

VILNIAUS GEDIMINO TECHNIKOS UNIVERSITETAS

Natalija TUMANOVA

NETIESINIŲ MATEMATINIŲ MODELIŲ GRAFUOSE SKAITINĖ ANALIZĖ

DAKTARO DISERTACIJA

FIZINIAI MOKSLAI,
MATEMATIKA (01P)



Vilnius LEIDYKLA
TECHNIKA 2012

Disertacija rengta 2007–2012 metais Vilniaus Gedimino technikos universitete.

Mokslinis vadovas

prof. habil. dr. Raimondas ČIEGIS (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, fiziniai mokslai, matematika – 01P).

VG TU leidyklos TECHNIKA 2006-M mokslo literatūros knyga
<http://leidykla.vgtu.lt>

ISBN 978-609-457-169-5

© Tumanova, N. 2012

© VG TU leidykla TECHNIKA, 2012

VILNIUS GEDIMINAS TECHNICAL UNIVERSITY

Natalija TUMANOVA

THE NUMERICAL ANALYSIS
OF NONLINEAR MATHEMATICAL
MODELS ON GRAPHS

DOCTORAL DISSERTATION

PHYSICAL SCIENCES,
MATHEMATICS (01P)



Vilnius LEIDYKLA
TECHNIKA 2012

Doctoral dissertation was prepared at Vilnius Gediminas Technical University in 2007–2012.

Scientific supervisor

Prof Dr Habil Raimondas ČIEGIS (Vilnius Gediminas Technical University, Physical Sciences, Mathematics – 01P).

Santrauka

Disertacijoje nagrinėjami nestacionarių matematinių modelių nestandartinėse srityse skaitiniai sprendimo algoritmai. Uždavinio formulavimo sritis yra šakotosios struktūros (ang. *branching structures*), kurių išsiskaidymo taškuose apibrėžiami tvermės dėsniai. Tvermės dėsnių skaitinė analizė ir nestandartinių kraštinių sąlygų analizė skiria nagrinėjamus uždavinius nuo klasikinių aprašytų literatūroje matematinės fizikos uždavinių.

Disertacijoje suformuluoti uždaviniai apima skaitinių algoritmų šakotose struktūrose su skirtingais srautų tvermės dėsniais stabilumo ir konvergavimo tyrimą, lygiagrečiųjų algoritmų sudarymą ir taikymą, skaitinių schemų uždaviniams su nelokalėmis integralinėmis sąlygomis tyrimą. Disertacijoje sprendžiami taikomieji neurono sužadinimo ir impulso relaksacijos lazerio apšviestame puslaidininkyje uždaviniai, netiesinio modelio identifikavimo uždavinys.

Disertaciją sudaro įvadas, penki skyriai, rezultatų apibendrinimas, literatūros šaltinių sąrašas ir autorės publikacijų disertacijos tema sąrašas.

Įvadiniamе skyriuje formuluojama problema, aprašytas tyrimų objektas, darbo aktualumas, formuluojami darbo tikslai ir uždaviniai, aprašoma tyrimų metodika, darbo mokslinis naujumas, darbo rezultatų praktinė reikšmė, pateikti ginamieji teiginiai ir disertacijos struktūra. Pabaigoje pristatomi pranešimai konferencijose disertacijos tema.

Pirmajame skyriuje pateikta matematinių modelių nestandartinėse srityse arba su nestandartinėmis sąlygomis apžvalga. Antrajame skyriuje aprašyti trys skaitiniai algoritmai tiesiniam paraboliniam uždaviniui šakotose struktūrose: svorinis neišreikštinis algoritmas ir du prediktoriaus – korektoriaus tipo algoritmai, grindžiami skirtingu srities padalijimu. Pateikiama algoritmų stabilumo ir konvergavimo analizė. Trečiajame skyriuje aprašytos lygiagrečios algoritmų versijos, lygiagrečiųjų algoritmų efektyvumo ir išplečiamumo analizė, aprašytas neurono sužadinimo skaitinis eksperimentas. Ketvirtajame skyriuje nagrinėjamas vienmatis parabolinis uždavinys su nelokalija integraline kraštine sąlyga. Neišreikštinės schemos analizė atliekama su skirtingomis nelokaliosios sąlygos koeficientų reikšmėmis. Penktajame skyriuje ištirtas krūvininko rekombinacijos lazerio apšviestame puslaidininkyje uždavinys, kuris dėl savo netiesiškumų pavidalo yra panašus į jaudrios ląstelės modeliavimo uždavinį, pateikiama skaitinės schemos analizė, sprendžiamas modelio identifikavimo uždavinys.

Tyrimų rezultatai paskelbti septyniuose moksliniuose straipsniuose, iš kurių šeši – recenzuojamuose mokslo leidiniuose. Šie rezultatai pristatyti trylikoje konferencijų.

Abstract

The numerical algorithms for non-stationary mathematical models in non-standard domains are investigated in the dissertation. The problem definition domain is represented by branching structures with conjugation equations considered at the branching points. The numerical analysis of the conjugation equations and non-classical boundary conditions distinguish considered problems among the classical problems of mathematical physics presented in the literature.

The scope of the dissertation covers the investigation of stability and convergence of the numerical algorithms on branching structures with different conjugation equations, the construction and implementation of parallel algorithms, the investigation of the numerical schemes for the problems with non-local integral conditions. The modeling of the excitation of neuron and photo-excited carrier decay in a semiconductor, also the problem of the identification of nonlinear model are considered in the dissertation.

The dissertation consists of an introduction, five chapters, main conclusions, bibliography and the list of the author's publications. Introductory chapter covers the problem formulation and the object of research, the topicality of the thesis, the aims and objectives of the dissertation, the methodology of research, scientific novelty and the practical value of the achieved results. The defended thesis and structure of the dissertation are given in this chapter. The first chapter presents the overview of mathematical models in the non-standard domains or with non-classical boundary conditions. In second chapter the θ -implicit algorithm and two predictor-corrector algorithms for the linear parabolic problems on branching structures are given. The stability and convergence analysis of these algorithms is performed. The third chapter presents the parallel versions of the algorithms, the efficiency and scalability analysis of parallel algorithms, and the numerical simulation of neuron excitation. The fourth chapter deals with the one-dimensional parabolic problem with nonlocal integral boundary condition. The analysis of the implicit scheme is performed with different values of coefficients of the nonlocal boundary condition. The nonlinear model of excited carrier decay in a semiconductor is presented in chapter five. The analysis of the linearized numerical scheme and the results of the model fitting experiment are presented.

The research results have been published in 7 scientific articles, 6 of them in the reviewed scientific journals. The results have been presented at 13 conferences.

Turinys

IšVADAS	1
Problemos formulavimas	1
Darbo aktualumas	3
Tyrimų objektas	5
Darbo tikslas	5
Darbo uždaviniai	5
Tyrimų metodika	6
Darbo mokslinis naujumas	6
Darbo rezultatų praktinė reikšmė	7
Ginamieji teiginiai	7
Darbo rezultatų aprobavimas	7
Disertacijos struktūra	9
Padėka	9
1. MATEMATINIAI MODELIAI NESTANDARTINĖSE SRITYSE ARBA SU NEKLASIKINĖMIS KRAŠTINĖMIS SĄLYGOMIS	11
1.1. Matematiniai modeliai grafuose: neurono sužadinimo modeliai ..	12
1.1.1. Skaitiniai sprendimo metodai ir analizė	13
1.1.2. Šakotos struktūros	14
1.1.3. Algoritmai šakotose struktūrose	16
1.1.4. NEURON paketas	18

1.1.5. Lygiagretieji skaičiavimai	19
1.2. Nelokalsiosios kraštinės sąlygos	19
1.3. Modelio identifikavimas	21
1.4. Pirmojo skyriaus išvados ir disertacijos uždavinių formulavimas	22
2. PARABOLINIS UŽDAVINYS GRAFUOSE	25
2.1. Tiesinis parabolinis uždavinys grafe	26
2.2. Neišreikštinė schema	28
2.2.1. Neišreikštinės schemos realizacija	30
2.2.2. Aproksimacijos tikslumo analizė	31
2.2.3. Stabilumas ir konvergavimas maksimumo principu	33
2.2.4. Konvergavimo analizė normoje L_2	35
2.2.5. Konvergavimo analizė normoje H_1	39
2.2.6. Konvergavimo analizė normoje L_∞	41
2.2.7. Skaičiavimo eksperimentas	44
2.3. Prediktoriaus – korektoriaus algoritmas I	47
2.3.1. Parabolinis uždavinys	48
2.3.2. Lygiagretus prediktoriaus – korektoriaus algoritmas	49
2.3.3. Konvergavimo analizė normoje H_1	50
2.3.4. Konvergavimo analizė normoje L_∞	56
2.3.5. Srities skaidymo metodas	57
2.4. Prediktoriaus – korektoriaus algoritmas II	61
2.5. Antrojo skyriaus išvados	70
3. LYGIAGRETIEJI ALGORITMAI	73
3.1. Neišreikštinis algoritmas	73
3.2. Prediktoriaus – korektoriaus algoritmas I	76
3.3. Prediktoriaus – korektoriaus algoritmas II	78
3.4. Skaičiavimo eksperimentas	79
3.5. Netiesinio uždavinio skaičiavimas	83
3.5.1. Algoritmų tikslumo eksperimentinis palyginimas	84
3.5.2. Neurono sužadavimo skaitinis eksperimentas	87
3.6. Trečiojo skyriaus išvados	90
4. PARABOLINIS UŽDAVINYS SU NELOKALIAJA INTEGRALINE KRAŠTINE SĄLYGA	91
4.1. Koeficientai $a = 1, b = -1$	93
4.2. Koeficientai $a = 1, b = 1$	96
4.3. Koeficientai $a = 0, b = 1$	99

4.3.1. Ionkino diskrečioji schema	101
4.3.2. Skaičiavimo eksperimentas	102
4.4. Ketvirtojo skyriaus išvados	103
5. KRŪVININKŲ REKOMBINACIJOS MODELIS	105
5.1. Matematinis modelis	106
5.2. Skaitinis integravimas	109
5.3. Modelio identifikavimas	113
5.3.1. Parametrų identifikuojamumas	114
5.3.2. Skaičiavimo eksperimentas	118
5.4. Penktojo skyriaus išvados	120
BENDROSIOS IŠVADOS	123
LITERATŪROS SĄRAŠAS	125
AUTORĖS PUBLIKACIJŲ DISERTACIJOS TEMA SĄRAŠAS	133

Contents

INTRODUCTION	1
Problem Formulation	1
Topicality of the Research Work	3
Research Object	5
The Aim of the Work	5
The Tasks of the Work	5
Applied Methods	6
Scientific Novelty	6
Practical Value of Work Results	7
Statements Presented for Defence	7
Approval of the Work Results	7
The Scope of the Scientific Work	9
Acknowledgment	9
1. MATHEMATICAL MODELS IN THE NON-STANDARD DOMAINS OR WITH NON-CLASSICAL BOUNDARY CONDITIONS	11
1.1. Mathematical Models on Graphs: the Models of an Excitable Cell	12
1.1.1. Numerical Methods and Analysis	13
1.1.2. Branching Structures	14
1.1.3. Algorithms on Branching Structures	16
1.1.4. The NEURON Environment	18

1.1.5. Parallel Calculations	19
1.2. Nonlocal Boundary Conditions	19
1.3. Model Identification	21
1.4. Conclusions for Chapter 1 and Formulation of the Tasks of Dissertation	22
2. PARABOLIC PROBLEM ON GRAPHS	25
2.1. Linear Parabolic Problem on Graph	26
2.2. The Implicit Discrete Scheme	28
2.2.1. Implementation of the Implicit Scheme	30
2.2.2. The Truncation Error	31
2.2.3. Stability and Convergence by Maximum Principle	33
2.2.4. Convergence in L_2 Norm	35
2.2.5. Convergence in H_1 Norm	39
2.2.6. Convergence in L_∞ Norm	41
2.2.7. Numerical Experiment	44
2.3. The Predictor – Corrector Algorithm I	47
2.3.1. Parabolic Problem	48
2.3.2. Parallel Predictor – Corrector Algorithm	49
2.3.3. Convergence in H_1 Norm	50
2.3.4. Convergence in L_∞ Norm	56
2.3.5. Domain Decomposition Method	57
2.4. The Predictor – Corrector Algorithm II	61
2.5. Conclusions for Chapter 2	70
3. PARALLEL ALGORITHMS	73
3.1. The Implicit Algorithm	73
3.2. The Predictor – Corrector Algorithm I	76
3.3. The Predictor – Corrector Algorithm II	78
3.4. Numerical Experiment	79
3.5. Nonlinear Problem	83
3.5.1. The Experimental Comparison of the Accuracy of Algorithms	84
3.5.2. The Numerical Experiment of the Excitation of Neuron ..	87
3.6. Conclusions for Chapter 3	90
4. PARABOLIC PROBLEM WITH NONLOCAL INTEGRAL BOUNDARY CONDITION	91
4.1. Coefficients $a = 1, b = -1$	93

4.2. Coefficients $a = 1, b = 1$	96
4.3. Coefficients $a = 0, b = -1$	99
4.3.1. The Ionkin Discrete Scheme	101
4.3.2. Numerical Experiment	102
4.4. Conclusions for Chapter 4	103
5. MODEL OF EXCITED CARRIER DECAY	105
5.1. Mathematical Model	106
5.2. Numerical Integration	109
5.3. Model Identification	113
5.3.1. Identifiability of Parameters	114
5.3.2. Numerical Experiment	118
5.4. Conclusions for Chapter 5	120
GENERAL CONCLUSIONS	123
REFERENCES	125
LIST OF THE AUTHOR'S SCIENTIFIC PUBLICATIONS ON THE TOPIC OF DISSERTATION	133

Ivadas

Problemos formulavimas

Didžiosios dalies šiuolaikinių mokslo ir technikos uždavinių sprendimo ir tyrimo neįmanoma įsivaizduoti be matematinio modeliavimo. Sprendžiant taikomuosius uždavinius matematinis modelis daugeliu atvejų yra lygčių dalinėmis išvestinėmis sistema, atspindinti esminius tiriamojo objekto elgesio ypatumus tam tikroje taikymo srityje. Sistema turi būti papildoma apibrėžimo sritimi, kurioje ieškomas sprendinys, ir reikalingais pradiniais ir kraštiniais duomenimis, užtikrinančiais sprendinio vienatį.

Tiesioginis analizinis tokių modelių tyrimas yra įmanomas tik labai retais atvejais. Dažniausiai jis leidžia gauti tik kokybinius objekto elgesio ypatumus, kurie yra svarbūs, bet nepakankami. Tokiu būdu, plėtojantis matematinio modeliavimo srčiai, atsirado skaičiavimo metodų, leidžiančių gauti uždavinio pakankamai tikslų skaitinį sprendinį, poreikis. Kita vertus, būtent spartus kompiuterinių technologijų našumo ir prieinamumo augimas sąlygojo tokių platų sudėtingų matematinių modelių naudojimą mokslo, medicinos, inžinerijos ir verslo srityse.

Formaliai skaitinė analizė gali būti apibūdinama, kaip bendra matematikos ir kompiuterinių technologijų sritis, kuri kuria, analizuoja ir įgyvendina matematinių uždavinių skaitinio sprendimo algoritmus (Atkinson 1989). Skai-

tinės analizės sritys apima įvairius klausimus nuo grynai teorinių matematikos mokslų iki techninės ir programinės įrangos įtakos atskirų specifinių algoritmų realizacijai tyrimų.

Didelė šios disertacijos dalis skirta kraštinių uždavinių diferencialinėms lygtims grafuose skaitiniam sprendimui. Matematinų modelių grafuose ypatumas yra uždavinio apibrėžimo sritis – matematinės lygtys formuluojamos šakotose struktūrose, kurios gali būti aprašomos pasitelkus grafų teorijos terminiją (žr. 2.1 poskyrį). Tokios struktūros pasižymi sudėtingesne geometrija, kurios supaprastinimui yra taikomi srities skaidymo metodai. Taip pat išsišakojimo taškuose atsiranda papildomi tvermės dėsniai, kurių aproksimacija ir tyrimas įneša savo specifiką ir papildomus klausimus į uždavinio skaitinę analizę. Tokiose struktūrose yra formuluojami transportavimo siaurais vamzdžiais, elektros grandinės modeliavimo ir kiti uždaviniai, tačiau plačiausiai žinomi ir tiriami modeliai šakotose struktūrose yra neurono sužadavimo modeliai. Jau seniai žinoma, kad neuronas gali būti sėkmingai aprašytas šakota struktūra (1 pav.).



1 pav. Neurono struktūros vaizdavimas grafu

Fig. 1. Neuron represented by graph

Dėl neuronų geometrijos ypatumų, kai ląstelės segmentų ilgiai yra šimtus kartų didesni už skersmenis, taikomi lokaliai vienmačiai modeliai. Konstruojant reakcijos – difuzijos modelio šakotose struktūrose skaitinę aproksimaciją svarbiu uždaviniu tampa srautų tvermės dėsnių išsišakojimo taškuose skaitinė aproksimacija. Šis uždavinys yra panašus į parabolinių lygčių antrojo ir trečiojo tipo kraštinių sąlygų aproksimaciją, tačiau dar sudėtingesnis. Tokie modeliai dažnai pasižymi netiesinėmis savybėmis ir reikalauja papildomų skaičiavimų

norint aprašyti sprendinį tiesinių lygčių sistema ir kitomis algebros operacijomis. Modeliuojant ląstelių, sujungtų sudėtingais sinapsiniais ryšiais, grupes, smarkiai didėja struktūra kartu su skaičiavimų apimtimi. Todėl atsiranda poreikis ieškoti būdų, kaip efektyviai spręsti tiesinės algebros uždavinius ir algoritmų lygiagretinimas yra vienas iš sprendimo variantų.

Skaičiavimų apimtis taip pat sparčiai auga sprendžiant modelio identifikavimo uždavinį, kai uždavinys yra sprendžiamas šimtus ar tūkstančius kartų, siekiant nustatyti modelio parametrų reikšmes, su kuriomis gauti rezultatai geriausiai atitinka eksperimentinius duomenis. Modelio identifikavimo uždavinys dažnai yra iššūkis ne tik dėl didelės skaičiavimų apimties, bet ir dėl tinkamo optimizavimo algoritmo parinkimo bei ribotų parametrų identifikuojamumo galimybių.

Klasikiniai uždaviniai gali būti formuluojami ne tik nestandartinėse srityse, bet ir su nestandartinėmis kraštinėmis sąlygomis. Pastaraisiais dešimtmečiais aktyviai tiriami nelokalieji uždaviniai diferencialinėms lygtims dalinėmis išvestinėmis, kuriuose vietoje klasikinių kraštinių sąlygų naudojami sąryšiai tarp ieškomos funkcijos ir jos išvestinių ant srities kontūro ir srities viduje. Be abejo, uždavinių su neklasikinėmis kraštinėmis sąlygomis skaitinė analizė yra netrivialus uždavinys.

Darbo aktualumas

Darbe nagrinėjami paraboliniai modeliai nestandartinėse srityse arba su nestandartinėmis kraštinėmis sąlygomis. Nagrinėjamas vienmatis parabolinis reakcijos – difuzijos modelis šakotose struktūrose yra apibendrintas sužadavimo modelis, kurio vienas iš konkretesnių ir plačiausiai žinomų pavyzdžių yra Hodžkino ir Hakslio (Hodgkin, Huxley 1952) netiesinis modelis, aprašantis aksono sužadimą. Hodžkino ir Hakslio modelis yra pagrindas daugeliui kitų matematinių modelių, kurie aprašo skirtingų jonų kanalų, ne tik kalio ir natrio, veikimą. Kiekvienas iš papildomų jonų kanalų gali būti modeliuojamas analogiškai kalio ir natrio kanalams Hodžkino ir Hakslio modelyje. Todėl šis modelis yra aktyviai tiriamas praėjus daugiau nei 60 metų po paskelbimo, už šį darbą kūrėjai gavo Nobelio premiją fiziologijos srityje.

Tolimesniame modelio vystyme galima išskirti dvi pagrindines kryptis:

1. Modelio pritaikymas skirtingų tipų lastelėms įtraukiant naujų jonų kanalus, tų kanalų parametrų nustatymas ir veikimo tyrimas. Kanalo laidumo koeficientas, sklendžių kintamųjų pavidalas ir perėjimo greičio funkcijų pavidalas yra dažniausiai nežinomi ir nustatomi priderinant

modelį prie eksperimento duomenų.

2. Modelio lygčių sprendimas sudėtingose didelėse struktūrose, aprašančiose neuronų, sujungtų sudėtingais sinapsiniais ryšiais, grupes. Tokiuose uždaviniuose formuluojami skirtingi tvermės dėsniai išsišakojimo taškuose, kurie reikalauja papildomos analizės ir tyrimų.

Abiem atvejais skaičiavimai gali būti labai didelės apimties, todėl reikalingi specialūs skaičiavimo algoritmai ir šiuolaikinės lygiagrečiosios technologijos. Taip pat pastaraisiais metais dėl sparčiai besivystančių eksperimentinių tyrimų metodikų paskelbta gausybė informacijos apie neuronų anatomines ir biofizikines savybes, todėl, siekiant pritaikyti vis sudėtingesnius modelius prie eksperimentinių duomenų, reikia spręsti didelės apimties identifikavimo uždavinius. Nors šioje srityje yra sukurti modeliavimo paketai, tačiau dėl kompromisų tarp skaičiavimų kaštų ir algoritmų universalumo paketuose naudojami algoritmai turi savo spragų.

Šiame darbe nagrinėjama parabolinė vienmatė netiesinė reakcijos – difuzijos lygtis šakotose struktūrose su dviejų tipų tvermės dėsniais išsišakojimo taškuose. Šie dėsniai leidžia aprašyti kaip ir paprastą srautų persiskirstymą išsišakojimo taškuose, taip ir sudėtingesnę mazgą, kuriame vyksta reakcija. Antsisis tvermės dėsnis gali būti naudojamas aprašant somą neurono modelyje.

Tyrimų eigoje ištirtos svorinė ir dviejų tipų prediktoriaus ir korektoriaus baigtinių skirtumų schemos, aproksimuojančios matematinį modelį. Atlikta šių schemų stabilumo ir konvergavimo analizė, sudaryti ir realizuoti algoritmai. Nuoseklieji algoritmai yra išlygiagretinti, pateikta lygiagrečiųjų algoritmų efektyvumo ir išplečiamumo analizė.

Klasikinio parabolinio uždavinio analizė tampa sudėtingesne ne tik nagrinėjant nestandartinę sritį, bet ir naudojant nestandartines kraštines sąlygas. Pastaraisias dešimtmečiais ypač aktyviai tiriamos nelokalios kraštinės sąlygos. Šių uždavinių tyrimai sąlygojami ne tik teorinio intereso, bet ir praktinės būtinybės: daugelis fizikinių, cheminių, biologinių ir ekologinių procesų aprašomi diferencialinėmis lygtimis su nelokaliosiomis kraštinėmis sąlygomis. Darbe atlikta vienmačio parabolinio uždavinio su integraline kraštine sąlyga analizė, ištirtas skaičiavimo schemų stabilumas ir konvergavimas.

Nagrinėjant netiesinį sužadintų krūvininkų apšviestame puslaidininkyje rekombinacijos modelį įrodytas diferencialinio sprendinio apriorinis įvertis, atlikta linearizuotos schemos analizė, sprendžiamas netiesinio modelio parametrų nustatymo uždavinys.

Tyrimų objektas

Darbo tyrimo objektas yra skaitiniai metodai, skirti procesų modeliavimui šakotose struktūrose, sudarytų diskrečiųjų schemų stabilumas ir konvergavimas, jų pagrindu sudaryti lygiagretieji algoritmai; diskrečiųjų schemų, skirtų uždaviniams su nelokaliosioms kraštinėms sąlygoms aproksimuoti stabilumas ir konvergavimas; netiesinio modelio identifikavimo uždavinys.

Darbo tikslas

Disertacijos tikslas yra sudaryti ir realizuoti skaitinius algoritmus, skirtus paraboliniams uždaviniams nestandartinėse srityse arba su neklasikinėmis kraštinėmis sąlygomis spręsti, išnagrinėti sudarytų skaitinių schemų stabilumą ir konvergavimą; atlikti algoritmų lygiagretinimą ir ištirti lygiagrečiųjų algoritmų efektyvumą ir išplėčiamumą; išnagrinėti netiesinio matematinio modelio identifikavimo uždavinį.

Darbo uždaviniai

Igyvendinant numatytus darbo tikslus buvo sprendžiami šie uždaviniai:

1. Sudaryti ir ištirti skaitinius algoritmus tiesiniam paraboliniam modeliui šakotose struktūrose su skirtingais srautų tvermės dėsniais išsišakojimo taškuose.
2. Atlikti neurono sužadinimo skaitinį modeliavimą, pritaikyti šiam uždaviniui ir ištirti lygiagrečiuosius algoritmus.
3. Atlikti parabolinio uždavinio su nelokaląja integraline kraštine sąlyga skaitinę analizę, išnagrinėti skirtingus nelokalios sąlygos koeficientų reikšmių atvejus.
4. Atlikti netiesinio impulso relaksacijos puslaidininkyje skaitinį modeliavimą ir skaitinę analizę. Atlikti modelio identifikavimo eksperimentą.

Tyrimų metodika

Darbe atliktų tyrimų eigoje buvo taikomi diferencialinių lygčių dalinėmis išvestinėmis skaitiniai sprendimo metodai, jų konvergavimo ir stabilumo analizės metodai, taikomosios funkcinės analizės metodai, lygiagrečiųjų algoritmų konstravimo ir jų analizės metodai, globalios optimizacijos ir netiesinių matematinių modelių parametrų identifikujamumo nustatymo metodai. Skaitinių eksperimentų programos parašytos C++ kalba, naudojant lygiagrečiąją biblioteką MPI, grafų dalijimo įrankį `Metis`; kai kurie skaičiavimo rezultatai lyginami su NEURON paketo pagalba gautais rezultatais.

Darbo mokslinis naujumas

Disertacijoje išnagrinėti trys matematinių modelių šakotose struktūrose skaitinio sprendimo algoritmai ir jų lygiagretieji analogai. Atlikto darbo rezultatai papildė iki šiol gautus rezultatus tiriant šiuos ir panašius uždavinius.

Didelis dėmesys yra skiriamas tiesiniams modeliams grafuose, nes ląstelių sužadinimo modeliai pasižymi sąlyginiu tiesiškumu ir gali būti skaidomi į kelias tiesines sistemas. Daug mokslininkų nagrinėja skaitinius metodus sužadinimo modeliams, tačiau apsiribojama uždaviniais viename segmente. Disertacijoje ištirti du tvėrmės dėsniai išsišakojimo taškuose, jų skaitinei analizei atlikti pritaikyti būdai, naudojami tiriant antrojo ir trečiojo tipo kraštines sąlygas. Be tradiciškai taikomos šio tipo uždaviniams svorinės schemos ištirtos dvi prediktoriaus – korektorius tipo schemos, įrodytas šių schemų stabilumas ir sąlyginis konvergavimas.

Atliktas realizuotų skaičiavimo algoritmų grafuose lygiagretinimas ir lygiagrečiųjų algoritmų analizė. Skaičiavimo paketuose realizuoti lygiagretieji algoritmai nėra universalūs ir kai kuriais atvejais netinkami naudoti. Parodyta, kad superpozicija grindžiamos neišreikštinės skaičiavimo schemos lygiagretinimo efektyvumas yra pakankamai aukštas, todėl ji gali būti sėkmingai naudojama lygiagrečiuose skaičiavimuose.

Atlikta taškinio netiesinio uždavinio, aprašyto paprastųjų diferencialinių lygčių sistema, analizė: įrodytas sprendinio apriorinis įvertis, pasiūlyta linearizuota skaičiavimo schema, įrodytas schemos stabilumas ir konvergavimas.

Disertacijoje taip pat nagrinėjamas uždavinys su nelokaliąja integraline kraštine sąlyga. Atlikta sisteminga tokio tipo nelokalios sąlygos analizė visoje parametrų (a, b) plokštumoje. Pateikiama diskrečiosios neišreikštinės Eulerio schemos stabilumo analizė maksimumo normoje, pagerinti žinomi stabilumo

rezultatai. Integralinės kraštinės sąlygos atveju įrodytas uždavinio jautrumo integralinės sąlygos atžvilgiu įvertis, parodantis tik sąlyginį konvergavimą, ir pasiūlytas regularizuojantis sąryšis tarp diskrečiųjų žingsnių.

Darbo rezultatų praktinė reikšmė

Sudaryti ir realizuoti skaitiniai algoritmai, kurie leidžia modeliuoti reakcijos – difuzijos procesus šakotose struktūrose, tarp jų neurono sužadavimo procesą. Didelių struktūrų tyrimams realizuoti lygiagretieji algoritmai, pagrįsti duomenų lygiagretumo principu.

Realizuotas netiesinio sužadintų krūvininkų rekombinacijos modelio optimizavimo algoritmas. Pateikti parametrų identifikuojamumo tyrimo rezultatai rodo, kad ne visus modelio parametrus įmanoma nustatyti.

Ginamieji teiginiai

1. Diskrečiųjų matematinių modelių grafuose tyrimui taikytini metodai, naudojami tiriant diskrečiuosius modelius su antrojo ir trečiojo tipo kraštinėmis sąlygomis.
2. Realizuotų lygiagrečiųjų algoritmų grafuose efektyvumas daugiausiai priklauso nuo duomenų paskirstymo kokybės ir branduolių konkurencijos dėl bendros atminties.
3. Vienmatės parabolinės lygties su nelokaliaja integraline sąlyga diskrečiosios schemos stabilumo ir konvergavimo sritis priklauso nuo nelokalsios sąlygos koeficientų ženklų.
4. Netiesinio krūvininkų rekombinacijos modelio diskretusis sprendinys atkartoja pagrindines diferencialinio sprendinio savybes. Modelio parametrų identifikuojamumas su naudojamais eksperimentiniais duomenimis yra ribotas.

