УДК 519; 533.6

НЕКОТОРЫЕ ПРОБЛЕМЫ И ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В. М. Ковеня

Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090 Новосибирск

Сформулированы основные проблемы и тенденции развития математического моделирования — нового научного направления в исследовании различных процессов и явлений. Анализ состояния и перспектив развития проведен на примере задач механики сплошной среды. Основное внимание уделено двум этапам моделирования — выбору физико-математических моделей механики сплошной среды и численным алгоритмам их решения.

Введение. Математическое моделирование как новый способ исследования и получения новых знаний сформировалось в 70-х гг. XX в. на основе широкого применения математических методов при решении теоретических и практических задач естествознания. Его создание и развитие обусловлено появлением электронно-вычислительных машин, способных производить арифметические и логические вычисления со скоростью, недоступной для человека. Необходимость решения все более сложных задач науки, техники и народного хозяйства потребовала разработки и обоснования математических моделей, отражающих основные закономерности исследуемых явлений, и создания экономичных численных алгоритмов их решения. Эффективная реализация этих алгоритмов в свою очередь не только потребовала разработки и создания новых ЭВМ, но и стимулировала исследования по созданию новых языков программирования, операционных систем и систем поддержки программного обеспечения, а также разработку новых подходов в программировании и информационных технологиях. Все это позволило перейти от использования ЭВМ как скоростного вычислителя к системе моделирования, включающей весь процесс от разработки математических моделей, численных алгоритмов, программирования до создания комплексов и пакетов программ для решения классов задач, анализа результатов, вывода, хранения, что является содержанием нового научного направления — математического моделирования [1–11].

С возникновением нового направления исследований появились проблемы, от решения которых зависит его развитие. Математические модели и алгоритмы, программы и комплексы программ, ЭВМ и системы поддержки для решения задач являются элементами моделирования. Их роль и место могут быть правильно оценены лишь во всей цепочке моделирования, которую назовем технологической (см. [11]). Под технологической цепочкой моделирования будем понимать совокупность ее элементов, выполняемых в определенной последовательности и составляющих полный цикл. Разумеется, для различных областей исследования эти элементы могут различаться, поэтому в качестве основы технологической цепочки должны быть выбраны общие для всех областей моделирования элементы. В соответствии с современными представлениями процесс моделирования может быть представлен в виде следующей последовательности: исследуемое явление — математические модели — численные алгоритмы — программирование — ЭВМ — вычисления и их анализ — обработка и хранение результатов, дополняющей известную триаду математического моделирования модель — алгоритм — программа [2, 4, 11]. Все элементы технологической цепочки, очевидно, взаимосвязаны, и эта связь нелинейна, а изменение одного из ее элементов может привести к изменению не только последующих, но и предыдущих элементов. До начала моделирования исследователь явно или неявно проводит анализ всей цепочки моделирования исходя из современных представлений об исследуемом явлении или процессе, наличия ресурсов ЭВМ и ее возможностей, наличия численных алгоритмов и т. д. Конечно, для некоторых изучаемых явлений и классов решаемых задач отдельные элементы цепочки могут быть опущены. В качестве примера приведем известное представление Н. Н. Яненко о разностной схеме (численном алгоритме) как математической модели для описания физического явления. Создание более полных математических моделей, способных адекватно описывать более сложные исследуемые процессы, и разработка более точных и эффективных численных алгоритмов приводили к необходимости создания ЭВМ все большей производительности. Это могло быть достигнуто не только за счет совершенствования элементной базы, но и главным образом за счет новых архитектур ЭВМ, использующих принципы многопроцессорности и параллельности вычислений. В свою очередь эти архитектуры накладывают определенные требования на численные алгоритмы, большинство из которых созданы в эпоху однопроцессорных ЭВМ, в которых вычисления проводились последовательно. Новые архитектуры ЭВМ требуют создания новых численных алгоритмов и пересмотра существующих численных методов с целью их адаптации к этим архитектурам.

В настоящее время можно утверждать, что математическое моделирование наряду с физическим и натурным экспериментами является основным способом исследования и получения новых знаний в различных областях естествознания. Можно ожидать, что его роль в дальнейшем возрастет, но оно не заменит физический или натурный эксперимент, так как опыт всегда остается основой исследования. Следует ожидать сближения различных форм исследования, дополняющих друг друга. Активное использование математического моделирования в различных областях естествознания и человеческой деятельности обусловлено многими факторами, основными из которых являются следующие:

— усложнение класса исследуемых задач, для изучения которых необходимо создание новых дорогостоящих экспериментальных установок или модельных объектов (в ряде случаев численное моделирование этих задач может быть получено при меньших финансовых затратах);

— большие энергетические и финансовые затраты на обслуживание экспериментальных установок и объектов;

— необходимость решения экологических, социальных и других проблем;

— невозможность проведения физического (химического, экономического и т. д.) или натурного моделирования в ряде областей исследования (в этом случае математическое моделирование является единственно возможным).

