

Крамаренко Василий Константинович

**Методы решения уравнения диффузии в средах с
контрастными включениями и с учетом особенностей от
распределенных источников**

Специальность 05.13.18 —
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы
программ»

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Московском физико-техническом институте (национальном исследовательском университете)

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Василевский Юрий Викторович

Научный консультант: доктор физико-математических наук, профессор
Кузнецов Юрий Алексеевич

Официальные оппоненты: **Капорин Игорь Евгеньевич**,
доктор физико-математических наук,
Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Рос-
сийской академии наук Федерального исследовате-
льского центра «Информатика и управление» Рос-
сийской академии наук,
главный научный сотрудник

Лаевский Юрий Миронович,
доктор физико-математических наук, профессор,
Институт вычислительной математики и математи-
ческой геофизики Сибирского отделения Российской
академии наук,
главный научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральный исследовательский центр Институт
прикладной математики им. М.В. Келдыша Рос-
сийской академии наук

Защита состоится 2019 г. в __ часов __ на заседании диссертационного совета
Д 002.045.01 при федеральном государственном бюджетном учреждении науки
Институте вычислительной математики имени Г. И. Марчука Российской акаде-
мии наук расположенном по адресу: Москва, ул. Губкина, 8.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИВМ РАН
<http://www.inm.ras.ru>.

Автореферат разослан _____ 2019 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 002.045.01,
доктор физико-математических наук

Бочаров Геннадий Алексеевич

Общая характеристика работы

Настоящая работа посвящена разработке и исследованию методов учета особенностей от распределенных источников при численном решении уравнения диффузии, а также численному решению уравнения диффузии в высококонтрастных средах. В работе предложены два метода, первый из которых позволяет учитывать особенности решения, порожденные распределенными источниками, при расчете уравнения диффузии. Второй метод позволяет эффективно решать линейные системы, возникающие в результате дискретизации уравнения диффузии в задачах с высококонтрастными средами.

Актуальность работы. В настоящее время математическое моделирование процессов, описываемых уравнением диффузии, является важным разделом прикладной математики. Такими процессами являются, например, многофазные течения в пористых средах, распространение тепла, а также многие другие. В реальных задачах достаточно часто возникают ситуации, в которых наличие различных особенностей решения или коэффициентов задачи затрудняет получение приближенного решения с приемлемой точностью.

Целью данной работы является разработка и исследование методов, позволяющих учитывать особенности среды или решения при расчете уравнения диффузии. Первый из предложенных подходов позволяет учитывать произвольную особенность решения при дискретизации потока в методе конечных объемов. Идея подхода состоит в том, чтобы, при наличии аналитического описания особенности, непосредственно ввести его в дискретизацию. В диссертационной работе данная идея применена для корректного учета распределенных источников (нагнетательных и эксплуатационных скважин), произвольным образом пересекающих ячейки расчетной сетки.

Второй подход, разработанный и исследованный в диссертационной работе, связан с моделированием диффузионных процессов в средах с высококонтрастными включениями. Он заключается в построении предобуславливателя, использование которого в итерационных методах исключает зависимость их скорости сходимости от скачков коэффициента диффузии. При дополнительных ограничениях, таких как отсутствие общей границы у включений с контрастным коэффициентом диффузии, метод обеспечивает эффективное распараллеливание процесса предобуславливания.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Разработать метод конечных объемов приближенного решения уравнения диффузии с учетом особенностей от распределенных источников (скважин), обладающий вторым порядком аппроксимации.
2. Разработать и исследовать параллельный метод для приближенного решения задачи диффузии в средах с высококонтрастными включениями.

Научная новизна. В работе были получены следующие результаты:

1. Впервые был предложен метод учета произвольной аналитической функции особенности в методе конечных объемов при учете особенностей от распределенных источников (скважин) в задачах диффузии.
2. Впервые был предложен блочно-двухуровневый предобуславливатель, который обеспечивает независимость скорости сходимости от скачков коэффициента диффузии.

Теоретическая значимость работы состоит в описании схемы нелинейной коррекции для учета особенностей решения от распределенных источников, а также описании и анализе метода построения блочно-двухуровневого предобуславливателя для итерационного решения систем линейных уравнений, порождаемых дискретизациями уравнения диффузии для высококонтрастных сред. В рамках описания схемы предложен механизм учета особенностей при дискретизации потока, а также схема расчета потока из скважины в расчетную область. Для анализа предобуславливателя были доказаны теоремы о независимости скорости сходимости итерационного процесса с его использованием от скачка коэффициентов для шарового тензора в уравнении диффузии.

Практическая значимость работы заключается в применении схемы нелинейной коррекции для дискретизации потока в методе конечных объемов и блочно-двухуровневого предобуславливателя для линейных систем, возникающих в задаче диффузии с сильно контрастными коэффициентами. В рамках исследования схемы нелинейной коррекции были проведены эксперименты для различных вариантов функции коррекции и различных физических параметров задачи фильтрации. В рамках исследования предобуславливателя были проведены численные эксперименты, подтверждающие теоретические выкладки, а также было проведено исследование параллельных свойств предобуславливателя и подтверждена эффективная параллелизация процесса предобуславливания.

Основные положения, выносимые на защиту. Основной результат работы — предложены и исследованы подходы для учета особенности от распределенных источников, а также расчета задач с сильно контрастными средами.