Darbo rezultatų aprobavimas

Tyrimai atlikti Vilniaus Gedimino technikos universitete. Su disertacijos tema susiję rezultatai paskelbti 7 moksliniuose straipsniuose: 6 straipsniai publikuoti recenzuojamuose mokslo leidiniuose, iš jų 5 – leidiniuose įtrauktuose į

MII *Web of Science* duomenų bazę. Autorės publikacijos pateiktos disertacijos pabaigoje.

Disertacijos tema perskaityti 13 pranešimų Lietuvos ir kitų šalių konferencijose:

1. Tumanova, N. Netiesiniai modeliai grafuose, 11-oji Lietuvos jaunųjų mokslininkų konferencija „Mokslas – Lietuvos ateitis“. Vilnius, 2008-03-28.
2. Tumanova, N. Hodgkin ir Huxley modelio grafuose skaitiniai sprendimo metodai, Lietuvos Matematikos Draugijos XLIX konferencija. Kaunas, 2008-06-25.
3. Čiegis, R.; Tumanova, N. On Predictor-Corrector Algorithms for Parabolic Problems on Graphs, in 8th European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications, ENUMATH 2009. Uppsala, Sweden, 2009-06-29.
4. Tumanova, N. Lygiagretus prediktoriaus-korektoriaus algoritmas parabolinėms lygtims grafuose spręsti, 13-oji Lietuvos jaunųjų mokslininkų konferencija „Mokslas – Lietuvos ateitis“. Vilnius, 2010-04-09.
5. Tumanova, N.; Čiegis, R. Parallel predictor corrector algorithms for systems of parabolic equations on graphs, 15th International Conference Mathematical Modelling and Analysis. Druskininkai, 2010-05-26.
6. Tumanova, N. Lygiagretus algoritmas paraboliniams uždaviniams grafuose spręsti, 1-oji jaunųjų mokslininkų konferencija „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai“. Vilnius, 2011-02-08.
7. Tumanova, N. Visiškai neišreikštinės schemos parabolinėms lygtims grafuose konvergavimo analizė, 14-oji Lietuvos jaunųjų mokslininkų konferencija „Mokslas - Lietuvos ateitis“. Vilnius, 2011-04-08.
8. Tumanova, N.; Čiegis, R. Parallel fully implicit algorithm for systems of parabolic equations on graphs, in 16th International Conference Mathematical Modelling and Analysis. Sigulda, Latvia, 2011-05-25.
9. Tumanova, N.; Čiegis, R. Visiškai neišreikštinės schemos parabolinėms lygtims grafuose konvergavimo analizė, Lietuvos Matematikos Draugijos LII konferencija. Vilnius, 2011-06-16.
10. Čiegis, R.; Tumanova, N. Parallel algorithms for nonlinear parabolic problems on graphs, in 9th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics. Torun, Poland, 2011-09-11.

11. Tumanova, N. Prediktoriaus ir korektoriaus srities skaidymo algoritmas parabolinėms lygtims grafuose spręsti, 2-oji jaunųjų mokslininkų konferencija „Fizinių ir technologijos mokslų tarpdalykiniai tyrimai“. Vilnius, 2012-02-14.
12. Tumanova, N.; Meilūnas, M.; Čiegis, R. Netiesinio sužadintų krūvininkų rekombinacijos modelio skaitinė analizė, 15-oji Lietuvos jaunųjų mokslininkų konferencija „Mokslas – Lietuvos ateitis“. Vilnius, 2012-04-26.
13. Tumanova, N.; Čiegis, R. The numerical analysis of nonlinear model of excited carrier decay, in 17th International Conference Mathematical Modelling and Analysis. Tallinn, Estonia, 2012-06-06.

Tyrimo rezultatai buvo pristatyti 4 Vilniaus Gedimino technikos universiteto Matematinio modeliavimo katedros seminaruose.

Disertacijos struktūra

Disertaciją sudaro įvadas, 5 skyriai, išvados ir literatūros sąrašas. Skyriai yra suskaidyti į poskyrius. Disertacijoje naudojama numeracija „skyrius.poskyris“, „skyrius.paveikslėlis“, „skyrius.lentelė“ ir t. t. Formulės yra numeruojamos kiekviename skyriuje atskirai, t. y. „skyrius.numeris“.

Darbo apimtis yra 135 puslapiai, kuriuose pateikta 209 formulės, 14 paveikslų ir 26 lentelės. Disertacijoje remtasi 98 kitų autorių literatūros šaltiniais.

Padėka

Esu dėkinga savo mokslinio darbo vadovui prof. habil. dr. Raimondui Čiegiui už skirtą laiką, pagalbą ir padėšinimą. Dėkoju doc. dr. Mečislavui Meilūnui už recenzavimą ir patarimus, padėjusius patobulinti disertaciją, prof. habil. dr. Vladimirui Gavriušinui už konsultacijas. Dėkoju Matematinio modeliavimo katedros kolektyvui už pagalbą ir palaikymą, taip pat už gerą atmosferą darbe. Ačiū mano artimiesiems už kantrybę ir supratingumą.

Matematiniai modeliai nestandartinėse srityse arba su neklasikinėmis kraštinėmis sąlygomis

Diferencialinių lygčių dalinėmis išvestinėmis teorijos pagrindinės sąvokos susiformavo tiriant klasikinius matematinės fizikos uždavinius ir šiai dienai yra pakankamai gerai ištirtos. Pagrindinių kraštinių sąlygų korektiškumas elipsinėms, parabolinėms ir hiperbolinėms lygtims yra nuodugnai išnagrinėtas daugelyje knygų ir straipsnių (Ladyzhenskaya 1973; Samarskii 2001). Tačiau šiuolaikiniai gamtos mokslų tyrimai sąlygoja kokybiškai naujų uždavinių formulavimo ir analizės būtinybę. Tai gali būti uždaviniai su neklasikinėmis kraštinėmis sąlygomis arba uždaviniai, formuluojami nestandartinėse srityse. Šio darbo interesų sritis yra reakcijos – difuzijos modeliai šakotose struktūrose, bei uždaviniai su nelokaliojomis papildomomis sąlygomis.

1.1. Matematiniai modeliai grafuose: neurono sužadavimo modeliai

Vienas žinomiausių taikomųjų uždavinių, aprašomas reakcijos – difuzijos – pernešimo lygtimis šakotose struktūrose, yra neurono simuliacijos modeliai, grindžiami Hodžkino ir Hakslio netiesinių lygčių sistema (Hodgkin, Huxley 1952):

$$C_m \frac{\partial V}{\partial t} = \frac{a}{2R_a} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - R(V), \quad (1.1)$$

$$R(V) = \bar{g}_K n^4 (V - V_K) + \bar{g}_{Na} m^3 h (V - V_{Na}) + \bar{g}_l (V - V_l), \quad (1.2)$$

$$\frac{dn}{dt} = \alpha_n(V)(1 - n) - \beta_n(V)n, \quad (1.3)$$

$$\frac{dm}{dt} = \alpha_m(V)(1 - m) - \beta_m(V)m, \quad \frac{dh}{dt} = \alpha_h(V)(1 - h) - \beta_h(V)h,$$

$$\alpha_n(V) = \frac{0,01(10 - V)}{\exp\left(\frac{10-V}{10}\right) - 1}, \quad \beta_n(V) = 0,125 \exp(-V/80),$$

$$\alpha_m(V) = \frac{0,1(25 - V)}{\exp\left(\frac{25-V}{10}\right) - 1}, \quad \beta_m(V) = 4 \exp(-V/18), \quad (1.4)$$

$$\alpha_h(V) = 0,07 \exp(-V/20), \quad \beta_h(V) = \frac{1}{\exp\left(\frac{30-V}{10}\right) + 1}.$$

Šio modelio lygtyse V žymi membranos veikimo potencialą, C_m – membranos elektrinę talpą, R_a – specifinę varžą, a – aksono spindulį. Netiesinis narys $R(V)$ žymi bendrą jonų srovės, einančios per membraną, tankį, o joninė srovė yra visų dalyvaujančių jonų rūšių individualių įnašų algebrinė suma. $\bar{g}_K$, $\bar{g}_{Na}$ ir $\bar{g}_l$ yra maksimalios pastovios joninių komponentų laidumo reikšmės, V_K , V_{Na} ir V_l yra pastovūs joninių komponentų pusiausvyros potencialai. Kintamieji m , n ir h yra bedimensiniai dydžiai, žymintys membranos kanalų „atvirumo“ laipsnį, jie kinta nuo 0 iki 1. Šių dydžių pokyčiai aprašomi pirmos eilės kinetinėmis lygtimis (1.3), kurių koeficientai priklauso nuo membranos potencialo V . Kadangi $\partial V / \partial x$ yra proporcingas ašinei srovei dydis, dažniausiai taikomos antrojo tipo kraštinės sąlygos. Pavyzdžiui, sąlygos

$$\left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=0} = -\frac{R_a I}{\pi a^2}, \quad \left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=L} = 0$$

rodo, kad taške $x = 0$ ląstelė sužadinama I mA srove, ir ašinė srovė nenu-
teka per tašką $x = L$. Kartais skaičiavimuose naudojama nutekančios srovės
(ang. *leaky end*) kraštinė sąlyga:

$$\pm \frac{\partial V}{\partial x} = \frac{R_a \bar{g}_l V(x, t)}{\pi a^2}.$$

Pritaikytas vienam kalmaro aksono segmetui modelis tapo visos teorijos,
paaiškinančios įtampos pokyčius ląstelėje, pagrindu. Šis darbas paskatino ki-
tų ląstelių elektrinių savybių teorinius ir eksperimentinius tyrimus. FitzHugh
(1961) pasiūlė supaprastintą modelį, palengvinantį didelių neuronų grupių si-
muliaciją ir potencialo generavimo dinamikos matematinį supratimą:

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dt} &= \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + V - V^3 - W + I_s, \\ \tau \frac{dW}{dt} &= V - a - bW, \end{aligned}$$

čia V žymi membranos veikimo potencialą, W – atkūrimo kintamąjį, I_s –
stimuliuojančios srovės tankį, o a ir b yra konstantos. Šio modelio paprastu-
mas leidžia ištirti sprendinio savybes, geometriškai pavaizduoti svarbias neu-
ronų sužadinimo ir smailių generavimo mechanizmo biologines savybes. Fi-
tzHugh modelio pagrindu sukurta nemažai neurono modelio variacijų, pavyz-
džiui, Morris-Lecar, Hindmarsh-Rose modeliai. Daug modelių yra aprašyta
neuromodeliavimui skirtose monografijose (Izhikevich 2007; Koch, Segev
1998; Koch 1999), kur yra nuodugnai išdėstyta modeliavimo eiga ir biofi-
zikinis pagrindas.

Tačiau, nepaisant daugybės kitų modelių, Hodžkino ir Hakslio modelis
yra plačiai taikomas ir dabar, kaip tiksliausiai aprašantis ląstelės veikimo po-
tencialo mechanizmą (Koch 1999). Šiuolaikiniai sudėtingi modeliai aprašo
didelį jonų kanalų skaičių (paprastai virš 10), o taikomiesiems skaičiavimams
yra sukurti skaičiavimo paketai. Hodžkino ir Hakslio modelio pagrindu mode-
liuojami širdies audiniai ir kitos ląstelės.

1.1.1. Skaitiniai sprendimo metodai ir analizė

Hodžkinas ir Haksli aproksimavo netiesinę sistemą baigtiniais skirtumais
ir apskaičiavo skaitinį sprendinį taikydami neišreikštinį metodą ir iteracijas.

Hodžkino ir Hakslio modelis pasižymi taip vadinamu sąlyginiu tiesiškumu
(ang. *conditionally linearity*). Tai reiškia, kad įtampos lygtis (1.1) yra tiesinė,

jei žinomi dydžiai m, n ir h . Taip pat lygtys (1.3) yra tiesinės, jei žinoma įtampos reikšmė. Ši savybė yra bendra netiesinių neuroninių modelių savybė. Ji leidžia suskirstyti netiesinį uždavinį į du paprastesnius tiesinius uždavinius. Kai sprendiniui aproksimuoti taikomas neišreikštinis Eulerio metodas, netiesiškumui paprastai taikomos Pikaro iteracijos. Mascagni (1990) įrodė Pikaro iteracijų metodo kartu su neišreikštinio Eulerio metodu konvergavimą L_2 normoje Hodžkino ir Hakslio lygtims, kai laiko diskretusis žingsnis yra pakankamai mažas.

Vieni pirmųjų Cooley, Dodge (1966) pasiūlė skaitinį algoritmą Hodžkino ir Hakslio sistemai spręsti naudojant Kranko-Nikolsono iteracinę schemą. Tai buvo pirmasis kartas, kai Hodžkino ir Hakslio lygtims buvo pritaikytas antros tikslumo eilės metodas. Taikant Kranko-Nikolsono metodą, lygčių (1.3) sprendinys apskaičiuojamas laiko sluoksnio viduriniame taške, o lygties (1.1) sprendinys – naujame sluoksnyje. Šis metodas taikomas be iteracijų, kai sistema yra sąlygiškai tiesinė. Šio metodo stabilumą ir konvergavimą sužadavimo modelių klasei įrodė Chiegis (1992). Tame pačiame darbe yra įrodytas neišreikštinio Eulerio metodo su Pikaro iteracijomis stabilumas ir konvergavimas maksimumo normoje.

Kranko-Nikolsono metodas yra vienas plačiausiai taikomų neuromodeliavime. Pastebima, kad taikant Kranko-Nikolsono metodą su pakankamai dideliu laiko diskretizacijos žingsniu, kartais atsiranda svyravimų (Koch, Segev 1998), vis dėlto yra atvejų, kai žingsnio pasirinkimas yra ribojamas.

Nors neišreikštinis Eulerio ir Kranko-Nikolsono metodai yra populiariausi, kai kurie tyrėjai taiko kitus, dažniausiai paprastesnius išreikštinius metodus. Hanslien *et al* (2005) įrodė sąlyginį išreikštinio Eulerio metodo stabilumą ir konvergavimą netiesiniam Hodžkino ir Hakslio modeliui. Koch, Segev (1998) savo monografijoje skiria visą skyrių skaitiniams metodams neuromodeliavime. Be paminėtų populiariausių metodų, čia galima rasti kitų metodų – kaip, pavyzdžiui, išreikštinio Eulerio, Rungės-Kuta, Giro, – aprašymą ir nuomonę apie jų tinkamumą šio tipo uždaviniams spręsti.

1.1.2. Šakotos struktūros

Apibrėžiant struktūrą, vienas neuronas gali turėti šimtus briaunų, vadina-
mų dendritais. Aksonai dažnai irgi pasižymi sudėtingesne geometrija ir šako-
jasi medžio pavidalu. Dendritai gali būti nagrinėjami kaip stipriai šakota struk-
tūra, kur kiekvienas kabelio segmentas gali būti nusakomas skirtingu spinduliu
ir membranos savybėmis.

Pirmas bandymas modeliuoti elektrostimuliacijos tyrimą dentritų medyje

buvo aprašytas Rall (1962). Jis aprašė taip vadinamą „ $d^{3/2}$ dėsnį“, kuris teigia, kad dendritų medis gali būti pakeistas ekvivalentiu cilindru, jei yra išpildytos sąlygos:

1. visų šakų elektrinės varžos yra vienodos;
2. visuose galuose galioja vienodos kraštinės sąlygos;
3. visi galai yra vienodai nutolę nuo medžio kamieno pradžios;
4. kiekviename išsišakojimo taške galioja sąryšis tarp pirminės ir dukterinių šakų skersmenų:

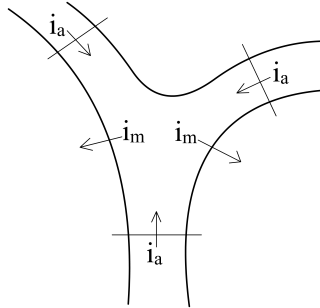
$$d_p^{3/2} = \sum_j d_{dj}^{3/2}.$$

Šakotos struktūros transformavimas į ekvivalentų cilindrą išsaugo duomenis apie membranos paviršių, t. y. medžio membranos paviršiaus plotas yra toks pat, kaip ir ekvivalentaus cilindro, kurio skersmuo lygus medžio kamieno skersmeniui, o ilgis lygus viso medžio ilgiui. Dėl to transformacijos metu nesikeičia visi kintamieji, susieti su membranos ploto vienetu, t. y. jonų kanalų tankiai, membranos varža ir elektrinė talpa (Koch 1999). Savo tyrimuose Rall pritaikė šią techniką tyriant katės α motoneuronus, kur somantinis ląstelės potencialas buvo modeliuojamas kaip vienas ekvivalentus cilindras.

Realūs dendritiniai medžiai retai atitinka visas sąlygas, reikalingas šiai transformacijai atlikti, dauguma neuronų pažeidžia mažiausiai vieną sąlygą. Todėl buvo sukurti metodai, leidžiantys nustatyti tikslų įtampos atsaką į stimuliaciją elektros srove. Tikslių metodų grupė naudoja superpozicijos principą, todėl daroma prielaida apie membranos tiesines savybes. Koch, Poggio (1985) pasiūlė algoritmą, apskaičiuojantį įtampos taške j atsaką į stimuliaciją elektros srove taške i Laplaso transformaciją bet kurios geometrijos dendritiniame medyje. Abbott *et al* (1991) pasiūlė kitą būdą, kai įtampos taške j atsakas į stimuliaciją srove taške i nustatomas įvertinant kabelio Gryno funkciją visuose keliuose nuo j iki i . Šie metodai, nors ir yra tikslūs, tačiau turi eilę trūkumų: kai srovė ateina iš n taškų, skaičiavimų apimtis auga n^2 greičiu, metodai naudoja membranos tiesines savybes ir negali būti taikomi, kai membranos savybės priklauso nuo įtampos.

Populiariausias šiuo metu metodas, grindžiamas skaičiavimo srities diskretizavimu, buvo aprašytas Rall (1964). Jis vadinamas sekcijiniu modeliavimu (ang. *compartmental modeling*) ir yra grindžiamas struktūros skaidymu į mažas dalis, kurių membranos yra izopotencialinės. Fizikinių savybių poky-

čiai ir įtampos pokyčiai atsiranda ne sekcijose, o tarp jų. Kiekvienoje sekcijoje



1.1 pav. Neurono ląstelės sekcija

Fig. 1.1. The compartment of the neuron

galioja Kirchhofo dėsnis, kuris iš esmės yra elektros srovės sekcijoje tvermės dėsnis:

$$c_j \frac{dv_j}{dt} + i_{ion_j} = \sum_k \frac{v_k - v_j}{r_{jk}}.$$

Šakota ląstelės struktūra atkuriama sujungiant sekcijas, iš kurių kiekviena gali turėti skirtingas anatomines ir biofizikines savybes, diskretizacijos taškų skaičių. Didelis sekcijinio metodo privalumas yra galimybė kombinuoti membranas, pasižyminčias skirtingomis savybėmis: taip neurono modelyje atsiranda somos, dendritai, aksonai, turintys įvairias savybes ir galintys turėti daug sinapsės taškų.

Šiuo metodu remiasi populiariausi neuromodeliavimo paketai NEURON (Hines, Carnevale 1997) ir GENESIS (Bower, Beeman 1998).

1.1.3. Algoritmai šakotose struktūrose

Aproksimuojant netiesinį modelį vienoje šakoje neišreikštiniu Eulerio ar Kranko-Nikolsono metodu gaunama trijstrižinė tiesinių lygčių sistema, kuri yra efektyviai sprendžiama perkelties metodu. Aproksimuojant diferencialinę lygtį šakotoje struktūroje gaunama lygčių sistemos matrica nėra trijstrižinė dėl mazgų, kurie jungia daugiau nei dvi šakas. Tokios sistemos sprendimas, ypač didelių realiųjų taikomųjų uždavinių atveju, reikalauja specialių metodų.

Hines (1984) pasiūlė metodą, skirtą šakotoms medžio tipo struktūroms be uždarų kontūrų. Metodo esmė yra tam tikras šakų numeracijos eiliškumas, kuriuo gauta specialaus pavidalo tiesinės sistemos matrica sprendžiama atlikus

$\mathcal{O}(N)$ operacijų, kur N yra bendras diskrečiųjų taškų skaičius, t. y. taip pat efektyviai, kaip ir nesišakojačios struktūros atveju. Tačiau taikant šį metodą, perskaičiuojamas sprendinys visoje struktūroje, nors didžioji neurono dalis gali būti ramybės būsenoje.

Mascagni (1991) pasiūlė algoritmą, grindžiamą superpozicijos principu. Reakcijos – difuzijos lygtis yra aproksimuojama neišreikštinio Eulerio metodu, tada taikant modifikuotą faktorizacijos algoritmą, sprendinys kiekvienoje briaunoje yra išreiškiamas sprendinių briaunos galuose suma. Gauname redukuotą tiesinių lygčių sistemą, kurios dydis yra lygus skirtingų sekcijų sujungimo taškų skaičiui. Kai sprendinys briaunų galuose yra apskaičiuotas, sprendinys kiekvienoje briaunoje randamas atlikus $\mathcal{O}(N)$ aritmetinių veiksmų, nes kiekvienoje atskiroje briaunoje sprendinys aprašomas trijstrižaine sistema. Skirtingai nei Hines pasiūlytas metodas, šis algoritmas leidžia nagrinėti struktūras su uždalais ciklais. Ši skaičiavimo schema nagrinėjama 2 skyriuje.

Naudojant Mascagni visiškai neišreikštinę baigtinių skirtumų schemą, kuri pasižymi geromis stabilumo savybėmis, kiekvienu laiko momentu reikia spręsti lygčių sistemą, kuri gausiai šakotos struktūros atveju gali būti didelė. Todėl, sprendžiant realius didelės apimties uždavinius, aktuali tampa sprendimo algoritmo išlygiagretinimas, kad būtų galima efektyviau panaudoti šiuolaikines daugiaprocesorines technologijas ir sutrumpinti skaičiavimo laiką, arba sėkmingai išspręsti didesnę uždavinį per tą patį laiką. Geromis lygiagretinimo savybėmis pasižymi prediktoriaus ir prediktoriaus – korektorius schemos, realizuojančios srities skaidymo (ang. *domain decomposition*) principą.

Prediktoriaus – korektorius metodas ir srities skaidymo metodai yra plačiai naudojami sprendžiant elipsines ir parabolines lygtis dalinėmis išvestinėmis daugiamatėse srityse (Dryja, Tu 2007; Mathew 2008; Quarteroni, Valli 1999; Zhuang 2006). Nauji šių idėjų plėtojimai yra pateikti darbuose (Vabishchevich 2008, 2011), kur nagrinėjami nestandartiniai srities skaidymo metodai su persidengiančiomis ir nepersidengiančiomis sritimis. Srities skaidymo ir prediktoriaus – korektorius metodai gali būti pritaikyti ir uždaviniams grafuose (Rempe, Chopp 2006; Shi, Liao 2006).

Rempe, Chopp (2006) aprašė prediktoriaus – korektorius schemą Hodžkino ir Hakslio lygtims šakotose struktūrose. Apibrėžimo sritis yra skaidoma išsišakojimo taškuose į vienmates briaunas, o sprendinys atskirose briaunose apskaičiuojamas perkelties metodu. Tokiu būdu algoritmo kaštai yra $\mathcal{O}(N)$. Publikacijoje pateiktos prediktoriaus – korektorius algoritmo realizacijos kartu su neišreikštinio Eulerio ir Kranko-Nikolsono schemomis. Parodė, kad skaičiavimo procedūra, kuri taikoma sritims su uždalais konturais, yra lengvai realizuojama ir lygiagretinama, o taip pat lengvai leidžia neskaičiuoti pusiausvy-

ros būsenoje esančių sričių, skaičiavimo schemas stabilumą ir konvergavimą autoriai nagrinėjo tik eksperimentiškai. Pateikti skaičiavimų rezultatai rodo tokį pat prediktoriaus – korektorius algoritmo konvergavimą, kaip ir neišreikštinės schemas. Tačiau be teorinės analizės liko atviras klausimas, ar visais atvejais išreikštinis prediktoriaus žingsnis neįneša reikšmingos paklaidos.

1.1.4. NEURON paketas

NEURON yra atskirų neuronų ir neuronų tinklų modeliavimo terpė, leidžianti konstruoti ir tirti modelius nesigilinant į skaitinių metodų ir programavimo klausimus. NEURON yra efektyvus įrankis, tiriant atskiras ląstelių dalis ir mažas ląstelių grupes, kurioms svarbi yra ląstelės geometrija ir membranos savybės. Jis gerai pritaikytas medžio pavidalo struktūroms (be uždaru kontūrų), kuriose membranų kanalų parametrai aproksimuojami dalimis tolydžiomis funkcijomis. Vartotojo nustatytos membranos biofizikinės savybės (pavyzdžiui, jonų kanalai) ir citoplazmos savybės (buferiai, pernešėjai) aprašomos diferencialinėmis ir kinetinėmis lygtimis, kurios yra sprendžiamos neišreikštiniais metodais (Hines, Carnevale 1997).

Vartotojas gali pasirinkti iš kelių integravimo metodų priklausomai nuo skaičiavimo prioritetų: tikslumo, stabilumo ar greitaveikos. Integravimo metodas pagal nutylėjimą yra neišreikštinis Eulerio metodas, kuris yra besąlygiškai stabilus ir rodo pakankamai gerus rezultatus net su gana dideliais integravimo žingsniais. Netiesiniams modeliams šis metodas naudojamas iteruojant. Kitas paketo skaičiavimo metodas su fiksuotu laiko diskretizavimo žingsniu yra Kranko-Nikolsono metodas, kurio tikslumo eilė laiko diskretizavimo žingsnio atžvilgiu yra antroji. Šis metodas naudojamas be iteracijų net ir netiesiniams modeliams. Nors Kranko-Nikolsono metodas formaliai yra stabilus, tačiau kartais stebimi dideli amplitudės svyravimai, kai diskretizavimo žingsnis yra didelis arba sprendinys kinta labai greitai. Tačiau daugumoje situacijų Kranko-Nikolsono metodas veikia korektiškai ir didesniu tikslumu, nei neišreikštinis Eulerio metodas. Uždaviniams, kuriems tinka Kranko-Nikolsono metodas, taip pat gali būti pritaikytas CVode adaptiviųjų žingsnių metodas (Cohen, Hindmarsh 1996). Šis metodas labiausiai tinka simuliacijoms, kai ląstelė yra žadinama impulsų serija, tarp kurių egzistuoja pakankamai ilgas laiko tarpas (ang. *spiking neuron model*).

NEURON paketas naudoja specialų sekcijų išdėstymo algoritmą, pasiūlytą Hines (1984), kurio suformuotos matricos Gauso eliminavimo algoritmas atliekamas per $\mathcal{O}(N)$ operacijų kiekviename laiko sluoksnyje. Nors šis metodas pasižymi puikiomis greičio savybėmis, tačiau netinka modeliams su uždaru

kontūru.

1.1.5. Lygiagretieji skaičiavimai

Gerai žinoma, kad smegenų veikla gali būti modeliuojama kaip sudėtinga elektros grandinė. Tačiau norint aprašyti smegenų veikimą, turime paisyti sudėtingos sinapsinių ryšių tarp atskirų neuronų architektūros ir neuronų netiesinių elektrinių savybių. Tokie modeliai priklauso nuo labai didelio parametrų skaičiaus. Neuronai gauna signalus iš tūkstančių kitų neuronų, kurie yra sujungti į sudėtingus medžius ir kuriems tiksliai aprašyti reikia tūkstančių sekcijų. Jeigu sprendžiamas atvirkštinis uždavinys, kuriuo siekiama nustatyti parametrų reikšmes pritaikant skaičiavimus prie eksperimentinių duomenų, skaičiavimų apimtis didėja eksponentiniu greičiu su kiekvienu papildomu parametru.

Akivaizdus šios problemos sprendimas yra lygiagrečiųjų technologijų, kurios dabar yra vis labiau prieinamos kiekvienam tyrėjui, naudojimas. Migliore *et al* (2006) aprašė NEURON terpei sukurtą modulį (MPI technologijos pagalba), skirtą lygiagretiems skaičiavimams. Pateikti skaičiavimo testai rodo beveik tiesinį išlygiagretintų skaičiavimų efektyvumą. Zhuang (2006) aprašė dar vieną Hines algoritmo lygiagretinimo būdą.

Labai įdomus projektas šioje srityje yra šiuo metu vykdomas Blue Brain projektas (Markram 2006), kurio vienas iš tikslų yra smegenų veiklos modeliavimas ir virtualių smegenų kūrimas. Modeliavimo eigoje naudojami biologiškai tikslūs, tačiau daug skaičiavimų reikalaujantys Hodžkino ir Hakslio tipo modeliai su daugiau nei dešimtimi skirtingų jonų kanalų. Šiuo metu paskelbta, kad pavyko sumodeliuoti žiurkės smeigtuko galvutės dydžio smegenų žievės skilties (apie 10000 neuronų, sujungtų $3 \cdot 10^7$ sinapsiniais ryšiais) veiklą. Šiame eksperimente buvo naudojamas Blue Gene kompiuteris, turintis 8192 procesorius.

