

Швидкодіючий алгоритм для моделювання динаміки розповсюдження викидів в атмосферу від зосереджених джерел*

В.Л. Макаров, В.Б. Василик, Д.О. Ситник

Інститут математики НАН України, Київ;

makarov@imath.kiev.ua, vasylyk@imath.kiev.ua, sytnik@imath.kiev.ua

An effective numerical algorithm for realistic modelling of the evolution of aerosol pollutants in the lower atmosphere is developed. The algorithm is based on the well studied mathematical model of the aerosols spread which takes into account time-dependence of the pollutant source, spatial and temporal variation of the wind-field, aerosol diffusion and deposition over the 3-D region with an arbitrary geometry. The developed method let us to simulate the evolution of aerosol pollutant substances emitted by the arbitrary number of point sources. Aside of that we derive a weak form of the resolvent equation for the elliptic partial differential operator from the mentioned mathematical model.

Разработано эффективный численный алгоритм реалистического моделирования распространения аэрозольных смесей (аэрозолей) в нижних слоях атмосферы. Алгоритм базируется на известной математической модели распространения аэрозолей, которая учитывает: сменное как в пространстве, так и во времени поле ветров на участках с произвольной трехмерной геометрией местности; диффузию аэрозоля в воздухе и его взаимодействие с земной поверхностью; зависимость от времени и интенсивности выбросов источника. Разработанный алгоритм позволяет проводить моделирование зависимой от времени эволюции концентраций аэрозоля в исследуемой области, которая содержит произвольное количество точечных источников аэрозоля. Получена слабая постановка резольвентного уравнения для эллиптического дифференциального оператора, который входит в базовую модель эволюционной задачи распространения аэрозоля.

1. Вступ

В останні роки проблема охорони навколишнього середовища та його відновлення стає однією з важливих завдань науки, розвиток якої стимулюється всезростаючими темпами технічного прогресу. Інтенсивний розвиток промисловості й пов'язане із цим процесом збільшення промислових викидів, що забруднюють навколишнє середовище, уже стають відчутними для екологічної рівноваги багатьох регіонів нашої планети. Тим часом спостерігається подальший бурхливий розвиток промисловості, що є потужним імпульсом для досліджень, пов'язаних з розміщенням нових промислових підприємств і промислових комплексів, так щоб вони разом з існуючою інфраструктурою вносили сукупний мінімальний негативний вплив на навколишнє середовище. Загострилася проблема забруднення середовища промисловими комплексами, для яких гранично припустимі санітарні норми усе ще не відповідають сучасним вимогам. Крім цього в результаті невідворотних процесів глобалізації та жорсткої конкуренції на світових ринках значно зросла концентрація потенційно небезпечних виробничих об'єктів в деяких промислово розвинених регіонах. Це суттєво збільшує ймовірність одноразових викидів шкідливих речовин спричинений аварійною ситуацією. Все це рівною мірою стосується як процесів, що проходять на континенті так і тих, що відбуваються в океані. Останнім часом спостерігається значний інтерес з боку міжнародної спільноти що до аналізу впливу побічних продуктів виробництва на глобальні кліматичні зміни та пов'язані з цим питання охорони навколишнього середовища. Враховуючи сучасний розвиток комп'ютерних технологій ключовими інструментами такого аналізу є ефективні методи моделювання негативного впливу промислових об'єктів з поміж яких моделювання розповсюдження забруднюючих сумішей в атмосфері займає одну з домінуючих ролей.

2. Модель переносу забруднюючих сумішей в атмосфері

Перенос забруднюючих субстанцій в атмосфері здійснюється вітровими потоками повітря з урахуванням їхніх дрібномасштабних флуктуацій. Усереднений потік субстанцій, що переносяться повітряними масами, як правило, має адвективну й конвективну складову, а усереднені флуктуації їхнього руху можна інтерпретувати як дифу-

зію на фоні основного усередненого руху, пов'язаного з цим потоком.

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} \varphi + \sigma \varphi = \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial \varphi}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \varphi + f \quad (1)$$

$\varphi(x, y, z, t)$ – інтенсивність аерозольної субстанції (аерозолю), що мігрує разом з потоками повітря в атмосфері, σ – коефіцієнт розпаду аерозолю, який характеризує скільки аерозолю розпадається при взаємодії з складовими повітря, векторна функція $\mathbf{u} = (u, v, w)$ описує напрям та швидкість частинок повітря, де кожен з компонентів u, v, w це функція x, y, z, t , коефіцієнти $\nu \geq 0$ та $\mu \geq 0$ вертикальний та горизонтальний коефіцієнти дифузії відповідно. Функція f – джерело аерозолю.

Задачу розглядатимемо в області G циліндричної форми з поверхнею S , яка складається з бічної поверхні циліндра Σ , його нижньої основи Σ_0 (при $z = 0$), та його верхньої основи Σ_H (при $z = H$). Враховуючи форму області та фізичні характеристики процесу рівняння (1) доповнимо наступними крайовими умовами

$$\begin{aligned} \varphi &= 0 \quad \text{на } \Sigma, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= \alpha \varphi \quad \text{на } \Sigma_0, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0 \quad \text{на } \Sigma_H, \end{aligned} \quad (2)$$

α – деяка функція, що характеризує взаємодію аерозолю з землею поверхнею. В якості початкової умови візьмемо $\varphi = \varphi_0$, така умова означає наявність в початковий момент часу деякої концентрації досліджуваного аерозолю, просторова інтенсивність якого описується функцією φ_0 .

