N_\phi$  необходимо выбирать совместно.

Рост погрешности со временем (рис. 1г), который сначала происходит достаточно резко, далее замедляется. Это означает, что предлагаемый метод можно использовать как при небольших, так и при больших значениях  $t_2$ . Причина замедления роста погрешности заключается в том, что при больших временах источники, расположенные близко друг от друга, дают практически одинаковый вклад в решение уравнения теплопроводности. В то же время предлагаемый метод перемещает каждый источник не далее чем в пределах выделенной области  $\Omega_{ij}$ .

На рис. 1д приведена зависимость погрешности от коэффициента диффузии, который принимает максимальное значение при  $a = a^*$ . При  $a < a^*$  уменьшается вклад в решение от источников, расположенных далеко от исследуемой области. При  $a > a^*$  снижается необходимость точного знания о местоположении источников тепла. Значение  $a^*$  убывает как функция от времени.

На рис. 2 представлен график, иллюстрирующий соотношение между погрешностью и эффективностью метода.

В разделе 1 число  $M$  необходимых арифметических операций было оценено как  $O(N_\Lambda N_t(N_0 + N))$ . Предположим, что источники распределены равномерно по всей области  $D$ . Если их число велико, то велико также число  $N_0$  источников, расположенных в области  $\Omega_0$ . Тогда можно считать, что число подобластей разбиения области  $D$  невелико по сравнению с  $N_0$ , т.е.  $N \ll N_0$ , и  $M = O(N_\Lambda N_t N_0)$  пропорционально  $\rho_0^2$ . Оптимальное значение  $\rho_0^*$  может быть определено из условия  $\epsilon(\rho_0) + k\rho_0^2 \sim \min_{\rho_0}$ , где параметр  $k$  определяет “весовое” соотношение между погрешностью и эффективностью метода. Пример определения оптимального  $\rho_0^*$  при  $k = 1$  (погрешность и эффективность одинаково важны для исследователя) приведен на рис. 2.

На рис. 3 в квадратной области  $D = \{0 \leq x \leq 40, 0 \leq y \leq 40\}$  представлено распределение температуры. В этой задаче  $N_D = 30\,000$  точечных источников тепла были случайно (с равномерным распределением) размещены в области  $D = \{-50 \leq x \leq 50, -50 \leq y \leq 50\}$ . Рисунок 3а соответствует решению задачи с неперенормированной функцией источников (точное решение). На рис. 3б представлено распределение температуры для функции источников, перенормированной в соответствии с предложенным методом. Мы предположили, что исследуемая область  $\Lambda$  и область  $\Omega_0$ , в которой не производится перенормировка функции источников, представляют собой круги радиусов  $\rho_\Lambda = 15$  и  $\rho_0 = 25$  с общим центром в точке  $x = 0, y = 0$ . Остальные параметры те же, что и в таблице, за исключением  $t_2 = 40$ .

Рисунок 3в иллюстрирует распределение относительной погрешности метода в данном численном примере. В области  $\Lambda$  относительная погрешность метода не превышает 0.001. В области  $\Omega_0$  относительная погрешность не превышает 0.005. В то же время в области  $D \setminus \Omega_0$  относительная погрешность метода может достигать значений, близких к единице. Это происходит в первую очередь в центрах областей  $\Omega_i$ , в которые в процессе перенормировки были помещены источники тепла большой интенсивности, однако определение значения температуры в этих точках не является задачей исследователя.