К указанным факторам следует добавить возможность сокращения сроков исследования и получения результатов, а также возможность их многократного и быстрого повторения или уточнения, хранения и т. д. Развитие математического моделирования приводит к созданию автоматизированных систем для управления производством, что позволит резко увеличить производительность труда и избежать влияния субъективного "человеческого" фактора при принятии решений. Таким образом, математическое моделирование становится основным способом исследования и получения новых знаний. В то же время результаты математического моделирования находят широкое применение в производстве и других областях человеческой деятельности (например, при создании систем автоматического проектирования, экспертных систем и т. д. [12]). В данной работе рассматриваются некоторые тенденции развития математического моделирования. Поскольку охватить все области его применения невозможно, ниже сделан акцент на задачах механики сплошной среды. В этой области исследования математическое моделирование получило наибольшее распространение как в силу невозможности получения решений на основе других подходов, так и в силу важности этого класса задач для развития производства (см., например, [1–12]). Как отмечено выше, эффективность математического моделирования может быть правильно оценена при рассмотрении всей технологической цепочки. Поэтому остановимся на анализе состояния и развития отдельных ее элементов и их взаимодействия. Основное внимание уделяется выбору моделей и численных алгоритмов.

1. Физико-математические модели. Для задач механики сплошных сред в наиболее полной постановке физико-математические модели могут быть описаны интегральными законами сохранения

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V W_0\,dV + \oint\limits_S W\,ds = \int\limits_V F\,dV, \tag{1.1}$$

выражающими связь между изменением во времени в замкнутом объеме V некоторых величин (потоков) и их изменением при переходе через границы S, а также взаимодействие потоков с внешними источниками или стоками. Интегральные законы сохранения (например, массы, импульсов и энергии для моделей сплошной среды) являются наиболее общей формой описания движения сред и справедливы как для непрерывных, так и для разрывных решений. Наряду с интегральной формой используется их дифференциальное представление

$$\frac{\partial W_0}{\partial t} + \operatorname{div} W = F,$$

полученное из (1.1), но справедливое лишь для непрерывных решений.

Многообразие и многопараметричность исследуемых задач и их математических постановок, разномасштабность процессов приводят к цепочке физико-математических моделей, каждая из которых получена при определенных предположениях о характере изучаемого явления и описывает основные его закономерности. Особенностью такого подхода является и многообразие уравнений, описывающих эти модели. Полученные уравнения могут быть уравнениями различного типа (гиперболическими, параболическими, эллиптическими или уравнениями переменного типа), что приводит к различным постановкам начальных и краевых задач. Более того, при исследовании одного класса задач тип уравнений может меняться в зависимости от характера решения. Например, стационарные уравнения газовой динамики являются уравнениями эллиптического типа для дозвуковых скоростей и гиперболического для сверхзвуковых, т. е. в отдельных подобластях расчетной области необходимо решать уравнения различного типа, что накладывает дополнительные требования на применяемые численные методы.

Большинство процессов в механике жидкости и газа являются нелинейными и эволюционными, и как следствие эти же свойства присущи описываемым их системам уравнений. Свойства таких уравнений изучены недостаточно, для большинства задач не доказаны теоремы существования и единственности, более того, их решения могут быть неединственными и разрывными даже при гладких начальных данных (см. [10]). Переход к многомерным задачам и усложнение расчетных областей (рассмотрение реальных геометрий) вносит дополнительные трудности в их постановку. При отсутствии строгих доказательств существования и единственности решений всегда остается открытым вопрос о соответствии физико-математической модели исследуемому явлению. При недостаточной информации об исследуемом процессе возникает необходимость рассмотрения различных моделей, учитывающих основные закономерности изучаемого явления для различных диапазонов основных параметров. Таким образом, выбор и формулировка физико-математических моделей становится многопараметрической задачей, решение которой требует анализа всей цепочки моделей. До начала моделирования исследователь должен ответить на ряд вопросов. Например, какова конечная цель исследования и какие данные предполагается получить в результате решения этой задачи? Насколько важна данная задача и какое место она занимает в общей проблеме? Какова точность модели и с какой точностью требуется получить ответ? Какие ресурсы необходимо привлечь для решения задачи и какие математические и технологические возможности имеются у исследователя? Фактически исследователь проводит анализ всей технологической цепочки моделирования, на основе которого делает вывод о возможности решения задачи или проблемы на основе существующих моделей, численных алгоритмов и технических средств (ЭВМ) или формулирует условия и требования, необходимые для ее разрешения (например, требования к созданию дополнительных моделей, численных методов решения, а также новых ЭВМ и т. д.).