3. Розміщення промислового підприємства з урахуванням забруднення навколишнього середовища

Припустимо, що потрібно розмістити нове промислове підприємство поблизу населених пунктів, зон відпочинку й інших екологічно значимих зон з такою умовою, щоб сумарне річне їхнє забруднення від шкідливих промислових викидів не перевищувало припустимих санітарних норм і щоб загальне екологічне навантаження на весь ре-

гійон за рахунок його забруднення була мінімальною або в межах глобальних санітарних норм. Нехай промислове підприємство викидає в атмосферу в одиницю часу на висоті $z = h$ шкідливий аерозоль з інтенсивністю Q , що потім переноситься повітряними масами й дифундує під впливом дрібномасштабної турбулентності. Припустимо, що джерело аерозолю розташовується в околі точки $r_0 = (x_0, y_0, h)$. Тоді він може бути описаний функцією

$$f(r) = Q\delta(r - r_0), \quad (3)$$

а рівняння (1) перетвориться до вигляду

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{u} \varphi + \sigma \varphi = \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial \varphi}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \varphi + Q\delta(r - r_0). \quad (4)$$

В якості крайових умов використаємо (2). Оскільки розглядувана тут модель розповсюдження промислових викидів передбачає, що джерело викидів володіє незалежною від часу інтенсивністю та зафіксоване просторово природним є припущення про те, що розв'язок (4) має бути стійким по часу, а його усереднення за деякий період часу T повинно бути еквівалентно стаціонарному розподілу [17]. Такі еволюційні властивості розв'язку забезпечуються наступною періодичною по часу умовою

$$\varphi(0) = \varphi(T) \quad (5)$$

4. Абстрактна постановка задачі

Розглянемо дві задачі для диференціального рівняння першого порядку зі сталим необмеженим операторним коефіцієнтом в банаховому просторі X , що узагальнюють моделі поширення забруднень описані вище:

$$\begin{aligned} u'_t + [A + \mathbb{I}g(t)]u &= f(t), \quad t \in [0, T] \\ u(0) &= u_0, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} u'_t + [A + \mathbb{I}g(t)]u &= f(t), \quad t \in [0, T] \\ u(0) &= u(T), \end{aligned} \quad (7)$$

де $g(t)$, $f(t)$ – задані векторно-значні функції зі значеннями в банаховому просторі X , причому $Ag(t) = g(t)A$, $u_0 \in X$ – задано. Оператор A з областю визначення $D(A)$ в X є щільно визначеним сильно

позитивним (секторіальним). Тобто його спектр $\Sigma(A)$ лежить в секторі в правій півплощині з вершиною в початку координат, а його резольвента в нормі простору X обернено пропорційна до $|z|$ на нескінченності (див. оцінку (10) нижче). У нашому випадку оператор A задається наступним чином:

$$A\psi = \operatorname{div} \mathbf{u}\psi + \sigma\psi - \left[\frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial \psi}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] \psi, \quad (8)$$

з областю визначення

$$D(A) = \{ \psi \mid \psi \in W_2^1(G) \cap C^1(\overline{G}) \},$$

Функція $f(t)$, яка задає інтенсивність та розміщення джерела забруднення в рівнянні (4) від часу (змінна t) не залежить

$$f(t) = Q\delta(r - r_0).$$

5. Існування та зображення розв'язку

Нехай оператор A в (7) є щільно визначеним сильно позитивним (секторіальним) оператором в банаховому просторі X з областю визначення $D(A)$, тобто його спектр $\Sigma(A)$ лежить в секторі (спектральний кут)

$$\Sigma = \left\{ z = \rho_0 + re^{i\theta} : r \in [0, \infty), |\theta| < \varphi < \frac{\pi}{2} \right\}. \quad (9)$$

Крім того поза сектором та на його межі Γ_Σ виконується наступна оцінка для його резольвенти:

$$\| (zI - A)^{-1} \| \leq \frac{M}{1 + |z|}. \quad (10)$$

Числа ρ_0 , φ називаються спектральними характеристиками оператора A .

За теоремою Хілле-Йосіда-Філіпса [15], сильно позитивний оператор A є генератором однопараметричної півгрупи $T(t) = e^{-tA}$ і розв'язок задач (6), (7) можна зобразити у вигляді

$$u(t) = e^{-At - \int_0^t g(s) ds} u(0) + \int_0^t e^{-A(t-\tau) - \int_\tau^t g(s) ds} f(\tau) d\tau. \quad (11)$$

Тобто, розв'язок задачі (6) має вигляд

$$u(t) = e^{-At - \int_0^t g(s) ds} u_0 + \int_0^t e^{-A(t-\tau) - \int_\tau^t g(s) ds} f(\tau) d\tau. \quad (12)$$

Задачу (7) можна розглядати як деяке узагальнення багатоточкової задачі. Тобто задачі, в якій крім диференціального рівняння поставлена додаткова умова

$$u(0) + \sum_{k=1}^m \alpha_k u(t_k) = u_0,$$

з $\alpha_k \in R$, $k = \overline{1, m}$, $u_0 \in X$ (задача (7) виникає при $m = 1$, $t_m = T$, $\alpha_m = -1$, $u_0 = 0$). Подібно до випадку багатоточкової задачі що розглянута в [2, 3] існування розв'язку залежатиме від розв'язності рівняння

$$u(0) - u(T) = 0 \quad (13)$$

Підставивши $t = T$ в (12) отримаємо

$$u(T) = e^{-AT - \int_0^T g(s) ds} u(0) + \int_0^T e^{-A(T-\tau) - \int_\tau^T g(s) ds} f(\tau) d\tau.$$

Тому (13) перетвориться до вигляду

$$\left(I - e^{-AT - \int_0^T g(s) ds} \right) u(0) = \int_0^T e^{-\left(A(T-\tau) + \int_\tau^T g(s) ds \right)} f(\tau) d\tau$$