1.2. Nelokaliosios kraštinės sąlygos

Situacija, kai elektros srovė yra leidžiama viename aksono gale, o atsakas matuojamas kitame aksono segmente, yra įdomi tik kaip modelinis uždavinys. Realiai kiekvienas neuronas būna sujungtas su šimtais ar net tūkstančiais kitų neuronų taip vadinamais sinapsiniais ryšiais. Dauguma šių sujungimų taškų išsidėstę ant dendritų ir somų, tačiau pasitaiko ir ant aksonų. Sinapsių modeliavimas ir tyrimas yra palyginus nauja ir dabar sparčiai besivystanti neuromoks-

lo šaka. Aprašyta įvairiausių sinapsių išdėstymo būdų: pavienės ir didelėmis grupėmis, dažnai ne dendritų galuose, o vidiniuose taškuose. Neurono gaunamas krūvis yra sumuojamas taikant netiesines erdvinio sumavimo (ang. *spatial summation*) arba sumavimo laike (ang. *temporal summation*) taisykles (Koch 1999); dažnai taip pat tenka paisyti sudėtingų plastiškumo efektų (ang. *plasticity*), kai ryšys tarp dviejų neuronų gali stiprėti arba silpnėti priklausomai nuo gaunamų signalų arba net nuo signalų, gaunamų arti išdėstytoje sinapsėje.

Iš esmės tai panašu į nelokalias sąlygas, siejančias ieškomos funkcijos ir jos išvestinių ant srities kontūro ir srities viduje reikšmes. Uždaviniai su nelokaliosiomis kraštinėmis sąlygomis plačiai studijuojami šiais laikais tokiose srityse, kaip šilumos laidumas ir termodinamika (Bouziani 1999; Cannon, Matheson 1993; Day 1992), plazmos fizika (Sun 1996), ir kitos (Dehghan 2005; Samarskii 1980). Daug pavyzdžių ir plačią įvairių sąlygų tipų apžvalgą savo vadovėlyje pateikė Sapagovas (2007).

Tarp nelokalijų uždavinių galima išskirti klasę uždavinių su integralinėmis sąlygomis. Nelokalios integralinės sąlygos galima traktuoti, kaip nelokalijų sąlygų apibendrinimą. Diferencialinių lygčių dalinėmis išvestinėmis su integralinėmis sąlygomis tyrimą pradėjo Cannon (1963), nagrinėdamas šilumos laidumo lygtį su sąlyga

$$\int_a^b g(x,t)u(x,t)dx = E(t), \quad 0 \leq t \leq T.$$

Nelokalios integralinės sąlygos savo darbuose nagrinėjo (Čiegis *et al* 2001, 2002; Day 1983; Dehghan 2005; Ekolis 1991; Fairweather, Lopez-Marcos 1996; Pečiulytė *et al* 2005; Sapagovas 2008) ir daug kitų autorių. Be tokių populiarių pritaikytų šioje disertacijoje diskrečiųjų schemų stabilumo tyrimo metodų, kaip maksimumo principas ir energetiniai metodai, plačiai uždaviniams su nelokaliosiomis sąlygomis yra taikomas diskrečiojo operatoriaus matricos spektro tyrimas (Ivanauskas *et al* 2009; Jachimavičienė *et al* 2009; Sapagovas 2008): diskrečiojo uždavinio su nelokalija sąlyga operatorius yra nesimetris, o jo tikrinės reikšmės gali būti neigiamos ir kompleksinės.

Diferencialinių uždavinių su nelokaliosiomis sąlygomis sritis yra labai plati, o išnagrinėti, nors ir svarbūs, bet tik atskiri atvejai. Todėl aktualūs yra tyrimai su įvairiomis nelokaliosiomis sąlygomis. 4 skyriuje nagrinėjamas parabolinis uždavinys su trimis integralinės sąlygos koeficientų variantais, pateikiama detalesnė atskirų nagrinėjamų uždavinių apžvalga.

1.3. Modelio identifikavimas

Matematinio modeliavimo proceso galutinis rezultatas dažnai yra ne tik sumodeliuoti sistemos būseną arba atsaką į sužadinimą, bet ir nustatyti nežinamus modelio parametrus, pritaikant sprendinį prie fizinio eksperimento metu gautų duomenų.

Neuronų modelių parametrų nustatymas yra sunkus uždavinys. Nors, iš vienos pusės, skaičiuojamoji kompiuterių galia nuolat auga, leisdama tirti plačias parametrų reikšmių aibes, tačiau tuo pat metu auga modelių sudėtingumas, o parametrų skaičius kartais skaičiuojamas šimtais. Todėl neuronų modelių identifikavimas reikalauja automatizuotų sprendimų (Prinz *et al* 2003).

Achard, De Schutter (2006) parodė, kad pakankamai sudėtingos nervo ląstelės optimizacijos funkcijos paviršius pasižymi daugybe lokalių minimumų, todėl bendru atveju pirmenybė turi būti teikiama globalios optimizacijos metodams. Van Geit *et al* (2008) pateikė apžvalgą globalių optimizavimo metodų, pritaikytų jaudrių neuronų modeliams identifikuoti, tarp kurių yra tokie populiarūs globalios paieškos metodai, kaip atkaitinimo modeliavimas (ang. *simulated annealing*) ir evoliuciniai algoritmai (ang. *evolutionary search*). Be abejo, šios technikos gali būti sėkmingai taikomos ir kitiems sudėtingiems netiesiniams uždaviniams spręsti.

Achard, De Schutter (2006) naudojo evoliucinį algoritmą, Tikidji-Hamburyan (2008) pateikė genetinio algoritmo modifikaciją, pritaikytą sužadintų neuronų identifikavimo uždaviniui. Toth *et al* (2011) aprašė neuronų parametrų nustatymą variaciniais metodais. Yra darbų, kur kartu taikomi keli optimizavimo metodai, pavyzdžiui, globalūs metodai kombinuojami su lokaliais. Tai dar kartą patvirtina, kad neegzistuoja vieno optimizavimo algoritmo, tinkančio visiems uždaviniams. Modelių įvairovė sąlygoja skirtingų metodų naudojimą, dažnai metodą, sėkmingai pritaikytą vienam uždaviniui, sunku pritaikyti kitam. Optimizavimo uždavinį dar apsunkina tikslo funkcijos parinkimas, nuo kurio gali ženkliai priklausyti optimizavimo rezultatai (Hayes *et al* 2005).

Parametrų identifikuojamumas

Kadangi atvirkštinis uždavinys yra nekorektiškas, prieš atliekant modelio identifikavimo skaičiavimus reikia įsitikinti, kad modelio parametrai apskritai gali būti nustatyti naudojant turimus eksperimentinius duomenis. Jei ne visi parametrai gali būti identifikuoti, ar galima nustatyti bent dalį jų?

Parametrų identifikuojamumo klausimai yra labai aktyviai vystomi pastaruoju metu. Prieš investuojant laiką ir pastangas į realiuosius eksperimentus,

būtina įsitikinti, ar parametrai gali būti vienareikšmiškai nustatyti naudojant eksperimento duomenis.

Miao *et al* (2011) pateikė plačią netiesinių paprastųjų diferencialinių lygčių sistemų identifikavimo metodų apžvalgą, kur taikomus metodus suskirstė į tris pagrindines grupes: struktūrinę (teorinę) modelio analizę, praktinę analizę ir jautrumo analizę. Nors struktūrinės analizės metodai leidžia spręsti apie globalų parametų identifikuojamumą, tačiau dinaminiams netiesiniams modeliams neegzistuoja vieningo universalaus metodo. Daugiau informacijos apie struktūrinius metodus netiesinėms sistemoms galima rasti (Chis *et al* 2011) darbe.

Dažnai teoriškai identifikuojamas parametras gali būti labai jautrus matavimo paklaidoms ir jo nustatymas pagal eksperimento duomenis gali būti neįmanomas. Todėl siūloma įvairius metodus derinti tarpusavyje. Taikomuosiuose uždaviniuose modeliai kartais nusakomi dideliu parametų skaičiumi ir visi parametrai negali būti nustatyti vienu metu. Svarbus klausimas yra kaip nustatyti parametų reikšmingumą modeliui ir atskirti nereikšmingus parametrus. Į šiuos klausimus gali atsakyti jautrumo analizė (Saltelli 2008), nors jos metodai leidžia nustatyti identifikuojamumą tik tam tikro parametų rinkinio atžvilgiu. Praktiniai identifikuojamumo metodai, naudojantys eksperimentinius duomenis, leidžia ne tik spręsti identifikuojamumo uždavinį, bet ir naudojami projektuojant skaitinius eksperimentus bei parenkant optimizavimo algoritmus.

Parametų identifikuojamumą modeliuojant neuronų veiklą nagrinėjo Schierwagen (1990); Toth *et al* (2011).

1.4. Pirmojo skyriaus išvados ir disertacijos uždavinių formulavimas

Atlikta literatūros apžvalga leidžia padaryti tokias išvadas:

1. Paraboliniai netiesiniai modeliai yra plačiausiai taikomi šakotose struktūrose, nes būtent tokiais modeliais aprašomi neurono sužadinimo uždaviniai. Dauguma šių modelių pasižymi sąlyginio tiesiškumo savybe, todėl gali būti suskaidyti į kelis tiesinius uždavinius, kurių sprendimui taikomi iteraciniai metodai. Plačiai taikomų neuromodeliavimo paketuose neišreikštinio Eulerio metodo ir Kranko-Nikolsono metodo stabilumas ir konvergavimas yra įrodyti tokio tipo uždaviniams, tačiau tik vienmačiu atveju.
2. Sprendžiant realius uždavinius būtina įvertinti šakotos struktūros geo-

metriją, dėl kurios atsiranda tvermės dėsniai išsišakojimo taškuose. Neuromodeliavimo paketuose naudojamas Hines šakotų struktūrų segmentų numeracijos algoritmas yra efektyvus, tačiau nėra tinkamas struktūroms su uždaraais kontūrais. Skaičiavimams supaprastinti siulomi srities skaidymo metodai, tačiau jų stabilumas ir konvergavimas analizuotas tik eksperimentiškai.

3. Modeliuojant neuronų grupes dėl didelės skaičiavimų apimties yra būtinas lygiagrečiųjų technologijų taikymas.
4. Netiesinio modelio optimizavimas daugiamatėje srityje dažnai yra netrivialus dėl optimizacijos funkcijos sudėtingo paviršiaus, todėl bendru atveju pirmenybė turi būti teikiama globalios optimizacijos metodams. Dėl optimizacijos uždavinio nekorektiškumo turi būti atliekama parametrų identifikuojamumo analizė.
5. Egzistuoja procesai, kur klasikinės kraštinės sąlygos neleidžia įvertinti visų sudėtingų veikimo mechanizmų, todėl modeliuojant naudojamos nelokalios sąlygos. Tokių uždavinių sritis yra labai plati, o išnagrinėti, nors ir svarbūs, bet tik atskiri atvejai.

Šios disertacijos tikslai yra sudaryti ir realizuoti skaitinius algoritmus, skirtus uždaviniams šakotose struktūrose arba su neklasikinėmis kraštinėmis sąlygomis spręsti, išnagrinėti sudarytų skaitinių schemų stabilumą ir konvergavimą, lygiagrečiųjų versijų efektyvumą, taip pat išnagrinėti netiesinio matematinio modelio parametrų nustatymo uždavinį. Įgyvendinant numatytus darbo tikslus formuluojami tokie uždaviniai:

1. Sudaryti ir ištirti skaitinius algoritmus tiesiniam paraboliniam modeliui šakotose struktūrose su skirtingais srautų tvermės dėsniais išsišakojimo taškuose. Dominantys algoritmai yra populiarūs neišreikštinio Eulerio ir Kranko-Nikolsono metodai ir prediktoriaus – korektoriaus tipo schemas, realizuojančios srities skaidymo metodą ir pasižyminčios geromis lygiagretinimo sąvybėmis.
2. Atlikti neurono sužadinimo skaitinį modeliavimą, pritaikyti šiam uždaviniui ir ištirti lygiagrečiuosius algoritmus.
3. Atlikti sistemingą parabolinio uždavinio su nelokalija integraline kraštine sąlyga skaitinę analizę, ištirti diskrečiojo sprendinio stabilumo ir konvergavimo priklausomybę nuo nelokalios sąlygos koeficientų ženklų.
4. Netiesinis impulso relaksacijos lazeriu apšviestame puslaidininkyje

modelis šiame darbe yra aktualus dėl šiuo metu sparčiai besivystančių bioelektronikos tyrimų, nagrinėjančių elektrinių prietaisų ir gyvųjų ląstelių sąveiką. Be to, netiesiniai šio modelio nariai yra tokio pat pavaldalo, kaip ir neurono sužadavimo modelio, tai leidžia apibendrinti kai kuriuos penktojo skyriaus rezultatus ląstelės sužadavimo modeliams. Todėl iškeltas uždavinys atlikti netiesinio impulso relaksacijos puslaidininkyje skaitinį modeliavimą ir skaitinę analizę, netiesinio modelio identifikavimo eksperimentą.

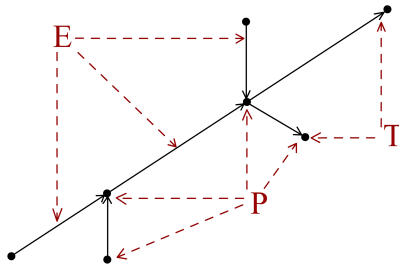
Parabolinis uždavinys grafuose

Šiame skyriuje pateiktas parabolinio uždavinio šakotose struktūrose aprašymas su dviejų tipų srautų tvermės dėsniais išsišakojimo taškuose. Tiesinis parabolinis uždavinys šakotose struktūrose su dviejų tipų tvermės dėsniais išsišakojimo taškuose aprašytas 2.1 poskyryje, modelio lygčių diskretizacija baigtinių skirtumų metodu, svorinė diskrečioji schema, sprendinio vienaties ir konvergavimo analizė maksimumo principo, energetiniais ir mažoruojančių funkcijų metodais pateikti 2.2 poskyryje. Dvi prediktoriaus – korektoriaus diskrečiosios schemas tiesiniam paraboliniam uždaviniui bei jų analizė pateiktos 2.3 poskyryje ir 2.4 poskyryje. Nagrinėjamos schemas skiriasi padalijimo strategija: pirmuoju atveju struktūra dalinama pjaunant kai kurias briaunas, taip gauname aibę uždavinių pografiuose, kurie gali būti sprendžiami 2.2 poskyryje aprašytais metodais; antruoju atveju struktūra dalinama skaidant išsišakojimo taškus, taip gauname aibę vienmačių parabolinių uždavinių, kurių sprendiniai efektyviai apskaičiuojami perkelties algoritmu.

Šio skyriaus rezultatai skelbti autorės publikacijose (Čiegis, Tumanova (2010b,c, 2012); Tumanova, Čiegis (2012)).

2.1. Tiesinis parabolinis uždavinys grafe

Nagrinėsime tiesinį parabolinį uždavinį šakotoje struktūroje. Ši struktūra



2.1 pav. Žymėjimai grafe

Fig. 2.1. Graph notations

gali būti aprašyta naudojant orientuotų grafų terminiją. Tegul $P = \{p_j, j = 1, \dots, J\}$ yra viršūnių aibė. Kai kurios viršūnės yra sujungtos orientuotomis briaunomis (lankais), kurios sudaro briaunų aibę

$$E = \{e_k = (p_{k_s}, p_{k_f}), p_{k_s}, p_{k_f} \in P, k = 1, \dots, K\},$$

čia p_{k_s} yra briaunos e_k pradžios viršūnė, o p_{k_f} yra tos pačios briaunos pabaigos viršūnė (2.1 pav.). Tegul $l_k = |e_k|$ žymi briaunos e_k ilgį, o x žymi atstumą nuo briaunos pradžios ir keičiasi intervale $(0, l_k)$. Grafo briaunos yra orientuotos, tai yra būtina sąlyga formuluojant tvermės dėsnius. Kiekvienoje viršūnėje $p_j \in P$ apibrėžiamos įeinančių ir išeinančių briaunų aibės $N^\pm(p_j)$:

$$\begin{aligned} N^+(p_j) &= \{e_k : e_k = (p_{j_s}, p_j) \in E, s = 1, \dots, S_j\}, \\ N^-(p_j) &= \{e_k : e_k = (p_j, p_{j_f}) \in E, f = 1, \dots, F_j\}. \end{aligned}$$

Visada nagrinėsime jungųjį orientuotą grafą.

Aprašytoje struktūroje (E, P) nagrinėjamas tiesinis parabolinis uždavinys

funkcijų aibei $\{u^k(x,t)\}$:

$$\frac{\partial u^k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(d^k \frac{\partial u^k}{\partial x} \right) - q^k u^k + f^k, \quad 0 < x < l_k, \quad k = 1, \dots, K, \quad (2.1)$$

$$0 < d_0 \leq d^k(x,t) \leq d_M, \quad q^k(x,t) \geq 0, \quad f^k = f^k(x,t), \quad (2.2)$$

$$u^k(x,0) = u_0^k(x) \quad 0 < x < l_k, \quad k = 1, \dots, K. \quad (2.3)$$

Čia funkcija $u^k(x,t)$ apibrėžiama kiekvienoje briaunoje e^k , o koeficientų funkcijos kiekvienoje briaunoje gali skirtis.

Visų grafo viršūnių aibė dalijama į tris poaibius $P = T \cup P_1 \cup P_2$, kuriuos sudaro kraštinės viršūnės T ir vidinės pirmojo ir antrojo tipo viršūnės. Viršūnė priklauso kraštinių viršūnių aibei, jeigu egzistuoja tik viena grafo briauna, kuri prasideda ar baigiasi toje viršūnėje:

$$T = \{ p_j : p_j \in P, \quad N^+(p_j) = \emptyset \text{ arba } N^-(p_j) = \emptyset \}.$$

Pirmojo tipo kraštinės sąlygos gali būti aprašomos tokiu būdu:

$$u^k(p_j; t) := u^k(b_k, t) = \mu_j(t), \quad \forall p_j \in T, \quad (2.4)$$

čia b_k žymi briaunos pradžios arba pabaigos tašką, t. y. sujungimo su kraštine viršūne koordinatę:

$$b_k = \begin{cases} 0, & \text{jei } e_k = (p_j, p_f), \\ l_k, & \text{jei } e_k = (p_s, p_j). \end{cases}$$

Pirmojo tipo arba paprastose vidinėse viršūnėse P_1 apibrėžiamas srautų tvermės dėsnis (Major *et al* 1993):

$$\sum_{e_k \in N^+(p_j)} d^k \frac{\partial u^k}{\partial x} \Big|_{x=l_k} = \sum_{e_m \in N^-(p_j)} d^m \frac{\partial u^m}{\partial x} \Big|_{x=0}, \quad \forall p_j \in P_1. \quad (2.5)$$

Antrojo tipo vidinės viršūnės aprašo somą neurono modelyje, joje formuluojamas sudėtingesnis tvermės dėsnis:

$$c \frac{\partial u_s}{\partial t} + q_s u_s = \sum_{e_m \in N^-(p_s)} d^m \frac{\partial u^m}{\partial x} \Big|_{x=0} - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} d^k \frac{\partial u^k}{\partial x} \Big|_{x=l_k} + f_s, \quad \forall p_s \in P_2. \quad (2.6)$$

Šio tipo viršūnėse atsižvelgiama į relaksacijos laiką c ir tiesinį sugėrimo narį $q_s u_s$:

$$c > 0, \quad q_s(t) \geq 0. \quad (2.7)$$

Visose grafo viršūnėse yra išpildytos tolydumo sąlygos:

$$\begin{aligned} u^m(p_j, t) &= u^k(p_j, t), \quad \forall p_j \in P_1, \quad e_m, e_k \in N^\pm(p_j), \\ u_s(t) &= u^m(p_s, t), \quad \forall p_s \in P_2, \quad e_m \in N^\pm(p_s). \end{aligned} \quad (2.8)$$

2.2. Neišreikštinė schema

Kiekvienoje grafo briaunoje e_k , $k = 1, \dots, K$ apibrėžiamas tolygus diskretusis tinklas

$$\omega_h(k) = \{x_j^k : x_j^k = j h_k, \quad j = 1, \dots, N_k - 1\}, \quad x_{N_k}^k = l_k,$$

kurio taškai žymimi x_j^k , o žingsnis – h_k . Taip pat apibrėžiamas tolygus laiko tinklas ω_τ :

$$\omega_\tau = \{t^n : t^n = n\tau, \quad n = 0, \dots, N, \quad N\tau = T\},$$

kurio žingsnis yra τ . Tinkluose $\omega_h(k) \times \omega_\tau$ apibrėžiamos diskrečiosios funkcijos

$$U_j^{k,n} = U^k(x_j, t^n), \quad k = 1, \dots, K,$$

čia $U_j^{k,n}$ aproksimuoja sprendinį u^k briaunoje e_k laiko momentu t^n . Taip pat apibrėžiame skirtuminius operatorius:

$$\partial_t U^n = \frac{U^n - U^{n-1}}{\tau}, \quad \partial_x U_j^{k,n} = \frac{U_{j+1}^{k,n} - U_j^{k,n}}{h_k}, \quad \partial_{\bar{x}} U_j^{k,n} = \frac{U_j^{k,n} - U_{j-1}^{k,n}}{h_k}.$$

Svorinei schemai aprašyti taip pat apibrėžiame vidurkinimo operatorių

$$A_\theta U_j^n = \theta U_j^n + (1 - \theta) U_j^{n-1},$$

čia parametras $\theta \in [0, 1]$.

Tada diferencialinė lygtis (2.1) aproksimuojama naudojant svorinę baigti-

nių skirtumų schemą:

$$\partial_t U_j^{k,n} = \partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}}^{k,n-\theta'} \partial_x A_\theta U_j^{k,n}) - q_j^{k,n-\theta'} A_\theta U_j^{k,n} + f_j^{k,n-\theta'}, \quad (2.9)$$

$$x_j \in \omega_h(k), \quad k = 1, \dots, K,$$

čia parametras $\theta' = 1 - \theta$. Toliau nagrinėsime matematinį modelį su pirmojo tipo kraštinėmis sąlygomis:

$$U^{k,n}(p_j) = \mu_j(t^n), \quad \forall p_j \in T. \quad (2.10)$$

Norėdami išlaikyti bendrą viso modelio lygčių antros eilės aproksimacijos tikslumą erdvinės koordinatės atžvilgiu, srautų tvermės dėsnį (2.5) išsiskaidymo taškuose P_1 aproksimuojame baigtinių tūrių metodu:

$$\begin{aligned} \sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^{k,n-\theta'} \partial_{\bar{x}} A_\theta U_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} (\partial_t U_{N_k}^{k,n} + q_{N_k}^{k,n-\theta'} A_\theta U_{N_k}^{k,n} - f_{N_k}^{k,n-\theta'}) \right] \\ = \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{1/2}^{m,n-\theta'} \partial_x A_\theta U_0^{m,n} - \frac{h_m}{2} (\partial_t U_0^{m,n} + q_0^{m,n-\theta'} A_\theta U_0^{m,n} - f_0^{m,n-\theta'}) \right], \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\forall p_j \in P_1.$$

Panašiai gauname antrosios tikslumo eilės aproksimacijos formulę antrojo tipo viršūnėse (2.6):

$$\begin{aligned} c \partial_t U_s^n + q_s^n A_\theta U_s^{n-\theta'} + \sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^{k,n-\theta'} \partial_{\bar{x}} A_\theta U_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} (\partial_t U_{N_k}^{k,n} \right. \\ \left. + q_{N_k}^{k,n-\theta'} A_\theta U_{N_k}^{k,n} - f_{N_k}^{k,n-\theta'}) \right] - \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{1/2}^{m,n-\theta'} \partial_x A_\theta U_0^{m,n} \right. \\ \left. - \frac{h_m}{2} (\partial_t U_0^{m,n} + q_0^{m,n-\theta'} A_\theta U_0^{m,n} - f_0^{m,n-\theta'}) \right] = f_s^{n-\theta'}, \quad \forall p_s \in P_2. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Visose viršūnėse galioja tolydumo sąlygos

$$\begin{aligned} U^{m,n}(p_j) = U^{k,n}(p_j), \quad \forall p_j \in P_1, \quad e_m, e_k \in N^\pm(p_j), \\ U_s^n = U^{m,n}(p_s), \quad \forall p_s \in P_2, \quad e_m \in N^\pm(p_s). \end{aligned} \quad (2.13)$$

2.1 lema. Diskretusis uždavinys (2.9)–(2.13) turi vienintelį sprendinį.

Įrodymas. Lemos įrodymas seka iš fakto, kad kiekviename laiko žingsnyje t^n diskretusis uždavinys apibrėžiamas tiesinių lygčių sistema su M tipo matrica (Berman, Plemmons 1994), kadangi matricos įstrižainė yra vyraujanti, o visi nediagonaliniai elementai yra neigiami arba nuliniai. $\square$

2.2.1. Neišreikštinės schemos realizacija

Diskrečiojo uždavinio (2.9)–(2.13) sprendinys gali būti veiksmingai apskaičiuotas per tris žingsnius (Mascagni 1991):

- Pirmajame žingsnyje, taikant modifikuotą faktorizacijos algoritmą, sprendinys briaunoje $U^{k,n}$ užrašomas suma sprendinių gretimose viršūnėse

$$U_j^{k,n} = \gamma_j^{k,n} V_{k_s}^n + \alpha_j^{k,n} V_{k_f}^n + \beta_j^{k,n}, \quad k = 1, \dots, K, \quad j = 0, \dots, N_k, \quad (2.14)$$

čia V_j^n , $j = 1, \dots, J$ ir yra nežinomos diskrečiojo sprendinio viršūnėse reikšmės. Faktorizacijos algoritmo sudėtingumas yra $\mathcal{O}(N_1 + \dots N_K)$.

- Antrajame žingsnyje, įstatant diskretųjį sprendinį (2.14) į srautų tvermės lygtis (2.11), (2.12) ir naudojant tolydumo sąlygas (2.13), gauname tiesinių lygčių sistemą

$$\mathcal{A}^n \mathbf{V}^n = \mathbf{F}^n,$$

čia $\mathbf{V}^n = (V_1^n, \dots, V_J^n)$ ir $\mathcal{A}^n$ yra išretinta matrica dydžio $J \times J$. Sistemos dydis dar labiau sumažinamas naudojant kraštines sąlygas (2.10) kraštinėse viršūnėse T . Tokia sistema gali būti veiksmingai sprendžiama taikant iteracinius metodus. Žingsnio sudėtingumas priklauso nuo sistemos sprendimo metodo parinkimo.

- Paskutiniame žingsnyje diskretusis sprendinys $U^{k,n}$ apskaičiuojamas naudojant (2.14) ir vektorių $\mathbf{V}^n$. Šito žingsnio sudėtingumas irgi yra $\mathcal{O}(N_1 + \dots N_K)$.

Jei antrajame žingsnyje naudojame paprasčiausią jungtinių gradientų metodą su diagonaliniu matricos sąlygotumą gerinančiu operatoriumi (PCG, ang. *Pre-conditioned Conjugate Gradient*), tai gauname tokį pilną nuosekliojo algoritmo sudėtingumo įvertį

$$W = W_f + W_s = \mathcal{O}\left(\sum_k N_k\right) + \mathcal{O}(\mu m J),$$

čia W_f yra faktorizacijos žingsnių sudėtingumas, o W_s yra tiesinių lygčių sistemos sprendimo PCG metodu sudėtingumas. Šios sistemos dydis yra $J \times J$, m yra nenulinių elementų eilutėje skaičius, μ yra PCG iteracijų skaičius.

2.2.2. Aproximacijos tikslumo analizė

Šiame poskyryje aptarsime diskrečiosios schemos (2.9)–(2.13) aproksimacijos tikslumą. Pirmą, apibrėžkime diskrečiojo sprendinio paklaidos funkciją:

$$\begin{aligned} Z_j^{k,n} &= U_j^{k,n} - u^k(x_j, t^n), \quad k = 1, \dots, K, \quad x_j \in \omega_h(k), \\ Z_s^n &= U_s^n - u_s(t^n), \quad \forall p_s \in P_2. \end{aligned}$$

Išstatę šias funkcijas į baigtinių skirtumų schemą gauname discretų paklaidos funkcijos uždavinį:

$$\partial_t Z_j^{k,n} = \partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}}^{k,n-\theta'} \partial_x A_\theta Z_j^{k,n}) - q_j^{k,n-\theta'} A_\theta Z_j^{k,n} + \psi_j^{k,n}, \quad (2.15)$$

$$x_j \in \omega_h(k), \quad k = 1, \dots, K$$

$$Z^{m,n}(p_j) = 0, \quad \forall p_j \in T, \quad (2.16)$$

$$\sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k-\frac{1}{2}}^{k,n-\theta'} A_\theta \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} (\partial_t Z_{N_k}^{k,n} + q_{N_k}^{k,n-\theta'} A_\theta Z_{N_k}^{k,n}) \right] \quad (2.17)$$

$$- \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{1/2}^{m,n-\theta'} A_\theta \partial_x Z_0^{m,n} - \frac{h_m}{2} (\partial_t Z_0^{m,n} + q_0^{m,n-\theta'} A_\theta Z_0^{m,n}) \right] = \varphi^n(p_j),$$

$$\forall p_j \in P_1,$$

$$c \partial_t Z_s^n + q_s^{n-\theta'} A_\theta Z_s^n \quad (2.18)$$

$$+ \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \left[d_{N_k-\frac{1}{2}}^{k,n-\theta'} \partial_{\bar{x}} A_\theta Z_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} (\partial_t Z_{N_k}^{k,n} + q_{N_k}^{k,n-\theta'} A_\theta Z_{N_k}^{k,n}) \right]$$

$$- \sum_{e_m \in N^-(p_s)} \left[d_{1/2}^{m,n-\theta'} A_\theta \partial_x Z_0^{m,n} - \frac{h_m}{2} (\partial_t Z_0^{m,n} + q_0^{m,n-\theta'} A_\theta Z_0^{m,n}) \right] = \phi^n(p_s),$$

$$\forall p_s \in P_2,$$

čia funkcijos $\psi^{k,n}$, φ^n and ϕ^n nusako aproksimacijos netiktį.