Создание моделей, адекватно описывающих исследуемое явление или изучаемый процесс, включает их математическое обоснование и корректную постановку начально-краевых задач. В соответствии с современными представлениями все классы моделей для задач механики могут быть условно разделены на четыре группы (уровня):

1) аналитические приближения и линеаризованные уравнения;

2) нелинейные уравнения без учета диссипативных процессов;

3) нелинейные уравнения с учетом диссипативных процессов;

4) полные нестационарные модели, описываемые уравнениями с учетом реальных эффектов (типа уравнений Навье — Стокса с учетом сжимаемости и теплопроводности, турбулентности и т. д.), уравнениями многокомпонентных и многофазных сред, магнитогидродинамические модели различного уровня и т. д.

В настоящее время в зависимости от целей исследования и классов решаемых задач, важности задачи в общей проблеме, требуемой точности решения, имеющихся математических и технических возможностей и других факторов используются все группы моделей начиная от простейших (первый уровень) до самых сложных (третий и четвертый уровни). Рассмотрим некоторые примеры из области вычислительной аэродинамики. В приближении потенциального течения (первый уровень) панельным методом удается получать решение задач обтекания самолетов реальных конфигураций (например, самолета F4F с подвесками для оружия) и получать распределение параметров течения на его поверхности [13]. Первые такие расчеты выполнены в 70-х гг. XX в. на ЭВМ малой мощности. Однако эта модель не учитывает реальные эффекты в газе, например сжимаемость, вязкость и теплопроводность, и не позволяет получить распределения газодинамических потоков вблизи тела. Переход к большим скоростям требует использования нелинейных моделей, описываемых уравнениями газовой динамики (второй уровень). Их решения могут содержать разрывы газодинамических величин, что требует использования специальных методов расчета и ЭВМ большой мощности (10^9 флоп) (флоп — количество операций над числами с плавающей запятой, выполняемых за 1 с). С появлением в 80-е гг. XX в. ЭВМ большого быстродействия расчет обтекания сверхзвукового самолета (например, типа F16) в приближении уравнений Эйлера мог быть проведен за время, сравнимое со временем его полета. Однако и в настоящее время решить задачу нестационарного обтекания с учетом реальных свойств газа, таких как турбулентная вязкость и теплопроводность (третий и четвертый уровни), даже с использованием современных суперЭВМ удается лишь для модельных форм летательных аппаратов. Указанные трудности связаны не только с многопараметричностью задач (различные числа Маха, Рейнольдса, геометрии обтекаемых тел и т. д.), но и в большей мере с недостаточным обоснованием математических моделей и их замыкающих соотношений, например с недостаточным обоснованием моделей турбулентности и областей их применимости. Подобные трудности возникают и в гиперзвуковой аэродинамике, где наряду с решением отмеченных выше проблем необходимо правильно учесть и оценить влияние химических реакций, протекающих в газе вблизи обтекаемого тела и на его поверхности при больших температурах, оценить разрушение поверхности и учесть прочностные и другие характеристики.

Естественно, при решении других задач в рамках различных приближений возникают другие проблемы, решение которых определяет прогресс в математическом моделировании. Многопараметричность исследуемых задач и разномасштабность процессов, их нелинейность и многомерность не позволяют сформулировать общие подходы при постановке задач и получении решений. Можно говорить лишь о направлениях исследований и основных тенденциях развития, включающих:

— использование моделей различного уровня в зависимости от целей исследования;

— применение все более сложных моделей для учета большего числа реальных физических эффектов исследуемых явлений;

— анализ моделей, их систематизацию и выявление некоторых классов общих моделей, пригодных для описания широкого комплекса проблем;

— дальнейшее математическое обоснование физико-математических моделей и корректных постановок начально-краевых задач.

Следует отметить, что упрощенные модели получают, как правило, из моделей более высокого уровня при различных предположениях о характере исследуемого явления. Таким образом, взяв за основу более полную модель, можно получить цепочку упрощенных моделей. Такие полные модели, из которых могут быть получены их упрощенные приближения, будем называть накрывающими. Ярким примером таких моделей является модель, описываемая уравнениями Навье — Стокса для сжимаемого теплопроводного газа (модель четвертого уровня). При пренебрежении эффектами вязкости и теплопроводности получаем модель газовой динамики, пригодную для описания многих физических задач. Для сильновязких течений может быть использовано приближение пограничного слоя, полученное из уравнения Навье — Стокса при сохранении членов порядка $O(1/\sqrt{\mathrm{Re}})$ и пренебрежении членами более высокого порядка малости. В рамках того же подхода можно получить модели вязкого ударного слоя, модели “параболизованных” уравнений Навье — Стокса и т. д. (см., например, [14]). Очевидно, что и для других классов исследуемых задач могут быть построены цепочки упрощенных моделей на основе базовой накрывающей модели. Использование такого подхода позволит сократить число рассматриваемых моделей и сосредоточиться на изучении базовых моделей, описывающих целые классы задач.