Для того щоб дослідити існування і єдиність оператора

$$B^{-1} \equiv \left(I - e^{-AT - \int_0^T g(s) ds} \right)^{-1}$$

$$\begin{aligned} \left\| I - e^{-AT - \int_0^T g(s) ds} \right\| &\geq \left| 1 - \left\| e^{-AT} e^{-\int_0^T g(s) ds} \right\| \right| \geq \\ &\geq \left| 1 - e^{-\rho_0 T} e^{-\left\| \int_0^T g(s) ds \right\|} \right|, \end{aligned}$$

Як результат отримаємо умову

$$\left| 1 - e^{-\rho_0 T} e^{-\left\| \int_0^T g(s) ds \right\|} \right| > 0 \quad (14)$$

При виконанні умови (14), з (11) отримаємо зображення для розв'язку задачі (7) у вигляді

$$\begin{aligned} u(t) = & e^{-At - \int_0^t g(s) ds} B^{-1} \int_0^T e^{-\left(A(T-\tau) + \int_\tau^T g(s) ds \right)} f(\tau) d\tau \\ & + \int_0^t e^{-A(t-\tau) - \int_\tau^t g(s) ds} f(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (15)$$

Для того щоб перейти безпосередньо до наближення розв'язку нам потрібно підібрати контур що охоплює спектр оператора A . Гіперболу, що охоплює спектр A та описується рівнянням

$$\Gamma_0 = \{z(\xi) = \rho_0 \cosh \xi - ib_0 \sinh \xi : \xi \in (-\infty, \infty), b_0 = \rho_0 \tan \varphi\} \quad (16)$$

будемо називати спектральною гіперболою. Вона має вершину в $(\rho_0, 0)$ і асимптоти, що паралельні до променів спектрального кута Σ з розхилом який дорівнює φ .

Для зображення операторних функцій зручно використовувати представлення на основі інтегралу Данфорда-Коші (див. напр. [11, 13]). В якості контура інтегрування для інтегралу у формулі Данфорда-Коші виберемо наступну гіперболу:

$$\Gamma_I = \{z(\xi) = a_I \cosh \xi - ib_I \sinh \xi : \xi \in (-\infty, \infty)\}. \quad (17)$$

Відповідно до [9], [5] параметри a_I, b_I цієї гіперболи можна визначити таким чином щоб вона охоплювала спектр A та забезпечувала

необхідну гладкість підінтегральних виразів. Покладемо

$$\begin{aligned}
 a_I &= \sqrt{\rho_0^2 + b_0^2} \cos\left(\frac{d_1}{2} + \varphi\right) \\
 &= \rho_0 \frac{\cos\left(\frac{d_1}{2} + \varphi\right)}{\cos \varphi} = \rho_0 \frac{\cos\left(\arccos\left(\frac{\rho_1}{\sqrt{\rho_0^2 + b_0^2}}\right) / 2 + \varphi / 2\right)}{\cos \varphi}, \\
 b_I &= \sqrt{\rho_0^2 + b_0^2} \sin\left(\frac{d_1}{2} + \varphi\right) \\
 &= \rho_0 \frac{\sin\left(\frac{d_1}{2} + \varphi\right)}{\cos \varphi} = \rho_0 \frac{\sin\left(\arccos\left(\frac{\rho_1}{\sqrt{\rho_0^2 + b_0^2}}\right) / 2 + \varphi / 2\right)}{\cos \varphi}, \\
 \cos \varphi &= \frac{\rho_0}{\sqrt{\rho_0^2 + b_0^2}}, \quad \sin \varphi = \frac{b_0}{\sqrt{\rho_0^2 + b_0^2}}.
 \end{aligned} \tag{18}$$

З попередніх формул видно що a_I, b_I залежать від параметрів спектральної гіперболи Γ_0 які в свою чергу визначаються через спектральні параметри ρ_0, φ оператора A . В наступному розділі ми представимо схему наближення розв'язку наведемо результати які характеризують швидкість збіжності цієї схеми в термінах гладкості початкових даних та спектральних характеристик коефіцієнту A .

6. Чисельні методи наближення розв'язків

Для побудови наближеного розв'язку задачі (6) використаємо методику з [9]. Розв'язок (12) представимо у вигляді суми двох доданків

$$u(t) = u_1(t) + u_2(t),$$

де

$$\begin{aligned}
 u_1(t) &= e^{-At - \int_0^t g(s) ds} u_0, \\
 u_2(t) &= \int_0^t e^{-A(t-\tau) - \int_\tau^t g(s) ds} f(\tau) d\tau.
 \end{aligned}$$

Згідно [9] наближення до $u_1(t)$ шукаємо у вигляді

$$u_{N,1}(t) = \frac{h}{2\pi i} \sum_{k=-N}^N \mathcal{F}(t, z(kh)), \tag{19}$$

де

$$\mathcal{F}(t, z(\xi)) = e^{-z(\xi)t} z'(\xi) \left[(z(\xi)I - A)^{-1} - \frac{1}{z(\xi)} I \right] e^{-\int_0^t g(s) ds} u_0,$$

$$z(\xi) = a_I \cosh \xi - ib_I \sinh \xi, \quad z'(\xi) = a_I \sinh \xi - ib_I \cosh \xi,$$

I – тотожний оператор.

Для ефективної апроксимації підінтегральних виразів з (15) та швидко збіжність квадратур для заданих інтегралів ми вимагатимемо виконання ряду припущень відносно початкових даних задач (6) (7) які зазначені у двох наступних теоремах.