Visose viršūnėse paklaidos funkcijos tenkina tolydumo sąlygas:

$$\begin{aligned} Z^{m,n}(p_j) &= Z^{k,n}(p_j), \quad \forall p_j \in P_1, \quad e_m, e_k \in N^\pm(p_j), \\ Z_s^n &= Z^{m,n}(p_s), \quad \forall p_s \in P_2, \quad e_m \in N^\pm(p_s). \end{aligned} \quad (2.19)$$

2.2 lema. Tarkime, kad (2.1)–(2.8) sistemos pradiniai duomenys, koeficientai ir tikslusis sprendinys yra pakankamai glodūs. Tada baigtinių skirtumų schemos (2.9)–(2.13) netiktis gali būti įvertinta taip:

$$\begin{aligned} |\psi_j^{k,n}| &\leq C(\tau^{\sigma_\theta} + h_k^2), \quad x_j \in \omega_h(k), \quad k = 1, \dots, K, \quad n > 0, \\ |\varphi^n(p_j)| &\leq C(\tau^{\sigma_\theta} + \tau^{\sigma_\theta} h + h^2), \quad p_j \in P_1, \quad n > 0, \quad h = \max_k h_k, \\ |\phi^n(p_s)| &\leq C(\tau^{\sigma_\theta} + \tau^{\sigma_\theta} h + h^2), \quad p_s \in P_2, \quad n > 0, \end{aligned} \quad (2.20)$$

čia $\sigma_\theta = 2$, kai $\theta = 1/2$, visais kitais atvejais $\sigma_\theta = 1$. Kai $\theta = 1$ arba difuzijos koeficientai $d^k(x, t)$ nepriklauso nuo laiko, teisingas įvertis

$$|\varphi^n(p_j)| \leq C(\tau^{\sigma_\theta} h + h^2), \quad p_j \in P_1. \quad (2.21)$$

Įrodymas. Netiktis įvertinimas grindžiamas Teiloro skleidinio formule. Pirmasis (2.20) įvertis yra standartinė svorinės schemos netiktis, kurios analizę galima rasti (Samarskii 2001). Panagrinėkime detaliau netiktis įvertį pirmojo tipo viršūnėse, kai tvermės dėsnis jose aproksimuojamas (2.5) formule. Pagal apibrėžimą

$$\begin{aligned} \varphi^n(p_j) &:= - \sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^{k,n-\theta'} \partial_{\bar{x}} A_\theta u_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} (\partial_{\bar{t}} u_{N_k}^{k,n} + q_{N_k}^{k,n-\theta'} A_\theta u_{N_k}^{k,n} - f_{N_k}^{k,n-\theta'}) \right] \\ &\quad + \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{1/2}^{m,n-\theta'} \partial_x A_\theta u_0^{m,n} - \frac{h_m}{2} (\partial_{\bar{t}} u_0^{m,n} + q_0^{m,n-\theta'} A_\theta u_0^{m,n} - f_0^{m,n-\theta'}) \right]. \end{aligned}$$

Pasinaudoję Teiloro skleidiniu

$$u(x_j, t^n) = u_j^{n-1} + \tau \frac{\partial u(\tilde{t})}{\partial t}, \quad t^{n-1} < \tilde{t} < t^n,$$

įvertiname svertinio vidurkinimo operatoriaus tikslumą:

$$A_\theta u^n = \theta u^n + (1 - \theta) u^{n-1} = u^n - (1 - \theta) \tau \frac{\partial u(\tilde{t})}{\partial t}.$$

Visiškai taip pat įvertiname koeficientų ir laisvojo nario aproksimacijos tikslumą, pavyzdžiui:

$$d_j^{n-\theta'} = d_j^n - (1 - \theta)\tau \frac{\partial d(\bar{t})}{\partial t}.$$

Naudodamiesi koeficientų eliptiškumo sąlyga (2.2) ir darydami prielaidą, kad išvestinės $\frac{\partial u}{\partial t}$, $\frac{\partial d}{\partial t}$, $\frac{\partial q}{\partial t}$, $\frac{\partial f}{\partial t}$ yra apręžtos, gauname

$$\begin{aligned} d^{n-\theta'} \partial_x A_\theta u^n &= d^n \partial_x u^n + \mathcal{O}(\tau), \quad q^{n-\theta'} A_\theta u^n = q^n u^n + \mathcal{O}(\tau), \\ f_j^{n-\theta'} &= f_j^n + \mathcal{O}(\tau). \end{aligned}$$

Taikydami Teiloro skleidinio formulę gauname įvėčius

$$\begin{aligned} d_{1/2}^m \partial_x u_0^m &= d^m \frac{\partial u^m}{\partial x} \Big|_{x=0} + \frac{h_m}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(d^m \frac{\partial u^m}{\partial x} \right) \Big|_{x=0} + \mathcal{O}(h^2), \\ d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_x u_{N_k}^k &= d^k \frac{\partial u^k}{\partial x} \Big|_{x=N_k} - \frac{h_k}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left(d^k \frac{\partial u^k}{\partial x} \right) \Big|_{x=N_k} + \mathcal{O}(h^2), \\ \partial_t u_j^n &= \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t^n) + \mathcal{O}(\tau). \end{aligned}$$

Išstatę šias išraiškas į netikties formulę ir padarę prielaidą, kad diferencialinė lygtis (2.1) galioja iki pat apibrėžimo srities krašto, įrodome (2.20) antrąjį teiginį. $\square$

2.2.3. Stabilumas ir konvergavimas maksimumo principu

Panagrinėkime baigtinių skirtumų schemos (2.9)–(2.13) diskrečiojo sprendinio stabilumą. Parodysime, kad klasikinis maksimumo principas (Samarskii 2001) nors ir patvirtina schemos (2.15)–(2.19) besąlyginį stabilumą maksimumo normoje

$$\|Z\|_\infty = \max_{1 \leq k \leq K} \max_{0 \leq j \leq N_k} |Z_j^k|$$

be jokių apribojimų laiko ir erdvės žingsniams τ ir h , tačiau neleidžia tiksliai įvertinti schemos konvergavimo greičio. Analizėje apsiribosime tik atveju, kai $\theta = 1$.

Pažymėkime $h_0 = \min_k h_k$ ir padarykime prielaidą, kad diskretusis tinklas ω_h yra beveik tolygus, t. y. $h/h_0 \leq C_0$.

2.3 lema. Tegul Z^n yra sistemos (2.15)–(2.19) sprendinys. Tada

$$\|Z^n\|_\infty \leq t^n \max_n \left(\max_{1 \leq k \leq K} \max_{0 < j < N_k} |\psi_j^{k,n}| + \max_{p_j \in P_1} \frac{C_0}{h} |\varphi_j^n| + \frac{1}{c} \max_{p_s \in P_2} |\phi^n(p_s)| \right).$$

Įrodymas. Parinkus tam tikrus indeksus k_0, j_0 galime prilyginti $\|Z^n\|_\infty = |Z_{j_0}^{k_0,n}|$. Jei didžiausia paklaida yra vidiniame briaunos diskrečiojo tinklelio taške ($0 < j_0 < N_{k_0}$), tada iš formulės (2.15) gaunamas paklaidos įvertis

$$\begin{aligned} \|Z^n\|_\infty = |Z_{j_0}^{k_0,n}| &\leq \frac{1}{1 + \tau q_{j_0}^{k_0,n}} \left(|Z_{j_0}^{k_0,n-1}| + \tau |\psi_{j_0}^{k_0,n}| \right) \\ &\leq \|Z^{n-1}\|_\infty + \tau \max_{1 \leq k \leq K} \max_{0 < j < N_k} |\psi_j^{k,n}|. \end{aligned}$$

Panašiai, jei didžiausia paklaida yra antrojo tipo viršūnėje ($Z_s^n = Z_{j_0}^{k_0,n}, p_s \in P_2$), iš formulės (2.18) gauname įvertį

$$\begin{aligned} \left[c + \tau q_s^n + \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \frac{h_k}{2} (1 + \tau q_{N_k}^{k,n}) + \sum_{e_m \in N^-(p_s)} \frac{h_m}{2} (1 + q_0^{m,n}) \right] |Z_s^n| \\ \leq \left[c + \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \frac{h_k}{2} + \sum_{e_m \in N^-(p_s)} \frac{h_m}{2} \right] |Z_s^{n-1}| + \tau |\phi^n(p_s)|, \end{aligned}$$

iš kurio seka įvertis

$$\|Z^n\|_\infty \leq \|Z^{n-1}\|_\infty + \frac{\tau}{c} \max_{p_s \in P_2} |\phi^n(p_s)|.$$

Jei $Z^n(p_j) = Z_{j_0}^{k_0,n}, p_j \in P_1$, tada iš formulės (2.17) gauname įvertį

$$\begin{aligned} \left[\sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left(\frac{h_k}{2} + \tau q_{N_k}^{k,n} \right) + \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left(\frac{h_m}{2} + \tau q_0^{m,n} \right) \right] |Z^n(p_j)| \\ \leq \left(\sum_{e_k \in N^+(p_j)} \frac{h_k}{2} + \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \frac{h_m}{2} \right) |Z^{n-1}(p_j)| + \tau |\varphi_j^n|, \end{aligned}$$

iš kurio seka stabilumo ir paklaidos įvertis

$$\|Z^n\|_\infty \leq \|Z^{n-1}\|_\infty + \frac{\tau C_0}{h} \max_{p_j \in P_1} |\varphi_j^n|.$$

Sujungę gautas nelygybes gauname pagrindinį stabilumo įvertį

$$\|Z^n\|_\infty \leq \|Z^{n-1}\|_\infty + \tau \left(\max_{1 \leq k \leq K} \max_{0 < j < N_k} |\psi_j^{k,n}| + \max_{p_j \in P_1} \frac{C_0}{h} |\varphi_j^n| + \frac{1}{c} \max_{p_s \in P_2} |\phi^n(p_s)| \right).$$

Pakartotinai pritaikę įvertį gauname norimą rezultatą. $\square$

Dabar suformuluosime konvergavimo įvertį.

2.1 teorema. *Tarkime, U_j^k yra diskrečiojo uždavinio (2.9)–(2.13) su $\theta = 1$ sprendinys ir $u^k(x, t)$ yra tiesinio uždavinio (2.1)–(2.8) sprendinys. Tada*

$$\|U^n - u^n\|_\infty \leq C t^n \begin{cases} \tau + h^2, & \text{kai } P_1 = \emptyset, \\ \tau + h, & \text{kai } P_1 \neq \emptyset. \end{cases}$$

Įrodymas. Konvergavimo įvertis gaunamas iš stabilumo įverčio, įrodyto lemoje 2.3 ir netikties įverčių, įrodytų lemoje 2.2. $\square$

Taigi, pirmojo tipo viršūnėse diskretusis sprendinys yra tik pirmosios tikslumo eilės h atžvilgiu. Šis įvertinimas nėra optimalus, tačiau rodo svarbų faktą, kad visiškai neišreikštinė diskrečioji schema yra besąlygiškai stabili.

2.2.4. Konvergavimo analizė normoje L_2

Šiame poskyryje panagrinėsime diskrečiosios schemos (2.9)–(2.13) stabilumą ir konvergavimą L_2 normoje. Tegu

$$V_h = \{V : V = \{V_j^k\}, k = 1, \dots, K, j = 0, \dots, N_k, V_j^k = 0, x_j^k \in T\}.$$

Kiekvienam $V \in V_h$ apibrėžiamo L_2 normą, H_1 pusnormę ir energijos funkcionalą:

$$\|V\| = \left[\sum_{k=1}^K h_k \left(\frac{1}{2} |V_0^k|^2 + \sum_{j=1}^{N_k-1} |V_j^k|^2 + \frac{1}{2} |V_{N_k}^k|^2 \right) \right]^{\frac{1}{2}},$$

$$|V|_1 = \left[\sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k} |\partial_{\bar{x}} V_j^k|^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad \|V\|_E = \left[\sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k} d_{j-\frac{1}{2}}^k |\partial_{\bar{x}} V_j^k|^2 \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Pirmiausia įrodysime dviejų gerai žinomų nelygybių apibendrinimus.

2.4 lema. Kiekvienam $V \in V_h$ galioja įverčiai:

$$\|V\|_\infty \leq C|V|_1, \quad C = \left(\sum_{k=1}^K l_k\right)^{1/2}, \quad (2.22)$$

$$\|V\|_\infty \leq 2\|V\|^{1/2}|V|_1^{1/2}. \quad (2.23)$$

$$\|V\| \leq C_1\|V\|_\infty, \quad \|V\| \leq C_2\|V\|_1. \quad (2.24)$$

Įrodymas. Tegū i, m yra tokie, kad galioja lygybė $|V_i^m| = \|V\|_\infty$. Kadangi grafas yra jungus, panagrinėkime seka briaunų $\{e_{s_1}, e_{s_2}, \dots, e_{s_M}\}$, jungiančių x_i^m su kraštine viršūne. Taikydami Koši-Švarco nelygybę gauname įvertį:

$$\begin{aligned} |V_i^m| &= \left| \sum_{j=i+1}^{N_m} (V_{j-1}^m - V_j^m) + \sum_{k=2}^M \sum_{j=1}^{N_{s_k}} (V_{j-1}^{s_k} - V_j^{s_k}) \right| \\ &\leq \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{N_k} |\partial_{\bar{x}} V_j^k| h_k \leq \left(\sum_{k=1}^K l_k\right)^{1/2} \left(\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{N_k} |\partial_{\bar{x}} V_j^k|^2 h_k\right)^{1/2}, \end{aligned}$$

iš kurio seka nelygybės (2.22) įrodymas.

Panašiai įrodoma nelygybė (2.23). Taikydami Koši-Švarco nelygybę gauname įvertį

$$\begin{aligned} |V_i^m|^2 &= \left| \sum_{j=i+1}^{N_m} (V_{j-1}^m + V_j^m)(V_{j-1}^m - V_j^m) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=2}^M \sum_{j=1}^{N_{s_k}} (V_{j-1}^{s_k} + V_j^{s_k})(V_{j-1}^{s_k} - V_j^{s_k}) \right| \leq \sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{N_k} |V_{j-1}^k + V_j^k| |\partial_{\bar{x}} V_j^k| h_k \\ &\leq \left(\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{N_k} |V_{j-1}^k + V_j^k|^2 h_k\right)^{1/2} \left(\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{N_k} |\partial_{\bar{x}} V_j^k|^2 h_k\right)^{1/2} \\ &\leq 2 \left(\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{N_k} \frac{1}{2} (|V_{j-1}^k|^2 + |V_j^k|^2) h_k\right)^{1/2} \left(\sum_{k=1}^K \sum_{j=1}^{N_k} |\partial_{\bar{x}} V_j^k|^2 h_k\right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Nelygybių (2.24) įrodymas grindžiamas diskrečiosios normos L_2 apibrėžimu ir formule (2.22). Lema įrodyta. $\square$

Galioja ir Gryno sumavimo formulė (Samarskii 2001):

2.5 lema. Kiekvienai porai tinklo funkcijų $V, W \in V_h$ galioja formulė

$$\begin{aligned} \sum_{j=n}^{m-1} \partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x V_j) W_j h = & - \sum_{j=n}^m d_{j-\frac{1}{2}} \partial_{\bar{x}} V_j \partial_{\bar{x}} W_j h \\ & + d_{m-\frac{1}{2}} W_m \partial_{\bar{x}} V_m - d_{n-\frac{1}{2}} W_{n-1} \partial_{\bar{x}} V_n. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Toliau nagrinėkime baigtinių skirtumų schemos (2.9)–(2.13) sprendinio stabilumą.

2.6 lema. Tegul Z^n yra schemos (2.15)–(2.19) sprendinys. Jei parametras $\theta \in [\frac{1}{2}, 1]$, tada galioja įvertis

$$\begin{aligned} \|Z^n\|^2 + c \sum_{p_s \in P_2} |Z_s^n|^2 \leq & Ct^n \max_{1 \leq k \leq n} (\|\psi^k\|^2 + \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^k(p_j)|^2 \\ & + \sum_{p_s \in P_2} |\phi^k(p_s)|^2). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Irodymas. Padauginę lygtį (2.15) iš $2\tau h_k A_\theta Z_j^{k,n}$ ir susumavę rezultatą visiems $x_j^k \in \omega_h(k)$, $k = 1, \dots, K$, taip pat pritaikę formulę (2.25) ir paprastą lygybę

$$2(Z_j^{k,n} - Z_j^{k,n-1}) A_\theta Z_j^{k,n} = |Z_j^{k,n}|^2 - |Z_j^{k,n-1}|^2 + 2\tau^2 \left(\theta - \frac{1}{2} \right) |\partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}|^2,$$

gauname

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^K \left[h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} (|Z_j^{k,n}|^2 + 2\tau^2 \left(\theta - \frac{1}{2} \right) |\partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}|^2 + 2\tau q_j^{k,n-\theta'} |A_\theta Z_j^{k,n}|^2) \right. \\ & + 2\tau \left(\sum_{j=1}^{N_k} d_{j-\frac{1}{2}}^{k,n-\theta'} (\partial_{\bar{x}} A_\theta Z_j^{k,n})^2 h_k - d_{N_k-\frac{1}{2}}^{k,n-\theta'} A_\theta Z_{N_k}^{k,n} \partial_{\bar{x}} A_\theta Z_{N_k}^{k,n} \right. \\ & \left. \left. + d_{\frac{1}{2}}^{k,n-\theta'} A_\theta Z_0^{k,n} \partial_x A_\theta Z_0^{k,n} \right) \right] \\ & = \sum_{k=1}^K h_k \left[\sum_{j=1}^{N_k-1} (|Z_j^{k,n-1}|^2 + 2\tau \psi_j^{k,n} A_\theta Z_j^{k,n}) \right]. \end{aligned}$$

Pasinaudoję kraštinėmis sąlygomis $Z_j^{k,n} = 0$, kai $x_j^k \in T$, ir diskrečiosiomis tvermės lygtimis (2.17), (2.18) gauname

$$\begin{aligned}
& \|Z^n\|^2 + 2\tau \|\sqrt{q^{n-\theta'}} A_\theta Z^n\|^2 + 2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k} d_{j-\frac{1}{2}}^{k,n-\theta'} (\partial_{\bar{x}} A_\theta Z_j^{k,n})^2 \\
& + \sum_{p_s \in P_2} \left[c |Z_s^n|^2 + 2\tau q_s^{n-\theta'} |A_\theta Z_s^n|^2 + 2c\tau^2 \left(\theta - \frac{1}{2} \right) |\partial_{\bar{t}} Z_s^n|^2 \right] \\
& + 2\tau^2 \left(\theta - \frac{1}{2} \right) \|\partial_{\bar{t}} Z^n\|^2 \\
& = \|Z^{n-1}\|^2 + \sum_{p_s \in P_2} c |Z_s^{n-1}|^2 + 2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \psi_j^{k,n} A_\theta Z_j^{k,n} \\
& + 2\tau \left(\sum_{p_j \in P_1} \varphi^n(p_j) A_\theta Z^n(p_j) + \sum_{p_s \in P_2} \phi^n(p_s) A_\theta Z^n \right).
\end{aligned}$$

Taikydami Koši-Švarco nelygybę, ε -nelygybę ir įdėjimo įvertį (2.22) įrodome tokius rėžius:

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \psi_j^{k,n} A_\theta Z_j^{k,n} & \leq \|\psi^n\| \|A_\theta Z^n\| \leq \frac{1}{3} \|A_\theta Z^n\|_E^2 + C_1 \|\psi^n\|^2, \\
\sum_{p_j \in P_1} \varphi^n(p_j) A_\theta Z^n(p_j) & \leq \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^n(p_j)| \|A_\theta Z^n\|_\infty \leq C \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^n(p_j)| \|A_\theta Z^n\|_1 \\
& \leq \frac{1}{3} \|A_\theta Z^n\|_E^2 + C_2 \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^n(p_j)|^2, \\
\sum_{p_s \in P_2} \phi^n(p_s) A_\theta Z^n & \leq \frac{1}{3} \|A_\theta Z^n\|_E^2 + C_3 \sum_{p_s \in P_2} |\phi^n(p_s)|^2.
\end{aligned}$$

Iš šių įverčių, turėdami omeny, kad $\theta \geq \frac{1}{2}$, gauname pagrindinį stabilumo įvertį:

$$\begin{aligned}
\|Z^n\|^2 + c \sum_{p_s \in P_2} |Z_s^n|^2 & \leq \|Z^{n-1}\|^2 + c \sum_{p_s \in P_2} |Z_s^{n-1}|^2 \\
& + \tau C (\|\psi^n\|^2 + \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^n(p_j)|^2 + \sum_{p_s \in P_2} |\phi^n(p_s)|^2).
\end{aligned}$$

Taikydami šį įvertį pakartotinai gauname norimą rezultatą. $\square$

Dabar galime įvertinti schemos (2.9)–(2.13) konvergavimą.

2.2 teorema. Tegul funkcija U_j^k apibrėžta diskrečiąja schema (2.9)–(2.13), o $u^k(x, t)$ yra diferencialinio uždavinio (2.1)–(2.8) sprendinys. Jei parametras $\theta \in [\frac{1}{2}, 1]$, tada

$$\|U^n - u^n\| \leq C\sqrt{t^n}(\tau^{\sigma_\theta} + h^2),$$

čia $\sigma_\theta = 2$, jei $\theta = 1/2$, kitaip $\sigma_\theta = 1$.

Įrodymas. Šis konvergavimo įvertis gaunamas iš lemoje 2.6 įrodyto stabilumo įverčio ir lemoje 2.2 apibrėžtų netikčių įverčių. $\square$

PASTABA: Taikydami paprastą idėjimo įvertį

$$\|V\|_\infty \leq \frac{C}{\sqrt{h}} \|V\|, \quad \forall V \in V_h, \quad (2.27)$$

iš 2.2 teoremos gauname schemos (2.9)–(2.13) diskrečiojo sprendinio paklaidos įvertį maksimumo normoje:

$$\|U^n - u^n\|_\infty \leq C\sqrt{t^n} \left(\frac{\tau^{\sigma_\theta}}{\sqrt{h}} + h^{3/2} \right).$$

Jei $\theta = 1$, tada, su sąlyga, kad $\tau = Ch^2$, gauname įvertį

$$\|U^n - u^n\|_\infty \leq C\sqrt{t^n} h^{3/2},$$

kuris rodo geresnį konvergavimo įvertį, nei gavome taikydami maksimumo principą 2.1 teoremoje. Kai $\theta = \frac{1}{2}$, tas pats įvertis teisingas su sąlyga, kad $\tau = Ch$.

2.2.5. Konvergavimo analizė normoje H_1

Šiame poskyryje tirsime diskrečiosios schemos (2.9)–(2.13) konvergavimą normoje H_1 . Paprastumo dėlei nagrinėsime atvejį, kai modelio koeficientai $d^k(x)$ ir $q^k(x)$ nepriklauso nuo laiko t .

2.7 lema. Tegul Z^n yra schemos (2.15)–(2.19) sprendinys. Jei parametras $\theta \in$

$[\frac{1}{2}, 1]$, tai galioja įvertis

$$\begin{aligned} \|Z^n\|_E^2 + \|\sqrt{q}Z^n\|^2 + \sum_{p_s \in P_2} q_s |Z_s^n|^2 &\leq Ct^n \max_{1 \leq k \leq n} (\|\psi^k\|^2 \\ &+ \sum_{p_j \in P_1} \frac{1}{h} |\varphi^k(p_j)|^2 + \sum_{p_s \in P_2} |\phi^k(p_s)|^2). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Įrodymas. Padauginę lygtį (2.15) iš $2\tau h_k \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}$, susumavę rezultatą visuose $x_j^k \in \omega_h(k)$, $k = 1, \dots, K$ ir pritaikę Gryno formulę (2.25), gauname

$$\begin{aligned} &\sum_{k=1}^K \left[h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \left(2\tau |\partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}|^2 + q_j^k |Z_j^{k,n}|^2 + 2\tau^2 \left(\theta - \frac{1}{2} \right) q_j^k |\partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}|^2 \right) \right. \\ &+ \sum_{j=1}^{N_k} d_{j-\frac{1}{2}}^k (\partial_{\bar{x}} Z_j^{k,n})^2 h_k + 2\tau^2 \left(\theta - \frac{1}{2} \right) \sum_{j=1}^{N_k} d_{j-\frac{1}{2}}^k (\partial_{\bar{x}} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n})^2 h_k \\ &+ 2\tau \left(-d_{N_k-\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{t}} Z_{N_k}^{k,n} \partial_{\bar{x}} A_\theta Z_{N_k}^{k,n} + d_{\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{t}} Z_0^{k,n} \partial_x A_\theta Z_0^{k,n} \right) \Big] \\ &= \sum_{k=1}^K h_k \left[\sum_{j=1}^{N_k} d_{j-\frac{1}{2}}^k (\partial_{\bar{x}} Z_j^{k,n-1})^2 + \sum_{j=1}^{N_k-1} (q_j^k |Z_j^{k,n-1}|^2 + 2\tau \psi_j^{k,n} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}) \right]. \end{aligned}$$

Vėl, panaudoję kraštines sąlygas $Z_j^{k,n} = 0 \quad \forall x_j^k \in T$ ir diskrečiąsias tvermės lygtis (2.17), (2.18), gauname

$$\begin{aligned} &\|Z^n\|_E^2 + \|\sqrt{q}Z^n\|^2 + \sum_{p_s \in P_2} q_s |Z_s^n|^2 + 2\tau (\|\partial_{\bar{t}} Z^n\|^2 + \sum_{p_s \in P_2} c |\partial_{\bar{t}} Z_s^n|^2) \\ &+ 2\tau^2 \left(\theta - \frac{1}{2} \right) (\|\partial_{\bar{t}} Z^n\|_E^2 + \|\sqrt{q} \partial_{\bar{t}} Z^n\|^2 + \sum_{p_s \in P_2} q_s |\partial_{\bar{t}} Z_s^n|^2) \\ &= \|Z^{n-1}\|_E^2 + \|\sqrt{q}Z^{n-1}\|^2 + \sum_{p_s \in P_2} q_s |Z_s^{n-1}|^2 \\ &+ 2\tau \left(\sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \psi_j^{k,n} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n} + \sum_{p_j \in P_1} \varphi^n(p_j) \partial_{\bar{t}} Z^n(p_j) + \sum_{p_s \in P_2} \phi^n(p_s) \partial_{\bar{t}} Z_s^n \right). \end{aligned}$$

Taikydami Koši-Švarco nelygybę, įdėjimo nelygybę (2.27) ir įverčius (2.2), (2.7), įrodome stabilumo įvertį

$$\begin{aligned} \|Z^n\|_E^2 + \|\sqrt{q}Z^n\|^2 + \sum_{p_s \in P_2} q_s |Z_s^n|^2 &\leq \|Z^{n-1}\|_E^2 + \|\sqrt{q}Z^{n-1}\|^2 \\ &+ \sum_{p_s \in P_2} q_s |Z_s^{n-1}|^2 + \tau C (\|\psi^n\|^2 + \sum_{p_j \in P_1} \frac{1}{h} |\varphi^n(p_j)|^2 + \sum_{p_s \in P_2} |\phi^n(p_s)|^2). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Taikydami įvertį pakartotinai gauname norimą rezultatą. $\square$

Dabar galime įvertinti konvergavimą.

2.3 teorema. Tegul funkcija U_j^k yra apibrėžta diskrečiąja schema (2.9)–(2.13), o $u^k(x, t)$ yra diferencialinio uždavinio (2.1)–(2.8) sprendinys. Jei parametras $\theta \in [\frac{1}{2}, 1]$ ir koeficientai $d^k(x, t)$ nepriklauso nuo laiko t , tada

$$|U^n - u^n|_1 \leq C\sqrt{t^n}(\tau^{\sigma_\theta} + h^{3/2}),$$

čia $\sigma_\theta = 2$ kai $\theta = 1/2$, visais kitais atvejais $\sigma_\theta = 1$.

Įrodymas. Šis konvergavimo įvertis gaunamas iš lemoje 2.7 įrodyto stabilumo įverčio ir lemoje 2.2 apibrėžtų netikčių įverčių. $\square$

PASTABA: Jeigu $\tau = Ch^2$, kai $\theta > \frac{1}{2}$, arba $\tau = Ch$, kai $\theta = \frac{1}{2}$, tai taikydami Sobolevo nelygybę (2.23) iš 2.2 ir 2.3 teoremų gauname tikslesnį schemos (2.9)–(2.13) diskrečiojo sprendinio paklaidos įvertį maksimumo normoje:

$$\|U^n - u^n\|_\infty \leq C\sqrt{t^n}h^{7/4}.$$

2.2.6. Konvergavimo analizė normoje L_∞

Šiame poskyryje nagrinėjamas diskrečiosios schemos (2.9)–(2.13) stabilumas normoje L_∞ . Nagrinėsime tik visiškai neišreikštinį metodą, kai $\theta = 1$. Šioje analizėje naudojama mažoruojančių funkcijų ir palyginimo teoremų technika (Hundsdorfer, Verwer 2003; Samarskii 2001).