Следует отметить, что достигнутый в настоящее время уровень математического моделирования (по крайней мере, в области механики сплошной среды) основывается на большом количестве работ математиков-теоретиков, механиков и физиков предыдущих поколений. Новые достижения в математическом моделировании будут основаны на новых теоретических результатах в этих областях и их использовании математиками-вычислителями. Качественный скачок в быстродействии ЭВМ до 10^{12}–10^{14} флоп, достигнутый в последние 5–10 лет, позволяет перейти к численному моделированию задач четвертого уровня, например к моделированию реальных процессов в металлургии и химии, в аэродинамике при оптимизации форм реальных летательных аппаратов в широком диапазоне параметров набегающего потока, моделированию процессов в гиперзвуковых воздушно-реактивных и ракетных двигателях, моделированию процессов перехода течения от ламинарного к турбулентному и обратно и т. д.

2. Численные алгоритмы. Как отмечено выше, нелинейность большинства исследуемых задач и соответствующих систем дифференциальных уравнений не позволяет получить их точные решения, за исключением некоторых частных случаев. Более того, такие решения не всегда существуют, поэтому основными методами их нахождения являются приближенные и численные. Первые основаны на некотором представлении решения исходя из известных предположений о характере решения. Например, в асимптотических методах в аэродинамике используется представление решения в виде его разложения по малому параметру (по обратным числам Рейнольдса для больших чисел Re или числам Маха M для гиперзвуковых скоростей и т. д.). Несмотря на простоту получения таких решений, эти подходы применимы лишь для сравнительно простых задач, в которых преобладает один тип течений. Остается открытым вопрос об области применимости этих подходов и их обосновании. Асимптотические методы широко использовались на начальном этапе моделирования. Переход к более сложным моделям потребовал разработки и применения численных алгоритмов решения многомерных задач в рамках различных физико-математических моделей.

На современном этапе развития математического моделирования широкое распространение получили различные численные методы, такие как метод конечных разностей (МКР) и метод конечных объемов (МКО), метод конечных элементов, метод граничных элементов, специальные методы: метод частиц в ячейках, метод статистических испытаний и др. Проведем анализ развития численных алгоритмов на примере МКР и МКО, в силу своей универсальности получивших широкое распространение при решении задач механики сплошной среды. Основы МКР и МКО изложены во многих работах (см., например, [15–22]). Напомним основные понятия. Пусть в области $\Omega = \Omega(\boldsymbol{x})$ с границей γ требуется найти решение краевой задачи

$$L\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}, \qquad l\boldsymbol{u}_\gamma = \boldsymbol{\varphi}, \tag{2.1}$$

где L, l — дифференциальные, интегральные или алгебраические операторы; $\boldsymbol{u} = u(\boldsymbol{x})$ — вектор искомых функций; $\boldsymbol{x} = (t, x_1, \ldots, x_N)$; $\boldsymbol{f}$, $\boldsymbol{\varphi}$ — векторы правых частей. Предположим, что задача (2.1) поставлена корректно. Переход от математической постановки задачи к ее численному решению включает следующие этапы:

— замена области Ω непрерывного аргумента $\boldsymbol{x}$ его дискретным аналогом Ω_h;

— замена (аппроксимация) функций $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{f}$, $\boldsymbol{\varphi}$ непрерывного аргумента $\boldsymbol{x}$ дискретными функциями $\boldsymbol{u}_h$, $\boldsymbol{f}_h$, $\boldsymbol{\varphi}_h$;

— аппроксимация исходных операторов L, l их дискретными аналогами L_h, l_h.

После выполнения указанных операций приходим к системе дискретных уравнений

$$L_h\boldsymbol{u}_h = \boldsymbol{f}_h, \qquad l_h\boldsymbol{u}_h\big|_{\gamma h} = \boldsymbol{\varphi}_h, \tag{2.2}$$

которую и называют разностной схемой. Как следствие возникает вопрос о соотношении (близости) решений исходной дифференциальной (2.1) и дискретной (2.2) задач. Так как каждый этап постановки дискретной задачи может проводиться различными способами, то в результате для решения задачи (2.1) может быть получено семейство дискретных постановок (2.2), обладающих, вообще говоря, различными свойствами. Требования к численным алгоритмам также могут быть разными. Сформулируем основные из них:

— сходимость решения дискретной задачи (2.2) к решению исходной задачи (2.1);

— достаточная точность расчета;

— экономичность алгоритма;

— универсальность алгоритма, т. е. возможность его адаптации к различным физико-математическим моделям;

— адаптация алгоритма к различным типам и архитектурам ЭВМ.

Очевидно, перечисленные требования должны быть дополнены, как отмечено выше, требованием адекватности или близости свойств разностной схемы к свойствам исходной задачи (см. [21]), условиями консервативности схемы, однородности алгоритма и т. д.

