

Санкт-Петербургский государственный университет

Программная Инженерия
Кафедра Системного программирования

Канашин Дмитрий Анатольевич

Об одном алгоритме адаптации сеток

Курсовая работа

Научный руководитель:
ст. пр. Куликов Е. К.

Санкт-Петербург
2020

Оглавление

Введение	3
1. Постановка задачи	5
2. Описание рассматриваемого алгоритма	6
3. Функции с экспоненциальным пограничным слоем и сетка Шишкина	8
3.1. Функции с экспоненциальным пограничным слоем	8
3.2. Сетка Шишкина	8
4. Программная реализация	10
5. Численные эксперименты	12
5.1. Функции, предложенные автором алгоритма	12
5.2. Функции с пограничным слоем	14
Заключение	18
Список литературы	20

Введение

Далеко не всегда получается провести натуральный физический эксперимент в полном объёме. В таких случаях, исследователи прибегают к математическому моделированию физических процессов и явлений на ЭВМ. Основным методом моделирования остаются численные методы. При таком подходе, одной из основных проблем является нахождение оптимальной расчётной сетки [9]. Важность построения качественной сетки наблюдается в том числе и в задачах газовой динамики, где решение может содержать области с большими градиентами (пограничный слой).

Выделяют несколько подходов к адаптации сеток [5]. Один из них подразумевает построение приближения на новой сетке на основе информации, полученной на старой сетке путём переинтерполяции решения. Другой подход основан на повышении густоты сетки в областях локализации особенностей решения (именно так, например, строятся сетки Шишкина, рассматриваемые в работе далее). Третий — наиболее сложный способ, который иногда называют методом дробления и слияния ячеек — сводится к включению в сетку дополнительных узлов в окрестностях локализации особенностей решения с одновременным удалением лишних узлов в регионах, где решение не содержит особенностей.

В 2017 году на достаточно престижной международной конференции ICAT-2017, проводимой в США, был предложен новый алгоритм адаптации сеток [3], который можно отнести к первому типу приведённой выше классификации, который основан на использовании сплайнов и опирающийся на результаты продолжительных исследований других членов исследовательского коллектива автора (см., например, работы [6] и [7]). Идея алгоритма заключается в построении начального приближения кусочно-полиномиальной функцией (кубическим сплайном) на избыточной сетке, после чего из этой сетке выбираются лишь некоторые узлы в соответствии с их рангом — некой мерой того, насколько необходим с точки зрения точности получаемой аппроксимации. После

этого финальное приближение представляется сплайном, полученным методом наименьших квадратов по выбранному набору узлов. Если полученная точность приближения оказывается неприемлемой, то количество выбираемых узлов с наиболее высоким рангом увеличивается и строится новое приближение, пока точность не окажется подходящей.

К сожалению, по неизвестным причинам данный доклад не был подкреплён публикацией как в сборнике трудов конференции, так и в других источниках. В презентации доклада результаты проводимого эксперимента описаны крайне скудно и не позволяют понять, как именно он проводился, а также оценить на их основе перспективность рассматриваемого алгоритма адаптации сеток. Кроме того, не были рассмотрены особенности работы алгоритма на некоторых функциях специального вида — например, имеющих большие градиенты в пограничном слое, которые часто встречаются в практических приложениях.

1. Постановка задачи

Проводимое исследование ставит следующие задачи:

1. Ввиду невозможности получить доступ к авторской реализации рассматриваемого алгоритма, разработать собственную и воспроизвести, насколько это возможно, численные эксперименты автора.
2. Исследовать качество адаптации сетки и точность рассматриваемого алгоритма для нескольких функций специального вида, обладающих пограничным слоем, особенности аппроксимации которых являются предметом интереса ряда современных исследований.
3. Исследовать, возможно ли получить более точный результат аппроксимации и более удачную адаптивную сетку, если в качестве сетки для построения начального приближения использовать не равномерную сетку, а специальную кусочно-равномерную, принадлежащую к классу сеток Шишкина.