**5. Заключение.** В работе предложен метод перенормировки функции источников, использование которого позволяет значительно сократить вычислительные затраты при решении начально-краевой задачи для уравнения диффузии (теплопроводности). Его применение оправданно в случае, когда необходимо найти решение внутри области  $\Lambda$ , размер которой много меньше размера области  $D$  расположения источников. Основная идея предлагаемого метода заключается в выборе области  $\Omega_0$  (где используется точная

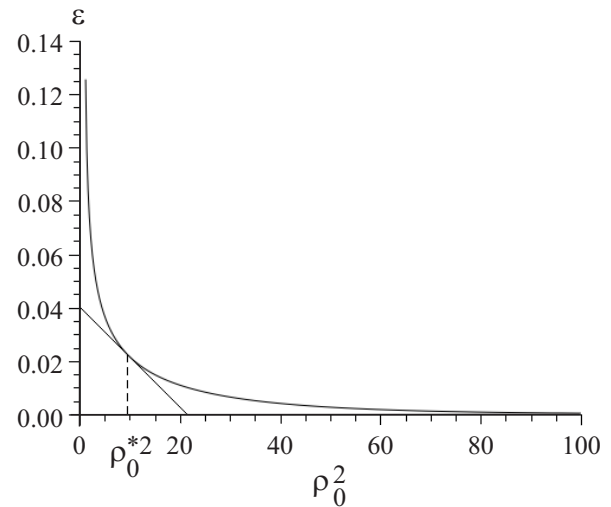


Рис. 2. Соотношение между погрешностью  $\epsilon$  и эффективностью ( $\sim \rho_0^2$ ) метода;  $\rho_0^*$  — оптимальное значение радиуса области без перенормированных источников

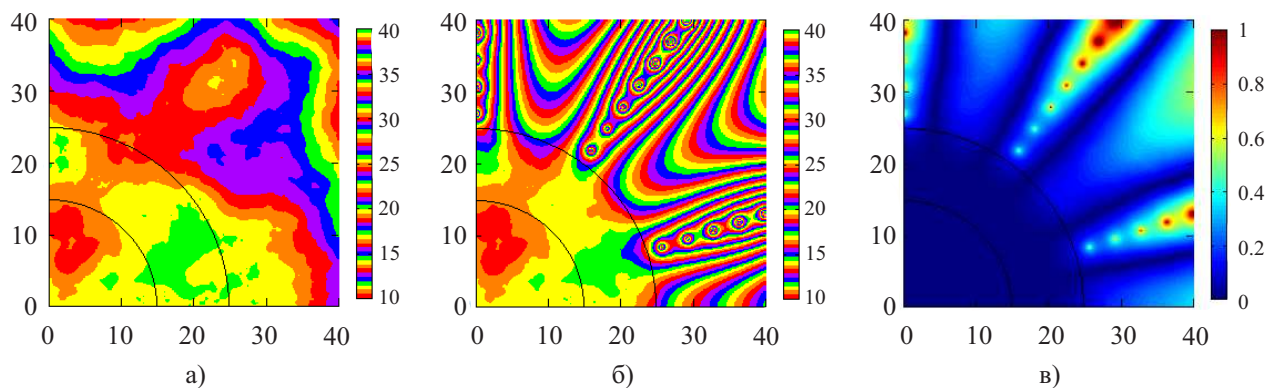


Рис. 3. Распределение температуры  $u$  в прямоугольной области  $\{0 \leq x \leq 40, 0 \leq y \leq 40\}$  для: а) первоначальной задачи; б) задачи с перенормированной функцией источников; в) распределение относительной погрешности метода  $\epsilon$ . Источники равномерно распределены в области  $\{-50 \leq x \leq 50, -50 \leq y \leq 50\}$ . Окружность меньшего радиуса ограничивает область  $\Lambda$ , интересующую исследователя. Окружность большего радиуса ограничивает область  $\Omega_0$ , в которой не производится перенормировка функции источников

функция источников), содержащей внутри себя  $\Lambda$ , и переходе к перенормированной функции источников в  $D \setminus \Omega_0$ . Перенормировка функции источников  $f(\cdot)$  осуществляется посредством разбиения области  $D \setminus \Omega_0$  на  $N$  подобластей  $\Omega_i$  и замене внутри каждой из них функции источников на один точечный источник с мощностью  $\tilde{f}_i$ , равной интегральной мощности  $f(\cdot)$  по  $\Omega_i$ .

