

УДК 519.622:532.517

ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДОВ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ КАСКАДНЫХ МОДЕЛЕЙ

Р. А. Степанов¹

В статье рассматривается возможность снижения временных затрат при интегрировании системы обыкновенных дифференциальных уравнений, содержащей слагаемые типа вязкого трения. Предложена конкретная реализация этого алгоритма для метода Рунге–Кутты четвертого порядка. Эффективность описанного алгоритма показана на примере расчетов каскадных моделей турбулентности. Для задач такого типа шаг интегрирования увеличивается на порядки.

Ключевые слова: численный анализ, численные методы, каскадные модели турбулентности обыкновенные дифференциальные уравнения, задача Коши, методы Рунге–Кутты, краевые задачи, разделение по физическим процессам, аппроксимация, сходимость.

1. Введение. Наиболее распространенным подходом к качественному исследованию сложных механических, физических, экономических и других систем является построение динамических моделей. Поведение системы описывается сравнительно небольшим числом параметров, изменение которых задается обыкновенными дифференциальными уравнениями (ОДУ). Эти уравнения содержат слагаемые, отвечающие за различные механизмы и определяющие эволюцию системы. Диссипация является обязательным элементом большинства моделей, который обычно описывается линейным трением. Система ОДУ, задающая эволюцию N переменных U_n и содержащая линейное трение, может быть записана в виде

$$\dot{U}_n(t) = F_n(U_n(t), t) - p_n U_n(t), \quad n = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где p_n — коэффициент вязкости со слагаемым линейного трения, а F_n — функционал, определяющий все остальные механизмы (например источник, обмен и т.д.). К такому виду вязкости сводятся диссипативные слагаемые в виде лапласиана континуальных уравнений в частных производных, спроектированные в пространство Фурье. Методы интегрирования системы (1) хорошо известны. Самый простейший из них — метод Эйлера. Большая точность и устойчивость счета достигается при использовании методов Рунге–Кутты более высоких порядков или разновидностей метода типа предиктор–корректор. Все эти методы различаются, в частности, критерием, ограничивающим сверху шаг интегрирования dt и гарантирующим устойчивый счет с заданной точностью. Учитывая только вязкое слагаемое, из общих соображений можно получить необходимое условие

$$p_n dt < 1, \quad (2)$$

справедливое для любого метода. В свою очередь, вид $F_n(U_n(t), t)$ также может влиять на выбор dt , но эти условия могут быть учтены в отдельности. Конечно, ограничение (2) для большинства методов является очень слабым, но в нашем случае для простоты изложения может быть принято в качестве общего.

Нарушение условия (2) может приводить не только к потере точности, но и к артефактному поведению системы, например к эффекту отрицательной вязкости. При условии, что $F_n(U_n(t), t)$ сохраняет энергию величины U_n , сумма $\sum_n U_n^2$ не может возрастать. Эта простая закономерность может нарушаться под действием отрицательной вязкости, что не допустимо с физической точки зрения. От такого рода эффекта можно себя обезопасить, используя метод разделения по физическим процессам. Данный подход заключается в том, что расчет одного временного шага dt производится в два этапа. Сначала некий метод применяется к (1) без вязкого слагаемого, а затем полученные значения умножаются на $\exp^{-p_n dt}$, что соответствует точному решению уравнения в отсутствие $F_n(U_n(t), t)$. Таким образом, проблема отрицательной вязкости снимается полностью при любом dt . Однако расплатой за это является снижение порядка аппроксимации уравнений. Независимо от того, с какой точностью были выполнены вычисления на первом этапе, общий порядок аппроксимации системы (1) в этом случае остается первым по шагу dt .

Структура системы уравнений (1) может быть такова, что для некоторых U_n влияние $F_n(U_n(t), t)$ на эволюцию пренебрежимо мало по сравнению с вязким слагаемым. При этом значение p_n для этих

¹ Институт механики сплошных сред РАН, ул. Королева, 1, 614061, г. Пермь; e-mail: rodion@icmm.ru

переменных настолько велико, что условие (2) сильно ограничивает шаг интегрирования dt для всей системы и тем самым значительно увеличивает вычислительные растраты. Каскадные модели являются представителями такого рода систем. В данной статье предлагается способ, как корректно преодолеть ограничение (2) и существенно увеличить шаг dt . Предлагаемый алгоритм представляет собой расширение практически любого выбранного метода интегрирования, не снижая его точности (порядка аппроксимации). В работе приводится описание метода и анализ его эффективности на примере специальной динамической модели — каскадной модели турбулентности.