Теорема 6.1. *Нехай A – щільно визначений сильно позитивний оператор і вектор $e^{-\int_0^t g(s) ds} u_0 \in D(A^\alpha)$, $\alpha \in (0, 1)$. Тоді (19) представляє наближення до $u_1(t)$ і забезпечує рівномірну (відносно $t \geq 0$) експоненціальну швидкість збіжності з порядком $\mathcal{O}(e^{-c\sqrt{N}})$ при $h = \mathcal{O}(1/\sqrt{N})$.*

Для наближення $u_2(t)$ використаємо наступний метод [9]:

$$u_2(t) \approx u_{2,N}(t) = \frac{h}{2\pi i} \sum_{k=-N}^N z'(kh) [(z(kh)I - A)^{-1} - \frac{1}{z(kh)} I] \times h \sum_{p=-N}^N \mu_{k,p}(t) f(\omega_p(t)), \quad (20)$$

де

$$\begin{aligned} \mu_{k,p}(t) &= \frac{t \exp\{-\frac{t}{2} z(kh) [1 - \tanh(ph)] - \nu_p(t)\}}{2 \cosh^2(ph)}, \\ \nu_p(t) &= h \sum_{l=-N}^N \frac{g(ph + \frac{t-ph}{2} [1 - \tanh(lh)])}{2 \cosh^2(lh)} \\ \omega_p(t) &= \frac{t}{2} [1 + \tanh(ph)], \quad h = \mathcal{O}(1/\sqrt{N}), \\ z(\xi) &= a_I \cosh \xi - ib_I \sinh \xi, \quad z'(\xi) = a_I \sinh \xi - ib_I \cosh \xi. \end{aligned} \quad (21)$$

Наступна теорема (див. [9], [8]) характеризує похибку наближення.

Теорема 6.2. Нехай A – щільно визначений сильно позитивний оператор зі спектральними параметрами ρ_0, φ , векторнозначна функція $e^{-\int_{\tau}^t g(s)ds} f(t) \in D(A^\alpha)$, $\alpha > 0$ для $t \in [0, \infty]$, $\forall \tau \in [0, t]$ має аналітичне продовження в сектор $\Sigma_f = \{\rho e^{i\theta_1} : \rho \in [0, \infty], |\theta_1| < \varphi\}$ де виконується оцінка

$$\|A^\alpha e^{-\int_{\tau}^t g(s)ds} f(w)\| \leq c_\alpha e^{-\delta_\alpha |Re w|}, \quad w \in \Sigma_f \quad (22)$$

з $\delta_\alpha \in (0, \sqrt{2}\rho_0]$. Тоді метод наближення розв'язку (20) є збіжним до розв'язку (7), причому виконується наступна оцінка для похибки

$$\|\mathcal{E}_N(t)\| = \|u_2(t) - u_{2,N}(t)\| \leq ce^{-c_1\sqrt{N}} \quad (23)$$

рівномірно по t з додатними сталими c, c_1 , що залежать від α, φ, ρ_0 і не залежать від N .

Таким чином, (19) та (20) дають наближений розв'язок задачі (6), а при $N \rightarrow \infty$ похибка наближення прямує до 0 експоненціально.

Далі розглянемо задачу (7). Запишемо її розв'язок

$$u(t) = u_1(t) + u_2(t), \quad (24)$$

де

$$\begin{aligned} u_1(t) &= e^{-At - \int_0^t g(s)ds} B^{-1} \int_0^T e^{-\left(A(T-\tau) + \int_{\tau}^T g(s)ds\right)} f(\tau) d\tau \\ u_2(t) &= \int_0^t e^{-A(t-\tau) - \int_{\tau}^t g(s)ds} f(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (25)$$

$u_2(t)$ збігається з неоднорідною частиною розв'язку класичної задачі Коші (6) і тому для нього можна використати наближення (20). Похибку цього наближення, а також необхідні умови на початкові дані задачі наведені в Теорема 6.2. Для $u_1(t)$ побудуємо наступне наближення:

$$\begin{aligned}
u_1(t) \approx u_{1,N}(t) &= \frac{h}{2\pi i} \sum_{k=-N}^N e^{-z(kh)t} \frac{z'(kh)}{1 - e^{\nu_0}} \\
&\times \left[(z(kh)I - A)^{-1} - \frac{1}{z(kh)} I \right] h \sum_{p=-N}^N \mu_{k,p}(T) f(\omega_p(T)),
\end{aligned} \tag{26}$$

де $\mu_{k,p}(T)$, ν_0 , $\omega_p(T)$, $z(kh)$, $z'(kh)$ визначені в (21). Справедлива наступна теорема (див. [5]):

Теорема 6.3. *Нехай виконані умови теореми 6.2. Тоді наближення (26) збігається рівномірно відносно t і виконується оцінка*

$$\|\mathcal{E}_N(t)\| = \|u_1(t) - u_{1,N}(t)\| \leq c e^{-c_1 \sqrt{N}}, \tag{27}$$

з невід'ємними константами c , c_1 , що залежать від α , φ , ρ_0 і не залежать від N .

7. Алгоритмічні та обчислювальні аспекти реалізації експоненціально збіжного методу для нелокальної задачі Коші

В цьому пункті ми зосередимо нашу увагу на алгоритмічних та обчислювальних аспектах реалізації методів наближення розв'язку класичної та нелокальної задач Коші, які описують модель розповсюдження забруднюючих сумішей в атмосфері, що викладені у пункті 6. Нагадаємо, що для отримання чисельного методу ми використовували явні представлення розв'язків (6), (7) отриманих в пункті 5. Кожне з цих представлень було подано у вигляді суми двох доданків $u(t) = u_1(t) + u_2(t)$, де u_1 є розв'язком відповідної однорідної задачі ($f(t) = 0$), що відповідає початковій умові u_0 , а u_2 є розв'язком неоднорідного аналогу задачі (6) або (7). Почнемо наш аналіз з виразу для $u_{1,N}(t)$ оскільки він є наближенням операторної функції, що міститься як складова у наближеннях до $u_{2,N}(t)$, а також відповідного наближення до однорідної частин розв'язку задачі з періодичною по часу умовою, яка визначається формулою (26).

$$u_1(t) \approx u_{1,N}(t) = \frac{h}{2\pi i} \sum_{k=-N}^N \mathcal{F}(t, z(kh)),$$