2. Описание рассматриваемого алгоритма

Первый шаг алгоритма подразумевает построение начального приближения. Предлагается использовать в качестве начального приближения такую функцию s_0 , которая являлась бы решением экстремальной задачи 1 с ограничениями типа неравенства для некоего малого параметра ε .

$$s_0 = \operatorname{argmin}\{ \|s''\|_{L_2} : |s(x_i) - f(x_i)| \leq \varepsilon, \quad i = 1, \dots, m \} \quad (1)$$

Известна следующая теорема, которая указывает способ построения начального приближения:

Теорема 1 Пусть s_0 — условный экстремум задачи 1. Тогда:

1) s_0 - стационарная точка Лагранжиана:

$$L(s, \lambda) = \int_0^1 (s''(t))^2 dt + \sum_{i=1}^m \lambda_i^+ (s(t_i) - f(t_i) - \varepsilon_i) + \sum_{i=1}^m \lambda_i^- (-s(t_i) + f(t_i) - \varepsilon_i)$$

2) $\lambda_i^+ = 0$ и/или $\lambda_i^- = 0$ для каждого i .

3) s_0 - кубический сплайн дефекта 1 с узлами $t_i \in T$ в точках x_i , таких что $\lambda_i \neq 0$, где $\lambda_i := \lambda_i^- - \lambda_i^+$.

Далее необходимо ранжировать узлы сетки по степени их значимости для начального приближения. Автором алгоритма предложена следующая формула:

$$r_i := (t_{i+1} - t_{i-1})^3 |\lambda_i| \quad (2)$$

При этом для вычисления значений множителей Лагранжа используется следующий факт:

Теорема 2 Пусть s_0 - кубический сплайн, являющийся условным экстремумом задачи 1. Тогда для $t_i \in T$ либо $\lambda_i = 2(s_0'''(t_i + 0) - s_0'''(t_i - 0))$, либо $s_0'(t_i) = 0$.

На последнем этапе работы алгоритма выбирается желаемое число узлов адаптивной сетки N и строится сплайн s_f методом наименьших

квадратов [2], в качестве узлов которого используются $N - 2$ внутренних узла кубического сплайна s_0 с наибольшим рангом и узлы на концах отрезка. Если указанное приближение оказывается недостаточно точным ($\|s_0 - s_f\|_\infty > \frac{\varepsilon}{2}$), то значение N увеличивается на единицу и построение s_f повторяется.

Кратко алгоритм может быть изложен следующим образом:

1. Найти такой кубический сплайн s_0 , что $\|s_0 - f\|_\infty \leq \frac{\varepsilon}{2}$ для некоторого заранее выбранного допустимого значения ошибки ε
2. Посчитать ранг r_i узлов сетки кубического сплайна s_0 по формуле 2
3. Определить количество узлов N для адаптивной сетки
4. Построить сплайн s_f методом наименьших квадратов [2], выбрав в качестве узлов внутренние $N - 2$ узла кубического сплайна s_0 с наибольшим рангом и узлы на концах отрезка
5. Если $\|s_0 - s_f\|_\infty > \frac{\varepsilon}{2}$, то увеличить число узлов N и вернуться к предыдущему шагу

3. Функции с экспоненциальным пограничным слоем и сетка Шишкина

3.1. Функции с экспоненциальным пограничным слоем

В данной работе особый интерес представляют функции, которые являются решениями сингулярно возмущенных краевых задач. Такие краевые задачи нередко возникают в задачах моделирования физических явлений, в особенности конвективно-диффузионных процессов с преобладающей конвекцией (подробнее об этом см. монографию [8]). Решения сингулярно-возмущенных краевых задач могут быть представлены в виде суммы так называемых регулярной и сингулярной составляющих [11]:

$$u(x) = q(x) + \Phi(x), \quad x \in [0, 1],$$

$$|q^{(j)}(x)| \leq C_1, \quad |\Phi^{(j)}(x)| \leq \frac{C_2}{\varepsilon^j} e^{-\frac{\alpha x}{\varepsilon}} \quad 0 \leq j \leq 3,$$

где $\alpha > 0$, $\varepsilon \in (0, 1]$, C_2 не зависит от ε .