2. Метод решения и его реализация. Идея решения проблемы учета вязкого слагаемого очень проста и заключается в проведении предварительной замены переменного. Введем вместо $U_n(t)$ функции $V_n(t)$, связанные следующим соотношением:

$$U_n(t) = V_n(t) \exp^{-p_n t} . \tag{3}$$

Выполняя такую подстановку в (1), получаем систему уравнений

$$\dot{V}_n(t) = G_n(V_n(t), t), \tag{4}$$

где $G_n(V_n(t), t) = F_n(V_n(t) \exp^{-p_n t}, t) \exp^{p_n t}$. Полагаем, что в начальный момент времени t_0 решения равны: $V_n(t_0) = U_n(t_0)$. Далее проводим вычисление одного временного шага dt в системе (4) с использованием некоторого метода. В результате находим $V_n(t_0 + dt)$. Затем выполняя обратное преобразование (3), окончательно имеем

$$U_n(t_0 + dt) = V_n(t_0 + dt) \exp^{-p_n dt} . \tag{5}$$

Таковыми итерациями выполняется интегрирование системы (1) на всем временном интервале.

Реализация данного подхода на практике может вызвать определенные трудности. Они связаны с тем, что при численной реализации множители $\exp^{-p_n t}$ и $\exp^{p_n t}$ при больших значениях $p_n t$ не будут компенсироваться должным образом из-за ограниченной разрядности числа в компьютерном представлении. Покажем, как можно обойти эту проблему на примере распространенного метода Рунге–Кутты 4-го порядка (см. [6], табл. 20.8-1а). Главная задача — устранить из расчетной схемы все множители с положительной степенью экспоненты. Это можно сделать, если при вычислении итерационных шагов метода интегрирования использовать выражение (5). Тогда расчетная схема примет вид

$$\begin{aligned} K_n^1 &= dt F_n(U_n(t_0), t_0), \\ K_n^2 &= dt F_n(U_n(t_0) \exp^{-p_n dt/2} + \exp^{-p_n dt/2} K_n^1/2, t_0 + dt/2), \\ K_n^3 &= dt F_n(U_n(t_0) \exp^{-p_n dt/2} + K_n^2/2, t_0 + dt/2), \\ K_n^4 &= dt F_n(U_n(t_0) \exp^{-p_n dt} + \exp^{-p_n dt/2} K_n^3, t_0 + dt), \\ U_n(t_0 + dt) &= U_n(t_0) \exp^{-p_n dt} + \\ &+ (K_n^1 \exp^{-p_n dt} + 2K_n^2 \exp^{-p_n dt/2} + 2K_n^3 \exp^{-p_n dt/2} + K_n^4) / 6 + O(dt^5). \end{aligned}$$

С точки зрения вычислительных затрат, такая модификация незначительно увеличивает число операций, если предварительно вычислить $\exp^{-p_n dt}$ и $\exp^{-p_n dt/2}$, которые не меняются в течение всего счета. Хорошо видно, что в случае малости $F_n(U_n(t), t)$ решение стремится к аналитическому виду $U_n(t_0 + dt) = U_n(t_0) \exp^{-p_n dt}$, где dt может быть любым.

