УДК 004.925.8

Г.Я. Тулученко, канд. техн. наук, доц.,
А.Н. Хомченко, д-р физ.-мат. наук, проф.,
Херсон. нац. техн. ун-т

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСИММЕТРИЧНЫХ БЛУЖДАНИЙ ПО СЕТКАМ СРЕДСТВАМИ СКМ MATLAB

Г.Я. Тулученко, А.Н. Хомченко. **Моделювання несиметричних блукань по сітках засобами СКМ MATLAB.** Проведено порівняльний аналіз спектрів кубатурних формул для трикутних скінченних елементів, побудованих за різними підходами. Для виконання тестових експериментів у середовищі СКМ MATLAB розроблено ряд процедур.

G.Ya. Tuluchenko, A.N. Khomchenko. **The simulation of asymmetrical random walks on grids by the means of SCM MATLAB.** The comparative analysis of cubature formulas spectrums for the triangular finite elements constructed on the basis of different approaches is carried out. For performance of test experiments in the environment of SCM MATLAB a number of procedures is developed.

В структуре эффективных алгоритмов восстановления функций с использованием методов Монте-Карло центральное место занимают схемы случайных блужданий и формулы барицентрического усреднения. Так, например, приближенные решения краевых задач для уравнения Лапласа [1], для уравнения Пуассона-Больцмана [2], для других эллиптических уравнений в частных производных [3] строятся с помощью схемы “случайных блужданий по сферам”, которая реализует непрерывные случайные блуждания.

Для решения перечисленных и многих других краевых задач также используется метод конечных элементов (МКЭ) [4]. Часто аналитическое доказательство адекватности полученного этим методом решения прикладной задачи является невозможным, что обусловливает необходимость получения решений альтернативными методами.

Аппроксимирующие свойства приближенного решения, получаемого МКЭ, во многом определяются свойствами матриц КЭ. Поэтому целесообразно тестирование на адекватность не только конечного решения, но и полученных альтернативными способами промежуточных результатов. В этом случае КЭ рассматривается как самостоятельный вычислительный шаблон.

Для треугольных КЭ высших порядков известны классические кубатурные формулы типа Ньютона-Котеса, спектры весовых коэффициентов которых получены разными способами: интегрированием базисных функций элемента, построенных методом неопределенных коэффициентов [4] и в результате барицентрического усреднения спектров ординарных моделей [10, 11, 12]. В спектрах кубатурных формул для КЭ высших порядков, полученных первым способом, часто присутствуют нулевые и отрицательные коэффициенты, что, как известно, отрицательно сказывается на точности этих формул. Кубатурные формулы, построенные вторым способом, имеют только положительные спектры. Однако известны примеры, когда альтернативные кубатурные формулы [8] демонстрируют большую степень приближения, чем их классические аналоги. Целесообразность поиска альтернативных кубатурных формул во многом определяется возможностью повышения точности кубатурных формул за счет выбора базисных функций КЭ в соответствии со свойствами подынтегральных функций [9].

Известны возможности воспроизведения спектров кубатурных формул с помощью схем случайных блужданий [10].

Предлагается анализ возможностей восстановления спектров весовых коэффициентов кубатурных формул с помощью схем несимметричных случайных блужданий путем синтеза идей методов барицентрического усреднения и Монте-Карло. Лаконичный язык программирования СКМ MATLAB является в данном случае удачным средством описания необходимых циклических процедур.

Для треугольных конечных элементов лагранжевого типа второго-четвертого порядков (см. рисунок) известны кубатурные формулы типа Ньютона-Котеса, спектры весовых коэффициентов которых получены интегрированием базисных функций этих КЭ [4], соответственно:

$$\iint_D f(x;\,y)\,dS \approx \mathrm{mes}\,D\left(\frac{9}{20}f_0+\frac{1}{20}\sum_{i=1}^{3}f_i+\frac{2}{15}\sum_{i=4}^{6}f_i\right); \tag{1}$$

$$\iint_D f(x;\,y)\,dS \approx \mathrm{mes}\,D\left(\frac{9}{20}f_0+\frac{1}{30}\sum_{i=1}^{3}f_i+\frac{3}{40}\sum_{i=4}^{9}f_i\right); \tag{2}$$

$$\iint_D f(x;\,y)\,dS \approx \mathrm{mes}\,D\left(0\sum_{i=1}^{3}f_i-\frac{1}{45}\sum_{i=4}^{6}f_i+\frac{4}{45}\sum_{i=7}^{12}f_i+\frac{8}{45}\sum_{i=13}^{15}f_i\right), \tag{3}$$

где $\mathrm{mes}\,D$ — мера области D (площадь треугольника);
dS — элемент площади.

