На правах рукописи

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

Москва — 2019

Работа выполнена в Институте вычислительной математики им. Г.И. Маручка РАН

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 Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» Российской академии наук,
главный научный сотрудник

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

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

Защита состоится 2019 г. в 14 часов 18 декабря 2019 года на заседании диссертационного совета Д 002.045.01 при федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики имени Г. И. Марчука Российской академии 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(τ, 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 Supercompiting 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:

$$p_T = \underbrace{a\,x + b\,y + c\,z + d}_{p_{\mathrm{lin}}} + \underbrace{e\,F(x,y,z)}_{p_{\mathrm{F}}}, \tag{1}$$

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:

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

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:

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

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 барицетров, в область поиска добавляются центры граней и, если необходимо, центры ребер.

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

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

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_-:

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

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.

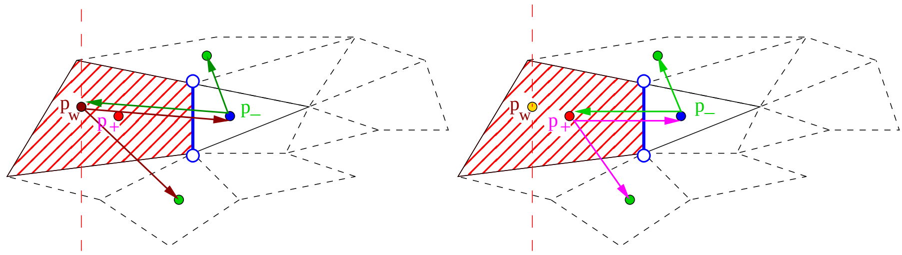

Рисунок 1 — Шаблоны для расчета давления по схеме нелинейной коррекции (справа) и дополнительный шаблон для взаимодействия между ячейкой и скважиной (слева).

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

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

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 применения 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 стороной в два раза больше, чем короткая, а расчетная сетка состоит из прямоугольных параллелепипедов. Скважины расположены в центах 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

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

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.

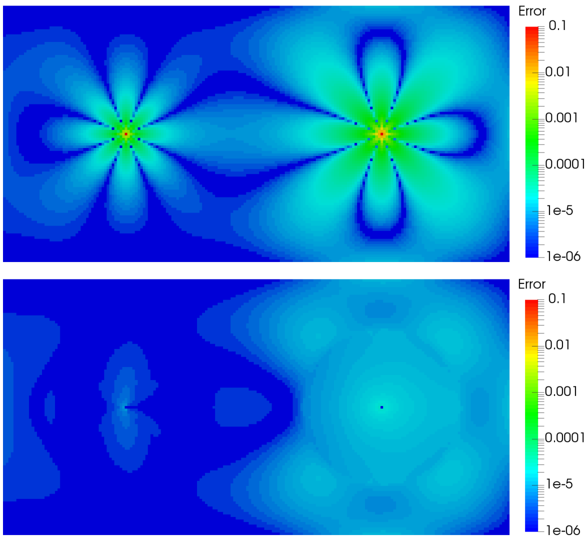

Рисунок 2 — Относительные ошибки для решения НМД-схемы и метода Писмана (сверху) и для НК-схемы (снизу) в логарифмической шкале. Сетка размером $134 \times 67 \times 1$.

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	$L^2_{\text{НМД,А}}$	$L^2_{\text{НК,А}}$	$L^2_{\text{НМД,Писман}}$	$L^2_{\text{НК}}$
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 предобуславливателя 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:

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

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

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

с симметричной матрицей

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

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

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

Конденсированная матрица также может быть представлена суммой матриц для подобластей:

$$\tilde{S} = \sum_{t=1}^{m} \tilde{\mathcal{N}}_t \tilde{S}_t \tilde{\mathcal{N}}_t^T, \qquad \tilde{S}_t = \begin{bmatrix} \tilde{B}_t \\ \tilde{C}_t \end{bmatrix} \tilde{M}_t^{-1} \begin{bmatrix} \tilde{B}_t^T & \tilde{C}_t \end{bmatrix} + R_t \equiv \mathring{S}_t + R_t \tag{3}$$