Tegul koeficientai $d^k(x)$ ir $q^k(x)$ yra nepriklausomi nuo laiko t . Tada kiekviename laiko sluoksnyje t^n globalios paklaidos uždavinys (2.15)–(2.18) yra abibrėžiamas tiesinių lygčių sistema, kurios matrica yra M -matrica. Todėl glo-

balioji paklaida $Z^{k,n}$ gali būti aprėžta iš viršaus

$$|Z_j^{k,n}| \leq V_j^k, \quad k = 1, \dots, K, \quad x_j \in \omega_h(k), \quad (2.30)$$

čia V^k yra stacionaraus uždavinio sprendinys:

$$-\partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}}^k \partial_x V_j^k) + q_j^k V_j^k = \Psi_j^k, \quad x_j \in \omega_h(k), \quad k = 1, \dots, K, \quad (2.31)$$

$$V^m(p_j) = 0, \quad \forall p_j \in T, \quad (2.32)$$

$$\sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} V_{N_k}^k + \frac{h_k}{2} q_{N_k}^k V_{N_k}^k \right] \quad (2.33)$$

$$-\sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{1/2}^m \partial_x V_0^m - \frac{h_m}{2} q_0^m V_0^m \right] = \Phi_j, \quad \forall p_j \in P_1,$$

$$q_s V_s + \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} V_{N_k}^k + \frac{h_k}{2} q_{N_k}^k V_{N_k}^k \right] \quad (2.34)$$

$$-\sum_{e_m \in N^-(p_s)} \left[d_{1/2}^m \partial_x V_0^m - \frac{h_m}{2} q_0^m V_0^m \right] = \tilde{\Phi}_s, \quad \forall p_s \in P_2.$$

Šiame uždavinyje netiktys yra apibrėžtos taip:

$$\Psi_j^k = \max_{1 \leq n \leq N} |\psi_j^{k,n}|, \quad k = 1, \dots, K, \quad x_j \in \omega_h(k),$$

$$\Phi_j = \max_{1 \leq n \leq N} |\varphi_j^n|, \quad \forall p_j \in P_1, \quad \tilde{\Phi}_s = \max_{1 \leq n \leq N} |\phi_s^n|, \quad \forall p_s \in P_2.$$

Padauginę lygtį (2.31) iš $h_k V_j^k$ ir susumavę rezultata visuose $x_j^k \in \omega_h(k)$, $k = 1, \dots, K$, pritaikę Gryno formulę (2.25) ir pasinaudoje kraštinėmis sąlygomis ir diskrečiaisiais tvermės dėsniais, gauname įvertį:

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k} d_{j-\frac{1}{2}}^k (\partial_{\bar{x}} V_j^k)^2 + \|\sqrt{q} V\|^2 + \sum_{p_s \in P_2} q_s |V_s|^2 \\ &= \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \Psi_j^k V_j^k + \sum_{p_j \in P_1} \Phi_j V(p_j) + \sum_{p_s \in P_2} \tilde{\Phi}_s V(p_s). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Taikydami koeficientų *a priori* įverčius (2.2), (2.7), gauname

$$\sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k} d_{j-\frac{1}{2}}^k (\partial_{\bar{x}} V_j^k)^2 + \|\sqrt{q} V\|^2 + \sum_{p_s \in P_2} q_s |V_s|^2 \geq d_0 |V|_1^2.$$

Panaudoję Koši-Švarco nelygybę ir įdėjimo įvertį (2.22) gauname, kad

$$\sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \Psi_j^k V_j^k \leq \|\Psi\| \|V\| \leq C \|\Psi\| |V|_1.$$

Taikydami įdėjimo įvertį (2.22), iš viršaus įvertiname dvi paskutines (2.35) sumas:

$$\begin{aligned} \sum_{p_j \in P_1} \Phi_j V(p_j) &\leq \left(\sum_{p_j \in P_1} \Phi_j \right) \|V\|_\infty \leq \left(\sum_{p_j \in P_1} \Phi_j \right) |V|_1, \\ \sum_{p_s \in P_2} \tilde{\Phi}_s V(p_s) &\leq \left(\sum_{p_s \in P_2} \tilde{\Phi}_s \right) \|V\|_\infty \leq \left(\sum_{p_s \in P_2} \tilde{\Phi}_s \right) |V|_1. \end{aligned}$$

Panaudoję gautas nelygybes, gauname pagrindinį stabilumo įvertį

$$|V|_1 \leq C \left(\|\Psi\| + \sum_{p_j \in P_1} \Phi_j + \sum_{p_s \in P_2} \tilde{\Phi}_s \right).$$

Tada, pritaikę įdėjimo įvertį (2.22), gauname stabilumo įvertį maksimumo normoje

$$\|V\|_\infty \leq C \left(\|\Psi\| + \sum_{p_j \in P_1} \Phi_j + \sum_{p_s \in P_2} \tilde{\Phi}_s \right). \quad (2.36)$$

Iš nelygybės (2.30) ir netikčių įverčių (2.20) seka rezultatas:

$$\|Z^n\|_\infty \leq \|V\|_\infty \leq C(\tau + h^2), \quad n = 1, \dots, N.$$

Toliau nagrinėkime bendresnį atvejį, kai $q^k = q^k(x, t) \geq 0$. Šio atvejo analizė atlikta dviem žingsniais. Pirma, suformuluokime pagalbinį diskretųjį uždavinį

$$\partial_{\bar{t}} W_j^{k,n} = \partial_{\bar{x}} \left(d_{j+\frac{1}{2}}^k \partial_x W_j^{k,n} \right) - q_j^{k,n} W_j^{k,n} + \Psi_j^k, \quad (2.37)$$

$$x_j \in \omega_h(k), \quad k = 1, \dots, K,$$

$$W^{m,n}(p_j) = 0, \quad \forall p_j \in T, \quad (2.38)$$

$$\sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_x W_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} (\partial_t W_{N_k}^{k,n} + q_{N_k}^{k,n} W_{N_k}^{k,n}) \right] \quad (2.39)$$

$$- \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{1/2}^m \partial_x W_0^{m,n} - \frac{h_m}{2} (\partial_t W_0^{m,n} + q_0^{m,n} W_0^{m,n}) \right] = \Phi_j, \quad \forall p_j \in P_1,$$

$$c \partial_t W_s^n + q_s^n W_s^n \quad (2.40)$$

$$+ \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^{k,n} \partial_x W_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} (\partial_t W_{N_k}^{k,n} + q_{N_k}^{k,n} W_{N_k}^{k,n}) \right]$$

$$- \sum_{e_m \in N^-(p_s)} \left[d_{1/2}^{m,n} \partial_x W_0^{m,n} - \frac{h_m}{2} (\partial_t W_0^{m,n} + q_0^{m,n} W_0^{m,n}) \right] = \tilde{\Phi}_s^n, \quad \forall p_s \in P_2.$$

Iš maksimumo principo seka, kad bet kuriam $n = 1, \dots, N$ galioja nelygė

$$W_j^{k,n} \geq 0, \quad |Z_j^{k,n}| \leq W_j^{k,n}, \quad k = 1, \dots, K, \quad x_j \in \omega_h(k). \quad (2.41)$$

Dabar abibrėžkime naują funkciją $R^{k,n}$, tenkinančią diskretųjį uždavinį (2.37)–(2.40), kai $q^{k,n} \equiv 0$. Vėl, pagal maksimumo principą

$$W_j^{k,n} \leq R_j^{k,n}, \quad k = 1, \dots, K, \quad x_j \in \omega_h(k).$$

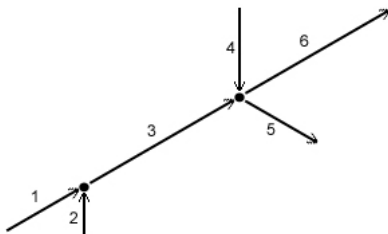
Tam, kad įvertinti $R^{k,n}$, galime vėl taikyti (2.36). Gauname, kad

$$R_j^{k,n} \leq V_j^k \leq C(\tau + h^2).$$

Galutinis paklaidos įvertis yra $\|Z^n\|_\infty \leq C(\tau + h^2)$.

2.2.7. Skaičiavimo eksperimentas

Šiame poskyryje pateikiami skaičiavimo eksperimento rezultatai. Nagrinėjamos diskrečiosios schemos stabilumas ir konvergavimas patikrinti skaičiavimais paprastoje struktūroje, kuri pavaizduota 2.2 pav. Grafą sudaro dvi viršūnės, sujungtos šešiomis briaunomis. Testavimo uždavinys apibrėžiamas reakcijos – difuzijos lygtimi (2.1) su koeficientais $d^k(x,t) = 1 + x + t$, $q^k(x,t) = t(x+1)$, $k = 1, \dots, 6$, o funkcija f^k , $k = 1, \dots, 6$ parenkama taip, kad diferencialinį uždavinį tenkintų sprendinys $u^k(x,t) = x^2(l_k - x)^2 \exp^{t+1}$. Briaunų



2.2 pav. Skaičiavimo eksperimente naudojama struktūra

Fig. 2.2. The branched structure for the test problem

ilgiai yra

$$l_1 = l_4 = l_5 = 1, \quad l_2 = \frac{1}{2}, \quad l_3 = l_6 = 2.$$

Kraštiniuose taškuose $p_j \in T$ apibrėžiamos kraštinės sąlygos

$$u^1(0, t) = u^2(0, t) = u^4(0, t) = u^5(l_5, t) = u^6(l_6, t) = 0.$$

Grafo viršūnėse galioja tvėrmės dėsnis (2.5):

$$\begin{aligned} d^1 \frac{\partial u^1}{\partial x} \Big|_{x=l_1} + d^2 \frac{\partial u^2}{\partial x} \Big|_{x=l_2} &= d^3 \frac{\partial u^3}{\partial x} \Big|_{x=0}, \\ d^3 \frac{\partial u^3}{\partial x} \Big|_{x=l_3} + d^4 \frac{\partial u^4}{\partial x} \Big|_{x=l_4} &= d^5 \frac{\partial u^5}{\partial x} \Big|_{x=0} + d^6 \frac{\partial u^6}{\partial x} \Big|_{x=0}. \end{aligned}$$

Skaičiavimuose naudojamas tolygus tinklelis.

Kranko-Nikolsono metodo ($\theta = 0,5$) skaičiavimo eksperimento rezultatai pateikti lentelėse 2.1, 2.2, 2.3.

2.1 lentelėje pateiktos globaliosios paklaidos reikšmės normose L_∞ , L_2 ir H_1 laiko momentu $T = 1$, kai žingsnis h yra labai mažas ir fiksuotas. Lentelėje taip pat pateikiama konvergavimo eilė p , kuri yra apskaičiuojama, kaip dviejų gretimų paklaidos reikšmių santykio logaritmas $\log_2$. Matome, kad konvergavimo eilė yra antroji τ atžvilgiu.

2.2 lentelėje pateikta globalioji sprendinio paklaida normose L_∞ , L_2 ir H_1 laiko momentu $T = 1$, kai žingsnis τ yra labai mažas ir fiksuotas. Matome, kad konvergavimo eilė yra antroji ir h atžvilgiu.

2.3 lentelėje pateikta globalioji sprendinio paklaida normose L_∞ , L_2 ir H_1 laiko momentu $T = 1$ kai abu žingsniai susieti sąryšiu $\tau = 2h$.

Pateiktieji rezultatai patvirtina, kad konvergavimo greitis yra $\mathcal{O}(\tau^2 + h^2)$ visose trijose normose. Todėl normoje H_1 skaičiavimai rodo geresnį rezultatą,

2.1 lentelė. Sprendinio paklaida, priklausanti nuo laiko žingsnio τ , momentu $T = 1$, su $\theta = 0,5$

Table. 2.1. Time errors of the solution at $T = 1$, for $\theta = 0.5$ with a sequence of step sizes τ

τ	$\ Z(T = 1)\ _{\infty}$	p	$\ Z(T = 1)\ $	p	$ Z(T = 1) _1$	p
0,2	0,0339248		0,0421266		0,0791588	
0,1	0,0084788	2,000	0,0105331	2,000	0,0194756	2,023
0,05	0,0021206	1,999	0,0026351	1,999	0,0048801	1,997
0,025	0,0005302	2,000	0,0006589	2,000	0,0012205	1,999

2.2 lentelė. Sprendinio paklaida, priklausanti nuo laiko žingsnio h , momentu $T = 1$, su $\theta = 0,5$

Table. 2.2. Spatial errors of the solution at $T = 1$, for $\theta = 0.5$ with a sequence of step sizes h

h	$\ Z(T = 1)\ _{\infty}$	p	$\ Z(T = 1)\ $	p	$ Z(T = 1) _1$	p
0,1	0,122789		0,128898		0,308883	
0,05	0,0307451	1,998	0,0321106	2,005	0,0773825	1,997
0,025	0,0076893	1,999	0,0080205	2,001	0,0193558	1,999
0,0125	0,0019225	2,000	0,0020047	2,000	0,0048396	2,000

2.3 lentelė. Sprendinio paklaida, kai $\tau = 2h$, momentu $T = 1$, su $\theta = 0,5$

Table. 2.3. Space-time errors of the solution at $T = 1$, for $\theta = 0.5$ with a sequence of step sizes $\tau = 2h$

h	$\ Z(T = 1)\ _{\infty}$	p	$\ Z(T = 1)\ $	p	$ Z(T = 1) _1$	p
0,1	0,126457		0,137753		0,295027	
0,05	0,0293907	2,105	0,0343402	2,004	0,0659181	2,162
0,025	0,0074549	1,979	0,0085921	1,999	0,0168333	1,969
0,0125	0,0018770	1,990	0,0021489	1,999	0,0042504	1,986

nei įrodytas 2.3 teoremoje. Modelio koeficientai, naudojami skaičiavimuose, priklauso nuo laiko, tačiau tai skaičiavimų rezultatų nepablogino.

2.4 lentelė. Sprendinio paklaida, priklausanti nuo laiko žingsnio τ , momentu $T = 1$, su $\theta = 1$

Table. 2.4. Time errors of the solution at $T = 1$, for $\theta = 1$ with a sequence of step sizes τ

τ	$\ Z(T = 1)\ _{\infty}$	p	$\ Z(T = 1)\ $	p	$ Z(T = 1) _1$	p
0,2	0,0891525		0,138519		0,147333	
0,1	0,0464869	0,940	0,0722722	0,939	0,0767286	0,941
0,05	0,0237421	0,969	0,0369202	0,969	0,0391584	0,970
0,025	0,0119984	0,985	0,01866	0,985	0,0197814	0,985

Panašūs rezultatai buvo gauti visiškai neišreikštinei schemai su $\theta = 1$. Skaičiavimai patvirtina konvergavimo greitį $\mathcal{O}(\tau + h^2)$ visose trijose normose. 2.4 lentelėje pateikiamos globalios paklaidos reikšmės esant įvairiems laiko žingsnio τ reikšmėms, kai žingsnis h yra mažas ir fiksuotas. Skaičiavimo eksperimento rezultatai patvirtina pirmos eilės konvergavimo greitį.

2.3. Prediktorius – korektorius algoritmas I

Realizuojant neišreikštinę schemą (2.9)–(2.13) kiekviename laiko sluoksnyje t^n tenka spręsti tiesinių lygčių sistemą. Sprendžiant taikomuosius uždavinius ši sistema būna didelė, tada jos sprendimas gali pareikalaus daug skaičiavimo resursų. Šiame poskyryje nagrinėjami algoritmai, leidžiantys išskaidyti uždavinį į aibę mažesnių uždavinių, kuriuos galima išspręsti greičiau ir paprasčiau, taip pat šie uždaviniai gali būti sprendžiami lygiagrečiai. Ši savybė yra labai svarbi sprendžiant didelės apimties uždavinius ir netiesinius uždavinius, kai lygiagrečiųjų algoritmų taikymas gali iš esmės sumažinti skaičiavimo laiką.

Disertacijoje nagrinėjami du prediktorius – korektorius tipo algoritmai. Šiame skyriuje nagrinėjama schema grindžiama grafo padalijimu į pografius pjaunant kai kurias grafo briaunas.

2.3.1. Parabolinis uždavinys

Grafe (E, P) apibrėžkime tiesinį parabolinį uždavinį be sugėrimo nario:

$$\frac{\partial u^k}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(d^k(x) \frac{\partial u^k}{\partial x} \right) + f^k(x, t), \quad (2.42)$$

$$0 < x < l_k, \quad k = 1, \dots, K, \quad t \in (0, T_f]$$

su pakankamai glodžiomis funkcijomis d^k, f^k , tenkinančiomis sąlygą

$$0 < d_0 \leq d^k(x) \leq d_M. \quad (2.43)$$

Kraštinės sąlygos formuluojamos kraštinėse viršūnėse taip:

$$u^{kj}(b_{kj}, t) = \mu_j(t), \quad \forall p_j \in T, \quad (2.44)$$

čia μ_j funkcijos yra žinomos. Vidinėse viršūnėse apibrėžiami tvermės dėsniai:

$$\sum_{e_k \in N^+(p_j)} d^k \frac{\partial u^k}{\partial x} \Big|_{x=l_k} = \sum_{e_m \in N^-(p_j)} d^m \frac{\partial u^m}{\partial x} \Big|_{x=0}, \quad \forall p_j \in P_1, \quad (2.45)$$

$$c \frac{\partial u_s}{\partial t} + \sum_{e_k \in N^+(p_s)} d^k \frac{\partial u^k}{\partial x} \Big|_{x=l_k} - \sum_{e_m \in N^-(p_s)} d^m \frac{\partial u^m}{\partial x} \Big|_{x=0} = f_s(t), \quad \forall p_s \in P_2. \quad (2.46)$$

Visose grafo viršūnėse galioja tolydumo sąlygos

$$u^m(p_j, t) = u^k(p_j, t), \quad \forall p_j \in P_1, \quad e_m, e_k \in N^\pm(p_j), \quad (2.47)$$

$$u_s = u^k(p_s, t), \quad \forall p_s \in P_2, \quad e_k \in N^\pm(p_s). \quad (2.48)$$

Pradinės sąlygos formuluojamos, kai $t = 0$:

$$u^k(x, 0) = u_0^k(x), \quad 0 \leq x \leq l_k, \quad k = 1, \dots, K. \quad (2.49)$$

Kaip ir 2.2 poskyryje, pagrindinės lygtys (2.42)–(2.49) diskretizuojamos taikant baigtinių tūrių metodą. Kiekvienoje briaunoje $e_k, k = 1, \dots, K$ apibrėžiame diskretųjį tolygųjį tinklą

$$\omega_h(k) = \{x_j^k : x_j^k = jh_k, j = 1, \dots, N_k - 1\}, \quad x_{N_k}^k = l_k,$$

$$\bar{\omega}_h(k) = \omega_h(k) \cup \{x_0^k, x_{N_k}^k\}$$

ir tolygųjį laiko tinklą $\omega_\tau = \{t^n : t^n = n\tau, n = 0, \dots, N, N\tau = T_f\}$.

Diferencialinė lygtis (2.42) aproksimuojama tokia skirtumine lygtimi:

$$\partial_t U_j^{k,n} = \partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}}^k \partial_x U_j^{k,n}) + f_j^{k,n}, \quad x_j^k \in \omega_h(k), \quad k = 1, \dots, K, \quad n \geq 1. \quad (2.50)$$

Kraštinės sąlygos apibrėžiamos kraštinėse viršūnėse

$$U^{k,n}(p_j) = \mu_j(t^n), \quad \forall p_j \in T. \quad (2.51)$$

Tvermės dėsniai (2.45)–(2.46) aproksimuojami diskrečiosiomis tvermės lygtimis:

$$\sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} U_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} (\partial_t U_{N_k}^{k,n} - f_{N_k}^{k,n}) \right] \quad (2.52)$$

$$= \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{1/2}^m \partial_x U_0^{m,n} - \frac{h_m}{2} (\partial_t U_0^{m,n} - f_0^{m,n}) \right], \quad \forall p_j \in P_1,$$

$$\begin{aligned} & c \partial_t U_s^n + \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} U_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} (\partial_t U_{N_k}^{k,n} - f_{N_k}^{k,n}) \right] \\ & - \sum_{e_m \in N^-(p_s)} \left[d_{1/2}^m \partial_x U_0^{m,n} - \frac{h_m}{2} (\partial_t U_0^{m,n} - f_0^{m,n}) \right] = f_s^n, \quad \forall p_s \in P_2. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Visose viršūnėse galioja tolydumo sąlygos

$$U^{m,n}(p_j) = U^{k,n}(p_j), \quad \forall p_j \in P_1, \quad e_m, e_k \in N^\pm(p_j) \quad (2.54)$$

$$U_s^n = U^{m,n}(p_s), \quad \forall p_s \in P_2, \quad e_m \in N^\pm(p_s). \quad (2.55)$$

Akiivaizdu, kad 2.2 poskyryje įrodyti rezultatai galioja ir diskrečiajam uždaviniui (2.50)–(2.54).

2.3.2. Lygiagretus prediktoriaus – korektoriaus algoritmas

Lygiagretus algoritmas sukurtas nuosekliojo diskrečiojo algoritmo (2.50)–(2.54) pagrindu taikant srities skaidymo metodą.

1. **Grafo skaidymo žingsnis.** Pirmajame žingsnyje skaičiavimo sritis – grafas – dalinama į posričius. Pažymėkime aibę briaunų, jungiančių viršūnes skirtinguose posričiuose $D = \{e_s \in E, s = 1, \dots, S\}$. Ta-

da kiekvienas tinklas $\omega_h(s)$ šiose briaunose dalinamas į du potinklius pjaunant briauną per vidurio tašką

$$B = \{x_{j_s} \in \omega_h(s), \quad j_s = N_s/2, \quad s = 1, \dots, S\}.$$

2. **Prediktoriaus žingsnis.** Lygiagrečiai apskaičiuojamos naujos sprendinio reikšmės dalijimo taškuose $x_{j_s} \in B$. Diferencialinė lygtis (2.42) aproksimuojama išreikštine Eulerio schema:

$$\frac{\tilde{U}_{j_s}^{s,n} - U_{j_s}^{s,n-1}}{\tau} = \partial_{\bar{x}}(d_{j_s+\frac{1}{2}}^s \partial_x U_{j_s}^{s,n-1}) + f_{j_s}^{s,n}, \quad s = 1, \dots, S. \quad (2.56)$$

3. **Srities skaidymo žingsnis.** Sprendiniai pografuose apskaičiuojami lygiagrečiai naudojant neišreikštinę baigtinių skirtumų schemą (2.50)–(2.54). Apskaičiuotos prediktoriaus žingsnyje reikšmės $\tilde{U}_{j_s}^{s,n}$ naudojamos kaip kraštinės sąlygos.
4. **Korektoriaus žingsnis.** Taikant neišreikštinę baigtinių skirtumų schemą ir naudojant antrame žingsnyje apskaičiuotą sprendinį U^n , lygiagrečiai atnaujinamas sprendinys padalijimo taškuose:

$$\frac{U_{j_s}^{s,n} - U_{j_s}^{s,n-1}}{\tau} = \partial_{\bar{x}}(d_{j_s+\frac{1}{2}}^s \partial_x U_{j_s}^{s,n}) + f_{j_s}^{s,n}, \quad s = 1, \dots, S. \quad (2.57)$$

2.3.3. Konvergavimo analizė normoje H_1

Nagrinėkime diskretaus prediktoriaus – korektoriaus algoritmo stabilumą ir tikslumą. Vidinėse viršūnėse $p_j \in P_1 \cup P_2$ nagrinėsime tik pirmojo tipo tvėrmės dėsnį, nes antrojo tipo viršūnėms taikomi 2.2 skyriaus rezultatai:

Apibrėžkime potinklius

$$\tilde{\omega}_h(k) = \omega_h(k) \setminus \{x_{j_s \pm 1}, s = 1, \dots, S\}, \quad k = 1, \dots, K.$$

Kaip ir anstesniame poskyryje, diskrečiojo sprendinio globalią paklaidą žymėsime

$$\begin{aligned} Z_j^{k,n} &= U_j^{k,n} - u^k(x_j, t^n), \quad k = 1, \dots, K, \quad x_j^k \in \tilde{\omega}_h(k), \\ \tilde{Z}_{j_s}^{s,n} &= \tilde{U}_{j_s}^{s,n} - u^s(x_{j_s}, t^n), \quad s = 1, \dots, S. \end{aligned}$$

Istatę paklaidą į baigtinių skirtumų schemą, gauname, kad Z tenkina diskretųjį

uždavinį:

$$\partial_t Z_j^{k,n} = \partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}}^k \partial_x Z_j^{k,n}) + \psi_j^{k,n}, \quad x_j^k \in \tilde{\omega}_h(k), \quad k = 1, \dots, K, \quad (2.58)$$

$$Z^{m,n}(p_j) = 0, \quad \forall p_j \in T, \quad (2.59)$$

$$\sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} \partial_t Z_{N_k}^{k,n} \right] \quad (2.60)$$

$$- \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{1/2}^m \partial_x Z_0^{m,n} - \frac{h_m}{2} \partial_t Z_0^{m,n} \right] = \varphi^n(p_j), \quad \forall p_j \in P_1,$$

$$\partial_t Z_{j_s \pm 1}^{s,n} = \partial_{\bar{x}}(d_{j_s \pm 1 + \frac{1}{2}}^s \partial_x Z_{j_s \pm 1}^{s,n}) \quad (2.61)$$

$$+ d_{j_s \pm \frac{1}{2}} \frac{\tilde{Z}_{j_s}^{s,n} - Z_{j_s}^{s,n}}{h_s^2} + \psi_{j_s \pm 1}^n, \quad x_{j_s} \in B,$$

$$\frac{\tilde{Z}_{j_s}^{s,n} - Z_{j_s}^{s,n-1}}{\tau} = \partial_{\bar{x}}(d_{j_s + \frac{1}{2}}^s \partial_x Z_{j_s}^{k,n-1}) + \tilde{\psi}_{j_s}^{s,n}, \quad x_{j_s} \in B, \quad (2.62)$$

čia funkcijos $\psi^{k,n}$, $\tilde{\psi}^{s,n}$ ir φ^n žymi baigtinių skirtumų schemos netiktį.

Visose viršūnėse paklaidos funkcijoms galioja tolydumo sąlyga

$$Z^{m,n}(p_j) = Z^{k,n}(p_j), \quad \forall p_j \in P_1, \quad e_m, e_k \in N^\pm(p_j). \quad (2.63)$$

Tarkime, kad pradiniai duomenys, koeficientai ir uždavinio (2.42)–(2.49) sprendinys yra pakankamai glodūs. Taikydami Teiloro skleidinio formulę baigtinių skirtumų schemos (2.56)–(2.57) netiktis įvertiname taip:

$$|\psi_j^{k,n}| \leq C(\tau + h_k^2), \quad x_j^k \in \omega_h(k), \quad k = 1, \dots, K, \quad n > 0, \quad (2.64)$$

$$|\varphi^n(p_j)| \leq C(\tau h + h^2), \quad p_j \in P_1, \quad n > 0, \quad h = \max_k h_k,$$

$$|\psi_{j_s}^{s,n} - \tilde{\psi}_{j_s}^{s,n}| \leq C\tau, \quad \forall x_{j_s} \in B.$$

Pirmieji du įverčiai gaunami iš 2.2 lemos, kai parametras $\theta = 1$. Panagrinėkime trečiąjį įvertį. Susumavę netikčių išraiškas turime

$$\begin{aligned} \psi_{j_s}^{s,n} - \tilde{\psi}_{j_s}^{s,n} &= -\partial_{\bar{x}}(d_{j_s + \frac{1}{2}} \partial_x u_{j_s} s, n) + \partial_{\bar{x}}(d_{j_s + \frac{1}{2}} \partial_x u_{j_s}^{s,n-1}) \\ &= -\tau \partial_{\bar{x}}(d_{j_s + \frac{1}{2}} \partial_x \frac{u_{j_s}^{s,n} - u_{j_s}^{s,n-1}}{\tau}), \end{aligned}$$

čia skirtumą galime užrašyti integraline forma:

$$\frac{u_{j_s}^{s,n} - u_{j_s}^{s,n-1}}{\tau} = \frac{1}{\tau} \int_{t^{n-1}}^{t^n} \frac{\partial u(x_j, s)}{\partial s} ds = \frac{1}{\tau} \int_{t^{n-1}}^{t^n} v_j(s) ds.$$

Taigi, jei dalinė išvestinė $\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t}$ aprėžta, dydis

$$\partial_{\bar{x}}(d_{j_s+\frac{1}{2}} \partial_x \frac{u_{j_s}^{s,n} - u_{j_s}^{s,n-1}}{\tau}) = \frac{1}{\tau} \int_{t^{n-1}}^{t^n} \partial_{\bar{x}}(d_{j_s+\frac{1}{2}} \partial_x v_j) ds$$

irgi yra aprėžtas.