В частности:

1. Предложен и численно исследован метод конечных объемов для приближенного решения уравнения диффузии на многогранных сетках, учитывающий особенности от распределенных источников.
2. Предложена модель взаимодействия распределенного источника (скважины) и содержащей его ячейки сетки.
3. Предложен блочно-двухуровневый предобуславливатель с проекторами, который обеспечивает независимость скорости сходимости от скачков коэффициента диффузии и экспериментально подтверждено отсутствие роста числа итераций при возрастании скачка коэффициента диффузии.
4. Разработана параллельная реализация блочно-двухуровневого предобуславливателя и проведено его сравнение с предобуславливателями AS-

$ILU(k, q)$, $AS-ILU2(\tau, q)$, а также алгебраическим многосеточным предобуславливателем.

5. Численные реализации разработанных методов внедрены в программную платформу INMOST.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на российско-немецком семинаре “German-Russian Workshop on Mathematical Modelling in Medicine and Geophysics” в 2016 году, международных конференциях “ECMOR” и “FVCA8 2017” в 2017 году, на “Всероссийской конференции-школе молодых исследователей Абрау-Дюрсо” в 2017 году, на международной конференции “Russian Supercomputing Days” в 2018 году, на третьем и пятом международных семинарах “Numerical Methods and Applications in Earth and Life Science” в городе Сьон в 2017 и 2019 годах, а также на семинаре в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук и на семинаре в Вычислительном центре имени А. А. Дородницына Российской академии наук.

Публикации автора по теме диссертации: основные результаты по теме диссертации опубликованы в 6 статьях и сборниках тезисов и трудов конференций [1–6], 3 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК [1–3], и 4 проиндексированы в международных системах цитирования Web of Science и Scopus [1, 2, 5, 6].

Личный вклад. Автором разработаны и исследованы методы учета особенностей от распределенных источников в задаче диффузии. Для метода построения предобуславливателя были проведены численные эксперименты, подтверждающие теоретические выкладки.

В работах [1–3] автором был предложен метод учета аналитической особенности от распределенных источников при численном расчете уравнения диффузии.

В работах [4] [5] и [6] автором был реализован блочно-двухуровневый предобуславливатель для итерационного решения линейных систем, возникающих в задаче диффузии с высококонтрастными средами. Также были исследованы свойства предобуславливателя и проведено его сравнение с другими типами предобуславливателей.

Объём и структура работы диссертационной работы.

Диссертация состоит из введения, двух глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 94 страницы, включая 23 рисунка и 24 таблицы. Список литературы содержит 93 наименования.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках диссертационной работы, сформулированы ее цели и задачи, описана структура диссертации.

В **первой главе** предлагается, описывается и численно исследуется метод учета особенностей решения от распределенного источника в уравнении диффузии.

В *разделе 1.1* кратко дается постановка задачи и описание метода конечных объемов. В *разделе 1.2* кратко описывается нелинейная монотонная двухточечная схема дискретизации потока для метода конечных объемов на многогранных сетках, дается описание подхода построения и применения триплетов. Подход, в котором конормаль раскладывается на сумму нескольких векторов, был использован для создания схемы, предложенной в данной работе.

В *разделе 1.3* описывается схема нелинейной коррекции для дискретизации потока в методе конечных объемов. Для построения схемы рассматривается некоторая окрестность вокруг распределенного источника (скважины) и делается предположение, что вокруг каждой грани в его окрестности решение представимо в виде линейной части и нелинейной поправки:

$$p_T = \underbrace{ax + by + cz + d}_{p_{\text{lin}}} + \underbrace{e F(x, y, z)}_{p_F}, \quad (1)$$

где $F(x, y, z)$ — функция, описывающая сингулярность, которая зависит от особенностей постановки задачи, таких как изотропность или анизотропность тензора диффузии.

В таком случае разложение (1) можно использовать при определении потока через грань ячейки f :

$$\begin{aligned} & - \int_f (\mathbb{D} \nabla p_T) \cdot \mathbf{n}_f dS \\ &= - \int_f (\mathbb{D} \nabla p_{\text{lin}}) \cdot \mathbf{n}_f dS - \int_f (\mathbb{D} \nabla p_F) \cdot \mathbf{n}_f dS \\ &= - \int_f \mathbb{D} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n}_f dS - e \int_f (\mathbb{D} \nabla F(x, y, z)) \cdot \mathbf{n}_f dS \\ &= al_1 + bl_2 + cl_3 + el_4. \end{aligned}$$

Интегралы для l_1, l_2 и l_3 могут быть вычислены аналитически. Для вычисления коэффициента l_4 необходимо использовать численное интегрирование. В настоящей работе была использована кубатурная формула 13-го порядка. Для восстановления коэффициентов a, b, c, e используется подход, в котором вместо триплета для нелинейной монотонной двухточечной схемы вводится новый набор из четырех векторов, называемый квадруплетом. В этом случае при построении приближения выбираются четыре соседние точки колокации, используя которые можно построить разложение потока на несколько компонент. Для описания схемы разложения рассмотрим две ячейки T_+ и T_- , соседствующие через грань f . Обозначим барицентры этих ячеек \mathbf{x}_+ и \mathbf{x}_- . Точки \mathbf{x}_i составляют