Решения сингулярно-возмущенных задач имеют большие градиенты в области пограничного слоя. Из-за этого применение стандартных подходов к аппроксимации нередко оказываются неудачными. В последние десятилетия исследовательским коллективом во главе с А. И. Задориным предложен ряд специальных подходов к приближению таких функций (см. [1] и библиографию этой работы), основанных на использовании специальной кусочно-равномерной сетки, называемой сеткой Шишкина, которая является сгущённой в области пограничного слоя.

3.2. Сетка Шишкина

Формально сетку Шишкина можно определить следующим образом. Рассмотрим сетку, содержащую $N + 1$ узел. Для $i = 0, \dots, N - 1$ её шаг

определяется формулами:

$$h_i = \frac{2\sigma}{N}, \quad i = 0, \dots, \frac{N}{2} - 1$$
$$h_i = \frac{2(1-\sigma)}{N}, \quad i = \frac{N}{2}, \dots, N-1,$$
$$\sigma = \min\left\{\frac{1}{2}, \frac{2\varepsilon}{\alpha} \ln N\right\}$$

Такая сетка, исходя из построения, является равномерной на отрезках $[0, \sigma]$ и $[\sigma, 1]$ и кусочно-равномерной на всём интервале. Подробно вопросы построения сеток Шишкина и их применения в прикладных задачах, в том числе не только на отрезке, но и в прямоугольной области, были рассмотрены в работе [4].

4. Программная реализация

К сожалению, авторы рассматриваемого алгоритма не опубликовали в открытом доступе исходные коды алгоритма. На письмо с просьбой предоставить программную реализацию для проведения дополнительных численных экспериментов ответа не последовало. Поэтому пришлось реализовывать рассматриваемый алгоритм самостоятельно.

В качестве языка программирования для разработки был выбран Python, поскольку он является удобным инструментом для быстрой разработки небольших приложений, а также содержит ряд стандартных библиотек, позволяющих не реализовывать самостоятельно некоторые стандартные математические операции. В частности, был использован ряд методов из библиотеки `scipy`: `CubicSpline` для построения кубического сплайна, `make_lsq_spline` — для построения сплайна методом наименьших квадратов. Также использовались стандартные методы численного дифференцирования сплайн-функций. Также для работы с массивами вроде их сортировки использовались средства библиотеки `numpy`.

Для проведения численных экспериментов на сетке Шишкина соответствующая функциональность была реализована самостоятельно, так как о существовании готовых программных пакетов для какого-либо языка программирования ни автору исследования, ни его научному руководителю не известно.

Программная реализация разбита на следующие модули:

- Реализация алгоритма
- Постановка экспериментов
- Обработка входных данных
- Вспомогательный модуль с функциями, по которым возможна постановка опыта

Модуль с реализацией алгоритма *variational_approach* используется в модуле для постановки экспериментов и состоит только из класса

VariationalApproach, содержащий в себе необходимые атрибуты и методы для работы алгоритма, в том числе сам алгоритм.

Основной модуль для проведения экспериментов *make_experiment* взаимодействует с модулем реализации алгоритма и содержит в себе построение необходимого для алгоритма набора данных точек, в том числе вспомогательные функции для построения равномерной сетки и кусочно-равномерной сетки Шишкина. Входные данные принимаются в специальном виде в формате *txt*. Эти входные данные предварительно обрабатываются с помощью модуля *file_ops* для корректного представления в основном модуле.

Дополнительный модуль работы с функциями *functions* выделен отдельно для упрощения и расширяемости постановки экспериментов в основном модуле. В целом структура модулей устроена таким образом, чтобы было постановку экспериментов можно было быстро масштабировать и на другие функции.