Gerai žinomas faktas, kad išreikštinė Eulerio schema yra tik sąlygiškai stabili, todėl taikyti maksimumo principo prediktoriaus – korektorius schemai negalime. Analizę atliksime energetiniu metodu (Shi, Liao 2006). Tegu

$$V_h = \{V : V = \{V_j^k\}, \quad k = 1, \dots, K, \quad j = 0, \dots, N_k, \quad V_j^k = 0, \quad x_j^k \in T\}.$$

Galioja paprastas apibendrinimas gerai žinomos idėjimo teoremos: kiekvienam $V \in V_h$ teisingas įvertis

$$\|V\|_{\infty} \leq C \|V\|_E, \quad C = \left(\frac{1}{d_0} \sum_{k=1}^K l_k \right)^{1/2}. \quad (2.65)$$

2.8 lema. Tegul $Z^{k,n}$ tenkina uždavinį (2.58)–(2.63). Tada galioja nelygybė

$$\begin{aligned} E^n \leq E^0 + \tau \sum_{l=1}^n \left\{ \|\psi^l\|^2 + \frac{J_1}{h} \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^l(p_j)|^2 \right. \\ \left. + \sum_{s=1}^S \left[\frac{2\tau \bar{d}_{j_s}^s}{h_s} (\psi_{j_s}^{s,l})^2 + \left(\frac{4\tau d_M^2 C}{h_s} + \frac{h_s^2}{2} \right) (\tilde{\psi}_{j_s}^{s,l} - \psi_{j_s}^{s,l})^2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.66)$$

čia $J_1 = |P_1|$, o funkcionalas E^n yra apibrėžtas taip

$$E^n = \|Z^n\|_E^2 + 2\tau^2 \sum_{s=1}^S \frac{\bar{d}_{j_s}^s}{h_s} \left(\partial_x(d_{j_s-1/2}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) \right)^2.$$

Įrodymas. Padauginę lygtį (2.58) iš $2h_k \tau \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}$, $x_j^k \in \tilde{w}_h(k)$, $k = 1, \dots, K$, o lygtį (2.61) iš $2h_s \tau \partial_{\bar{t}} Z_{j_s \pm 1}^{s,n}$, $x_s \in B$, susumavę rezultatus gauname

$$\begin{aligned}
2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} |\partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}|^2 &= 2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n} \partial_{\bar{x}} (d_{j+\frac{1}{2}}^k \partial_x Z_j^{k,n}) \quad (2.67) \\
&+ 2\tau \sum_{s=1}^S \frac{\tilde{Z}_{j_s}^{s,n} - Z_{j_s}^{s,n}}{h_s} (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{t}} Z_{j_s-1}^{s,n} + d_{j_s+\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{t}} Z_{j_s+1}^{s,n}) \\
&+ 2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \psi_j^{k,n} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}.
\end{aligned}$$

Taikydami Gryno formulę, gauname

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n} \partial_{\bar{x}} (d_{j+\frac{1}{2}}^k \partial_x Z_j^{k,n}) &= - \sum_{k=1}^K \left(h_k \sum_{j=1}^{N_k} d_{j-\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n} \partial_{\bar{x}} Z_j^{k,n} \right. \\
&\left. - d_{N_k-\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{t}} Z_{N_k}^{k,n} \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} + d_{\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{t}} Z_0^{k,n} \partial_x Z_0^{k,n} \right).
\end{aligned}$$

Atsižvelgę į kraštinės sąlygas kraštinėse viršūnėse, srautus kitose viršūnėse $p_j \in P_1$ sugrupuojame taip:

$$\begin{aligned}
&\sum_{k=1}^K \left(d_{N_k-\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{t}} Z_{N_k}^{k,n} \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} - d_{\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{t}} Z_0^{k,n} \partial_x Z_0^{k,n} \right) \\
&= \sum_{p_j \in P_1} \left(\sum_{e_k \in N^+(p_j)} d_{N_k-\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n}(p_j) - \sum_{e_m \in N^-(p_j)} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_m^{m,n}(p_j) \right) \partial_{\bar{t}} Z^n(p_j).
\end{aligned}$$

Iš (2.67), pritaikę lygybę $2Z^n = Z^n + Z^{n-1} + \tau \partial_{\bar{t}} Z^n$ ir lygtį (2.60), gauname

$$\begin{aligned}
2\tau \|\partial_{\bar{t}} Z^n\|^2 + \tau^2 \|\partial_{\bar{t}} Z^n\|_E^2 + \|Z^n\|_E^2 &= \|Z^{n-1}\|_E^2 \quad (2.68) \\
&+ 2\tau \sum_{s=1}^S \frac{\tilde{Z}_{j_s}^{s,n} - Z_{j_s}^{s,n}}{h_s} (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{t}} Z_{j_s-1}^{s,n} + d_{j_s+\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{t}} Z_{j_s+1}^{s,n}) \\
&+ 2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \psi_j^{k,n} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n} + 2\tau \sum_{p_j \in P_1} \varphi^n(p_j) \partial_{\bar{t}} Z^n(p_j).
\end{aligned}$$

Pritaikę Koši-Švarco nelygybę ir ε -nelygybę, gauname

$$2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \psi_j^{k,n} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n} \leq \tau \|\partial_{\bar{t}} Z^n\|^2 + \tau \|\psi^n\|^2. \quad (2.69)$$

Panašiai gaunamas įvertis

$$\begin{aligned} 2\tau \sum_{p_j \in P_1} \varphi^n(p_j) \partial_{\bar{t}} Z^n(p_j) &\leq 2\tau \sum_{p_j \in P_1} \left(\frac{h}{2J_1} |\partial_{\bar{t}} Z^n(p_j)|^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{J_1}{2h} |\varphi^n(p_j)|^2 \right) \leq \tau \|\partial_{\bar{t}} Z^n\|^2 + \frac{\tau J_1}{h} \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^n(p_j)|^2. \end{aligned} \quad (2.70)$$

Telieka įvertinti prediktoriaus žingsnyje įneštą paklaidą. Iš lygčių (2.58), (2.62) seka, kad

$$\tilde{Z}_{j_s}^{s,n} - Z_{j_s}^{s,n} = -\tau^2 \partial_{\bar{t}} \partial_x (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) + \tau (\tilde{\psi}_{j_s}^{s,n} - \psi_{j_s}^{s,n}), \quad x_{j_s} \in B.$$

Perrašome narį $d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{t}} Z_{j_s-1}^{s,n} + d_{j_s+\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{t}} Z_{j_s+1}^{s,n}$ dviem būdais:

$$\begin{aligned} d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{t}} Z_{j_s-1}^{s,n} + d_{j_s+\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{t}} Z_{j_s+1}^{s,n} &= h_s^2 \partial_{\bar{t}} \partial_x (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) + 2\bar{d}_{j_s}^s \partial_{\bar{t}} Z_{j_s}^{s,n} \\ &= h_s^2 \partial_{\bar{t}} \partial_x (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) + 2\bar{d}_{j_s}^s \left(\partial_x (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) + \psi_{j_s}^{s,n} \right), \end{aligned}$$

čia $\bar{d}_{j_s}^s = (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s + d_{j_s+\frac{1}{2}}^s)/2$. Tada suskaidome likusį įvertį į penkias dalis

$$\frac{2\tau}{h_s} (\tilde{Z}_{j_s}^{s,n} - Z_{j_s}^{s,n}) (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{t}} Z_{j_s-1}^{s,n} + d_{j_s+\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{t}} Z_{j_s+1}^{s,n}) = T_1 + T_2 + T_3 + T_4 + T_5,$$

kur

$$\begin{aligned} T_1 &= -2\tau^3 h_s \left(\partial_{\bar{t}} \partial_x (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) \right)^2, \\ T_2 &= -\frac{4\tau^3 \bar{d}_{j_s}^s}{h_s} \partial_x (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) \partial_{\bar{t}} \partial_x (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) \\ &= -\frac{2\tau^2 \bar{d}_{j_s}^s}{h_s} \left((\partial_x (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}))^2 - (\partial_x (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n-1}))^2 \right. \\ &\quad \left. + \tau^2 (\partial_{\bar{t}} \partial_x (d_{j_s-\frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}))^2 \right). \end{aligned}$$

Pritaikę Koši-Švarco nelygybę ir ε -nelygybę, gauname įverčius:

$$\begin{aligned} T_3 &= \frac{4\tau^3 \bar{d}_{j_s}^s}{h_s} \partial_{\bar{t}} \partial_x (d_{j_s - \frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) \psi_{j_s}^{s,n} \\ &\leq \frac{2\tau^4 \bar{d}_{j_s}^s}{h_s} \left(\partial_{\bar{t}} \partial_x (d_{j_s - \frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) \right)^2 + \frac{2\tau^2 \bar{d}_{j_s}^s}{h_s} (\psi_{j_s}^{s,n})^2, \\ T_4 &= 2\tau^2 h_s \partial_{\bar{t}} \partial_x (d_{j_s - \frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) (\tilde{\psi}_{j_s}^{s,n} - \psi_{j_s}^{s,n}) \\ &\leq 2\tau^3 h_s \left(\partial_{\bar{t}} \partial_x (d_{j_s - \frac{1}{2}}^s \partial_{\bar{x}} Z_{j_s}^{s,n}) \right)^2 + \frac{\tau h_s}{2} (\tilde{\psi}_{j_s}^{s,n} - \psi_{j_s}^{s,n})^2. \end{aligned}$$

Pritaikę idėjimo įvertį (2.65), įvertiname paskutinį narį

$$\begin{aligned} T_5 &= \frac{4\tau^2 \bar{d}_{j_s}^s}{h_s} (\tilde{\psi}_{j_s}^{s,n} - \psi_{j_s}^{s,n}) \partial_{\bar{t}} Z_{j_s}^{s,n} \leq \frac{4\tau^2 d_M}{h_s} |\tilde{\psi}_{j_s}^{s,n} - \psi_{j_s}^{s,n}| |\partial_{\bar{t}} Z_{j_s}^{s,n}| \\ &\leq \frac{4\tau^2 d_M C}{h_s} |\tilde{\psi}_{j_s}^{s,n} - \psi_{j_s}^{s,n}| \|\partial_{\bar{t}} Z_{j_s}^{s,n}\|_E \\ &\leq \frac{\tau^2}{S} \|\partial_{\bar{t}} Z^n\|_E^2 + \frac{4d_M^2 C S \tau^2}{h_s^2} (\tilde{\psi}_{j_s}^{s,n} - \psi_{j_s}^{s,n})^2. \end{aligned}$$

Išstatę lygtis (2.69), (2.70) į lygtį (2.68) ir naudodami gautas nelygybes T_m , $m = 1, \dots, 5$, įvertiname

$$\begin{aligned} E^n &\leq E^{n-1} + \tau \left(\|\psi^n\|^2 + \frac{J_1}{h} \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^n(p_j)|^2 + \sum_{s=1}^S \left[\frac{2\tau \bar{d}_{j_s}^s}{h_s} (\psi_{j_s}^{s,n})^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left(\frac{4\tau d_M^2 C}{h_s^2} + \frac{h_s}{2} \right) (\tilde{\psi}_{j_s}^{s,n} - \psi_{j_s}^{s,n})^2 \right] \right). \end{aligned}$$

Kartodami šią procedūrą gauname norimą rezultatą (2.66). $\square$

Pritaikę 2.8 lemoje pateiktą stabilumo įvertį ir netikčių įverčius (2.64), gauname konvergavimo rezultatą.

2.4 teorema. Tegul U yra baigtinių skirtumų schemos (2.56)–(2.57) sprendinys, o $u(x, t)$ yra diferencialinio uždavinio (2.42)–(2.49) sprendinys. Tada

$$\|U^n - u^n\|_E \leq C t^n \left(\tau + h^{\frac{3}{2}} + \frac{\tau \sqrt{\tau}}{h} \right). \quad (2.71)$$

Pažymėsime, kad konvergavimo įverčio (2.71) pirmoji dalis $\tau + h^{\frac{3}{2}}$ atitin-

ka neišreikštinės schemos paklaidą. Poskyryje 2.2.5 irodėme tą patį neišreikštinės schemos konvergavimo greitį, tačiau poskyryje 2.2.6 šį įvertį pagerinome taikant mažoruojančių funkcijų metodą. Taigi, galime teigti, kad tikėtinas konvergavimo greitis šiuo atveju yra $\left(\tau + h^2 + \frac{\tau\sqrt{\tau}}{h}\right)$.

Iš lemos 2.8 ir įverčio (2.71) seka, kad baigtinių skirtumų schema (2.56)–(2.57) yra besąlygiškai stabili, tačiau schemos aproksimavimo tikslumas susijusioje normoje yra tik sąlyginis.

2.3.4. Konvergavimo analizė normoje L_∞

Šiame poskyryje panagrinėsime skaičiavimo schemos (2.56)–(2.57) stabilumą normoje L_∞ . Paprastumo dėlei apsiribosime vienmačiu paraboliniu uždaviniu:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(d(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) - q(x)u(x,t) + f(x,t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \quad (2.72)$$

$$0 < d_0 \leq d(x) \leq d_M, \quad q(x) \geq 0,$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1,$$

$$u(0,t) = \mu_L(t), \quad u(1,t) = \mu_R(t), \quad 0 < t \leq T.$$

Pažymėsime, kad (2.72) lygtis turi tiesinį sugėrimo narį $q(x)u(x)$.

Sritį $\bar{\Omega} = [0, 1]$ daliname į dvi dalis

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{k=1}^2 \bar{\Omega}_k, \quad \bar{\Omega}_1 = [0, l], \quad \bar{\Omega}_2 = [l, 1], \quad 0 < l < 1.$$

Pagal srities padalijimą erdvinis tinklas dalinamas į potinklius $\bar{\omega}_h = \bigcup_{k=1}^2 \bar{\omega}_h^k$,
čia

$$\bar{\omega}_h^k = \{x_j : x_j = jh, j = j_{k-1}, \dots, j_k\}, \quad x_{j_0} = 0, \quad x_{j_1} = l, \quad x_{j_2} = 1.$$

Pažymėsime, kad šiame uždavinyje naudojame globalų tinklo mazgų žymėjimą.

Paimkime koeficientų reikšmes $a(x) \equiv 1$, $q(x) \equiv 0$ ir apibrėžkime

$$g = \max_{1 \leq n \leq N} \max_{x_j \in \omega_h} |\psi_j^n|, \quad \tilde{g} = \max_{1 \leq n \leq N} |\varphi_l^n - \psi_l^n|, \quad G = \tilde{g} + g.$$

Taikydami mažoruojančių funkcijų metodą, suformuluojame stacionarųjį pre-

diktoriaus – korektoriaus uždavinį:

$$\begin{cases} -\partial_x \partial_{\bar{x}} W_j = g, & 1 \leq j < l, \\ W_0 = 0, & W_l^p = \tilde{W}_l, \end{cases} \quad \begin{cases} -\partial_x \partial_{\bar{x}} W_j = g, & l < j < 1, \\ W_l^p = \tilde{W}_l, & W_1 = 0, \end{cases} \quad (2.73)$$

$$\frac{\tilde{W}_l - W_l}{\tau} = \partial_x \partial_{\bar{x}} W_l + G,$$

$$-\partial_x \partial_{\bar{x}} W_l = g, \quad j = m.$$

Skačiuojant perkelties metodu, diskretaus uždavinio (2.73) sprendinys gali būti užrašytas išreikštinėje formoje:

$$W_j = \begin{cases} A \frac{x_j}{x_l} + \frac{g}{2} x_j (1 - x_j), & 0 \leq j \leq l, \\ A \frac{1 - x_j}{1 - x_l} + \frac{g}{2} x_j (1 - x_j), & l < j \leq 1, \end{cases} \quad A = \frac{2\tau(x_l - x_l^2 - h/2)}{h} \tilde{g}.$$

Matome, kad sprendinys W yra aprėžtas iš viršaus

$$|W_j| \leq C \left(\tau + h^2 + \frac{\tau^2}{h} \right) \quad (2.74)$$

ir šis konvergavimo greitis yra geresnis, nei įrodytas 2.4 teoremoje.

2.3.5. Srities skaidymo metodas

Šioje dalyje palyginsime aukščiau gautus rezultatus su rezultatais, kuriuos pateikė Vabishchevich (2011). Čia prediktoriaus – korektoriaus schemos stabilumas tiriamas naudojant srities skaidymo metodą, grindžiamą adityvaus skaidymo schemomis (ang. *additive splitting schemes*).

Daug žinomų ir naujų schemų galima užrašyti operatorinių – skirtuminių schemų pavidalu. Pavyzdžiui, šis būdas taikomas užrašant schemas su lokaliuoju laiko ar erdvės tinklelio smulkinimu arba srities skaidymo metodu gaunamas schemas, skirtas realizuoti lygiagrečiuose kompiuteriuose. Operatorinių – skirtuminių schemų teorijoje daugiausia dėmesio skiriama dviejų ir trijų sluoksnių schemoms. Apsiribosime vienmačiu uždaviniu (2.72).

Srities skaidymo algoritmas panašus į lygiagretų prediktoriaus – korektoriaus algoritmą, išdėstyta 2.3.2 poskyryje:

1. **Prediktoriaus žingsnis.** Sprendinys bendruose dviejų posričių taškuo-

se apskaičiuojamas naudojant išreikštinį Eulerio metodą

$$\frac{\tilde{U}_{j_1}^n - U_{j_1}^{n-1}}{\tau} = \partial_{\bar{x}}(d_{j_1+\frac{1}{2}} \partial_x U_{j_1}^{n-1}) - q_{j_1} U_{j_1}^{n-1} + f_{j_1}^n. \quad (2.75)$$

2. **Srities skaidymo žingsnis.** Sprendiniai kiekviename posirtyje apskaičiuojami lygiagrečiai naudojant neišreikštinę baigtinių skirtumų schemą (2.76), o prognozuojamos reikšmės $\tilde{U}_{j_1}^n$ naudojamos kaip kraštinės sąlygos:

$$\begin{aligned} \partial_t U_j^n &= \partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x U_j^n) - q_j U_j^n + f_j^n, \quad \forall x_j \in \omega_h^k, \quad k = 1, 2, \\ U_0^n &= \mu_L(t^n), \quad U_{j_1}^n = \tilde{U}_{j_1}^n, \quad U_J^n = \mu_R(t^n). \end{aligned} \quad (2.76)$$

3. **Korektoriaus žingsnis.** Sprendinio reikšmės posrčių bendruose taškuose atnaujinamos taikant neišreikštinę baigtinių skirtumų schemą (2.76) ir naudojant apskaičiuotą antrame žingsnyje sprendinį U^n :

$$\partial_t U_{j_1}^n = \partial_{\bar{x}}(d_{j_1+\frac{1}{2}} \partial_x U_{j_1}^n) - q_{j_1} U_{j_1}^n + f_{j_1}^n. \quad (2.77)$$

Remiantis (Vabishchevich 2011), galime užrašyti šią prediktoriaus – korektoriaus schemą kaip adityvaus skaidymo schemą. Vienetinio operatoriaus I adityvų pateikimą susiejame su diskrečiosios srities ω_h padalijimu:

$$\sum_{j=1}^2 \chi_j = I, \quad \chi_j \geq 0, \quad j = 1, 2.$$

Tada apibrėžiame diskrečiuosius operatorius:

$$A_h U^n = -\partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x U_j^n) + q_j U_j^n, \quad A_{h,\alpha} = \chi_\alpha A_h, \quad \alpha = 1, 2.$$

Operatorius A_h yra savijungus (skaliarinės sandaugos atžvilgiu) ir teigiamai apibrėžtas:

$$A_h = A_h^*, \quad A_h \geq \lambda_0 I, \quad \lambda_0 = \frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{\pi h}{2}\right). \quad (2.78)$$

Operatoriai $A_{h,\alpha}$ nepaveldi šių pagrindinių savybių, todėl skaidymo schemų konstravimas ir analizė yra pakankamai netriviali užduotis.

Prediktoriaus – korektoriaus schema (2.75)–(2.77) gali būti užrašyta kaip

Douglas schema

$$\frac{U_j^{n-1/2} - U_j^{n-1}}{\tau} + A_{h,1}U_j^{n-1/2} + A_{h,2}U_j^{n-1} = f_j^n, \quad x_j \in \omega_h, \quad (2.79)$$

$$\frac{U_j^n - U_j^{n-1}}{\tau} + A_{h,1}U_j^{n-1/2} + A_{h,2}U_j^n = f_j^n, \quad x_j \in \omega_h.$$

Eliminavę tarpinį sprendinį $U^{n-1/2}$, gauname ekvivalenčią faktorizuotą schemą

$$(I + \tau A_{h,1})(I + \tau A_{h,2})\partial_{\bar{\tau}}U_j^n + A_h U_j^{n-1} = f_j^n, \quad x_j \in \omega_h. \quad (2.80)$$

Atitinkamas paklaidos $Z_j^n = U_j^n - u(x_j, t^n)$ uždavinys apibrėžiamas taip:

$$(I + \tau A_{h,1})(I + \tau A_{h,2})\partial_{\bar{\tau}}Z_j^n + A_h Z_j^{n-1} = \psi_j^n, \quad Z_j^0 = 0, \quad x_j \in \omega_h, \quad (2.81)$$

čia ψ^n yra netiktis

$$\psi_j^n = f_j^n - (I + \tau A_{h,1})(I + \tau A_{h,2})\partial_{\bar{\tau}}u_j^n - A_h u_j^{n-1}, \quad x_j \in \omega_h.$$

Darbe (Vabishchevich 2011) įrodytas toks konvergavimo įvertis (daugiau rezultatų tyriant Douglas schemų stabilumą galima rasti darbuose (Hundsdofer, Verwer 2003; Samarskii 2001)):

$$\|(I + \tau A_{h,2})Z^n\|_{A_h} \leq t^n \|(I + \tau A_{h,1})^{-1}\psi^n\|_{A_h}, \quad (2.82)$$

čia energetinė norma apibrėžta taip: $\|Z\|_{A_h} = (A_h Z, Z)^{1/2}$.

Netiktį išskaidome į dvi dalis $\psi_j^n = \psi_{1,j}^n + \psi_{2,j}^n$. Pirmasis narys aprašo neišreikštinės Eulerio schemos netiktį

$$\psi_{1,j}^n = f_j^n - \partial_{\bar{\tau}}u_j^n - A_h u_j^n, \quad x_j \in \omega_h,$$

antrasis narys aprašo skaidymo žingsnio netiktį (t. y. prediktoriaus – korektoriaus netiktį):

$$\psi_{2,j}^n = -\tau^2 A_{h,1} A_{h,2} \partial_{\bar{\tau}} u_j^n.$$

Skaidymo žingsnio paklaida gali būti įvertinta taip (Vabishchevich 2011):

$$\|(I + \tau A_{h,1})^{-1}\psi_2^n\|_{A_h} \leq C\tau \|\chi_2\|_{A_h} \leq C \frac{\tau}{\sqrt{h}}. \quad (2.83)$$

2.5 lentelėje surinkti trys gauti skaidymo schemas (2.75)–(2.77) aproksimavimo paklaidos ψ_2^n įverčiai, šie įverčiai pritaikyti skirtingiems sąryšiams tarp τ ir h .

2.5 lentelė. Srities skaidymo paklaidos ψ_2^n teorinė analizė

Table. 2.5. Theoretical analysis of the domain decomposition error ψ_2^n

	(2.74) $O\left(\frac{\tau^2}{h}\right)$	(2.71) $O\left(\frac{\tau\sqrt{\tau}}{h}\right)$	(2.83) $O\left(\frac{\tau}{\sqrt{h}}\right)$
$\tau = h^2$	$O(h^3)$	$O(h^2)$	$O(h^{3/2})$
$\tau = h$	$O(h)$	$O(\sqrt{h})$	$O(\sqrt{h})$
$\tau = \sqrt{h}$	$O(1)$	$O(h^{-1/4})$	$O(1)$

Pateiksime skaičiavimo eksperimento rezultatus. Sprendėme vienmatį parabolinį uždavinį su pastoviu difuzijos koeficientu $d(x) = 1$ ir $q(x) = 0$. Tikslusis diferencialinio uždavinio sprendinys yra $u = tx(1 - x)$. Šiuo atveju $\psi_1^n = 0$, taigi analizuojama yra tik srities skaidymo paklaida ψ_2^n . Kadangi paklaidos Z^n elgsena yra tokia pat visose testuotose normose, 2.6 lentelėje pateiktos tik paklaidos energetinėje normoje $\|Z^n\|_E$ reikšmės, kai $t = 1$.

2.6 lentelė. Skaičiavimo eksperimento rezultatai: paklaidos ψ_2^n analizė

Table. 2.6. Results of computational experiments: analysis of approximation error ψ_2^n

$\tau = 50h^2$	$h = 0,02$	$h = 0,01$	$h = 0,005$	$h = 0,0025$
$\ Z(t = 1)\ _E$	0,039264	0,0049497	0,0006218	0,0000779
p		2,9878	2,9928	2,9968
$\tau = h$	$h = 0,02$	$h = 0,01$	$h = 0,005$	$h = 0,0025$
$\ Z(t = 1)\ _E$	0,039264	0,019799	0,009950	0,004987
p		0,98778	0,99266	0,99652
$\tau = 0,1\sqrt{h}$	$h = 0,04$	$h = 0,01$	$h = 0,0025$	$h = 0,000625$
$\ Z(t = 1)\ _E$	0,019174	0,019799	0,019950	0,019987
p		-0,02313	-0,00548	-0,00134

Matome, kad šiuo atveju skaidymo žingsnio paklaida yra $\frac{\tau^2}{h}$ eilės.

Lentelėje 2.7 pateikti skaičiavimo eksperimento rezultatai, kai sprendžiamas uždavinys grafe su koeficientais $d(x) = x + 1$, $q(x) = x + 1$. Tikslusis diferencialinio uždavinio sprendinys $u = x^2(l_k - x)^2 \exp(t + 1)$, taigi Eulerio metodas irgi įneša savo paklaidą.

2.7 lentelė. Skaičiavimo eksperimento rezultatai: paklaida $\|Z(t = 1)\|_\infty$

Table. 2.7. Results of computational experiments: global error $\|Z(t = 1)\|_\infty$

τ	0,1	0,1/2	0,1/4	0,1/8	0,1/16	0,1/32	0,1/64
$h = 0,05$	0,0771	0,0626	0,0586	0,0575	0,0572	0,0571	0,0571
$h = 0,05/2$	0,1382	0,0382	0,0172	0,0151	0,0146	0,0144	0,0144
$h = 0,05/4$	0,2565	0,0792	0,0206	0,0055	0,0040	0,0037	0,0036
$h = 0,05/8$	0,3773	0,1659	0,0416	0,0107	0,0028	0,0011	0,0009

Pirmajame stulpelyje, kai τ yra pakankamai didelis, dominuoja paklaidos dalis $\frac{1}{h}$: mažindami h du kartus paklaidą padidiname apie du kartus, – o paskutiniame, kai τ yra mažas, dominuoja paklaida h^2 : mažindami h du kartus paklaidą sumažiname apie keturis kartus. Paskutinė lentelės eilutė, kai h yra pakankamai mažas ir fiksuotas, rodo konvergavimą τ^2 eilės: mažindami τ du kartus paklaidą sumažiname apie keturis. Galime padaryti išvadą, kad skaičiavimo eksperimento sprendinys konverguoja greičiu $C(h^2 + \frac{\tau^2}{h})$, tai patvirtina teorinius konvergavimo įverčius.

2.4. Prediktorius – korektorius algoritmas II

Šiame skyriuje nagrinėjama dar viena prediktorius – korektorius tipo schema paraboliniam uždaviniui grafuose, grindžiama kitu srities padalijimu. Šiuo atveju garafas yra skaidomas viršūnėse, tokiu būdu gauname aibę vienmačių parabolinių uždavinių, kurie yra efektyviai sprendžiami perkelties metodu. Sprendžiamas parabolinis uždavinys (2.42)–(2.49).

Diferencialinėms lygtims aproksimuoti naudojame išreikštinę ir neišreikštinę baigtinių skirtumų schemas. Prediktorius – korektorius algoritmas apibrėžiamas taip:

1. **Prediktorius žingsnis.** Apskaičiuojame sprendinį grafo viršūnėse

$p_j \in P_1 \cup P_2$ aproksimuodami lygtis (2.45), (2.46) išreikštine Eulerio schema ir naudodami tolydumo sąlygas:

$$\sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} U_{N_k}^{k,n-1} + \frac{h_k}{2} \left(\frac{\tilde{U}_{N_k}^{k,n} - U_{N_k}^{k,n-1}}{\tau} - f_{N_k}^{k,n} \right) \right] \quad (2.84)$$

$$= \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x U_0^{m,n-1} - \frac{h_m}{2} \left(\frac{\tilde{U}_0^{m,n} - U_0^{m,n-1}}{\tau} - f_0^{m,n} \right) \right], \quad \forall p_j \in P_1,$$

$$c \frac{\tilde{U}_s^n - U_s^{n-1}}{\tau} + \sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} U_{N_k}^{k,n-1} \right. \quad (2.85)$$

$$\left. + \frac{h_k}{2} \left(\frac{\tilde{U}_{N_k}^{k,n} - U_{N_k}^{k,n-1}}{\tau} - f_{N_k}^{k,n} \right) \right] - \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x U_0^{m,n-1} - \frac{h_m}{2} \left(\frac{\tilde{U}_0^{m,n} - U_0^{m,n-1}}{\tau} - f_0^{m,n} \right) \right] = f_s^n, \quad \forall p_s \in P_2.$$

2. **Srities skaidymo žingsnis.** Apskaičiuojame sprendinį kiekvienoje briaunoje pagal neišreikštinę baigtinių skirtumų schemą (2.50) naudodami prognozuojamas reikšmės $\tilde{U}^n$ kaip kraštinės sąlygas.
3. **Korektoriaus žingsnis.** Atnaujiname sprendinio reikšmės grafo viršūnėse pagal neišreikštinę Eulerio schemą (2.52)–(2.53), naudodami apskaičiuotą antrame žingsnyje sprendinį U^n .

Šis algoritmas įdomus tuo, kad sėkmingai gali būti taikomas ir nuoseklus jo variantas, siekiant palengvinti ir pagreitinti skaičiavimus ir išvengti tiesinių lygčių sistemos sudarymo ir sprendimo. Be to, Rempe, Chopp (2006) teigia, kad toks sprendinių reikšmių išsišakojimo taškuose prognozavimas leidžia eliminuoti iš skaičiavimų dalį grafo briaunų. Gera žinoma, kad, impulsui sklindant didele ląstele, ne visos ląstelės sritys sužadindamos vienu metu. Taigi, jei ląstelės dalis tam tikru laiku yra poilsio būsenoje, o įtampos reikšmė išsišakojimo taškuose atitinka pusiasvyros įtampą, žinoma, ta ląstelės dalis nebus sužadinta, ir tikslus sprendinio radimas šioje briaunoje nereikalingas.