квадруплет, а соответствующие давления в этих точках обозначены $p_i = p(\mathbf{x}_i)$ и $p_+ = p(\mathbf{x}_+)$. Предположим, что представление (1) с коэффициентами a, b, c, e верно для каждой точки в квадруплете. Тогда, вычитая значения давления в центре ячейки T_+ из значения в точках колокации и объединяя уравнения в систему, можно получить:

$$\begin{pmatrix} p_1 - p_+ \\ p_2 - p_+ \\ p_3 - p_+ \\ p_4 - p_+ \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 - x_+ & y_1 - y_+ & z_1 - z_+ & F_1 - F_+ \\ x_2 - x_+ & y_2 - y_+ & z_2 - z_+ & F_2 - F_+ \\ x_3 - x_+ & y_3 - y_+ & z_3 - z_+ & F_3 - F_+ \\ x_4 - x_+ & y_4 - y_+ & z_4 - z_+ & F_4 - F_+ \end{bmatrix}}_Q \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ e \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ e \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $F_* := F(x_*, y_*, z_*)$. Отметим, что поиск точек колокации для квадруплета производится таким образом, чтобы детерминант матрицы Q был отличен от нуля и максимален по модулю. В случае, если такой квадруплет не был найден при обходе окрестных барицентров, в область поиска добавляются центры граней и, если необходимо, центры ребер.

Решая систему (2), получим коэффициенты a_+, b_+, c_+, e_+ для ячейки T_+ :

$$\begin{aligned} a_+ &= \sum_j (p_j - p_+) m_{1,j}, & b_+ &= \sum_j (p_j - p_+) m_{2,j}, \\ c_+ &= \sum_j (p_j - p_+) m_{3,j}, & e_+ &= \sum_j (p_j - p_+) m_{4,j}, \end{aligned}$$

где $m_{i,j}$ — элементы обратной матрицы $M = Q^{-1}$. Таким же образом строится аппроксимация для потока из ячейки T_- . Окончательная аппроксимация потоков получается при сложении q_+ и q_- :

$$q_f = \mu_+ \left(\sum_j k_j^+ (p_j - p_+) \right) - \mu_- \left(\sum_{j'} k_{j'}^- (p_{j'} - p_-) \right).$$

В настоящей работе были выбраны коэффициенты $\mu_+ = \mu_- = 1/2$.

В подразделе 1.3.1 кратко описывается модель Писмана, являющаяся одной из классических моделей учета скважины в ячейке. В подразделе 1.3.2 приводится альтернативная схема учета скважины в ячейке. Эта схема учета строится на подходе, описанном в разделе 1.3. Для корректного ее применения на скважине вводятся дополнительные степени свободы, связанные с забойным давлением на скважине, как показано на Рисунке 1, и при использовании этих степеней свободы для каждой грани в ячейке со скважиной строится квадруплет, аппроксимирующий часть потока из скважины в ячейку.

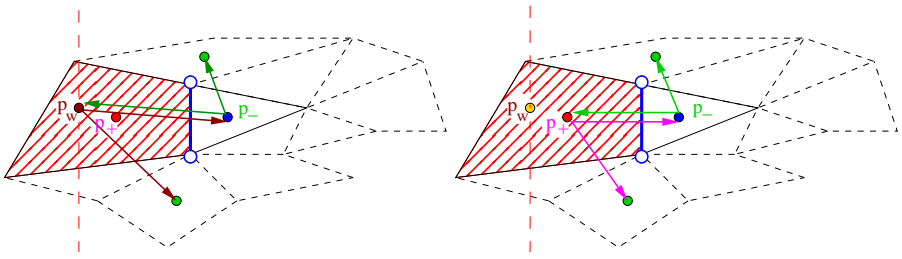


Рисунок 1 — Шаблоны для расчета давления по схеме нелинейной коррекции (справа) и дополнительный шаблон для взаимодействия между ячейкой и скважиной (слева).

В этом случае поток из скважины в ячейку может быть выписан в виде суммы по граням f_i

$$f_{rh} = \sum_{f_i} \left[\left(\sum_l k_l^+ (p_l - p_w) \right) \right].$$

Раздел 1.4 посвящен описанию различных вариантов функции особенности, используемых для нелинейной коррекции, в зависимости от условий задачи. В подразделе 1.4.1 рассматривается функция особенности для изотропного случая. В подразделе 1.4.2 описывается функция особенности для анизотропного случая. Для этого приводится решение для задачи диффузии в случае изолированной скважины в эллиптических координатах. Далее обосновывается возможность использования такого приближения для бесконечной равномерно перфорированной (идеальной) скважины в случае произвольного тензора диффузии. В подразделе 1.4.3 рассматривается функция особенности, применимая для частично перфорированных скважин, а также приводится процедура получения этой функции.

В *разделе 1.5* дается описание численных экспериментов, в которых была исследована схема нелинейной коррекции дискретизации потоков для метода конечных объемов. Реализация данной схемы была выполнена в рамках программной платформы INMOST. Для каждого эксперимента было подобрано аналитическое решение, с которым производилось сравнение. Во всех экспериментах были использованы две схемы дискретизации потока для метода конечных объемов — нелинейная монотонная двухточечная схема (НМД-схема) и схема нелинейной коррекции (НК-схема). Для учета скважины использовались три различных подхода. Для НМД-схемы при учете скважины использовалась или формула Писмана, или же известный поток аналитического решения. Для НК-схемы использовался или метод из подраздела 1.3.2, или известный поток аналитического решения учитывался также как источник. Для граничных условий были использованы условия непротекания на верхней и нижней границах, и условия Дирихле, взятые из следа аналитического решения на боковых границах.