3. Оценка эффективности. Рассмотрим одну из каскадных моделей турбулентности в качестве стандарта для демонстрации предлагаемого подхода. Основная идея каскадных моделей турбулентности состоит в построении цепочки ОДУ, описывающих процессы спектрального переноса энергии в развитой турбулентности. Задача состоит в том, чтобы сохранить для каждой октавы волновых чисел $k_n < |\mathbf{k}| < k_{n+1}$, $k_n = 2^n$ только одну переменную U_n , характеризующую пульсации скорости в соответствующих масштабах, и записать для этих переменных систему ОДУ, сохраняющую некие “базовые” свойства исходного уравнения Навье–Стокса. В каскадной модели, построенной в работе [1], удалось учесть эти базовые свойства, необходимые для моделей гидродинамического типа. Впоследствии каскадные модели были развиты для случая магнитогиродинамической турбулентности [3]. Не останавливаясь на обсуждении свойств каскадных моделей (на сегодня им посвящено значительное количество публикаций), запишем каскадные уравнения модели турбулентности GOY, введенной в работе [2]:

$$\dot{U}_n(t) = ik_n \left(U_{n+1}^* U_{n+2}^* - \frac{1}{4} U_{n-1}^* U_{n+1}^* - \frac{1}{8} U_{n-1}^* U_{n-2}^* \right) - \text{Re}^{-1} k_n^2 U_n(t), \tag{6}$$

где Re — число Рейнольдса, являющееся единственным физическим параметром. Особо важно отметить, что коэффициент вязкости $p_n = Re^{-1} k_n^2$ в этой модели очень быстро растет с ростом n . Структура модели такова, что нелинейное слагаемое $F_n(U_n(t), t)$ преобладает над вязким только до некоторого $k \leq k_\lambda$. Этот интервал называется инерционным и содержит большую часть энергии. Используя теорию Колмогорова, можно сделать оценку $k_\lambda \sim Re^{3/4}$, а статистически стационарное распределение энергии пульсаций соответствует степенному закону $U_n^2 = k_n^{-2/3}$. При $k > k_\lambda$ диссипация преобладает над всем остальным и приводит к тому, что значения U_n стремятся к нулю.

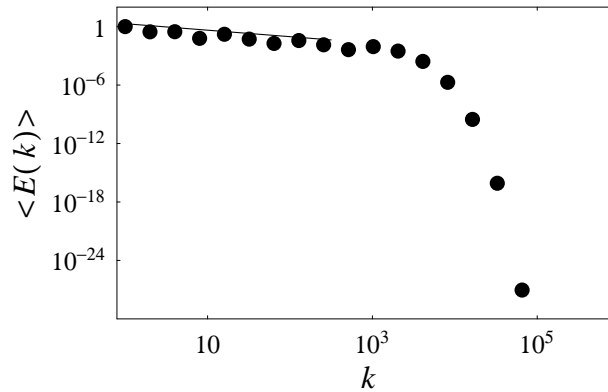


Рис. 1. Статистически стационарное распределение энергии пульсаций по масштабам при $Re = 10^5$

Такое состояние показано на рис. 1. Однако поведение системы хаотично и временами случается, что энергия выходит за пределы k_λ . Данное обстоятельство вынуждает для корректного учета этих всплесков использовать некоторый запас оболочек за пределами k_λ . Если ориентироваться на ограничение шага dt , используя $k_{\max} = k_\lambda$, вычисления будут неустойчивы, а результаты сомнительны в силу эффекта отрицательной вязкости. Необходимый запас по dt априори очень трудно оценить. Расчеты каскадных моделей при больших Re на длительных временах требуют значительных временных ресурсов вычислительной техники. Так, в вычислениях, обсуждаемых в работах [4, 5], применялась многопроцессорная техника НИВЦ МГУ. Покажем, насколько эффективно будет использование предлагаемого подхода для решения каскадной модели.

Рассмотрим остаточный член аппроксимации системы (6) без учета замены (3):

$$O(dt_1^5) = dt_1^5 \sum_{i=0}^5 A_i U_n^{i+1} p_n^{5-i} k_n^i, \quad (7)$$

где A_i — постоянные коэффициенты разложения. Самыми опасными слагаемыми в области $k > k_\lambda$ являются те, у которых старше степень p_n . Использование подхода, описанного в этой статье, дает остаточный член следующего вида:

$$O(dt_2^5) = dt_2^5 \sum_{i=1}^5 B_i U_n^{i+1} p_n^{5-i} k_n^i, \quad (8)$$

где B_i — коэффициенты разложения, получающиеся в целом на два порядка меньше, чем A_i . Отношение слагаемых со старшей степенью p_n в (7) и (8) дает отношение шагов по времени, обеспечивающих равную величину остаточного члена, т.е. точность

$$\left(\frac{dt_2}{dt_1} \right)^5 \sim \frac{A_0 p_n}{B_1 U_n k_n}. \quad (9)$$

Полученное порядковое соотношение (9) позволяет качественно оценить эффективность предлагаемого в данной работе метода. Для количественной оценки необходимо воспользоваться некоторым конкретным распределением U_n .