Nuoseklojo algoritmo sudėtingumas šiuo atveju yra

$$W = \mathcal{O}\left(\sum_k N_k\right) + \mathcal{O}(J).$$

Konvergavimo analizė normoje H_1

Taikysime tą pačią metodiką, kaip ir 2.3 poskyryje. Diskretusis uždavinys paklaidos funkcijai Z yra:

$$\partial_t Z_j^{k,n} = \partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}}^k \partial_x Z_j^{k,n}) + \psi_j^{k,n}, \quad (2.86)$$

$$x_j^k \in \omega_h(k) \setminus \{x_1, x_{N_k-1}\}, \quad k = 1, \dots, K,$$

$$Z^{m,n}(p_j) = 0, \quad \forall p_j \in T, \quad (2.87)$$

$$\sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k-\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} \partial_t Z_{N_k}^{k,n} \right] \quad (2.88)$$

$$- \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{1/2}^m \partial_x Z_0^{m,n} - \frac{h_m}{2} \partial_t Z_0^{m,n} \right] = \varphi^n(p_j), \quad \forall p_j \in P_1,$$

$$c \partial_t Z_s^n + \sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k-\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} + \frac{h_k}{2} \partial_t Z_{N_k}^{k,n} \right] \quad (2.89)$$

$$- \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{1/2}^m \partial_x Z_0^{m,n} - \frac{h_m}{2} \partial_t Z_0^{m,n} \right] = \phi^n(p_s), \quad \forall p_s \in P_2,$$

$$\partial_t Z_1^{k,n} = \partial_{\bar{x}}(d_{1+\frac{1}{2}}^s \partial_x Z_1^{k,n}) + d_{\frac{1}{2}} \frac{\tilde{Z}_0^{k,n} - Z_0^{k,n}}{h_k^2} + \psi_1^n, \quad (2.90)$$

$$\partial_t Z_{N_k-1}^{k,n} = \partial_{\bar{x}}(d_{N_k-\frac{1}{2}}^s \partial_x Z_{N_k-1}^{k,n}) + d_{N_k-\frac{1}{2}} \frac{\tilde{Z}_{N_k}^{k,n} - Z_{N_k}^{k,n}}{h_k^2} + \psi_{N_k-1}^n,$$

$$\sum_{e_k \in N^+(p_j)} \left[d_{N_k-\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n-1} + \frac{h_k}{2} \frac{\tilde{Z}_{N_k}^{k,n} - Z_{N_k}^{k,n-1}}{\tau} \right] \quad (2.91)$$

$$- \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \left[d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^{m,n-1} - \frac{h_m}{2} \frac{\tilde{Z}_0^{m,n} - Z_0^{m,n-1}}{\tau} \right] = \tilde{\varphi}^n(p_j), \quad \forall p_j \in P_1,$$

$$c \frac{\tilde{Z}_s^{k,n} - Z_s^{k,n-1}}{\tau} + \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \left[d_{N_k-\frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n-1} + \frac{h_k}{2} \frac{\tilde{Z}_{N_k}^{k,n} - Z_{N_k}^{k,n-1}}{\tau} \right] \quad (2.92)$$

$$- \sum_{e_m \in N^-(p_s)} \left[d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^{m,n-1} - \frac{h_m}{2} \frac{\tilde{Z}_0^{m,n} - Z_0^{m,n-1}}{\tau} \right] = \tilde{\phi}^n(p_s), \quad \forall p_s \in P_2,$$

čia funkcijos $\psi^{k,n}$, φ^n , $\tilde{\varphi}^n$, ϕ^n ir $\tilde{\phi}^n$ žymi baigtinių skirtumų schemos netiktį. Visose viršūnėse paklaidos funkcijoms galioja tolydumo sąlygos

$$Z^{m,n}(p_j) = Z^{k,n}(p_j), \quad \forall p_j \in P_1, \quad e_m, e_k \in N^\pm(p_j), \quad (2.93)$$

$$Z_s^n = Z^{k,n}(p_s), \quad \forall p_s \in P_2, \quad e_k \in N^\pm(p_s). \quad (2.94)$$

Nesunku įsitikinti, kad šiuo atveju galioja panašūs netikčių įverčiai, kai pradiniai duomenys, koeficientai ir uždavinio (2.42)–(2.49) sprendinys yra pakankamai glodūs:

$$|\psi_j^{k,n}| \leq C(\tau + h_k^2), \quad x_j^k \in \omega_h(k), \quad k = 1, \dots, K, \quad n > 0, \quad (2.95)$$

$$|\varphi^n(p_j)| \leq C(\tau h + h^2), \quad p_j \in P_1, \quad n > 0, \quad h = \max_k h_k,$$

$$|\varphi_{p_j}^n - \tilde{\varphi}_{p_j}^n| \leq C\tau, \quad p_j \in P_1,$$

$$|\phi^n(p_s)| \leq C(\tau + \tau h + h^2), \quad p_s \in P_2, \quad n > 0, \quad h = \max_k h_k,$$

$$|\phi_{p_s}^n - \tilde{\phi}_{p_s}^n| \leq C\tau, \quad p_s \in P_2.$$

2.9 lema. Tegul $Z^{k,n}$ tenkina uždavinį (2.86)–(2.93). Tada teisinga nelygybė

$$\begin{aligned} E^n \leq & E^0 + \tau \sum_{l=1}^n \left\{ \|\psi^l\|^2 + \frac{J_1}{h} \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^l(p_j)|^2 + \frac{1}{2c} \sum_{p_s \in P_2} |\phi^l(p_s)|^2 \right. \\ & + \sum_{p_j \in P_1} \left[\frac{4\tau d_M}{C_1 h_j^3} (\varphi_{p_j}^l)^2 + \left(\frac{4\tau d_M^2 C J_1}{h_j^4} + \frac{1}{C_1 h_j} \right) (\tilde{\varphi}_{p_j}^l - \varphi_{p_j}^l)^2 \right] \\ & \left. + \sum_{p_s \in P_2} \left[\frac{4\tau d_M}{C_1 h_s^3} (\phi_{p_s}^l)^2 + \left(\frac{4\tau d_M^2 C J_2}{h_s^4} + \frac{1}{C_1 h_s} \right) (\tilde{\phi}_{p_s}^l - \phi_{p_s}^l)^2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.96)$$

čia $J_1 = |P_1|$, $J_2 = |P_2|$, $h_j = \min_{e^k \in N^\pm(p_j)} h_k$, $p_j \in P_1$,

$h_s = \min_{e^k \in N^\pm(p_s)} h_k$, $p_s \in P_2$, o funkcionalas E^n yra apibrėžtas taip

$$\begin{aligned} E^n = & \|Z^n\|_E^2 + 4\tau^2 \sum_{p_j \in P_1} \frac{D_j}{H_j^2} \left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^{m,n} - \sum_{e_k \in N^+(p_j)} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} \right)^2 \\ & + 4\tau^2 \sum_{p_s \in P_2} \frac{D_s}{H_s^2} \left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^{m,n} - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} \right)^2, \\ H_j = & \left(\sum_{e_k \in N^\pm(p_j)} h_k \right), \quad p_j \in P_1, \quad H_s = \left(2c + \sum_{e_k \in N^\pm(p_s)} h_k \right), \quad p_s \in P_2, \end{aligned}$$

$$D_i = \left(\sum_{e_k \in N^+(p_i)} \frac{d_{N_k - \frac{1}{2}}^k}{h_k} + \sum_{e_m \in N^-(p_i)} \frac{d_{\frac{1}{2}}^m}{h_i} \right), \quad p_i \in P_1 \cup P_2.$$

Irodymas. Padauginę lygtis (2.86) ir (2.90) iš $2h_k \tau \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}$, $x_j^k \in \omega_h(k)$ ir susumavę rezultatus gauname

$$\begin{aligned} 2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} |\partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}|^2 &= 2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n} \partial_{\bar{x}} \left(d_{j+\frac{1}{2}}^k \partial_x Z_j^{k,n} \right) \\ &+ 2\tau \sum_{k=1}^K \left[d_{\frac{1}{2}}^k \frac{\tilde{Z}_0^{k,n} - Z_0^{k,n}}{h_k} \partial_{\bar{t}} Z_1^{k,n} + d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \frac{\tilde{Z}_{N_k}^{k,n} - Z_{N_k}^{k,n}}{h_k} \partial_{\bar{t}} Z_{N_k-1}^{k,n} \right] \\ &+ 2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \psi_j^{k,n} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n}. \end{aligned}$$

Taikydami Gryno formulę, diskrečiuosius srautų tvermės dėsnius (2.88)–(2.89), kraštines sąlygas ir lygybę $2Z^n = Z^n + Z^{n-1} + \tau \partial_{\bar{t}} Z^n$, gauname

$$\begin{aligned} 2\tau \|\partial_{\bar{t}} Z^n\|^2 + \tau^2 \|\partial_{\bar{t}} Z^n\|_E^2 + \|Z^n\|_E^2 &= \|Z^{n-1}\|_E^2 \tag{2.97} \\ &+ 2\tau \sum_{p_j \in P_1 \cup P_2} (\tilde{Z}^n(p_j) - Z^n(p_j)) \left[\sum_{e_k \in N^+(p_j)} \frac{d_{N_k - \frac{1}{2}}^k}{h_k} \partial_{\bar{t}} Z_{N_k-1}^{k,n} + \sum_{e_m \in N^-(p_j)} \frac{d_{\frac{1}{2}}^m}{h_m} \partial_{\bar{t}} Z_1^{m,n} \right] \\ &+ 2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \psi_j^{k,n} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n} + 2\tau \sum_{p_j \in P_1} \varphi^n(p_j) \partial_{\bar{t}} Z^n(p_j) \\ &+ 2\tau \sum_{p_s \in P_2} \phi^n(p_s) \partial_{\bar{t}} Z^n(p_s) - 2\tau c \sum_{p_s \in P_2} |\partial_{\bar{t}} Z^n(p_s)|^2. \end{aligned}$$

Pritaikę Koši–Švarco nelygybę ir ε -nelygybę, įvertiname narius

$$\begin{aligned} 2\tau \sum_{k=1}^K h_k \sum_{j=1}^{N_k-1} \psi_j^{k,n} \partial_{\bar{t}} Z_j^{k,n} &\leq \tau \|\partial_{\bar{t}} Z^n\|^2 + \tau \|\psi^n\|^2, \\ 2\tau \sum_{p_j \in P_1} \varphi^n(p_j) \partial_{\bar{t}} Z^n(p_j) &\leq \tau \|\partial_{\bar{t}} Z^n\|^2 + \frac{\tau J_1}{h} \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^n(p_j)|^2, \\ 2\tau \sum_{p_s \in P_2} \phi^n(p_s) \partial_{\bar{t}} Z^n(p_s) &\leq 2\tau c \sum_{p_s \in P_2} |\partial_{\bar{t}} Z^n(p_s)|^2 + \frac{\tau}{2c} \sum_{p_s \in P_2} |\phi^n(p_s)|^2. \end{aligned}$$

Prediktoriaus žingsnyje įneštos paklaidos įvertinimą pateiksime tik antrojo tipo viršūnėse. Nesunku įsitikinti, kad prediktoriaus paklaidos įvertį pirmojo tipo viršūnėse gausime su koeficientu $c = 0$.

Naudodami lygtis (2.89), (2.92) gauname įvertį:

$$\begin{aligned} \tilde{Z}^n(p_s) - Z^n(p_s) = & \frac{2}{H_s} \left[\tau^2 \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \partial_{\bar{t}}(d_{N_k - \frac{1}{2}} \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n}) \right. \\ & \left. - \tau^2 \sum_{e_m \in N^-(p_s)} \partial_{\bar{t}}(d_{\frac{1}{2}} \partial_x Z_0^{m,n}) + \tau(\tilde{\phi}(p_s) - \phi(p_s)) \right], \quad p_s \in P_2. \end{aligned}$$

Taip pat naudodami įvertį

$$\begin{aligned} & \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \frac{d_{N_k - \frac{1}{2}}^k}{h_k} \partial_{\bar{t}} Z_{N_k - 1}^{k,n} + \sum_{e_m \in N^-(p_s)} \frac{d_{\frac{1}{2}}^m}{h_m} \partial_{\bar{t}} Z_1^{m,n} = \\ & - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} + \sum_{e_m \in N^-(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^{m,n} + D_s \partial_{\bar{t}} Z^n(p_s), \quad p_s \in P_2, \end{aligned}$$

suskaidome įvertį į penkias dalis

$$\begin{aligned} 2\tau(\tilde{Z}^n(p_s) - Z^n(p_s)) & \left(\sum_{e_k \in N^+(p_s)} \frac{d_{N_k - \frac{1}{2}}^k}{h_k} \partial_{\bar{t}} Z_{N_k - 1}^{k,n} + \sum_{e_m \in N^-(p_s)} \frac{d_{\frac{1}{2}}^m}{h_m} \partial_{\bar{t}} Z_1^{m,n} \right) \\ & = T_1 + T_2 + T_3 + T_4 + T_5, \end{aligned}$$

kur

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{-4\tau^3}{H_s} \left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^n - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^n \right)^2, \\ T_2 &= \frac{-8\tau^3}{H_s^2} D_s \left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^{m,n} - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} \right) \\ & \times \left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^{m,n} - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-4\tau^2}{H_s^2} D_s \left[\left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^{m,n} - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} \right)^2 \right. \\
&\quad - \left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^{m,n-1} - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n-1} \right)^2 \\
&\quad \left. + \tau^2 \left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^{m,n} - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^{k,n} \right)^2 \right].
\end{aligned}$$

Taikydami Koši-Švarco nelygybę ir ε -nelygybę, gauname įvertčius:

$$\begin{aligned}
T_3 &= \frac{-8\tau^3}{H_s^2} D_s \left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^n - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^n \right) \phi^n(p_s) \\
&\leq \frac{4\tau^2}{H_s^2} D_s \left[\tau^2 \left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^n - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^n \right)^2 + (\phi^n(p_s))^2 \right] \\
T_4 &= \frac{4\tau^2}{H_s} \left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^n - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^n \right) (\tilde{\phi}^n(p_s) - \phi^n(p_s)) \\
&\leq \frac{4\tau}{H_s} \left[\tau^2 \left(\sum_{e_m \in N^-(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{\frac{1}{2}}^m \partial_x Z_0^n - \sum_{e_k \in N^+(p_s)} \partial_{\bar{t}} d_{N_k - \frac{1}{2}}^k \partial_{\bar{x}} Z_{N_k}^n \right)^2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{4} (\tilde{\phi}^n(p_s) - \phi^n(p_s))^2 \right].
\end{aligned}$$

Pritaikę įdėjimo įvertį (2.65), paskutinį narį įvertiname taip

$$\begin{aligned}
T_5 &= \frac{4\tau^2}{H_s} D_s (\tilde{\phi}^n(p_s) - \phi^n(p_s)) \partial_{\bar{t}} Z^n(p_s) \\
&\leq \frac{\tau^2}{J_2} \|\partial_{\bar{t}} Z^n\|_E^2 + \frac{4\tau^2 D_s^2 C J_2}{H_s^2} (\tilde{\phi}^n(p_s) - \phi^n(p_s))^2.
\end{aligned}$$

Išstatę gautus įverčius į lygtį (2.97), gauname

$$\begin{aligned}
 E^n &\leq E^{n-1} + \tau \left(\|\psi^n\|^2 + \frac{J_1}{h} \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^n(p_j)|^2 + \frac{1}{2c} \sum_{p_s \in P_2} |\phi^n(p_s)|^2 \right. \\
 &\quad + \sum_{p_j \in P_1} \left[\frac{4\tau D_j}{H_j^2} (\varphi_{p_j}^n)^2 + \left(\frac{4\tau D_j^2 C J_1}{H_j^2} + \frac{1}{H_j} \right) (\tilde{\varphi}_{p_j}^n - \varphi_{p_j}^n)^2 \right] \\
 &\quad \left. + \sum_{p_s \in P_2} \left[\frac{4\tau D_s}{H_s^2} (\phi_{p_s}^n)^2 + \left(\frac{4\tau D_s^2 C J_2}{H_s^2} + \frac{1}{H_s} \right) (\tilde{\phi}_{p_s}^n - \phi_{p_s}^n)^2 \right] \right) \\
 &\leq E^{n-1} + \tau \left(\|\psi^n\|^2 + \frac{J_1}{h} \sum_{p_j \in P_1} |\varphi^n(p_j)|^2 + \frac{1}{2c} \sum_{p_s \in P_2} |\phi^n(p_s)|^2 \right. \\
 &\quad + \sum_{p_j \in P_1} \left[\frac{4\tau d_M}{C_1 h_j^3} (\varphi_{p_j}^n)^2 + \left(\frac{4\tau d_M^2 C J_1}{h_j^4} + \frac{1}{C_1 h_j} \right) (\tilde{\varphi}_{p_j}^n - \varphi_{p_j}^n)^2 \right] \\
 &\quad \left. + \sum_{p_s \in P_2} \left[\frac{4\tau d_M}{C_1 h_s^3} (\phi_{p_s}^n)^2 + \left(\frac{4\tau d_M^2 C J_2}{h_s^4} + \frac{1}{C_1 h_s} \right) (\tilde{\phi}_{p_s}^n - \phi_{p_s}^n)^2 \right] \right),
 \end{aligned}$$

čia $h_j = \min_{e^k \in N^\pm(p_j)} h_k$, $p_j \in P_1$, o $h_s = \min_{e^k \in N^\pm(p_s)} h_k$, $p_s \in P_2$. Kartodami šią procedūrą gauname norimą rezultatą (2.96). $\square$

Pagaliau, naudojant stabilumo įvertį iš 2.9 lemos, ir netikčių įverčius gauname tokį konvergavimo rezultatą.

2.5 teorema. *Tegul U yra baigtinių skirtumų schemos (2.56)–(2.57) sprendinys, o $u(x, t)$ yra diferencialinio uždavinio (2.42)–(2.49) sprendinys. Tada*

$$\|U^n - u^n\|_E \leq C t^n \left(\tau + h^{\frac{3}{2}} + \sqrt{\tau h} + \frac{\tau \sqrt{\tau}}{h^2} \right). \quad (2.98)$$

Priminsime, kad konvergavimo įverčio (2.98) pirmoji dalis $\tau + h^{\frac{3}{2}}$ atitinka neišreikštinės schemos paklaidą, ir šitą rezultatą galime pagerinti.

Nors konvergavimo įverčio (2.96) narys, aprašantis prediktoriaus žingsnio netiktį, yra prastesnis, nei įverčio (2.71), tačiau baigtinių skirtumų schema (2.56)–(2.57) irgi yra besąlygiškai stabili, o jos konvergavimas yra sąlyginis. Taigi, rezultatai abiem prediktoriaus – korektorius algoritmo versijoms yra labai panašūs, o realizacija versijos, kai prediktorius – korektorius yra taikomas tvėrmės lygtims, yra paprasčiausia.

Pateiksime skaičiavimo eksperimento rezultatus. Sprendėme parabolinį uždavinį su pastoviu difuzijos koeficientu $d(x) = 1$ grafe, kurį sudaro viena pirmojo tipo viršūnė, jungianti tris vienetinio ilgio briaunas. Tvermės dėsnis šiuo atveju yra

$$\frac{\partial u^1}{\partial x} \Big|_{x=1} = \frac{\partial u^2}{\partial x} \Big|_{x=0} + \frac{\partial u^3}{\partial x} \Big|_{x=0}.$$

Tikslieji diferencialinio uždavinio sprendiniai yra $u^1 = t(x^2 + x)$, $u^2 = t(2,5x^2 + x + 2)$, $u^3 = t(1,5x^2 + 2x + 2)$. Akivaizdu, kad neišreikštinės schemos paklaida šiuo atveju yra 0. Kadangi paklaidos Z^n elgsena yra tokia pat testuotose normose L_∞ ir H_1 , 2.8 lentelėje pateiktos tik paklaidos energinėje normoje $\|Z^n\|_E$ reikšmės, kai $t = 1$.

2.8 lentelė. Skaičiavimo eksperimento rezultatai: prediktoriaus žingsnio paklaidos analizė

Table. 2.8. Results of computational experiments: analysis of predictor step error

$\tau = 50h^2$	$h = 0,02$	$h = 0,01$	$h = 0,005$	$h = 0,0025$
$\ Z(t = 1)\ _E$	0,107544	0,0133817	0,00167633	0,000209847
p		3,007	2,997	2,998
$\tau = h$	$h = 0,02$	$h = 0,01$	$h = 0,005$	$h = 0,0025$
$\ Z(t = 1)\ _E$	0,107544	0,0537681	0,0268904	0,0134475
p		1,000	1,000	1,000
$\tau = 0,1\sqrt{h}$	$h = 0,04$	$h = 0,01$	$h = 0,0025$	$h = 0,000625$
$\ Z(t = 1)\ _E$	0,0527034	0,0537681	0,0540625	0,0541507
p		-0,029	-0,007	-0,003

Matome, kad ir šiuo atveju skaidymo žingsnio paklaida yra $\frac{\tau^2}{h}$ eilės.

2.9 lentelėje pateikti skaičiavimo eksperimento rezultatai, kai sprendžiamas uždavinys grafe su koeficientais $d(x) = x + 1$, $q(x) = x + 1$. Tikslusis diferencialinio uždavinio sprendinys $u = x^2(l_k - x)^2 \exp(t + 1)$, taigi Eulerio metodas irgi įneša savo paklaidą.

Matome, kad šie rezultatai yra labai panašūs į skaičiavimo eksperimento su prediktoriaus – korektorius I schema rezultatus, pateiktus 2.7 lentelėje, todėl galime daryti tą pačią išvadą, kad skaičiavimo eksperimentai rodo skaidymo žingsnio paklaidą $\frac{\tau^2}{h}$ eilės.

2.9 lentelė. Skaičiavimo eksperimento rezultatai: paklaida $\|Z(t = 1)\|_\infty$

Table. 2.9. Results of computational experiments: global error $\|Z(t = 1)\|_\infty$

τ	0,2	0,2/2	0,2/4	0,2/8	0,2/16	0,2/32	0,2/64
$h = 0,1$	0,3069	0,1667	0,1312	0,1226	0,1206	0,1201	0,1201
$h = 0,1/2$	0,4336	0,1323	0,0553	0,0361	0,0314	0,0303	0,0301
$h = 0,1/4$	0,8310	0,2214	0,0610	0,0206	0,0106	0,0082	0,0077
$h = 0,1/8$	1,6199	0,4344	0,1119	0,0292	0,0086	0,0035	0,0022

2.5. Antrojo skyriaus išvados

Šiame skyriuje sprendėme parabolinį uždavinį šakotoje struktūroje, kurios išsišakojimo taškuose galioja dviejų rūšių tvermės dėsniai. Nors parabolinis uždavinys su klasikinėmis kraštinėmis sąlygomis yra pakankamai ištirtas ir aprašytas literatūroje, tokiose nestandartinėse srityse, kaip grafai, sunkumai atsiranda dėl tvermės dėsnių viršūnėse aproksimacijos ir analizės. Apibendrinsime pasiektus rezultatus:

1. Aprašyta neišreikštinė svorinė schema, skirta spręsti parabolines lygtis grafuose su dviejų rūšių tvermės dėsniais grafo viršūnėse. Įrodytas šios schemos besąlyginis stabilumas, kai svorinės schemos parametras $\theta \in [\frac{1}{2}, 1]$. Taikant energetinį metodą ir mažoruojančių funkcijų metodą išnagrinėtas schemos stabilumas ir konvergavimas normose L_∞ , L_2 , H_1 . Pavyko pagerinti gautus maksimumo principo pagalba rezultatus ir įrodyti, kad konvergavimo greitis grafo viršūnėse, kuriose galioja paprastas tvermės dėsnis, taip pat yra $\mathcal{O}(\tau^{\sigma_\theta} + h^2)$. Teoriniai rezultatai patvirtinti skaičiavimo eksperimento rezultatais.
2. Siekiant palengvinti skaičiavimus ir sutrumpinti skaičiavimo laiką, taikant lygiagrečias technologijas, paraboliniam uždaviniui grafuose pritaikyta populiari srities skaidymo paradigma. Aprašytos dvi prediktoriaus – korektoriaus schemos, kurios grindžiamos skirtingu skaičiavimo srities padalijimu. Taikant energetinius metodus įrodyta, kad abi prediktoriaus – korektoriaus schemos yra besąlygiškai stabilios, tačiau dėl prediktoriaus žingsnyje įneštos paklaidos pasižymi tik sąlyginiu konvergavimo greičiu. Naudojant prediktoriaus – korektoriaus ir Douglas schemų ekvivalentiškumą, gauti rezultatai palyginti su žinomu Douglas schemos konvergavimo įverčiu. Skaičiavimų rezultatai

rodo, kad pavyko gauti tikslesnį skaidymo žingsnio paklaidos įvertį. Atlikto skaičiavimo eksperimento rezultatai patvirtina, kad prediktoriaus žingsnio netiktis yra $\mathcal{O}(\tau^2/h)$.

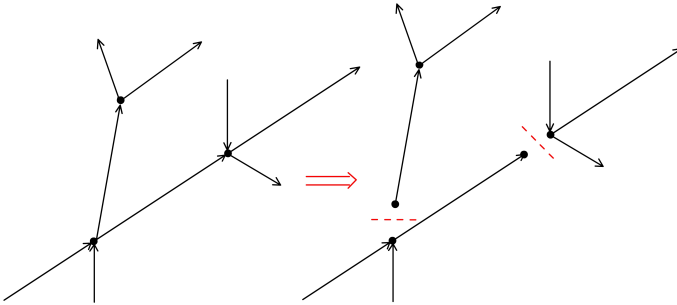
Lygiagretieji algoritmai

Šiame skyriuje pateikiamos lygiagrečios aprašytų 2 skyriuje algoritmų versijos, jų efektyvumo ir išplečiamumo analizė ir skaičiavimo eksperimentų rezultatai. Visos lygiagrečiųjų algoritmų versijos grindžiamos duomenų lygiagretumu.

3.1. Neišreikštinis algoritmas

Šiame poskyryje pateikiamas lygiagretus algoritmas, realizuojantis neišreikštinę schemą (2.9)–(2.13), aprašytą 2.2.1 poskyryje.

1. **Srities padalijimas.** Skaičiavimo sritis dalinama į posričius skaidant viršūnes (3.1 pav.). Pirmame žingsnyje sprendžiame skaičiavimo užduočių tolygaus paskirstymo uždavinį. Siekiame garantuoti, kad kiekvienas procesas turės maždaug vienodą skaičių diskrečiojo tinklo taškų, nes šis skaičius nusako diskrečiojo algoritmo sudėtingumą, kurį sudaro faktorizacijos žingsnių veiksmas $W_f = \mathcal{O}(\sum_k N_k)$ ir tiesinių lygčių sistemos sprendimas PCG metodu $W_s = \mathcal{O}(\mu m J)$ (žr. 2.2.1 poskyrį). Dėl baigtinių tūrių schemos diskretizavimo šablono skirtingų procesų skaičiavimo sritys persidengia. Procesai turi apsikeisti duomenimis, priklausančiais persidengiančioms sritims. Bet duomenų persiuntimo kaštai yra lygiagrečiojo algoritmo papildomieji



3.1 pav. Neišreikštinė schema: grafo padalijimas procesams

Fig. 3.1. The implicit scheme: distribution of the graph to the processes

kaštai. Todėl antras tikslas ieškant optimalaus paskirstymo yra sumažinti persidengiančių sričių skaičių. Svertinio grafo padalijimui naudojame *Metis* įrankį (Karypis, Kumar 1999), o briaunų svorius nustatėme pagal diskrečiojo tinklo taškų skaičių briaunose.

2. **FaktORIZACIJOS tiesioginės eigos žingsnis.** FaktORIZACIJOS algoritmas vykdomas lygiagrečiai.
3. **Tiesinės lygčių sistemos sprendimas.** Po faktORIZACIJOS žingsnio procesai apskaičiuoja lokaliuosius viršūnių matricos koeficientus. Gaunama tiesinė lygčių sistema sprendžiama naudojant lygiagretų jungtinių gradientų metodą su diagonaliniu matricos sąlygotumą gerinančiu operatoriumi (PPCG, ang. *Parallel Preconditioned Conjugate Gradient*).
4. **FaktORIZACIJOS atbulinės eigos žingsnis.** Kiekvienas procesas lygiagrečiai apskaičiuoja sprendinį jam skirtose briaunose.

Tokiu būdu lygiagretaus algoritmo aproksimacijos tikslumas ir stabilumas yra toks pat, kaip ir nuoseklaus algoritmo. Gerai žinoma, kad lygiagretaus iteracinio PCG algoritmo konvergavimas nežymiai priklauso nuo apvalinimo paklaidų dėl slankiojo kablelio aritmetikos ir MPI duomenų persiuntimo protokolų.

Lygiagrečiojo algoritmo išplėčiamumo analizė

Panagrinėkime lygiagrečiojo algoritmo sudėtingumo ir efektyvumo įverčius. FaktORIZACIJOS žingsnis (2.14) yra pilnai lygiagretinamas, o šio žingsnio sudėtingumas yra $T_{1,p} = W_f/p$, čia p yra procesų skaičius.