В подразделе 1.5.1 приводится эксперимент с треугольно–призматическими сетками, в которых ячейки сетки имеют выраженную анизотропию. В этом эксперименте рассматривается псевдодвумерная область с одним слоем треугольных призм. Тензор диффузии был выбран изотропным, поэтому функция коррекции была использована из подраздела 1.5.1. Результаты экспериментов показали, что НК-схема достаточно точно воспроизводит аналитическое решение, и L^2 -норма ошибки решения для НК-схемы меньше L^2 -нормы ошибки решения для НМД-схемы на 4-5 порядков. В подразделе 1.5.2 описан аналогичный эксперимент для расчетной сетки, состоящей из шестигранных ячеек, полученных из прямоугольных призм путем сдвижки вершин на небольшую случайную величину в плоскости xOy . Результаты экспериментов также показали точное воспроизведение аналитического решения при использовании сочетания НК-схемы и представленного подхода для учета скважин. В подразделе 1.5.3 рассматривался эксперимент со скважиной, сдвинутой из центра ячейки на некоторое расстояние. В первой части раздела рассматривалась сетка из прямоугольных параллелепипедов. В этом случае было проведено сравнение как НК-схемы с НМД-схемой, так и схемы Писмана с новым подходом для учета скважины. Во второй части раздела представлен аналогичный эксперимент на сетке, состоящей из шестиугольных призм. Результаты расчета в обеих частях эксперимента показывают, что как для НК-схемы, так и для нового подхода для учета скважин L^2 -нормы ошибок на 3-4 порядка меньше, чем для НМД-схемы в сочетании с методом Писмана. В подразделе 1.5.4 рассмотрен эксперимент с анизотропным тензором. Сетка была использована та же, что и в эксперименте из подраздела 1.5.2. Были рассмотрены различные отношения между компонентами тензора d_x и d_y от 10 до 10000. Результаты экспериментов показывают, что при использовании соответствующего решения, схема нелинейной коррекции также остается гораздо более точной, нежели нелинейная монотонная двухточечная схема.

В подразделе 1.5.5 рассматривается полностью трехмерная задача с наклонной скважиной. Была выбрана сетка, состоящая из нескольких слоев прямоугольных параллелепипедов. Рассмотрены варианты как изотропного, так и анизотропного тензора диффузии, а также различные углы наклона скважины. Отметим, что при наклонной скважине были использованы граничные условия Дирихле на всей границе области. Результаты экспериментов хорошо согласуются с результатами из предыдущих разделов и показывают намного более точное воспроизведение решения при применении НК-схемы в сочетании с новым подходом для учета скважин.

В подразделе 1.5.6 описан эксперимент для частично перфорированной скважины. Тензор диффузии был выбран изотропным, сетка была взята из предыдущего подраздела. Результаты экспериментов также показывают значительно большую точность НК-схемы по сравнению с НМД-схемой.

В подразделе 1.5.7 рассматривается эксперимент с двумя скважинами. Расчетная псевдодвумерная область имеет прямоугольную форму с длинной сторо-

ной в два раза больше, чем короткая, а расчетная сетка состоит из прямоугольных параллелепипедов. Скважины расположены в центрах квадратов, на которые можно разбить область. Тензор диффузии является изотропным. В этом эксперименте в качестве функции для описания особенности была взята функция из подраздела 1.4.1, аналитическое решение задавалось формулой

$$p = \frac{q_1 \ln r_1}{2\pi dh_w} + \frac{q_2 \ln r_2}{2\pi dh_w} + C.$$

Для задания константы C было зафиксировано давление в точке между скважинами. Так как схему нелинейной коррекции невозможно применить во всей области, для каждой скважины был определен радиус, в котором вокруг скважины была использована схема нелинейной коррекции. Радиусы были выбраны так, чтобы подобласти не пересекались, а за их пределами использовалась НМД-схема. Результаты экспериментов показывают, что применение схемы нелинейной коррекции повышает точность решения. В Таблице 1 приведены L^2 нормы ошибок решения для данного эксперимента, а на Рисунке 2 изображены функции ошибки на сетке для НК- и НМД-схем.

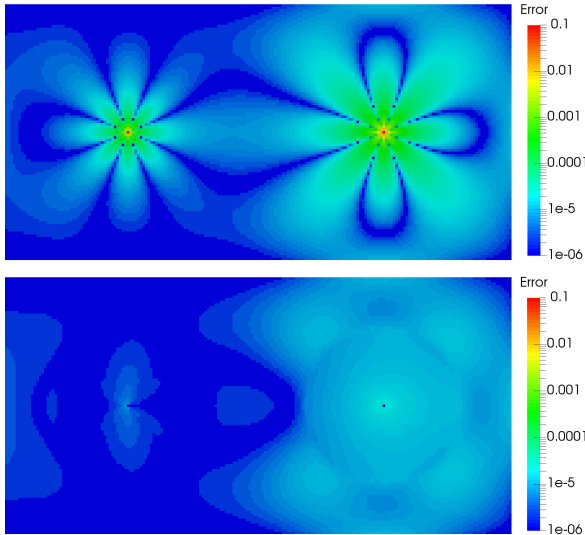


Рисунок 2 — Относительные ошибки для решения НМД-схемы и метода Писмана (сверху) и для НК-схемы (снизу) в логарифмической шкале. Сетка размером $134 \times 67 \times 1$.