Эффективность моделирования на этом этапе может быть наиболее точно оценена лишь во всей технологической цепочке. Следует отметить, что требования, предъявляемые к численным алгоритмам, противоречивы, и в зависимости от целей исследования часть из них может быть опущена. Например, при необходимости получения решения с высокой точностью экономичность алгоритма или его универсальность могут оказаться не столь важными. Таким образом, удовлетворение всем требованиям приводит к задаче оптимизации. Как и любая задача оптимизации, она может иметь одно или несколько решений (или не иметь их). Отсюда следует очевидный вывод о невозможности построения универсального алгоритма для решения различных классов задач и необходимости создания различных алгоритмов в зависимости от целей исследования.

Проведем анализ основных требований, предъявляемых к численным алгоритмам. Для обеспечения *сходимости* численного решения к решению исходной задачи необходимо удовлетворять (как следует из теории разностных схем [16, 17]) условиям аппроксимации и устойчивости (корректности) разностного решения. Доказательство этих утверждений достаточно сложное, особенно в случае нелинейных уравнений, и является одним из актуальных вопросов теории разностных схем.

Требования к *точности* расчета для различных физико-математических задач могут быть различными в зависимости от цели моделирования. Разумеется, точность расчета должна быть согласована с точностью выбранной физико-математической модели. Повышение точности расчета как одной из его важнейших характеристик может быть достигнуто измельчением шагов сетки или расчетных ячеек; применением неравномерных и подвижных сеток; построением схем повышенного порядка. Укажем также другие способы повышения точности расчетов, которые используются в последнее время: экстраполяция численных решений, полученных на последовательности сеток [23]; использование информации о гладкости решения (алгоримы без насыщения [24]); использование точных решений (в ячейке с кусочно-постоянными или кусочно-линейными начальными данными), как в схеме Годунова, послужившей основой для построения новых классов разностных схем [25]; выделение главных особенностей решения, например головной ударной волны в задачах сверхзвукового обтекания, и т. д. Равномерное измельчение шагов сетки (или расчетных ячеек) не является эффективным способом повышения точности при решении многомерных задач из-за степенного возрастания числа узлов в расчетной области и соответствующего роста числа арифметических операций. Хотя такой подход не требует изменения алгоритма и программ, используется он сравнительно редко. При решении задач чаще всего используются неравномерные сетки, в том числе сетки, сгущающиеся в областях больших градиентов. При наличии информации о поведении решения вводится преобразование координат, сгущающее ячейки в областях, содержащих особенности решения (пограничные слои, ударные волны и т. д.). Такой подход оказывается очень эффективным, так как позволяет без существенного увеличения числа расчетных ячеек значительно повысить точность расчета. Однако для большинства задач области больших градиентов и других особенностей решения, как правило, априори неизвестны и могут быть получены лишь в процессе решения.

Еще более сложная ситуация возникает в нестационарных задачах, в которых решение меняется во времени и расчетные сетки зависят от времени. Для решения таких задач исходные уравнения необходимо дополнить нестационарными уравнениями для определения закона движения сетки [25–28]. Усложнение расчетных областей и переход к решению многомерных задач потребовали разработки специальных методов построения или генерации сеток, удовлетворяющих определенным требованиям. На современном этапе моделирования задача построения эффективных сеток становится центральной, и, по оценкам специалистов, основные затраты ресурсов приходятся на ее решение. Некоторые подходы к решению этих проблем приведены в работах [25–29]. Укажем еще один способ повышения точности расчета — построение решения на вложенных или адаптивно-встраивающихся сетках. Хотя данный подход недостаточно обоснован, он может служить основой для получения предварительного решения, а затем процесс вычислений может повторяться до получения решений с требуемой точностью. Некоторые методы решения уравнений на неструктурированных сетках изложены в [29].

В последние десятилетия наряду с неравномерными сетками широко используются схемы повышенного порядка, главным образом двух типов: схемы на расширенном шаблоне (см. [20, 22]) и так называемые компактные схемы высокого порядка на трехточечном шаблоне [30, 31]. В первом случае при построении схем сквозного счета в задачах с разрывными данными для уменьшения осцилляций численного решения применяются различные способы монотонизации: в исходные уравнения или разностную схему добавляются диссипативные члены, которые не только гасят осцилляции, но и сглаживают решение. В схемах типа TVD, основанных на принципе минимальных производных, монотонность решения достигается путем введения нелинейной численной диссипации, обеспечивающей обратную связь схемы с решением [32–34]. Как правило, эти схемы согласованы с энтропийным неравенством и имеют второй или более высокий порядок аппроксимации. Сглаживание решения происходит на небольшом числе ячеек. Имеется множество модификаций схем (ENO-схемы, схемы с корреляцией, схемы ограниченной антидиффузии и т. д. [34]), позволяющих сохранить их монотонность, повышенный порядок на разрывах, консервативность и т. д. Следует отметить, что использование расширенного шаблона в этих схемах приводит к необходимости задания фиктивных слоев и дополнительных граничных условий, отсутствующих в исходной постановке задач, или изменения аппроксимации в приграничных узлах, что нарушает однородность схем.