де

$$\mathcal{F}(t, \xi) = B^{-1}(z) e^{-z(\xi)t} z'(\xi) \left[(z(\xi)I - A)^{-1} - \frac{1}{z(\xi)} I \right] u_0,$$

$$z'(\xi) = a_I \sinh \xi - ib_I \cosh \xi.$$

Як було зазначено у роботі [4] кількість доданків в сумі може бути зменшена в двічі у випадку коли спектр оператора A симетричний відносно дійсної осі, а u_0 дійснозначна. Тому що тоді в наслідок симетрії контуру функція $\mathcal{F}(t, z(kh))$ прийматиме комплексно спряжені значення для протилежних значень k . В такому випадку формула (19) перетвориться до вигляду

$$u_1(t) \approx u_{1,N}(t) = \frac{h}{\pi i} \left(\frac{1}{2} \mathcal{F}(t, z(0)) u_0 + \Re \left\{ \sum_{k=1}^N \mathcal{F}(t, z(kh)) u_0 \right\} \right). \quad (28)$$

Проаналізувавши формули (19) та (28) помічаємо, що кожен з доданків у присутніх там сумах є функцією незалежною від інших доданків і тому значення цих доданків може бути обчислено паралельно. Важливість такої властивості згаданих формул особливо зростає у випадках коли дію скорегованої резольвенти на елемент u_0 не можна обчислити явно.

Навіть у достатньо простому випадку коли A одновимірний диференціальний оператор легко показати (див. Приклад 5 з [15]), що обчислювальна складність наближення дії резольвенти домінує по відношенню до складності обчислення інших компонентів функції $\mathcal{F}(t, z(kh))$. Цей факт стає очевидним, при переході до розгляду задач, що моделюють перенос забруднюючих сумішей. Для таких задач A — диференціальний оператор визначений на підмножині трьох-вимірному простору \mathbb{Z} , можливо, неканонічною геометрією. У такому випадку відповідна функція Гріна не може бути виписана явно і єдиним можливим варіантом наближення $(zI - A)^{-1} u_0$ є застосування методу скінченних різниць (МСР), методу скінченних елементів (МСЕ) чи інших подібних методів, що в результаті зводять задачу наближення дії резольвенти до задачі чисельного наближення розв'язку лінійної системи рівнянь (СЛР) з розрідженою матрицею великої розмірності.

Існуюче програмне забезпечення [4] призначене для розв'язування систем лінійних рівнянь великої розмірності дозволяє в свою чергу розпаралелити процес наближення розв'язку СЛР з використанням

відомих методів міжпроцесової комунікації (MPI, Threads). Прикладом програмного пакету, в якому реалізовані згадані можливості по розпаралелюванню в комплексі з відомими ітеративними алгоритмами для наближення розв'язку СЛР, є Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation (PETSc) [14]. Таким чином при обчисленні виразу $u_{1,N}(t)$ для деякого фіксованого значення t може бути досягнутий дворівневий паралелізм, як на рівні даних, так і на рівні обчислень для досить загального класу задач, окресленого вище. Обчислення цього виразу для інших значень t може бути проведено з мінімальним обчислювальним коштом, за умови, збереження в пам'яті обчислених значень $(z(kh)I - A)^{-1}u_0$, які не залежать від часу.

При використанні обчислювальних систем із розподіленою пам'яттю, до яких відносяться більшість наявних на Україні і в світі GRID систем та кластерів, обчислювальна топологія нав'язана дворівневим паралелізмом буде являти собою сукупність груп процесорів на які розділений загальнодоступний для обчислень пул процесорів. За такого розподілу, кожна з отриманих груп використовується для наближення значень $\left[(z(kh)I - A)^{-1} - \frac{1}{z(kh)}I\right]u_0$ на відведеній для цієї групи підмножині множини індексів $\{k_{j_1}, \dots, k_{j_m}\}$, після чого суми значень відповідних $\mathcal{F}(t, z(kh))$ у кожній з груп додаються для отримання фінального значення використовуючи міжпроцесорні комунікації між відповідними процесорами в різних групах. Такий підхід дозволяє масштабувати кількість необхідних ресурсів для збереження m значень резольвент в середині групи за допомогою збільшення кількості груп процесорів.

Всі проведені вище міркування справджуються і для наближення неоднорідної частини розв'язку задачі (6) визначеного формулою (20)

$$u_2(t) \approx u_{2,N}(t) = \frac{h}{2\pi i} \sum_{k=-N}^N z'(kh) \left[(z(kh)I - A)^{-1} - \frac{1}{z(kh)}I \right] \\ \times h \sum_{p=-N}^N \mu_{k,p}(t) f(\omega_p(t)),$$

де

$$\mu_{k,p}(t) = \frac{t}{2 \cosh^2(ph)} \exp\left\{-\frac{t}{2}z(kh)[1 - \tanh(ph)]\right\}, \\ \omega_p(t) = \frac{t}{2}[1 + \tanh(ph)].$$

Єдиною принциповою з точки зору реалізації відмінністю є те, що у випадку формули (19) операторна резольвента діє не на задану функцію, а у випадку формули (20) резольвента діє на функцію, що є результатом застосування квадратурної формули до інтегралу по часу з представлення $u_2(t)$. Тому при зміні точності квадратури для згаданого інтегралу потрібно буде знаходити результат дії резольвенти на отриману функцію знову, .

Подальші оптимізації можуть бути проведені на стадії розв'язування послідовності систем лінійних рівнянь, які відповідають наближенню значень резольвент при різних k_j , в кожній групі процесорів. За однакових умов дискретизації оператора A для всієї підмножини k_j , матриці лінійних системи, виникаючих в результаті дискретизації рівняння для обчислення резольвенти

$$(z(kh)I - A)v = u_0 \quad (29)$$

будуть відрізнятися лише зсувом i , як наслідок, можуть бути розв'язані більш ефективно [10], [7], [6], [12]. Такі оптимізації дозволяють у більшості випадків значно зменшити обчислювальну складність наближення розв'язку рівняння для резольвенти.