В подразделе 1.5.8 исследуется ошибка решения в зависимости от радиуса применения схемы нелинейной коррекции. Исследование проводилось на псевдодвумерной прямоугольной области из предыдущего подраздела. Результаты исследования показали, что даже при радиусе в 3-4 раза больше, чем линейный размер одной ячейки, L^2 -норма ошибки продолжает оставаться достаточно малой.

h	$L^2_{\text{НМД},A}$	$L^2_{\text{НК},A}$	$L^2_{\text{НМД},\text{Писман}}$	$L^2_{\text{НК}}$
100 /33	1.2e-2	2.8e-5	1.2e-2	2.8e-5
100 /67	5.1e-3	7.0e-6	5.2e-3	7.6e-6
100 /99	3.1e-3	3.2e-6	3.1e-3	3.1e-6

Таблица 1 — Ошибки решения для НК- и НМД-схемы для случая двух скважин.

В *подразделе 1.6* кратко представлены выводы первой главы.

Во **второй главе** описан метод построения преобуславливателя для задачи диффузии с высококонтрастными включениями.

В *разделе 2.1* приводится дифференциальная формулировка задачи диффузии, а также ее вариационная и слабая постановки. Описывается также смешанная формулировка задачи диффузии и для нее приводятся дифференциальная, вариационная и слабая постановки.

В *разделе 2.2* описывается смешанный метод конечных элементов, а также описывается система линейных алгебраических уравнений, получаемая при дискретизации уравнения диффузии этим методом. В работе были использованы методы Равьяра-Тома RT_0 и метод PWCF (piecewise constant fluxes), предложенный Ю.А. Кузнецовым. В *разделе 2.3* осуществляется переход от смешанной к смешанной гибридной постановке, дается ее дифференциальная и слабая формулировки, вводятся соответствующие функциональные пространства. Далее выписывается алгебраическая система уравнений, получаемая при дискретизации приведенными методами:

$$\tilde{A} \begin{bmatrix} \bar{u} \\ \bar{p} \\ \bar{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{F} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{A} = \begin{bmatrix} \tilde{M} & \tilde{B}^T & C^T \\ \tilde{B} & -\Sigma & 0 \\ C & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Далее описывается процедура конденсации, состоящая в исключении степеней свободы, связанных с потоками через грани:

$$\tilde{S} \begin{bmatrix} \bar{p} \\ \bar{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\bar{F} \\ 0 \end{bmatrix}$$

с симметричной матрицей

$$\tilde{S} = \begin{bmatrix} \tilde{S}_{pp} & \tilde{S}_{p\lambda} \\ \tilde{S}_{\lambda p} & \tilde{S}_{\lambda\lambda} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \tilde{B} \\ C \end{bmatrix} \tilde{M}^{-1} [\tilde{B}^T \quad C^T] + \begin{bmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

В *разделе 2.4* рассматриваются различные варианты введения функциональных пространств и их влияние на процедуру ассемблирования матрицы \tilde{A} . В *разделе 2.5* рассматривается макрогибридная формулировка, определяющая матрицу линейной системы, как сумму матриц для подобластей E_t , $t = \bar{1}, \bar{m}$, с соответствующими матрицами ассемблирования:

$$\tilde{A} = \sum_{t=1}^N N_t A_t N_t^T, \quad A_t = \begin{pmatrix} M_t & B_t^T & C_t^T \\ B_t & -\Sigma_t & 0 \\ C_t & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Конденсированная матрица также может быть представлена суммой матриц для подобластей:

$$\tilde{S} = \sum_{t=1}^m \tilde{\mathcal{N}}_t \tilde{S}_t \tilde{\mathcal{N}}_t^T, \quad \tilde{S}_t = \begin{bmatrix} \tilde{B}_t \\ \tilde{C}_t \end{bmatrix} \tilde{M}_t^{-1} [\tilde{B}_t^T \quad \tilde{C}_t] + R_t \equiv \mathring{S}_t + R_t \quad (3)$$

с соответствующими матрицами ассемблирования $\tilde{\mathcal{N}}_t$.

Положительно полуопределенная матрица \mathring{S}_t имеет ядро, состоящее из одного вектора с одинаковыми компонентами.

В *разделе 2.6* приводится построение двухуровневого предобуславливателя. Для этого рассматривается обобщенная проблема собственных значений:

$$\mathring{S}_t \bar{w} = \lambda K_t \bar{w}. \quad (4)$$

Пусть K_t — диагональная $m_t \times m_t$ матрица с положительными диагональными элементами, где m_t — размерность \mathring{S}_t , $1 \leq t \leq m$. Примером такой матрицы может служить “лампированная” матрица масс из классического галеркинского метода конечных элементов с кусочно-линейными базисными функциями (P1). Пусть $0 = \lambda_{t,1} < \lambda_{t,2} \leq \dots \leq \lambda_{t,m_t}$ — собственные значения задачи (4), а $\bar{w}_{t,1}, \dots, \bar{w}_{t,m_t}$ набор K_t -ортонормальных собственных векторов, $t = \overline{1, m}$. Тогда можно выписать спектральное разложение для \mathring{S}_t :

$$\mathring{S}_t = K_t W_t \Lambda_t W_t^T K_t,$$

где $\Lambda_t = \text{diag}\{\lambda_{t,1}, \lambda_{t,2}, \dots, \lambda_{t,m_t}\}$ и $W_t = [\bar{w}_{t,1}, \dots, \bar{w}_{t,m_t}]$. Для матрицы \mathring{S}_t предлагается предобуславливатель

$$\mathring{B}_t = \beta_t (K_t - K_t \bar{w}_{t,1} \bar{w}_{t,1}^T K_t),$$

где $\beta_t \geq \lambda_{t,m_t}$, например $\beta_t = d_t \|K_t^{-1} \mathring{S}_t\|_\infty$, $t = \overline{1, m}$, где d_t — коэффициент диффузии для данной подобласти.