В случае использования компактных схем аппроксимация повышенного порядка достигается на трехточечном шаблоне за счет специального выбора аппроксимации уравнения, исключающей погрешности более низких порядков (см. [20, 22, 30, 31]). Их недостатком является значительное усложнение аппроксимации, особенно в многомерном случае. Однако применение схем повышенного порядка является единственной возможностью решения многомерных задач с достаточно высокой точностью.

Разновидностью МКР является МКО, основанный на аппроксимации исходных уравнений в интегральной форме (см., например, [16–20]). Возможность выбора различных форм расчетных ячеек при аппроксимации расчетных областей обеспечила широкое распространение МКО при решении задач в областях сложной геометрии, в том числе в многосвязных областях. Исходные уравнения аппроксимируются для каждой исходной ячейки, т. е. получаемые схемы являются консервативными. Порядок аппроксимации зависит от точности аппроксимации объемных и поверхностных интегралов, что облегчает построение схем повышенного порядка.

Требование *экономичности* алгоритма всегда являлось одним из главных и понималось как минимизация числа арифметических операций на решение задачи. Приведем оценки затрат ресурсов ЭВМ при решении многомерных нестационарных задач (см. [11]). Пусть M — размерность задачи по пространству, m — количество уравнений (неизвестных функций), I_j — число узлов в направлении x_j, q — осредненное число арифметических операций на узел сетки, N — число шагов по времени. Тогда общее число операций, необходимых для решения задачи, равно

$$Q = mqNI, \tag{2.3}$$

где $I = I_1 \times I_2 \times \ldots \times I_M$. Эта формула не учитывает ряд факторов, влияющих на затраты ресурсов ЭВМ, таких как число внутренних итераций, заданная точность расчета, начальное приближение и т. д. Будем полагать, что они априорно учтены в коэффициенте q.

Выберем для примера средние значения параметров при решении задач существующими методами: $I_j = I = 10^2 \div 10^3$, $m = 10 \div 10^2$, $N = 10^3 \div 10^4$, $q = 10^2 \div 10^4$. Для $M = 3$ (трехмерный случай) $Q = 10^{12} \div 10^{19}$ флоп. Обозначим через R количество операций, выполняемых ЭВМ за 1 с. Тогда

$$T = Q/R \tag{2.4}$$

есть время решения задачи. Соответственно затраты оперативной памяти могут быть определены по формуле

$$L = mlI,$$

где l — число временных слоев, необходимых для хранения в оперативной памяти ЭВМ (обычно $l = 2$). По оценкам специалистов, использование результатов математического моделирования в проектировании является оптимальным, если расчет одного варианта не превышает 15 мин (порядка 10^3 с). Для выполнения этого условия быстродействие ЭВМ и объем оперативной памяти для решения трехмерных задач должны составлять $R = Q/T = 10^9 \div 10^{16}$ флоп, $L = 2 \cdot 10^7 \div 2 \cdot 10^{11}$ байт. Заметим, что в национальном аэрокосмическом проекте США по моделированию (см. [6]), разработанном в 80-е гг. и ориентированном на решение задач аэродинамики, параметры ЭВМ составляли: $R = 10^9 \div 10^{10}$ флоп, $L \approx 2{,}5 \cdot 10^8$ байт, т. е. планировалось создать вычислительную систему решения пространственных задач аэродинамики в приближении уравнений газовой динамики и упрощенных уравнений Навье — Стокса (модели второго и третьего уровней).

При определении быстродействия R выше не оговаривалось, используется однопроцессорная ЭВМ или многопроцессорный вычислительный комплекс. Полагалось, что быстродействие R не зависит от типа алгоритмов, размерности задачи, использованного объема памяти и других факторов. В действительности быстродействие ЭВМ зависит от многих факторов. Для их приближенного учета формула быстродействия может быть представлена в виде

$$R' = sR,$$

где R — пиковая производительность системы; s — средний коэффициент загрузки процессоров ($s < 1$), значение которого может значительно изменяться для различных многопроцессорных вычислительных систем. Согласно (2.4) затраты на решение задачи могут быть сокращены путем уменьшения Q или увеличения быстродействия R. Число арифметических операций Q определяет экономичность алгоритма. Численный алгоритм назовем *экономичным*, если Q в (2.3) — линейная функция числа узлов сетки по времени и пространству. Как известно, классы разностных схем делятся на явные и неявные. Как правило, явные схемы условно устойчивы, т. е. разностная задача корректна при определенном соотношении между временным (итерационным) τ и пространственными h_j шагами сетки. Для неявных схем эти ограничения отсутствуют или более слабые, чем для явных. В соответствии с приведенным выше определением явные схемы не являются экономичными. Проиллюстрируем сказанное выше простейшим примером. Пусть (2.2) — явная разностная схема, аппроксимирующая нестационарное уравнение теплопроводности в области $\Omega = \{0 \leqslant t \leqslant 1,\ 0 \leqslant x \leqslant 1\}$. Введем шаги разностной сетки $\tau = 1/N$, $h = 1/I$, где N, I — число узлов сетки в направлениях t и x. Явная схема устойчива при выполнении условия $\tau \leqslant h^2/2 = KI^{-2}$. Тогда число арифметических операций, необходимых для решения задачи, равно $Q = qNI \approx KqI^3$. При изменении шага сетки h, т. е. при увеличении числа узлов I в p раз, число операций увеличивается в p^3 раз. Аналогичная ситуация возникает при использовании явных схем для решения гиперболических уравнений, для которых число операций увеличивается по квадратичному закону при линейном увеличении числа шагов сетки.