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:

$$\mathring{S}_t \overline{w} = \lambda K_t \overline{w}. \tag{4}$$

Пусть K_t — диагональная $m_t \times m_t$ матрица с положительными диагональными элементами, где m_t — размерность $\mathring{S}_t$, $1 \leqslant t \leqslant m$. Примером такой матрицы может служить “лампированная” матрица масс из классического галеркинского метода конечных элементов с кусочно-линейными базисными функциями (P1). Пусть $0 = \lambda_{t,1} < \lambda_{t,2} \leqslant \ldots \leqslant \lambda_{t,m_t}$ — собственные значения задачи (4), а $\overline{w}_{t,1}, \ldots, \overline{w}_{t,m_t}$ 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 $\Lambda_t = \operatorname{diag}\{\lambda_{t,1}, \lambda_{t,2}, \ldots, \lambda_{t,m_t}\}$ и $W_t = [\overline{w}_{t,1}, \ldots, \overline{w}_{t,m_t}]$. Для матрицы $\mathring{S}_t$ предлагается предобуславливатель

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

где $\beta_t \geqslant \lambda_{t,n_t}$, 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

$$\alpha_t = \frac{\lambda_{t,2}}{\beta} \tag{5}$$

и
$$\alpha = \min_{1 \leqslant t \leqslant m} \alpha_t. \tag{6}$$

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 предобуславливателя для подобласти:

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

легко доказать, что
$$\alpha_t \left(b_t\overline{v}, \overline{v}\right) \leqslant \left(\tilde{S}\overline{v}, \overline{v}\right) \leqslant \left(B\overline{v}, \overline{v}\right),$$

где
$$\alpha_t = \frac{\lambda_{t,1}}{\beta_t}. \tag{7}$$

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 предобуславливателя. Для итерационного решения системы линейных уравнений на каждой итерации необходимо решить систему

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

которую, учитывая структуру предобуславливателя, можно записать следующим образом
$$\overline{u} - K^{-1}\sum_t \beta_t \mathcal{N}_t K_t \overline{w}_{t,1} \overline{w}_{t,1}^T K_t \mathcal{N}_t^T \overline{u} = K^{-1}\overline{g}. \tag{8}$$

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

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

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

$$(I - Q)\,\overline{\xi} = \overline{\psi}, \tag{10}$$

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

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

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 группы 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

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

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

$\tilde{S}_t^{(1)} = \tilde{S}_t$ 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:

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

где Z — диагональная матрица с положительными элементами, например $Z = ||K^{-1}\mathring{S}||_\infty \, K$, 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 обмены между процессорами при правильном выборе разбиения сетки.

Отметим, что при построении блочно-двухуровневого предобуславливателя было использовано только одно свойство ядра матрицы $\mathring{S}$, 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 предобуславливателей. В подразделе 2.9.1 описаны эксперименты по сравнению двухуровневого предобуславливателя с предобуславливателем Якоби (диагональным предобуславливателем). 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, $k = \overline{1,m}$.

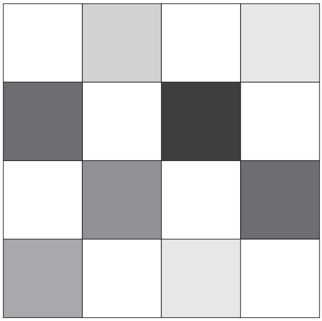

Рисунок 3 — Пример распределения коэффициентов диффузии в подобластях.

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 галеркинского 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 предобуславливатель, 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 предобуславливатель обладает тем же свойством независимости скорости сходимости итерационного процесса от скачка коэффициентов диффузии, что и двухуровневый предобуславливатель.

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(τ) с $\tau = 10^{-3}$. Также для сравнения из пакета PETSc был использован предобуславливатель ILU(k) с $k = 7$. В качестве схемы распараллеливания для ILU2(τ) 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.

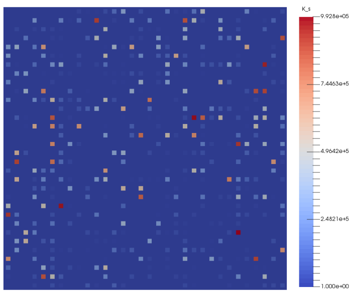

Рисунок 4 — Пример распределения коэффициента диффузии в подобластях для численного исследований параллельных свойств блочно-двухуровневого предобуславливателя.

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 $N_{proc} = 1,2,\ldots,64$ 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.* Предобуславливатель 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. C. Cancès, P. 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 ____