Для наближеного обчислення резольвенти ми будемо застосовувати пакет програм deal.II призначений для розв'язування диференціальних рівнянь в частинних похідних за допомогою МСЕ [1]. Цей пакет забезпечує необхідну інфраструктуру для використання методу скінченних елементів використовуючи в своїй реалізації сучасні техніки об'єктно орієнтованого програмування та інкапсуляції даних, що дозволяє легко пристосовувати його для конкретних потреб не вникаючи при цьому в деталі реалізації МСЕ. Інструментарій пакету deal.II дозволяє автоматизувати більшість етапів чисельного розв'язування заданого диференціального рівняння за допомогою МСЕ, зокрема: триангуляція геометрії та генерація сіток з використанням різних видів скінченних елементів; необхідні базові маніпуляції з простором шаблонних функцій для вибраного набору скінченних елементів а також адресація утвореної множини степенів свободи; асемблювання дискретного лінійного або лінеаризованого аналогу вихідної системи з використанням однієї з багатьох, вбудованих в бібліотеку deal.II, квадратурних формул; розв'язування, отриманої після асемблювання розрідженої системи та подальша обробка знайденого розв'язку. Крім цього пакет deal.II підтримує інтеграцію з багатьма відомими чисельними пакетами програм розширюючи таким чином

область свого застосування та збільшуючи гнучкість в реалізації кінцевої програми.

Щоб зберегти всі обчислювальні переваги згаданого в попередніх пунктах алгоритму наближення розв'язку задач (6), (7) розроблена нами програма використовує доступну в deal.II можливість розпаралелювання методами стандарту MPI більшості етапів застосування МСЕ, а також наявну в цьому пакеті підтримку розв'язування розріджених лінійних систем за допомогою бібліотеки PETSc. Це дозволяє досягти дворівневого паралелізму обчислень, описаного вище, і практично зняти будь-які обмеження, щодо масштабування розробленої програми на доступні в обчислювальній системі процесори.

Для того, щоб застосувати до резольвентного рівняння (29) з оператором A , визначеним в (8), метод скінченних елементів нам потрібно отримати для цього рівняння відповідне йому слабке формулювання. Нам також потрібно врахувати, що deal.II у версії 7.1.1 доступний на момент виконання проекту не повністю підтримує роботу з комплексними числами, які виникають коли $z(kh)$ в (29) пробігає множину квадратурних точок заданих на комплекснозначному контурі інтегрування Γ_I . Тому ми розділимо комплексну та дійсну частини в резольвентному рівнянні, збільшивши таким чином кількість невідомих змінних вдвічі.

Нехай

$$v = \varphi + i\psi, \quad z = x + iy, \quad u = p + iq,$$

тоді відділяючи комплексну та дійсну частину в рівнянні (29), підставивши туди попередньо значення A з формули (8), отримаємо

$$\begin{cases} -\left[\frac{\partial}{\partial z}\nu\frac{\partial}{\partial z} + \mu\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\right]\varphi + \operatorname{div}\mathbf{u}\varphi + \sigma\varphi - x\varphi + y\psi = -p, \\ -\left[\frac{\partial}{\partial z}\nu\frac{\partial}{\partial z} + \mu\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\right]\psi + \operatorname{div}\mathbf{u}\psi + \sigma\psi - y\varphi - x\psi = -q; \end{cases} \quad (30)$$

крайові умови (2) приймуть вигляд

$$\begin{aligned} \varphi &= 0, & \psi &= 0, & r &\in \Sigma, \\ \frac{\partial}{\partial z}\varphi &= \alpha\varphi, & \frac{\partial\psi}{\partial z} &= \alpha\psi, & r &\in \Sigma_0, \\ \frac{\partial}{\partial z}\psi &= 0, & \frac{\partial\varphi}{\partial z} &= 0, & r &\in \Sigma_H. \end{aligned} \quad (31)$$

Далі домножимо обидві частини кожного з рівнянь на тест фун-

кції χ, ω відповідно і проінтегруємо по всій області G . Матимемо

$$\left\{ \begin{array}{l} - \int_G \chi \left[\frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] \varphi dr + \int_G \chi \operatorname{div} \mathbf{u} \varphi dr + \\ \quad + \int_G \chi (\sigma \varphi - x \varphi) dr + \int_G \chi y \psi dr = - \int_G \chi v dr, \\ - \int_G \omega \left[\frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] \varphi dr + \int_G \omega \operatorname{div} \mathbf{u} \varphi dr - \\ \quad + \int_G \omega (\sigma \psi - x \psi) dr - \int_G \omega y \varphi dr = - \int_G \omega q dr, \end{array} \right.$$

Тепер до першого інтегралу у кожному з рівнянь ми можемо застосувати формулу Гріна [16, ст. 41], яка разом з урахуванням крайових умов (31) та закону збереження маси [17, ст. 10] дозволяє отримати слабе формулювання резольвентного рівняння (29)

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_G [(\mu, \mu, \nu) \cdot \nabla \varphi] \nabla \chi dr - \oint_{\Sigma_0} \chi \mathbf{n} [(\mu, \mu, \nu) \cdot \nabla \varphi] dr + \int_G \chi [\nabla \varphi \mathbf{u}] dr \\ \quad + \int_G \chi (\sigma \varphi - x \varphi) dr + \int_G \chi y \psi dr = - \int_G \chi v dr, \\ \int_G [(\mu, \mu, \nu) \cdot \nabla \psi] \nabla \omega dr - \oint_{\Sigma_0} \omega \mathbf{n} [(\mu, \mu, \nu) \cdot \nabla \psi] dr + \int_G \omega [\nabla \psi \mathbf{u}] dr \\ \quad + \int_G \omega (\sigma \psi - x \psi) dr - \int_G \omega y \varphi dr = - \int_G \omega q dr, \end{array} \right.$$

де векторна операція \cdot означає покомпонентне множення векторів. Перепишемо попередню систему застосувавши до підінтегральних виразів у інтегралах по частині границі області Σ_0 підстановку визначену крайовими умовами (31), а також використаємо позначення $\langle x, y \rangle = \int_G xy dr$. В результаті отримаємо слабку форму представлення

рівняння (29) у вигляді придатному для реалізації засобами Deal.II.