Отметим, что построенная реализация алгоритма может быть в некоторых случаях ускорена путём распараллеливания: возможно независимо вычислять наименьшее подходящее количество узлов на каждом из промежутков возможных значений количества узлов и из них выбирать наименьшее. Вычисление рангов узлов сетки может быть также проведено независимо (а значит, параллельно) для различных узлов.

Исходный код разработанной реализации алгоритма доступен по **ссылке**.

5. Численные эксперименты

В качестве функций для численных экспериментов были рассмотрены функция Рунге, которая была рассмотрена в качестве примера автором в его докладе, а также функции с экспоненциальным пограничным слоем на равномерной и кусочно-равномерной сетке Шишкина.

5.1. Функции, предложенные автором алгоритма

В презентации автора алгоритма [3] представлено лишь два результата работы алгоритма. Результаты представлены лишь графически: в виде количества узлов адаптивной сетки и ошибки полученной аппроксимации, а также графиков исходных функций с отмеченными на оси абсцисс адаптированными узлами, без какого-либо указания характера входных данных. 1.

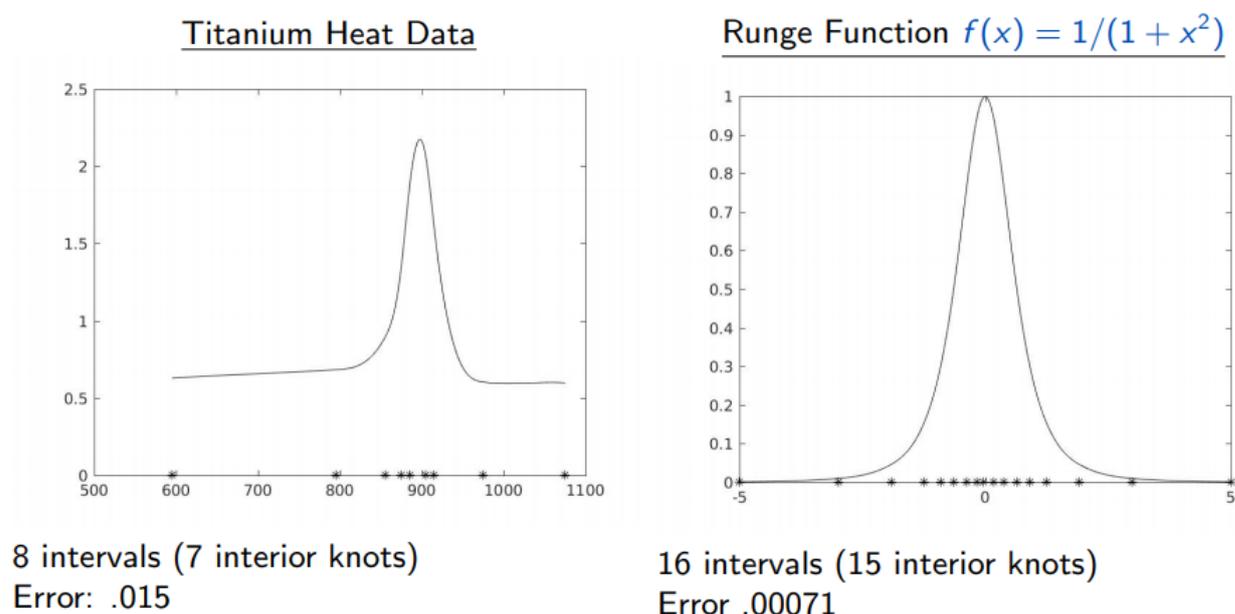


Рис. 1: Результаты алгоритма, представленные автором, на функции Рунге и на данных по титану

В качестве одной из представленных в презентации автора приближений показана аппроксимация датасета с данными поведения титановой пластины при нагреве (Titanium Heat Data). Воспроизвести указан-

ный эксперимент затруднительно, поскольку имеющейся информации о постановке этого эксперимента автором недостаточно: неизвестно, какие точки указанного набора были использованы в качестве входных данных алгоритма и, соответственно, на какой сетке был построен кубический сплайн, а также какой поднабор точек использовался для вычисления ошибки построенного приближения. Эти претензии также уместны и для второго эксперимента (на функции Рунге), но здесь указанные проблемы критически важны, так как в данном случае мы имеем дискретный (и не слишком объёмный) набор данных, а не непрерывную функцию.