Подробно рассмотрена двумерная задача диффузии в случае радиальной симметрии. В качестве области  $\Omega_0$  выбран круг радиуса  $\rho_0$ , а в качестве областей  $\Omega_i$  — секторы концентрических колец, центр которых совпадает с центром  $\Omega_0$ . Погрешность метода сильно убывает как функция от  $\rho_0$  и стремится, монотонно убывая, к постоянному ненулевому значению как функция от числа колец  $N_\rho$  и числа секторов  $N_\phi$ . Отсюда можно заключить, что использование слишком больших значений  $\rho_0$ ,  $N_\rho$  и  $N_\phi$  нецелесообразно, оптимальное значение этих величин может быть определено из соображений баланса между точностью и быстротой решения уравнения диффузии.

Рост погрешности решения как функции от времени сильно замедляется при больших значениях  $t_2$ , поэтому предлагаемый метод может быть использован для расчета решения при достаточно больших временах. Кроме того, погрешность решения сильно зависит от коэффициента диффузии  $a$ , принимая максимальное значение в некоторой точке  $a = a^*$ , которое убывает как функция от  $t_2$ .

Применение предложенного метода может существенно упростить решение задач математического моделирования сложных физических, биофизических и других “естественных” систем, в которых число источников (стоков) вещества и энергии крайне велико, а эффективность программной реализации является важной характеристикой математической модели. Метод применим как для задач с точечными источниками (стоками), так и для задач с непрерывной функцией источников.

В то же время предложенный метод имеет ряд серьезных ограничений. Так, важным условием применимости метода является требование малости исследуемой области  $\Lambda$  по сравнению со всей областью  $D$  расположения источников. Необходимым условием является стационарность (или редкие изменения) функции источников и однородность коэффициента теплопроводности, что, конечно, не всегда выполнено для произвольной физической модели. Идеализацией также является сделанное нами предположение о том, что моделируемая система находится в бесконечной среде.

Интеграция перенормировочного метода с методом конечных разностей затруднительна вследствие жесткой фиксированности размеров ячеек разностной схемы. Применение предложенного метода следует искать в классе методов конечных объемов, конечных элементов или граничных элементов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989.
2. Смирнов Е.М., Зайцев Д.К. Метод конечных объемов в приложении к задачам гидрогазодинамики и теплообмена в областях сложной геометрии // Научно-технические ведомости СПбГТУ. 2004. № 2 (36). 70–81.
3. Розин Л.А. Метод конечных элементов // Соросовский образовательный журнал. 2000. № 4. 120–127.
4. Гейн С.В., Зайцев Н.А., Посвянский В.С., Радвогин Ю.Б. Метод независимых потоков для численного решения многомерного уравнения теплопроводности. Препринт № 53 ИПМ им. М. В. Келдыша. Москва, 2003.

5. Карслоу Г., Езер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964.
6. Wilson K.G. The renormalization group and critical phenomena: Nobel lecture, 8 December 1982 // *Reviews of Modern Physics*. 1983. № 55. 583–600.
7. Ма Ш. Современная теория критических явлений. М.: Мир, 1980.
8. Quarteroni A., Valli A. Domain decomposition methods for partial differential equations. New York: Oxford Science Publications, 1995.
9. Пшикин Г.И. Сеточная аппроксимация метода декомпозиции области и решения с улучшенной сходимостью для сингулярно возмущенных эллиптических уравнений в областях с характеристическими границами // *Журн. вычисл. матем. и матем. физики*. 2005. **45**, № 7. 1196–1212.
10. Султанов В.Г., Григорьев Д.А., Ким В.В., Ломоносов И.В., Матвеевичев А.В., Острик А.В., Шутов А.В. FPC3D — параллельный код для моделирования высокоэнергетических процессов в конденсированных средах // *Вычислительные методы и программирование*. 2009. **10**, № 1. 101–109.
11. Diekmann R., Preis R., Schlimbach F., Walshaw C. Shape-optimized mesh partitioning and load balancing for parallel adaptive FEM // *Parallel Computing*. 2000. № 26. 1555–1581.

Поступила в редакцию  
09.02.2012

---