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \nabla \chi, [(\mu, \mu, \nu) \cdot \nabla \varphi] \rangle - \oint_{\Sigma_0} \chi \alpha \varphi dr + \langle \chi, \nabla \varphi \mathbf{u} \rangle \\ \quad + \langle \chi, (\sigma \varphi - x \varphi) \rangle + \langle \chi, y \psi \rangle = - \langle \chi, v \rangle, \\ \langle \nabla \omega, [(\mu, \mu, \nu) \cdot \nabla \psi] \rangle - \oint_{\Sigma_0} \omega \alpha \psi dr + \langle \omega, \nabla \psi \mathbf{u} \rangle \\ \quad + \langle \omega, (\sigma \psi - x \psi) \rangle - \langle \omega, y \varphi \rangle = - \langle \omega, q \rangle. \end{array} \right. \quad (32)$$

Для того що перевірити правильність реалізації резольвентного рівняння для розглядуваного тут оператора A з (8) засобами deal.II розглянемо тестовий приклад в якому для заданого u_0 явно відомо розв'язок v .

Приклад 7.1. Підберемо u_0 таким чином щоб точний розв'язок рівняння (29) мав вигляд

$$v = \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) (a \sin(1/2 \pi x_3) + c).$$

Таке значення v при підстановці в крайові умови (31) приводить до того, що параметр α з цих крайових умов матиме вигляд $\alpha = \frac{\pi a}{2c}$. Підставимо значення v в рівняння (29) де A визначений формулою (8), матимемо

$$\begin{aligned} -(Av - zv) &= - \left(\left\{ \mathbf{u} \nabla + \sigma - \left[\frac{\partial}{\partial x_3} \nu \frac{\partial}{\partial x_3} + \mu \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) \right] \right\} v - zv \right) \\ &= - 2 \mu \sin(\pi x_1) \pi^2 \sin(\pi x_2) (a \sin(1/2 \pi x_3) + c) - \\ &\quad - 1/4 \nu \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) a \sin(1/2 \pi x_3) \pi^2 - \\ &\quad - \sigma \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) (a \sin(1/2 \pi x_3) + c) - \\ &\quad - (u) \cos(\pi x_1) \pi \sin(\pi x_2) (a \sin(1/2 \pi x_3) + c) - \\ &\quad - v \sin(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \pi (a \sin(1/2 \pi x_3) + c) - \\ &\quad - 1/2 w \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) a \cos(1/2 \pi x_3) \pi + \\ &\quad + z \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) (a \sin(1/2 \pi x_3) + c) \equiv u_0 \end{aligned} \quad (33)$$

Щоб порівнювати точний розв'язок u_0 з наближеним розв'язком u_{appr} , введемо в розгляд величину $err(r) = u_{appr}(r) - u_0(r)$, $r \in [0, 1]^3$ яку називатимемо похибкою наближення.

На Рис. 1 зображено тривимірний розподіл похибки $err(r)$ наближення дії резольвенти на u_0 з (33) для якого використовувались наступні значення параметрів:

$$u = 4, v = -1, w = 0$$

$$\nu = 1, \mu = 1, \sigma = 2$$

$$a = 1, c = 1.$$

Наближений розв'язок має вигляд наведений на Рис. 2.

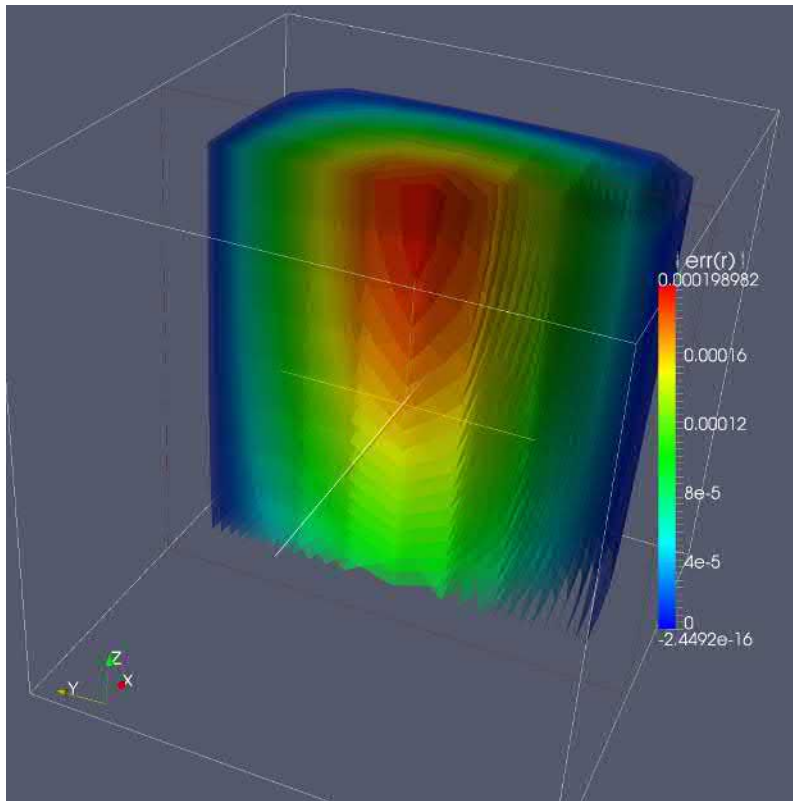


Рис 1. Тривимірний розподіл похибки $err(r)$ наближення дії резольвенти на u_0 визначеного у прикладі 7.1 (фрагмент поверхонь рівня функції $err(r)$, що зображений на рисунку утворений перетином рівнів $err(r)$ з множиною $x \geq 0.5$).