В качестве предобуславливателя для матрицы \tilde{S}_t , $t = \overline{1, m}$, из (3) выберем

$$B_t = \mathring{B}_t + R_t,$$

и матрицу

$$B = \sum_{t=1}^m \mathcal{N}_t B_t \mathcal{N}_t^T$$

в качестве предобуславливателя для матрицы \tilde{S} .

Для данного предобуславливателя доказываются две теоремы, в которых даются оценки для спектра матрицы $B^{-1} \tilde{S}$.

Пусть

$$\alpha_t = \frac{\lambda_{t,2}}{\beta} \quad (5)$$

и

$$\alpha = \min_{1 \leq t \leq m} \alpha_t. \quad (6)$$

Тогда верно утверждение:

Теорема 1. Собственные числа матрицы $B^{-1}\tilde{S}$ принадлежат отрезку $[\alpha; 1]$, где величина α определена в (5) и (6). В случае шаровых тензоров $\mathbb{D} = d_t \mathbb{I}$ величина α не зависит от d_t , $t = \overline{1, m}$.

Если же на части границы задано однородное условие Дирихле, то при использовании следующего преобуславливателя для подобласти:

$$B_t = \beta_t \cdot K_t, \quad \beta_t = \|K_t^{-1}\tilde{S}_t\|_\infty,$$

легко доказать, что

$$\alpha_t(b_t \bar{v}, \bar{v}) \leq (\tilde{S} \bar{v}, \bar{v}) \leq (B \bar{v}, \bar{v}),$$

где

$$\alpha_t = \frac{\lambda_{t,1}}{\beta_t}. \quad (7)$$

Тогда справедливо следующее утверждение:

Теорема 2. В случае смешанных краевых условий Неймана/Дирихле или только условий Дирихле собственные числа матрицы $B^{-1}\tilde{S}$ принадлежат отрезку $[\alpha; 1]$, где величина α определена в (5), (7) и (6). В случае шаровых тензоров $\mathbb{D} = d_t \mathbb{I}$ величина α не зависит от d_t , $t = \overline{1, m}$.

В разделе 2.7 описана процедура практической реализации двухуровневого преобуславливателя. Для итерационного решения системы линейных уравнений на каждой итерации необходимо решить систему

$$B \bar{u} = \bar{g},$$

которую, учитывая структуру преобуславливателя, можно записать следующим образом

$$\bar{u} - K^{-1} \sum_t \beta_t \mathcal{N}_t K_t \bar{w}_{t,1} \bar{w}_{t,1}^T K_t \mathcal{N}_t^T \bar{u} = K^{-1} \bar{g}. \quad (8)$$

Если ввести новую переменную $\xi_t = \bar{w}_{t,1}^T K_t \mathcal{N}_t^T u$, то уравнение (8) может быть представлено в виде:

$$\bar{u} - \sum_t \beta_t K^{-1} \mathcal{N}_t K_t \bar{w}_{t,1} \xi_t = K^{-1} \bar{g}. \quad (9)$$

При умножении (9) на $\bar{w}_{t,1}^T K_t \mathcal{N}_t^T$ для всех E_t , $t = \overline{1, m}$, из уравнения (9) можно составить новую линейную систему, называемую системой грубой сетки:

$$(I - Q)\bar{\xi} = \bar{\psi}, \quad (10)$$

где $Q = \{q_{ts}\}$ — матрица грубой сетки, $\bar{\psi} = \{\psi_t\}$,

$$q_{ts} = \bar{w}_{t,1}^T K_t \mathcal{N}_t^T \beta_t K^{-1} \mathcal{N}_s K_s \bar{w}_{s,1}, \quad \psi_t = \bar{w}_{t,1}^T K_t \mathcal{N}_t^T \bar{g}.$$

На каждом шаге необходимо решать линейную систему с этой матрицей.

В разделе 2.8 описывается новый блочно–двухуровневый предобуславливатель не требующий решения системы на грубой сетке. Для его формулирования сделаем дополнительное предположение о коэффициенте диффузии. Пусть задана скалярная величина d_0 и пусть подобласти в задаче диффузии разделены на две группы, причем коэффициенты диффузии в первой группе подобластей удовлетворяют соотношению $d_t \gg d_0$, $k = \overline{1, m_0}$, а коэффициенты диффузии во второй группе подобластей одинаковы: $d_t = d_0$, $t = \overline{m_0 + 1, m}$. Пусть также подобласти внутри первой подгруппы не имеют общей границы между собой.