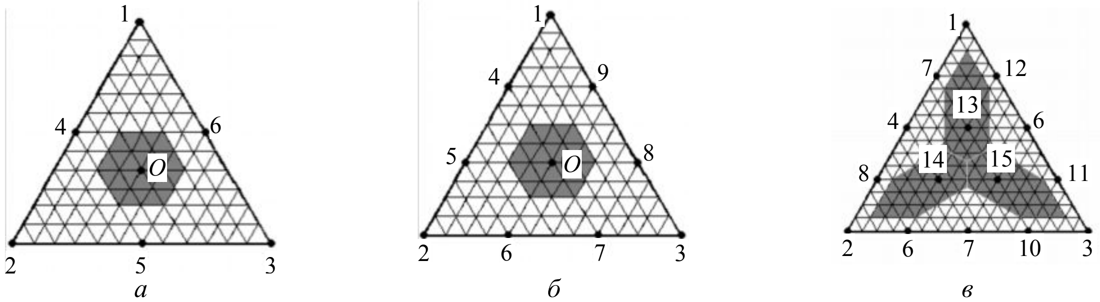

Рис. 1. Треугольные конечные элементы (заштрихованы) второго порядка (а), третьего порядка (б), четвертого порядка (в); точки 0, 13, 14, 15 — внутренние узлы интегрирования

На основании метода барицентрического усреднения двумерных аналогов формулы центральных прямоугольников и формулы трапеций получены альтернативные кубатурные формулы [7, 10, 11] для КЭ:

второго порядка —

$$\iint_D f(x;\,y)\,dS \approx \mathrm{mes}\,D\left(\frac{3}{7}f_0+\frac{1}{21}\sum_{i=1}^{3}f_i+\frac{1}{7}\sum_{i=4}^{6}f_i\right); \tag{4}$$

третьего порядка —

$$\iint_D f(x;\,y)\,dS \approx \mathrm{mes}\,D\left(\frac{9}{20}f_0+\frac{1}{20}\sum_{i=1}^{3}f_i+\frac{1}{15}\sum_{i=4}^{6}f_i\right); \tag{5}$$

четвертого порядка —

$$\iint_D f(x;\,y)\,dS \approx \mathrm{mes}\,D\left(\frac{1}{45}\sum_{i=1}^{3}f_i+\frac{1}{15}\sum_{i=4}^{6}f_i+\frac{1}{45}\sum_{i=7}^{12}f_i+\frac{1}{5}\sum_{i=13}^{15}f_i\right); \tag{6}$$

$$\iint_D f(x;\,y)\,dS \approx \mathrm{mes}\,D\left(\frac{1}{15}\sum_{i=1}^{3}f_i+\frac{2}{45}\sum_{i=4}^{6}f_i+\frac{1}{90}\sum_{i=7}^{12}f_i+\frac{1}{5}\sum_{i=13}^{15}f_i\right); \tag{7}$$

$$\iint_D f(x;\,y)\,dS \approx \mathrm{mes}\,D\left(\frac{1}{80}\sum_{i=1}^{3}f+\frac{4}{45}\sum_{i=4}^{6}f_i+\frac{1}{45}\sum_{i=7}^{12}f_i+\frac{3}{6}\sum_{i=13}^{15}f_i\right). \tag{8}$$

Метод восстановления значений гармонической в некоторой области функции с помощью схем случайных блужданий естественным образом распространяется на построение формул приближенного интегрирования.

На КЭ накладывается сетка с треугольными ячейками, узлы которой совпадают с узлами КЭ (см. рисунок). С ростом порядка КЭ изменяются правила блуждания вброшенной частицы по узлам наложенной сетки. Схемы симметричных блужданий Я. Бернулли, которые позволяют восстанавливать спектры весовых коэффициентов кубатурных формул билинейных КЭ [11], не работают при наличии внутренних узлов интегрирования сетки. Для центрированных КЭ предложена схема несимметричных случайных блужданий с наличием области притяжения правильной формы в виде шестиугольника вокруг центрального узла. При попадании блуждающей частицы в область притяжения маршруты переходов, направленные к барицентру *O* области, ассоциируются с большими переходными вероятностями.

За счет изменения размеров области и величин переходных вероятностей для преимущественных маршрутов в области притяжения можно восстановить спектры кубатурных формул (1) и (4) [11].

Однако, при увеличении порядка КЭ возможности описанной схемы несимметричных блужданий ограничены, например известно, что на распределение стохастических частот частиц, поглощенных узлами КЭ, влияет размер ячеек сетки [10]. Для крупных ячеек ощутимо влияние границы области, после выхода на которую по условию частица совершает одномерные симметричные блуждания.