Остановимся на вопросах *универсальности* алгоритма. Для явных схем обобщение алгоритмов на многомерный случай не представляет значительных трудностей, однако проблема экономичности выходит на первый план, так как увеличение размерности задачи приводит к более жестким ограничениям на устойчивость. Реализация неявных схем даже для линейных систем для многомерных задач значительно усложняется. Например, разностная схема с весами для численного решения линейного уравнения теплопроводности (см. [20]) безусловно устойчива при $\alpha \geqslant 0{,}5$ и аппроксимирует уравнение теплопроводности с порядком $O(\tau^2 + h^2)$ при $\alpha = 0{,}5$. В одномерном случае она реализуется скалярными трехточечными прогонками и требует восьми арифметических операций на один узел сетки. В двумерном случае ее решение может быть получено методом матричной прогонки, требующим обращения матриц размерности $I \times I$ в каждом узле сетки. Очевидно, для большого числа узлов данная схема становится неэкономичной. Эта ситуация характерна и для гиперболических уравнений. Таким образом, обобщение неявных схем, эффективных для решения одномерных задач, на многомерный случай чаще всего приводит к усложнению их реализации или потере экономичности. Переход от решения одномерных уравнений к решению многомерных потребовал разработки новых численных алгоритмов, пригодных для эффективного решения задач любой размерности. Такие алгоритмы созданы в 70–80-е гг. на основе метода факторизации и метода расщепления (см., например, [1, 3, 14–22]). Их суть заключается в сведении исходной многомерной задачи к последовательности ее одномерных аналогов или более простых задач. В методе факторизации базовые схемы представляются в виде приближенного произведения одномерных или более простых разностных аналогов, а в методе расщепления исходная задача представляется в виде совокупности (слабой аппроксимации) более простых одномерных задач, которые затем аппроксимируются явными и неявными разностными схемами (см. [3, 15, 18]). Следует отметить, что введение расщепления или факторизации в разностные схемы приводит к появлению дополнительных членов порядка $O(\tau^2)$, отсутствующих в исходных уравнениях, что может вызвать понижение точности решения или увеличение числа итераций для получения стационарного решения методом установления.

Последним, но не менее важным требованием, предъявляемым к численным алгоритмам, является *адаптация* алгоритмов к различным архитектурам вычислительных систем. Основные численные алгоритмы, использующиеся для решения различных классов задач, созданы в эпоху однопроцессорных ЭВМ и предполагают последовательное выполнение арифметических операций. Появление многопроцессорных вычислительных систем различного типа потребовало переоценки разработанных численных алгоритмов, оценки их эффективности и возможности адаптации к новым архитектурам. Сложность этой проблемы состоит также в том, что новые архитектуры ЭВМ создаются на основе разных подходов к их проектированию. Поэтому в настоящее время возможности адаптации большинства существующих методов к различным типам вычислительных систем изучены недостаточно. Более просто могут быть распараллелены явные схемы. Например, при явном способе вычислений на новом шаге исходная задача может быть разбита на отдельные сегменты или модули, каждый из которых может быть решен независимо (с точностью до вычислений на границах сегментов и передачи данных от одного сегмента к другим). Таким образом, появление новых вычислительных средств привело к возникновению нового направления в вычислительной математике — созданию параллельных алгоритмов решения многомерных задач.

Сформулируем основные проблемы, возникающие при разработке численных алгоритмов:

— развитие математического аппарата и его применение для обоснования численных алгоритмов;

— построение расчетных сеток с заданными свойствами (например, адаптирующихся к решению) для решения многомерных задач в сложных многосвязных геометрических областях;

— адаптация существующих и разработка новых экономичных численных алгоритмов решения задач в рамках различных физико-математических моделей, в том числе для ЭВМ различной архитектуры.