Тогда матрицу \tilde{S} из (3) можно представить как сумму матриц \tilde{S}_0 и \tilde{S}_1 , где

$$\tilde{S}_1 = \sum_{t=1}^{m_0} (d_t - d_0) \mathcal{N}_t \tilde{S}_t^{(1)} \mathcal{N}_t^T, \quad (11)$$

$$\tilde{S}_0 = \sum_{t=m_0}^m \mathcal{N}_t \tilde{S}_t^{(1)} \mathcal{N}_t^T, \quad (12)$$

$\tilde{S}_t^{(1)} = \tilde{S}_t$ при $d_t = d_0$. В таком случае для областей из первой группы конструируется предобуславливатель способом, описанным в разделе 2.7, а для второй группы используется диагональный предобуславливатель. Этот блочно–диагональный предобуславливатель формулируется в виде:

$$B = Z + \sum_{t=1}^{m_0} (d_t - d_0) \mathcal{N}_t B_t \mathcal{N}_t^T, \quad (13)$$

где Z — диагональная матрица с положительными элементами, например $Z = \|\|K^{-1} \tilde{S}\|_\infty K$, где $K = \sum_{t=m_0}^m \mathcal{N}_t K_t \mathcal{N}_t^T$. В рассмотренном случае, при использовании процедуры применения предобуславливания, матрица грубой сетки $I - Q$ из (10) вырождается в диагональную матрицу. Этот факт позволяет еще более ускорить применение предобуславливателя, исключив обмена между процессорами при правильном выборе разбиения сетки.

Отметим, что при построении блочно–двухуровневого предобуславливателя было использовано только одно свойство ядра матрицы \tilde{S} , которое заключается в том, что оно должно содержать только вектор с одинаковыми компонентами. Таким свойством обладают не только матрицы, полученные при помощи дискретизации смешанными методами конечных элементов, но и в некоторых случаях матрицы, полученные при помощи дискретизации галеркинскими методами.

Примером такого метода может служить дискретизация при помощи кусочно-линейных базисных функций (P1).

В разделе 2.9 описаны численные эксперименты, проведенные для исследования свойств двухуровневого и блочно-двухуровневого преобуславливателей. В подразделе 2.9.1 описаны эксперименты по сравнению двухуровневого преобуславливателя с преобуславливателем Якоби (диагональным преобуславливателем). Рассматривается задача реакции–диффузии с краевыми условиями Неймана в единичном квадрате, разбитом на $m = \sqrt{m} \times \sqrt{m}$ квадратных подобластей, как показано на Рисунке 3. Предположим, что коэффициент диффузии является константой внутри каждой подобласти E_k , т.е. $\mathbb{D}_k = d_k \mathbb{I}$, $d_k \equiv \text{const} > 0$ в E_k , $k = \overline{1, m}$.

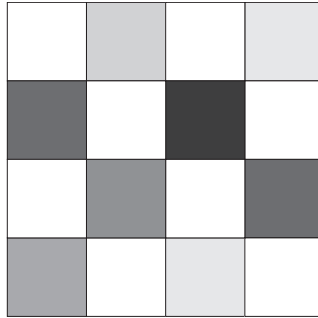


Рисунок 3 — Пример распределения коэффициентов диффузии в подобластях.

Для численных экспериментов в каждой области коэффициент диффузии был выбран случайным образом в диапазоне от $d_{min} \equiv 1$ до величины d_{max} , которая является изменяющимся параметром в проведенных экспериментах. Также рассмотрены различные виды коэффициента реакции: константный коэффициент реакции для всей области, или случайное распределение значений этого коэффициента.

Дискретизация задачи была построена при помощи гибридной схемы метода конечных элементов PWCF [7]. Для нахождения матриц B_t была выбрана диагональная “лампированная” матрица масс K_t из галеркинського метода с кусочно-линейными базисными функциями (P1), $t = \overline{1, m}$. Результаты экспериментов подтверждают отсутствие зависимости скорости сходимости итерационного процесса от скачка коэффициентов диффузии. В разделе 2.9.2 была взята область с шахматным разбиением подобластей на две группы, как показано на Рисунке 3 и к сравнению добавлен блочно-диагональный преобуславливатель, так как в этом случае при использовании смешанного гибридного метода конечных элементов подобласти различных групп не имеют общих степеней свободы. Остальные параметры эксперимента были оставлены теми же. Результаты эксперимента показывают, что блочно-двухуровневый преобуславливатель обладает тем же свойством независимости скорости сходимости итерационного процесса от скачка коэффициентов диффузии, что и двухуровневый преобуславливатель.

В подразделе 2.9.3 исследуются параллельные свойства блочно-двухуровневого предобуславливателя и проводится сравнение его с другими предобуславливателями. Параллельная реализация предобуславливателя была создана на базе программной платформы INMOST. В самой платформе INMOST для сравнения был выбран предобуславливатель $ILU2(\tau)$ с $\tau = 10^{-3}$. Также для сравнения из пакета PETSc был использован предобуславливатель $ILU(k)$ с $k = 7$. В качестве схемы распараллеливания для $ILU2(\tau)$ и $ILU(k)$ использовался аддитивный метод Шварца с перекрытием, равным 1. Также для сравнения был использован алгебраический многосеточный предобуславливатель в пакете Trilinos. Количество уровней предобуславливателя было выбрано равным 5, а пред- и пост-сглаживание было произведено при помощи пакета Ifpack. Для всех предобуславливателей в качестве итерационного метода решение системы линейных уравнений был выбран метод стабилизированных бисопряженных градиентов (BiCGstab). Для исследования была использована следующая задача: область $\Omega = [0,1]^2$, разбита на квадратные ячейки, каждая из которых в свою очередь разбита на два треугольника. Пусть в области Ω задан шаровый тезор диффузии $\mathbb{D} = d_0\mathbb{I}$. Внутри области выделены m подобластей ω_s , $s = \overline{1, m}$, соответствующие включениям, в которых коэффициент диффузии d_s существенно больше коэффициента в остальной части области, $d_s \gg d_0$, $s = \overline{1, m}$, как показано на рисунке 4. Границы подобластей конформны по отношению к сетке, введенной в области Ω . Включения не имеют общей границы друг с другом и не соприкасаются с границей области. Подобласти с большим коэффициентом диффузии одинаковы по размеру являются квадратами со стороной размером n , как изображено на рисунке 4. Расстояния между этими подобластями равны размерам подобластей. В ходе экспериментов рассматривается различный размер подобластей. В области Ω решается уравнение диффузии с однородными граничными условиями Дирихле. Были рассмотрены различные значения m количества включений и различные размеры включений n , и, таким образом, различные размерности решаемой задачи N_A .