Для КЭ четвертого порядка использование правильной формы области притяжения оказалось вовсе невозможным. При такой форме область притяжения не оказывает влияния на частоты поглощения частиц узлами в вершинах КЭ. Деформация области притяжения отвечает существованию окрестностей узлов интегрирования, относительные площади которых равны весовым коэффициентам оптимальных кубатурных формул [12]. Можно предположить, что для обеспечения возможностей восстановления различных спектров весовых коэффициентов с ростом порядка КЭ области притяжения должны иметь невыпуклую форму.

Все спектры кубатурных формул (1)…(8) восстановлены с помощью моделей несимметричных блужданий по сеткам треугольных КЭ, которые реализованы с помощью программируемой среды системы компьютерной математики MATLAB.

Операции приближенного интегрирования являются одними из центральных при реализации алгоритмов МКЭ. Вычислительные эксперименты, проведенные с помощью СКМ MATLAB, показали, что альтернативные кубатурные формулы (4)…(8) обеспечивают точность, достаточную для инженерных расчетов. Тестирование производилось путем сравнения результатов точного и приближенного интегрирования как по отдельным КЭ [7], так и после их ансамблирования в МКЭ.

Таким образом, синтез идей метода барицентрического усреднения и метода Монте-Карло позволяет строить кубатурные формулы с положительными, физически правдоподобными спектрами весовых коэффициентов, разрабатывать вычислительные схемы, экспериментально подтверждающие существование альтернативных базисов КЭ. Возникновение аномальных спектров весовых коэффициентов до недавнего времени считалось неизбежным при увеличении порядков интерполяции серендиповых и лагранжевых КЭ.

Результаты компьютерного моделирования несимметричных блужданий по треугольным КЭ подтверждают существование не только классических кубатурных формул, но и их альтернативных аналогов. Вычислительные эксперименты показали, что с ростом порядка КЭ модель несимметричных случайных блужданий значительно усложняется и становится многопараметрической. Характеристики областей притяжения внутренних узлов лагранжевых КЭ высоких порядков хорошо согласуются с теоретическими положениями о весовых коэффициентах оптимальных кубатурных формул.

Литература

1. Соболь И.М. Численные методы Монте-Карло. — М.: Наука, 1973. — 312 с.
2. Hwang C.-O. Monte Carlo Methods for the Linearized Poisson-Boltzmann Equation: Prepr. / Hwang C.-O., Mascagni M., Simonov N.A. // Elsevier Science. — 20003. — 19 p.

3. Booth T. E. Regional Monte Carlo solution of elliptic partial differential equations // J. Comput. Phys. — 1982. — № 47. — P. 281 — 290.
4. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. — М.: Мир, 1979. — 392 с.
5. Хомченко А.Н. Модели взвешенного усреднения и кубатурные формулы / Хомченко А.Н., Цыбуленко О.В. // Геометр. та комп'ютер. моделювання. — Харків: ХДУХТ, 2002. — Вип. 2. — С. 19 — 24.
6. Крючковський В.В. Спрощена побудова кубатур Ньютона-Котеса на дискретних елементах / Крючковський В.В., Цибуленко О.В. // Приклад. геометрія та інженер. графіка. — Мелітополь: ТДАТА, 2003. — Вип. 4, т. 18. — С. 135 — 139.
7. Хомченко А.Н. Альтернативні кубатури Ньютона на елементах вищих порядків / Хомченко А.Н., Крючковський В.В., Тулученко Г.Я. // Геометр. та комп'ютер. моделювання. — Харків: ХДУХТ, 2004. — Вип. 7. — С. 26 — 30.
8. Тулученко Г.Я. Обчислювальні експерименти з ваговими коефіцієнтами кубатур на скінченних елементах вищих порядків / Тулученко Г.Я., Хомченко А.Н. // Геометр. та комп'ютер. моделювання. — Харків: ХДУХТ, 2005. — Вип. 11. — С. 37 — 43.
9. Крылов В.И. Приближенное вычисление интегралов. — М.: Наука, 1967. — 500 с.
10. Хомченко А.Н. Стохастичні моделі для комп'ютерної діагностики вагових спектрів кубатур / Хомченко А.Н., Тулученко Г.Я. // Вісн. Харк. нац. ун-ту. Сер. "Мат. моделювання. Інформ. технології. Автоматиз. системи упр.". — Харків: Харк. нац. ун-т, 2004. — Вип. 3, № 629. — С. 33 — 38.
11. Хомченко А.Н. Геометрія випадкових блукань у центрованих дискретних елементах / Хомченко А.Н., Зуб П.М., Цибуленко О.В. // Сучас. проб. геометр. моделювання: Матеріали міжнар. наук.-практ. конф. — Львів: НУ "Львів. політехніка", 2003. — С. 104 — 106.
12. Бабенко В.Ф. Асимптотически точная оценка остатка наилучших для некоторых классов функций кубатурных формул // Мат. заметки. — 1976. — Т.19, № 3. — С. 313 — 322.

Поступила в редакцию 3 марта 2005 г.