Прежде чем проводить дальнейшие эксперименты, укажем способ определения точности приближения, соответствующий авторскому. Будем считать, что ошибка аппроксимации между функцией $f(x)$ и её приближением $g(x)$ на промежутке $[a, b]$ вычисляется следующим образом:

$$\|f - g\|_{\infty} = \sup_{x \in [a, b]} |f(x) - g(x)|$$

На начальном этапе алгоритма вычисляется ошибка err_bound между кубическим сплайном и исходной функцией на сетке, в 10 раз более мелкой, чем исходная. На одном из последних шагов алгоритма ошибка между кубическим сплайном и сплайном, построенным методом наименьших квадратов, вычисляется на той же сетке, что и err_bound . При этом алгоритм завершает свою работу именно тогда, когда при m узлах ошибка между кубическим и финальным сплайном не превосходит по своему значению err_bound .

При проведении эксперимента была поставлена задача получить близкие к результатам автора значения точности. Для этого в алгоритме была выбрана постоянная граница ошибки err_bound , чтобы в итоге ошибка между $f(x)$ и $s_f(x)$ была не более $8.00 * 10^{-4}$. Самым близким по количеству узлов к результату автора является представленный в таблице 1 результат. Отметим, что количество узлов в адаптивной сетке оказалось практически таким же, как и в оригинальном эксперименте.

Изначальное кол-во узлов	Оптимальное кол-во узлов	Точность
37	17	$6.99 * 10^{-4}$

Таблица 1: Результаты по функции Рунге

5.2. Функции с пограничным слоем

В качестве функций, являющимися решениями задач сингулярно возмущенных краевых задач, были выбраны следующие функции:

$$u(x) = \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) + e^{-\frac{x}{\varepsilon}} \quad (3)$$

и

$$u(x) = x + \frac{w(x) - w(1)}{1 - w(1)}, \quad w(x) = e^{-\frac{x}{\varepsilon}} \quad (4)$$

с параметром $\varepsilon = 0.01$ и $\varepsilon = 0.001$.

Выбор указанных функций обусловлен тем, что именно они рассматривались в качестве модельных в целом ряде ранее проведенных экспериментов у нескольких авторов (см. [1], [4], [12]).

Точность аппроксимации в представленных результатах высчитывается как отклонение исходной функции $f(x)$ и сплайна $s_f(x)$, построенного методом наименьших квадратов в соответствии с алгоритмом. Отметим, что на начальном этапе на равномерной сетке фиксируется ошибка между кубическим сплайном $s_0(x)$ и исходной функцией $f(x)$, поэтому про итоговую точность вычисления может быть установлено следующее тождество:

$$\|f - s_f\|_{\infty} = \|f - s_0 + s_0 - s_f\|_{\infty} \leq \|f - s_0\|_{\infty} + \|s_0 - s_f\|_{\infty} \leq \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon$$

Результаты поставленных экспериментов приведены в таблицах 2 - 9.

Отметим, что для функций 3 и 4 оптимальное количество узлов в адаптивной сетке получилось небольшим, потому что ошибка между s_0 и f получилась достаточно большая, а значит и допускаемая ошибка между s_0 и s_f была большой, чего можно было достичь при и небольшом

количестве узлов. Когда изначальное количество узлов было достаточно большим, чтобы ошибка между s_0 и f (как например при 257 узлах в таблицах 2 и 6) была не такой уж большой, то и для достижения схожей ошибки между s_0 и s_f понадобилось большее количество оптимальных узлов.