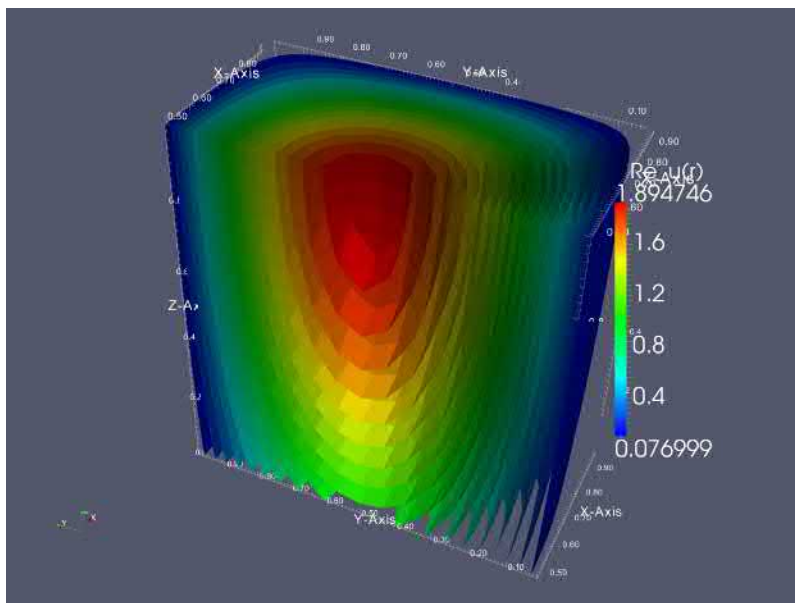


Рис 2. Тривимірний вигляд $u_{appr}(r)$ — наближення дії резольвенти на u_0 визначеного у прикладі 7.1 (фрагмент поверхонь рівня функції $u_{appr}(r)$, що зображений на рисунку утворений перетином рівнів $u_{appr}(r)$ з множиною $x \geq 0.5$).

-
- [1] *Bangerth W., Hartmann R., Kanschat G.* deal.II – a general purpose object oriented finite element library // *ACM Trans. Math. Softw.* — 2007. — Vol. 33, no. 4. — P. 24/1–24/27.
- [2] *Byszewski L.* Theorems about the existence and uniqueness of solution of a semilinear evolution nonlocal cauchy problem // *Journal of Mathematical analysis and Applications.* — 1991. — Vol. 162, no. 5. — P. 494–505.
- [3] *Byszewski L.* Application of properties of the right-hand sides of evolution equations to an investigation of nonlocal evolution problems // *Nonlinear Anal.* — 1998. — Vol. 33, no. 5. — P. 413–426.
- [4] *Dongarra J.* Freely available software for linear algebra. — 2011. — Mode of access: URL: <http://www.netlib.org/utk/people/JackDongarra/lasw.html>.
- [5] Exponentially convergent method for the m-point nonlocal problem for a first order differential equation in Banach space / I. P. Gavrilyuk, V. L. Makarov, D. O. Sytnyk, V. B. Vasylyk // *Numerical Functional Analysis and Optimization.* — 2010. — Vol. 31, no. 1. — P. 1–21.
- [6] *Frommer A.* BiCGstab(l) for families of shifted linear systems // *Computing.* — 2003. — 4. — Vol. 70, no. 2. — P. 87–109.
- [7] *Frommer A., Glässner U.* Restarted gmres for shifted linear systems // *SIAM Journal on Scientific Computing.* — 1998. — Vol. 19, no. 1. — P. 15–26.
- [8] *Gavrilyuk I., Makarov V.* Exponentially convergent algorithms for the operator exponential with applications to inhomogeneous problems in Banach spaces // *SIAM Journal on Numerical Analysis.* — 2005. — Vol. 43, no. 5. — P. 2144–2171.
- [9] *Gavrilyuk I., Makarov V., Vasylyk V.* Exponentially convergent algorithms for the differential equations with operator coefficients in Banach spaces. *Frontiers in Mathematics* no. 29. — Springer Basel, 2011. — 190 p.
- [10] *Jegerlehner B.* Krylov space solvers for shifted linear systems. — 1996.
- [11] *Krein S.* Linear Differential Operators in Banach Spaces. — New York : Amer. Math. Soc., 1971.
- [12] *McLean W., Thomée V.* Iterative methods for shifted positive definite linear systems and time discretization of the heat equation // *ArXiv e-prints.* — 2011. — 10. — 1111.5105.
- [13] One-parameter semigroups. / Ph. Clement, H.J.A.M. Heijmans, S. Angenent et al. — Amsterdam : CWI Monographs, 5. North-Holland Publishing Co., 1987.

-
- [14] *Balay S., Buschelman K., Gropp W. D. et al.* PETSc Web page. — 2009. — Mode of access: URL: <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
- [15] *Yosida K.* Functional Analysis. Classics in Mathematics. — Cambridge University Press, 1995.
- [16] *Лионс Ж.-Л.* Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными. — М. : Мир, 1972. — 416 с.
- [17] *Марчук Г.* Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. — М. Наука, 1982. — 320 с.
- [18] *Ситник Д. О.* Експоненціально збіжні методи для нелокальної абстрактної задачі Коші та нелінійних крайових задач : Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук : 01.01.07 / Дмитро Олексійович Ситник ; Ін-т математики НАН України. — Київ, 2012. — 131 с.