Следует отметить, что и при разработке других элементов технологической цепочки моделирования программирование — ЭВМ достигнуты значительные успехи. Современное состояние языков программирования и перспективы их развития изложены в [35]. Быстродействие ЭВМ и вычислительных систем постоянно возрастает с экспоненциальной скоростью за счет как совершенствования элементной базы, так и создания принципиально новых архитектур вычислительных структур и систем моделирования. Наряду с созданием суперЭВМ с пиковой производительностью до 10^{12}–10^{15} флоп разрабатываются вычислительные средства кластерного типа, объединяющие в сети ЭВМ различной мощности: персональные ЭВМ, рабочие станции и т. д. Следует ожидать создания новых вычислительных средств и усиления их влияния на развитие численных алгоритмов и моделей, а также создания экспертных систем и систем моделирования в различных областях человеческой деятельности.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Яненко Н. Н.** Избранные труды. Математика. Механика. М.: Наука, 1991.
2. **Самарский А. А.** Математическое моделирование и вычислительный эксперимент // Вестн. АН СССР. 1979. № 5. С. 38–49.
3. **Белоцерковский О. М.** Численное моделирование в механике сплошных сред. М.: Наука, 1984.
4. **Яненко Н. Н., Коновалов А. Н.** Модульный принцип построения программ как основа создания пакета прикладных программ решения задач механики сплошной среды // Комплексы программ математической физики. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1972. С. 46–54.
5. **Jamesson A.** The evalution of computational methods in aerodynamics // Trans ASME. J. Appl. Mech. 1983. V. 50. P. 1051–1070.
6. **Balley F. R.** Status and projections of the NAS program: Technishe Memorandum Report / NASA; Amer. Res. Center, CA. 1986. N 88339.
7. **Kutler P.** A perspective of teoretical and applied computational fluid dynamics // AIAA J. 1985. V. 23, N 3. P. 328–341.
8. **Comput.** Fluid Dynamic J. 2001. V. 9, N 1: Proceeding of International symposium on CFD 1999.
9. **Comput.** Fluid Dynamics J. 2001. V. 9, N 4: Advancend method for computational fluid dynamics. Special issue.
10. **Рождественский Б. Л., Яненко Н. Н.** Системы квазилинейных уравнений. М.: Наука, 1968.
11. **Ковеня В. М.** Методы вычислений (дополнительные главы). Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 1995.
12. **Белоцерковский О. М.** Математическое моделирование на суперкомпьютерах (опыт и тенденции) // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2000. Т. 40, № 8. С. 1221–1236.
13. **Numerical** methods in fluid dynamics. Washington; L.: Hemissphere Publ. Corp., 1979.
14. **Ковеня В. М., Яненко Н. Н.** Метод расщепления в задачах газовой динамики. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1981.

15. **Яненко Н. Н.** Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1967.
16. **Самарский А. А.** Теория разностных схем. М.: Наука, 1989.
17. **Годунов С. К., Рябенький В. С.** Разностные схемы: Введение в теорию. М.: Наука, 1973.
18. **Марчук Г. И.** Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1980.
19. **Fletcher C. A.** Computational techniques for fluid dynamics. N. Y.: Springer Verlag, 1988. V. 1, 2.
20. **Самарский А. А., Николаев Е. С.** Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.
21. **Шокин Ю. И., Яненко Н. Н.** Метод дифференциального приближения. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1985.
22. **Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М.** Численные методы. М.: Наука, 1987.
23. **Марчук Г. И., Шайдуров В. В.** Повышение точности решений разностных схем. М.: Наука, 1979.
24. **Бабенко К. И.** Основы численного анализа. М.: Наука, 1986.
25. **Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я. и др.** Численные методы решения многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1989.
26. **Liseikin V. D.** Grid generation method. Berlin: Springer Verlag, 1999.
27. **Лисейкин В. Д.** Обзор методов построения структурных адаптивных сеток // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1996. Т. 36, № 1. С. 3–41.
28. **Гильманов А. Н.** Методы адаптивных сеток в задачах газовой динамики. М.: Наука, 2000.
29. **Самарский А. А., Колдоба А. В., Повещенко Ю. А. и др.** Разностные схемы на нерегулярных сетках. Минск: Критерий, 1996.
30. **Толстых А. И.** Компактные разностные схемы и их применение в задачах гидродинамики. М.: Наука, 1996.
31. **Паасонен В. И.** Схема третьего порядка аппроксимации на неравномерной сетке для уравнений Навье — Стокса // Вычисл. технологии. 2000. Т. 5, № 5. С. 78–85.
32. **Harten A.** A high resolution scheme for the computation of werk solution of hyperbolic conservation laws // J. Comput. Phys. 1983. V. 49, N 3. P. 357–393.
33. **Карамышев В. Б.** Монотонные схемы и их приложения в газовой динамике. Новосибирск: Изд-во Новосиб. гос. ун-та, 1994.
34. **Пинчуков В. И., Шу Ч.-В.** Численные методы высших порядков для задач аэрогидродинамики. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000.
35. **Кауфман В. Ш.** Языки программирования: Концепции и принципы. М.: Радио и связь, 1993.

Поступила в редакцию 24/XII 2001 г.