Изначальное кол-во узлов	Оптимальное кол-во узлов	Точность
17	3	$7.59 * 10^{-1}$
33	3	$3.21 * 10^{-1}$
65	3	$7.30 * 10^{-2}$
129	7	$9.52 * 10^{-3}$
257	80	$8.28 * 10^{-4}$

Таблица 2: Результаты по функции $\cos(\frac{\pi x}{2}) + e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$ на равномерной сетке с параметром $\varepsilon = 0.01$

Изначальное кол-во узлов	Оптимальное кол-во узлов	Точность
17	3	1.73
33	3	1.55
65	3	1.27
129	3	$8.87 * 10^{-1}$
257	3	$4.49 * 10^{-1}$

Таблица 3: Результаты по функции $\cos(\frac{\pi x}{2}) + e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$ на равномерной сетке с параметром $\varepsilon = 0.001$

Изначальное кол-во узлов	Оптимальное кол-во узлов	Точность
17	7	$1.53 * 10^{-2}$
33	14	$1.07 * 10^{-3}$
65	43	$1.86 * 10^{-4}$
129	99	$1.61 * 10^{-5}$
257	217	$6.50 * 10^{-7}$

Таблица 4: Результаты по функции $\cos(\frac{\pi x}{2}) + e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$ на кусочно-равномерной сетке Шишкина с параметром $\varepsilon = 0.01$

Изначальное кол-во узлов	Оптимальное кол-во узлов	Точность
17	9	$2.45 * 10^{-1}$
33	14	$2.57 * 10^{-2}$
65	26	$2.66 * 10^{-3}$
129	80	$2.61 * 10^{-4}$
257	203	$2.09 * 10^{-5}$

Таблица 5: Результаты по функции $\cos(\frac{\pi x}{2}) + e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$ на кусочно-равномерной сетке Шишкина с параметром $\varepsilon = 0.001$

Изначальное кол-во узлов	Оптимальное кол-во узлов	Точность
17	3	$7.59 * 10^{-1}$
33	3	$3.21 * 10^{-1}$
65	3	$7.30 * 10^{-2}$
129	3	$9.52 * 10^{-3}$
257	3	$8.28 * 10^{-4}$

Таблица 6: Результаты по функции $x + \frac{w(x)-w(1)}{1-w(1)}$, $w(x) = e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$ на равномерной сетке с параметром $\varepsilon = 0.01$

Изначальное кол-во узлов	Оптимальное кол-во узлов	Точность
17	3	1.73
33	3	1.56
65	3	1.28
129	3	$8.87 * 10^{-1}$
257	3	$4.49 * 10^{-1}$

Таблица 7: Результаты по функции $x + \frac{w(x)-w(1)}{1-w(1)}$, $w(x) = e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$ на равномерной сетке с параметром $\varepsilon = 0.001$

Изначальное кол-во узлов	Оптимальное кол-во узлов	Точность
17	7	$1.53 * 10^{-2}$
33	13	$1.07 * 10^{-3}$
65	25	$1.86 * 10^{-4}$
129	53	$1.61 * 10^{-5}$
257	116	$6.50 * 10^{-7}$

Таблица 8: Результаты по функции $x + \frac{w(x)-w(1)}{1-w(1)}$, $w(x) = e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$ на кусочно-равномерной сетке Шишкина с параметром $\varepsilon = 0.01$

Изначальное кол-во узлов	Оптимальное кол-во узлов	Точность
17	9	$2.45 * 10^{-1}$
33	14	$2.57 * 10^{-2}$
65	26	$2.66 * 10^{-3}$
129	57	$2.61 * 10^{-4}$
257	114	$2.09 * 10^{-5}$

Таблица 9: Результаты по функции $x + \frac{w(x)-w(1)}{1-w(1)}$, $w(x) = e^{-\frac{x}{\varepsilon}}$ на кусочно-равномерной сетке Шишкина с параметром $\varepsilon = 0.001$

Заключение

Результаты исследования

В результате проведенного исследования был реализован алгоритм адаптации сеток, предложенный в работе [3] и поставлен ряд численных экспериментов по анализу его работы.