На рис. 2 показано, как быстро растет отношение $\frac{dt_2}{dt_1}$ в зависимости от номера оболочки в случае стационарного решения при $Re = 10^5$, изображенном на рис. 1. На данном примере можно наблюдать, что

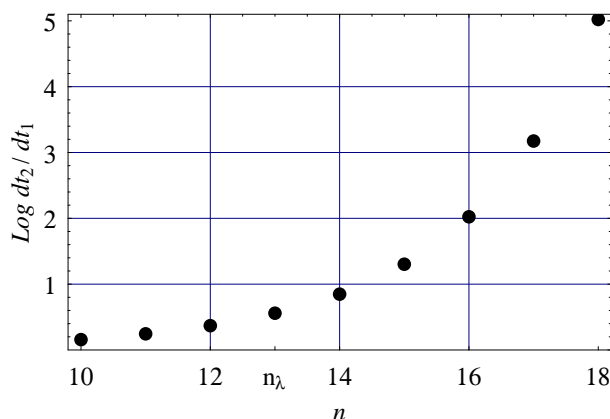


Рис. 2. Отношение временных шагов с использованием подстановки и без нее для различных масштабов, вычисленное в стационарном состоянии, изображенном на рис. 1

конец инерционного интервала и начало диссипативного находится около $n_\lambda = \log_2 \text{Re}^{3/4} \approx 13$. Видно, что метод дает большой выигрыш в шаге интегрирования именно при расчете тех значений, которые попадают в область диссипативного интервала.

В качестве тестовой задачи рассматривался случай $\text{Re} = 10^5$, $N = 20$ с зафиксированным $U_1(t) = 1$ (самый простой способ подкачки энергии, обеспечивающий стационарное решение). Расчеты с постоянным шагом интегрирования показывают, что для обеспечения устойчивого счета необходимо взять $dt_1 = 10^{-6}$ и $dt_2 = 10^{-4}$. Использование процедуры адаптивного выбора шага с относительной погрешностью вычислений 10^{-5} в установившемся режиме дает средние шаги $dt_1 = 5 \cdot 10^{-7}$ и $dt_2 = 3 \cdot 10^{-6}$. При рассмотрении больших Re эффективность заметно увеличивается. Так, при $\text{Re} = 10^8$ и $N = 30$ в среднем получается $\frac{dt_2}{dt_1} = 2 \cdot 10^2$.

Полученные оценки и проведенные расчеты показывают высокую эффективность применение данной методики для каскадных систем типа (6). Наши результаты могут быть справедливы и для любых других систем, содержащих вязкие линейные слагаемые, которые динамически могут доминировать над остальными составляющими модели.

Работа выполнена при финансовой поддержке Научно-образовательного центра (CRDF PE-009-0) и РФФИ (проект УРАЛ-01-01-96482).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гледзер Е.Б. Система гидродинамического типа, допускающая два квадратичных интеграла движения // Докл. АН СССР. 1973. **209**, № 5. 1046–1048.
2. Yamada M., Okhitani K. GOY // J. Physical Society of Japan. 1987. **56**. 4210.
3. Frick P., Sokoloff D. Cascade and dynamo action in a shell model of magnetohydrodynamic turbulence // Phys. Rev. E. 1998. **57**, N 4. 4155–4164.
4. Антонов Т.Ю., Фрик П.Г., Соколов Д.Д. Рост корреляций в свободно распадающейся МГД-турбулентности // Вычислительные методы и программирование. 2000. **1**, № 1. 16–20 (<http://num-meth.srcc.msu.su>).
5. Антонов Т.Ю., Фрик П.Г., Соколов Д.Д. Долговременная эволюция свободно распадающейся МГД-турбулентности // Докл. РАН. 2001. **377**, № 2. 170–172.
6. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1984.

Поступила в редакцию
10.07.2002