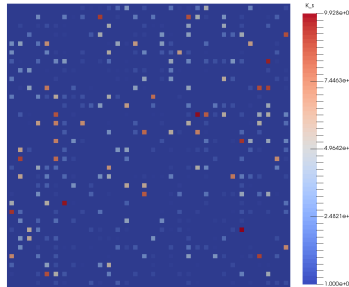


Рисунок 4 — Пример распределения коэффициента диффузии в подобластях для численного исследований параллельных свойств блочно-двухуровневого предобуславливателя.

Для дискретизации был использован метод конечных элементов с кусочно-линейными базисными функциями (P1). В рассматриваемом случае, учитывая, что включения не касаются друг друга и границы расчетной области, можно использовать описанную выше процедуру построения предобуславливателя, так как локальные матрицы для включений обладают всеми свойствами, необходимыми для построения блочно-двухуровневого предобуславливателя. В рамках данного подраздела экспериментальные исследования состоят из двух частей. В первой части было подтверждено теоретическое утверждение о независимости скорости сходимости итерационного процесса от скачка коэффициентов и проведено сравнение времени решения системы с тремя другими технологиями предобуславливания. Было показано, что при увеличении размера включения n блочно-двухуровневый предобуславливатель становится наиболее быстрым и эффективным для данной задачи, как демонстрируют результаты в таблице 2

preconditioner		#iter	Time	T_{it}
PETSc ILU(7)	$d_s = 10^4$	3641	449.99	0.12358
Trilinos AMG		92	34.41	0.37402
INMOST ILU2(10^{-3})		322	74.85	0.2324
BDP		2609	165.9	0.06358
PETSc ILU(7)	$d_s \in [1; 10^4]$	1517	189.21	0.12472
Trilinos AMG		76	28.57	0.37592
INMOST ILU2(10^{-3})		206	63.98	0.31058
BDP		2996	192.85	0.06436
PETSc ILU(7)	$d_s = 10^6$	3996	495.52	0.12400
Trilinos AMG		518	189.17	0.36519
INMOST ILU2(10^{-3})		1441	278.21	0.19306
BDP		1839	117.47	0.06387
PETSc ILU(7)	$d_s \in [1; 10^6]$	3871	368.87	0.09529
Trilinos AMG		544	105.23	0.19343
INMOST ILU2(10^{-3})		492	80.80	0.16422
BDP		2539	76.18	0.0300

Таблица 2 — Количество подобластей $m = 128 \times 128$, размер подобласти $n = 8 \times 8$, количество неизвестных $N_A = 4190209$. T_{it} — время одной итерации, Time — общее время решения системы.

Во второй части исследования было проведено исследование зависимости скорости сходимости от количества процессоров $N_{proc} = 1, 2, \dots, 64$ для различных предобуславливателей. Результаты расчетов показывают, что блочно-двухуровневый предобуславливатель в данном эксперименте является одним из самых быстрых методов предобуславливания и также показывает одно из наилучших ускорений. Ввиду его блочно-диагональной структуры и независимости скорости сходимости итерационного метода от роста количества процессоров, он показывает высокую параллельную эффективность при минимальном времени на одну итерацию.

В заключении перечисляются основные результаты работы.

Публикации автора по теме диссертации

1. *Kuznetsov Y. Kramarenko V.* Preconditioners with projectors for mixed hybrid finite element methods // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2017. Vol. 32, no. 1. Pp. 39–45.
2. *Kramarenko V., Nikitin K., Vassilevski Y.* A finite volume scheme with improved well modeling in subsurface flow simulation // Computational Geosciences. 2017. Vol. 21, no. 5. Pp. 1023–1033.
3. *Крамаренко В., Кузнецов Ю., Коньшин И.* Параллельный блочно-диагональный переобуславливатель с проекторами для задачи диффузии // Вестник компьютерных и информационных технологий. 2018. Т. 172, № 11. С. 3–11.
4. *Крамаренко В.* Преобуславливатель с проекторами для смешанного метода конечных элементов // Современные проблемы математического моделирования. Сборник трудов XVII Всероссийской конференции-школы молодых исследователей Абрау-Дюрсо. 2017. С. 91–99.
5. *Nikitin K., Kramarenko V., Vassilevski Y.* Enhanced nonlinear finite volume scheme for multiphase flows // ECMOR XV - 15th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery. European Association of Geoscientists, Engineers, EAGE, 2016.
6. *Kramarenko V., Nikitin K., Vassilevski Y.* A nonlinear correction FV scheme for near-well regions // Finite Volumes for Complex Applications VIII - Hyperbolic, Elliptic and Parabolic Problems / под ред. С. Cancès, Р. Omnes. Cham : Springer International Publishing, 2017. С. 507–516.

Крамаренко Василий Константинович

Методы решения уравнения диффузии в средах с контрастными включениями и с учетом особенностей от распределенных источников

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать _____.____._____. Заказ № _____

Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

Типография _____