Были проведены эксперименты, повторяющие, насколько это возможно в условиях недостаточной формализации, эксперименты автора алгоритма. Получены сопоставимые по количеству узлов и точности получаемого приближения адаптации. Также рассматриваемый алгоритм был проанализирован на нескольких известных функциях, имеющих большие градиенты в области пограничного слоя. Установлено, что из-за невысокой точности начального приближения получаемые адаптации оказываются малоинформативными.

Реализация алгоритма была доработана возможностью строить начальное приближение на сетках Шишкина, которые нередко используются при аппроксимации функций с большими градиентами. Построенные на сетках Шишкина начальные приближения оказались значительно более точными для функций с экспоненциально пограничным слоем, чем на равномерных сетках.

Продолжение работы

Предложенная в данной работе идея использования сеток Шишкина для построения начальной аппроксимации s_0 — не единственная возможная модификация алгоритма, направленная на повышение качества адаптации сеток для аппроксимации функций, обладающих пограничным слоем.

Одной из возможных альтернатив может являться использование в качестве начального приближения сплайна специального вида [11], спроектированного именно для аппроксимации подобных функций. Также может быть исследован вопрос о применении для построения начального приближения техник локальной сплайновой аппроксимации,

например, активно изучаемых в последние годы минимальных сплайнов [10]. При этом придётся пересмотреть и подход к ранжированию узлов, поскольку текущие формулы, весьма вероятно, рассчитаны на использование именно того начального приближения, которое было предложено автором алгоритма.

Список литературы

- [1] Blatov I. A., Zadorin A. I., Kitaeva E. V. On the uniform convergence of parabolic spline interpolation on the class of functions with large gradients in the boundary layer // Numerical Analysis and Applications. — 2017. — Vol. 10(2). — P. 108–119.
- [2] Eberly D. Least-Squares Fitting of Data with B-Spline Curves. — 2005. — Access mode: <https://www.geometrictools.com/Documentation/BSplineCurveLeastSquaresFit.pdf> (online; accessed: 28.08.2020).
- [3] Kersey S. Free-Knot Spline Approximation. — 2017. — Access mode: <https://drive.google.com/file/d/0Byz2P-Rfk27jMEF3ZU5BSGNPbDdvZ3N0c01VYVdma0ZGbzRr/view> (online; accessed: 28.08.2020).
- [4] Kopteva N., O' Riordan E. Shishkin meshes in the numerical solution of singularly perturbed differential equations // International Journal of Numerical Analysis and Modeling. — 2010. — Vol. 7. — P. 393—415.
- [5] Thompson J. F., Warsi Z. A., Mastin C. V. Numerical Grid Generation, Foundations and Applications. — Amsterdam: North-Holland, 1985.
- [6] Yingkang Hu. Convexity preserving approximation by free knot splines // SIAM Journal on Mathematical Analysis. — 1991. — Vol. 22. — P. 1183—1191.
- [7] Yingkang Hu. An algorithm for data reduction using splines with free knots // IMA Journal of Numerical Analysis. — 1993. — Vol. 13. — P. 365–381.
- [8] Бутузов В. Ф. Асимптотические методы в теории сингулярных возмущений. — Высшая школа, 1990.
- [9] Вальгер С. А., Фёдорова Н. Н. Применение алгоритма адаптации

расчётной сетки к решению уравнений Эйлера // Вычислительные технологии. — 2012. — Т. 17. — С. 24–33.

- [10] Демьянович Ю. К. Локальная аппроксимация на многообразии и минимальные сплайны. — Издательство Санкт-Петербургского университета, 1994.
- [11] Задорин А. И. Аналог кубического сплайна для интерполяции функций с погранслойной составляющей // Сеточные методы для краевых задач и приложения. Материалы Десятой Международной конференции. — 2014.
- [12] Куликов Е. К., Макаров А. А. О приближённом решении одной сингулярно возмущённой краевой задачи // Дифференциальные уравнения и процессы управления. — 2020. — Т. 1. — С. 91–120.