Dabar įvertinkime PPCG algoritmo sudėtingumą. Po faktORIZACIJOS žings-

nio procesai apskaičiuoja lokaliuosius matricos koeficientus ir apsieičia viršūnių, priklausančių keliems procesams, duomenimis. Šio žingsnio sudėtingumas yra $T_{2,p} = \gamma(\alpha + vm\beta)$, čia $\gamma = \gamma(p)$ žymi didžiausią skaičių kaimynų, t. y. procesų, su kuriais reikia keistis duomenimis, v žymi didžiausią skaičių viršūnių, priklausančių kuriam nors iš kaimynų, α žymi pranešimo parengimo laiką, o β žymi laiką, reikalingą duomenų vienetui nusiųsti. Siekiant paslėpti persiuntimo kaštus, skaičiavimuose naudojamas asinchroninis duomenų siuntimas, tuo pat metu atliekant skaičiavimus su lokaliais duomenimis tarp persiuntimo operacijų.

Atliekant matricos ir vektoriaus daugybą kiekvienas procesas apsieičia su kaimynais šešėliniais vektoriaus elementais. Šešėlinių elementų aibę šiuo atveju sudaro grafo viršūnių, kurias su išskaidyta keliems procesams viršūne sieja viena briauna, duomenys (t. y. išskaidytos viršūnės „kaimynės“). Todėl matricos ir vektoriaus lygiagrečios daugybos kaštai apibrėžiami taip:

$$T_{3,p} = m \left\lceil \frac{J}{p} \right\rceil + \gamma(\alpha + v\beta).$$

Dviejų vektorių skaliarinės sandaugos lygiagretus skaičiavimas reikalauja visų procesų globalios komunikacijos sumuojant lokalias sandaugų sumas. Skaičiavimuose naudojome *MPI_Allreduce* operaciją, kurios kaštai priklauso nuo konkrečios bibliotekos realizacijos algoritmų ir kompiuterio architektūros. Todėl pažymėkime duomenų vieneto paskleidimo p procesams kaštus $B_{1,p} = R_B(p)(\alpha + \beta)$.

Kai lygčių sistemos sprendinys yra apskaičiuotas, kaimyniniai procesai apsieičia sprendinio reikšmėmis bendrose viršūnėse, šio žingsnio kaštai yra $\gamma(\alpha + v\beta)$.

Susumavę gautus įverčius gauname lygiagretaus neišreikštinio algoritmo sudėtingumo įvertį:

$$T_p = \frac{W_f}{p} \delta + \frac{W_s}{p} \theta \delta + \gamma(\alpha + v(m+1)\beta) + \mu \left(2R_B(p)(\alpha + \beta) + \gamma(\alpha + v\beta) \right) + \gamma(\alpha + v\beta),$$

čia θ žymi lokalių skaičiavimo užduočių viršūnėse paskirstymo koeficientą, o $\delta = \delta(p_c)$ yra gaišinimo koeficientas, priklausantis nuo branduolių skaičiaus procesoriuje. Būtina atsižvelgti į šį koeficientą, nes bendrosios atminties kompiuteriuose dėl magistralių pralaidumo apribojimų gali kilti problemų, kai daug procesų bando vienu metu skaityti ar rašyti į globalią atmintį (ang. *bott-*

leneck effect). Darydami prielaidą, kad vykdomas paprastas duomenų mainų algoritmas, ir žinodami, kad $\alpha \gg \beta$, gauname įvertį

$$T_p \approx \frac{W_f}{p} \delta + \frac{W_s}{p} \theta \delta + \gamma \alpha (\mu + 2) + 2R_B(p) \mu \alpha. \quad (3.1)$$

Galime padaryti išvadą, kad lygiagretaus algoritmo efektyvumas didžiaja dalimi priklauso nuo viršūnių balansavimo koeficiento θ . Didėjant skaičiavimų apimčiai, lygiagretaus algoritmo efektyvumas turėtų gerėti, tačiau šią tendenciją gali bloginti blogesnis duomenų paskirstymas ir konkurencija dėl atminties skaitymo tarp vieno skaičiavimo mazgo branduolių.

Abibrėžkime lygiagretaus algoritmo papildomus kaštus:

$$H(W, p) = W_f(\theta \delta - 1) + W_s(\theta_1 \delta - 1) + p \gamma \alpha (\mu + 2) + 2p R_B(p) \mu \alpha.$$

Tada algoritmo izoefektyvumo funkcija $W = g(p, E)$ apibrėžiama lygtimi

$$W = \frac{E}{1 - E} H(p, W),$$

čia E yra fiksuotas algoritmo efektyvumas. Atlikę nesudėtingus skaičiavimus gauname

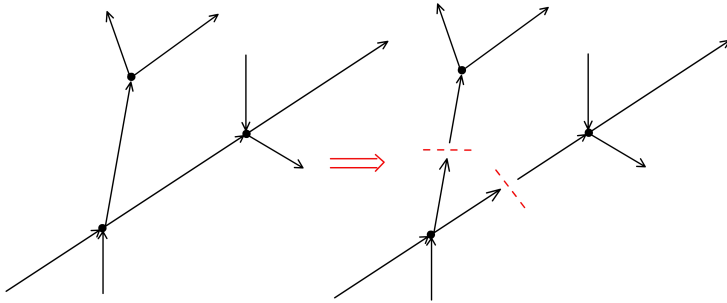
$$W_f\left(\frac{1}{E} + \theta \delta\right) + W_s\left(\frac{1}{E} + \theta_1 \delta\right) = \Theta\left(p \gamma (p) + p R(p)\right).$$

Tai rodo, kad lygiagretaus algoritmo išplečiamumas taip pat priklauso nuo paskleidimo operacijos realizacijos: dydis $R(p)$ keičiasi ribose nuo $\log_2 p$ iki p priklausomai nuo lygiagrečios bibliotekos realizacijos ir kompiuterio ar tinklo architektūros.

3.2. Prediktorius – korektorius algoritmas I

Lygiagretus prediktorius – korektorius algoritmas, kai grafas yra dalinamas į pografius pjaunant kai kurias briaunas, yra detalčiai aprašytas 2.3.2 poskyryje. Realizacija yra labai paprasta:

1. **Srities padalijimas.** Realizuojant prediktorius – korektorius schemas, grafas dalinamas į pografius pjaunant kai kurias briaunas (3.2 pav.). Šiuo atveju skaičiavimo sritys persidengia. Kaip ir neišreikštinės schemos atveju, siekiant tolygiau paskirstyti skaičiavimo taš-



3.2 pav. Prediktoriaus – korektoriaus schema: grafo padalijimas procesams

Fig. 3.2. Predictor – corrector scheme: distribution of the graph to the processes

kų skaičių procesams ir sumažinti pjaunamų briaunų skaičių, svertinio grafo padalijimui naudojome *Metis* įrankį.

2. **Srities skaidymo žingsnis.** Visi kiti skaičiavimo žingsniai vykdomi lygiagrečiai pagal 2.3.2 poskyryje pateiktą aprašymą.

Lygiagrečiojo algoritmo išplėčiamumas

Panagrinekime šio algoritmo savybes. PPCG algoritmo sudėtingumas yra $O(\mu m J)$. Kai uždavinys dalinamas p procesams, lokalsios matricos dydis tampa $\frac{J}{p} \times \frac{J}{p}$, nes kiekvienam procesui atitenka apie $\frac{J}{p}$ grafo viršūnių. Tačiau nenulinių elementų eilutėje skaičius m lieka beveik nepakitęs, nes nenulinis elementas matricoje rodo, kad dvi viršūnės yra sujungtos briauna. Siekiant optimaliai padalinti grafiką, taip pat siekiame ir minimizuoti pjaunamų briaunų skaičių, taigi šis skaičius yra gana mažas, o tai reiškia, kad sąryšių tarp viršūnių skaičius sumažėja nežymiai. Todėl lygiagrečiojo algoritmo sudėtingumą įvertiname

$$\begin{aligned} T_p &= \frac{W_f}{p} \theta(p) \delta(p_c) + \frac{W_s}{p} \theta_s(p) \delta(p_c) + \gamma(p) (\alpha + \beta) \\ &\approx \frac{W}{p} \theta(p) \delta(p_c) + \frac{W_s}{p} \theta_s(p) \delta(p_c) + \gamma(p) \alpha. \end{aligned}$$

Algoritmo sudėtingumo įvertis rodo, kad lygiagretaus algoritmo efektyvumas labiausiai priklauso nuo srities padalijimo kokybės.

Įvertinę algoritmo sudėtingumą gauname papildomų kaštų įvertį:

$$H(W, p) = W_f(\theta\delta - 1) + W_s(\theta_s\delta - 1) + p\gamma\alpha.$$

Tada izoefektyvumo funkcija apibrėžiama taip:

$$W_f\left(\frac{1}{E} - \theta\delta\right) + W_s\left(\frac{1}{E} - \theta_s\delta\right) = \Theta\left(p\gamma(p)\right).$$

Kaip ir neišreikštinio algoritmo atveju, prediktoriaus – korektoriaus algoritmo išplėčiamumas labiausiai priklauso nuo padalijimo kokybės ir branduolių konkurencijos dėl atminties.

3.3. Prediktoriaus – korektoriaus algoritmas II

Prediktoriaus – korektoriaus algoritmo, aprašyto 2.4 poskyryje, lygiagrečioji versija irgi grindžiama srities skaidymo metodu. Siekiant kuo labiau sumažinti persiunčiamų tarp skirtingų procesų duomenų kiekius, papildomai daliname briaunas, kurių viršūnės priklauso skirtingiems procesams (3.2 pav.). Skirtingai, nei taikant 2.3.2 poskyryje aprašytą schemą, šiuo atveju skaičiavimo sritys nepersidengia.

Visi kiti skaičiavimo žingsniai vykdomi lygiagrečiai: naudojant išreikštinę schemą procesai apskaičiuoja numatomas sprendinio reikšmes grafo viršūnėse, tada sprendžia vienmačius parabolinius uždavinius grafo briaunose. Briaunose, kurios viršūnės priklauso skirtingiems procesams, standartinis trijųstrižainės matricos faktorizacijos algoritmas pakeičiamas lygiagrečia versija, skirta dviem procesams (Čiegis 2005). Vykdam šią briaunų faktorizaciją procesai apsieičia dviem faktorizacijos koeficientais, tačiau šio modifikuoto faktorizacijos algoritmo sudėtingumas lieka $8N$ eilės.

Lygiagrečiojo algoritmo išplėčiamumas

Lygiagrečiojo algoritmo sudėtingumo įvertis yra

$$T_p = \frac{W}{p}\delta + \gamma(\alpha + 2\beta) \approx \frac{W}{p}\delta + \gamma\alpha.$$

Matome, kad duomenų persiuntimo kaštų įtaka gali būti nereikšminga, jei skaičiavimų apimtis yra pakankamai didelė. Efektyvumo įvertis rodo, kad lygiagretaus algoritmo efektyvumas gali mažėti labiausiai dėl gaišinimo koeficiento δ . Atlikę nesudėtingus skaičiavimus gauname lygiagretaus algoritmo

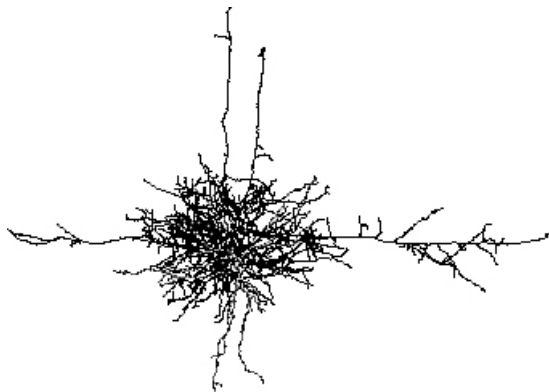
papildomų kaštų $H(W, p)$ įvertį ir izoefektyvumo funkciją W :

$$H(W, p) = W(\delta - 1) + p\gamma(p)\alpha, \quad W = \Theta(p\gamma(p)/(1/E_p - \delta)).$$

Kai $\gamma(p) \leq \gamma_0$, lygiagretaus algoritmo išplečiamumas yra tiesinis.

3.4. Skaiciavimo eksperimentas

Šiame poskyryje pateikiami skaičiavimo eksperimentų rezultatai. Parabolinis uždavinys sprendžiamas grafe, kuris pavaizduotas 3.3 pav. Tai yra tikro neurono, kurį sudaro 16089 sekcijos ir 15316 šakojimosi taškai, rekonstrukcija (Ascoli *et al* 2007). Briaunų ilgiai pasiskirstę intervale $0.24 \leq l_k \leq 51.5$, $k = 1, \dots, K$, o diskretusis tinklas yra tolygus. Tokiu atveju, kai briaunų ilgiai skiriasi daugiau nei 200 kartų, lokalių užduočių tolygus paskirstymas tampa labai svarbiu. Pažymėsime, kad pakankamai didelių grafų paskirstymo, padaryto *Metis* bibliotekos pagalba, kokybė visada buvo labai artima 1.



3.3 pav. Skaičiavimo eksperimentuose naudojama struktūra

Fig. 3.3. Structure used in the numerical experiments

Skaičiavimo eksperimento rezultatai gauti sprendžiant tiesinį uždavinį. Kai sprendžiamas sąlygiškai tiesinis uždavinys, kurio koeficientai apskaičiuojami sprendžiant paprastųjų diferencialinių lygčių sistemas, lokalių skaičiavimų apimtis tik padidėja dėl papildomų PDL sprendimo ir Pikaro iteracijų, todėl paprastas tiesinis uždavinys yra blogiausias atvejis lygiagrečiųjų algoritmų efektyvumui testuoti.

Skaičiavimai atlikti Vilniaus Gedimino technikos universiteto kompiuterių

3.1 lentelė. Lygiagretaus visiškai neišreikštinio algoritmo vykdymo rezultatai**Table. 3.1.** Performance results for the parallel fully implicit solver

$p(n \times c)$	1×2	2×1	1×4	2×2	4×1	2×4	4×2	8×1	4×4	8×2	8×4
θ	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
θ_1	1,02	1,02	1,05	1,05	1,05	1,13	1,13	1,13	1,15	1,15	1,17
$\gamma \times v$	1×5	1×5	5×4	5×4	5×4	5×4	5×4	5×4	7×4	7×4	7×3
$h = 0,03, J = 15316, T_0 = 1123$											
T_p	576	565	328	293	285	166	148	142	85	79	44
S_p	1,95	1,99	3,42	3,83	3,94	6,77	7,59	7,91	13,21	14,21	25,52
E_p	0,97	0,99	0,86	0,96	0,99	0,85	0,95	0,99	0,83	0,89	0,80
$h = 0,015, J = 15316, T_0 = 2172$											
T_p	1107	1089	620	559	546	312	284	276	161	150	83
S_p	1,96	1,99	3,50	3,89	3,98	6,96	7,65	7,87	13,49	14,48	26,17
E_p	0,98	1,00	0,88	0,97	0,99	0,87	0,96	0,98	0,84	0,91	0,82
θ	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
θ_1	1,04	1,04	1,05	1,05	1,05	1,07	1,07	1,07	1,10	1,10	1,17
$\gamma \times v$	1×5	1×5	3×3	3×3	3×3	5×4	5×4	5×4	8×5	8×5	7×3
$h = 0,015, J = 30632, T_0 = 2250$											
T_p	1152	1133	644	588	568	331	297	286	165	157	86
S_p	1,95	1,99	3,49	3,83	3,96	6,80	7,58	7,87	13,64	14,33	26,16
E_p	0,98	0,99	0,87	0,96	0,99	0,85	0,95	0,98	0,85	0,90	0,82

klasteryje Vilkas, naudojant mazgus Intel®Core™ su procesoriais i7-860 @ 2,80 GHz ir 4 GB DDR3-1600 RAM.

Visiškai neišreikštinio ($\theta = 1$) lygiagretaus algoritmo vykdymo rezultatai pateikti 3.1 lentelėje. Procesų skaičius žymimas $p = n \times c$, čia n yra skaičiavimo mazgų skaičius, o c yra branduolių skaičius kiekviename mazge. Lentelėje pateikiami spartinimo koeficientas $S_p = T_0/T_p$ ir efektyvumo koeficientas $E_p = S_p/p$. T_p žymi procesoriaus laiką, reikalingą sprendžiant uždavinį su p procesais. Diskrečiojo tinklo generavimui buvo naudojamos dvi žingsnio h reikšmės, tokiu būdu gaunami skirtingo dydžio uždaviniai. Paskutiniame skaičiavimų bloke nagrinėjama PPCG algoritmo kaštų įtaka, tam grafo viršū-

3.2 lentelė. Lygiagretaus prediktoriaus – korektoriaus algoritmo I vykdymo rezultatai

Table. 3.2. Performance results for the parallel predictor-corrector I solver

$p(n \times c)$	1×2	2×1	1×4	2×2	4×1	2×4	4×2	8×1	4×4	8×2	8×4
θ	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
θ_s	1,02	1,02	1,05	1,05	1,05	1,09	1,09	1,09	1,13	1,13	1,21
γ	1	1	3	3	3	7	7	7	9	9	9
$h = 0,03, J = 15316, T_0 = 1123$											
T_p	604	591	335	303	293	168	150	143	83	75	41
S_p	1,86	1,90	3,35	3,71	3,83	6,68	7,49	7,85	13,53	14,97	27,39
E_p	0,93	0,95	0,84	0,93	0,96	0,84	0,94	0,98	0,85	0,94	0,86
$h = 0,015, J = 15316, T_0 = 2172$											
T_p	1156	1136	639	580	567	322	291	284	162	151	82
S_p	1,88	1,91	3,40	3,74	3,83	6,75	7,46	7,65	13,4	14,4	26,5
E_p	0,94	0,96	0,85	0,94	0,96	0,84	0,93	0,96	0,84	0,90	0,83
θ	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
θ_s	1,03	1,03	1,06	1,06	1,06	1,15	1,15	1,15	1,17	1,17	1,21
γ	1	1	3	3	3	7	7	7	8	8	7
$h = 0,015, J = 30632, T_0 = 2250$											
T_p	1224	1186	671	618	595	338	313	295	169	158	84
S_p	1,84	1,90	3,35	3,64	3,78	6,66	7,19	7,63	13,3	14,2	26,8
E_p	0,92	0,95	0,83	0,91	0,95	0,83	0,90	0,95	0,83	0,89	0,84

nių skaičius padidinamas du kartus, įterpiant papildomas viršūnes kiekvienoje briaunoje.

Skaičiavimo eksperimento rezultatai patvirtina teorinius lygiagrečiojo algoritmo sudėtingumo įverčius. Naudojant skaičiavimuose branduolius $n \times 2$ ir $n \times 4$ atsiranda efektyvumo sumažėjimas dėl atminties magistralės išotinio, o didinant skaičiavimų apimtį branduolių efektyvumas mažėja. Ši tendencija prieštarauja bendram išplečiamumo įverčiui, kuris teigia, kad lygiagrečiojo algoritmo efektyvumas turėtų didėti, didinant skaičiavimo uždavinį fiksuotam procesų skaičiui. Šis efektas plačiau yra nagrinėjamas darbe (Starikovičius *et al* 2011).

3.2 lentelėje pateikiami lygiagrečiojo prediktoriaus – korektoriaus algo-

3.3 lentelė. Lygiagretaus prediktoriaus – korektoriaus algoritmo II vykdymo rezultatai

Table. 3.3. Performance results for the parallel predictor-corrector II solver

$p(n \times c)$	1×2	2×1	1×4	2×2	4×1	2×4	4×2	8×1	4×4	8×2	8×4
θ	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
γ	4	4	8	8	8	13	13	13	12	12	10
$h = 0,03, J = 15316, T_0 = 945$											
T_p	479	470	275	241	234	137	126	114	69	62	33
S_p	1,97	2,01	3,44	3,92	4,04	6,90	7,50	8,29	13,70	15,24	28,64
E_p	0,99	1,01	0,86	0,98	1,01	0,86	0,94	1,04	0,86	0,95	0,89
$h = 0,015, J = 15316, T_0 = 1801$											
T_p	915	898	526	459	450	263	236	224	131	122	64
S_p	1,97	2,01	3,42	3,92	4,00	6,85	7,63	8,04	13,75	14,76	28,14
E_p	0,98	1,00	0,86	0,98	1,00	0,86	0,95	1,01	0,86	0,92	0,88
$h = 0,015, J = 30632, T_0 = 1897$											
θ	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
γ	6	6	9	9	9	10	10	10	10	10	9
T_p	963	945	555	487	472	276	244	235	138	123	68
S_p	1,97	2,01	3,42	3,90	4,02	6,87	7,77	8,07	13,75	15,42	27,9
E_p	0,98	1,00	0,85	0,97	1,00	0,86	0,97	1,01	0,86	0,96	0,87

ritmo I skaičiavimo rezultatai. Matome, kad algoritmo efektyvumas yra gana artimas lygiagrečiojo neišreikštinio algoritmo efektyvumui. Šiuos rezultatus galima paaiškinti faktu, kad net lygiagrečiam neišreikštiniam algoritmui duomenų mainų kaštų įtaka buvo labai maža, lygiant su efektyvumo sumažėjimu, kai naudojami 2 ar 4 branduoliai procesoriuje.

3.3 lentelėje pateikiami lygiagrečiojo prediktoriaus – korektoriaus algoritmo II, kai grafas yra dalinamas į vienmačius uždavinius, skaičiavimo rezultatai. Matome, kad visų trijų išnagrinėtų algoritmų testų rezultatai yra panašūs.

Pažymėsime, kad naudojant daugiau skaičiavimo mazgų (ne branduolių), pastebimas didesnis nei tiesinis lygiagrečiojo algoritmo pagreitėjimas. Šį efektą galima paaiškinti geresniu duomenų talpinimu sparčioje atmintyje, kai sprendžiamas mažesnės apimties uždavinys. Tam, kad patikrinti šį efektą, pa-

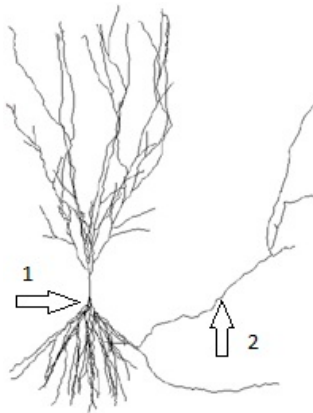
teiksime skaičiavimo eksperimento rezultata, kai nuosekliai buvo sprendžiami uždaviniai dydžio N , $N/2$, $N/4$ and $N/8$. Gavome tokį procesoriaus laiką (s):

$$T_1(N) = 945, \quad T_1(N/2) = 467, \quad T_1(N/4) = 225, \quad T_1(N/8) = 112.$$

Šie rezultatai aiškiai rodo efektyvaus atminties naudojimo spartinimo efektą.

3.5. Netiesinio uždavinio skaičiavimas

Šiame poskyryje pateikiami netiesinio uždavinio skaičiavimo rezultatai. Skaičiavimo eksperimente naudojama žiurkės piramidinio neurono struktūra (Ascoli *et al* 2007), pavaizduota 3.4 pav. Piramidiniai neuronai yra pagrindiniai galvos smegenų didžiųjų pusrutulių žievės ir hipokampo neuronai. Nagrinėjamą grafą sudaro 250 skirtingų skersmenų briaunos, 173 šakojimosi taškai ir 1 soma.



3.4 pav. Žiurkės piramidinis neuronas; pirmoji rodyklė žymi somą, antroji – įtampos stebėjimo tašką skaitiniame eksperimente

Fig. 3.4. Pyramidal neuron of a rat; the first arrow indicates soma, the second – voltage observation point performing numerical experiment

3.5.1. Algoritmų tikslumo eksperimentinis palyginimas

Nagrinėtų skaičiavimo algoritmų tikslumą palyginome, atlikę skaičiavimus su netiesiniu uždaviniu:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u^k}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(d^k \frac{\partial u^k}{\partial x} \right) - q^k u^k + f^k, \quad 0 < x < l_k, \quad k = 1, \dots, K, \\ 0 < d_0 &\leq d^k(x) \leq d_M, \quad q^k(x, m, n, h) \geq 0, \quad f^k = f^k(x, m, n, h), \\ \frac{dm}{dt} &= f_1(u^k), \quad \frac{dn}{dt} = f_2(u^k), \quad \frac{dh}{dt} = f_3(u^k), \\ u^k(x, 0) &= u_0^k(x) \quad 0 < x < l_k, \quad k = 1, \dots, K \\ u^k(p_j; t) &= \mu_j(t), \quad \forall p_j \in T.\end{aligned}$$

Uždavinio sprendinys yra žinomas:

$$u^k(x, t) = \left(\frac{x}{l_k} \right)^2 \left(1 - \frac{x}{l_k} \right)^2 \exp(t).$$

Modelio koeficientai ir funkcija $f^k(x, t)$ buvo parinkti taip, kad galima būtų išskirti netiesinius koeficientus, priklausančius nuo funkcijos $u^k(x, t)$, taip suformuluotas sąlygiškai tiesinis uždavinys:

$$\begin{aligned}d^k(x) &= 1 + \frac{x}{l_k}, \quad q^k = m, \\ f^k(x, m, n, h) &= n + h + -\frac{2t}{l_k^2} \left(8 \left(\frac{x}{l_k} \right)^3 - 3 \left(\frac{x}{l_k} \right)^2 - 4 \left(\frac{x}{l_k} \right) + 1 \right), \\ \frac{dm}{dt} &= 2u^k + 1, \quad \frac{dn}{dt} = 3(u^k)^2, \quad \frac{dh}{dt} = 2u^k.\end{aligned}$$

Grafo briaunų ilgiai yra nuo 0,5 iki 488 mikronų, todėl tolygaus diskrečiojo tinklelio naudojimas reikalauja labai mažo žingsnio h . Eksperimentiniai skaičiavimai rodo, kad dalimis tolygus tinklelis duoda tokio pat tikslumo rezultatus, kaip ir tolygus, per trumpesnę skaičiavimo laiką, todėl žemiau pateikti rezultatai apskaičiuoti su dalimis tolygiu tinkleliu, kai kiekviena briauna dalinama į N dalių. Skaičiuojant uždavinį neišreikštinu Eulerio metodu algoritmas buvo iteruojamas 2 kartus kiekviename laiko sluoksnyje. Skaičiavimų rezultatai pateikti 3.4 lentelėje, skliausteliuose nurodytas skaičiavimo laikas sekundėmis.

Matome, kad konvergavimo greitis išlieka $\tau + h^2$ eilės, ir, sumažinę h du kartus, o τ - keturis, paklaidą sumažiname apie keturis kartus. Skaičiavimo

3.4 lentelė. Netiesinio uždavinio skaičiavimo Eulerio metodu paklaida $\|Z(t=2)\|_\infty$

Table. 3.4. Global errors $\|Z(t=2)\|_\infty$ of the solution of nonlinear problem for implicit Euler scheme

N	$\tau = 0,2$	$\tau = 0,1$	$\tau = 0,05$	$\tau = 0,0125$	$\tau = 0,003125$
10	0,19201 (<1)	0,08783 (<1)	0,04110 (<1)	0,03387 (1)	0,03583 (5)
20	0,19201 (<1)	0,08783 (<1)	0,04110 (<1)	0,00967 (2)	0,00954 (8)
40	0,19201 (<1)	0,08783 (<1)	0,04110 (1)	0,00967 (3)	0,00244 (15)
80	0,19201 (<1)	0,08783 (1)	0,04110 (2)	0,00967 (7)	0,00238 (29)

rezultatai, kai $\tau \leq 0,05$, rodo, kad dominuoja paklaida $C\tau$, todėl, norėdami apskaičiuoti uždavinį su pakankamai maža paklaida, turime smulkinti laiko žingsnį. Pavyzdžiui, norėdami apskaičiuoti sprendinį 10^{-2} tikslumu, Eulerio metodui turėtume parinkti žingsnį $\tau = 0,0125$, ir skaičiavimo laikas būtų apie 2 s.

Kranko-Nikolsono algoritmas buvo taikomas be iteracijų. Tam, kad būtų išlaikytas antrosios eilės aproksimacijos tikslumas laiko žingsnio atžvilgiu, paprastųjų diferencialinių lygčių sprendiniai m , n ir h skaičiuojami pagal trapecijų formulę. Skaičiavimų rezultatai pateikti 3.5 lentelėje, skliausteliuose nurodytas skaičiavimo laikas sekundėmis.

3.5 lentelė. Netiesinio uždavinio skaičiavimo Kranko-Nikolsono metodu paklaida $\|Z(t=2)\|_\infty$.

Table. 3.5. Global errors $\|Z(t=2)\|_\infty$ of the solution of nonlinear problem for Crank-Nicolson scheme

N	$\tau = 0,2$	$\tau = 0,1$	$\tau = 0,05$	$\tau = 0,025$	$\tau = 0,0125$
10	0,03579 (<1)	0,03633 (<1)	0,03643 (<1)	0,03646 (<1)	0,03646 (<1)
20	0,00998 (<1)	0,01002 (<1)	0,01002 (<1)	0,01001 (<1)	0,01001 (1)
40	0,00405 (<1)	0,00302 (<1)	0,00302 (<1)	0,00301 (1)	0,00301 (2)
80	0,00324 (<1)	0,00123 (<1)	0,00095 (1)	0,00095 (2)	0,00095 (3)
1000	0,00339 (3)	0,00089 (6)	0,00023 (12)	0,00006 (23)	0,00002 (47)

Konvergavimo greitis išlieka $\tau^2 + h^2$ eilės, ir, sumažinę abu žingsniu du kartus, paklaidą sumažiname apie keturis kartus. Matome, kad sprendinys, apskaičiuotas Kranko-Nikolsono metodu yra tikslesnis, nei apskaičiuotas neišreikštinio Euleio metodu, net ir su dideliu τ žingsniu dominuoja paklaida Ch^2 ,

todėl, norėdami apskaičiuoti sprendinį 10^{-2} tikslumu, Kranko-Nikolsono metodui pakanka žingsno $\tau = 0,2$, ir skaičiavimo laikas būtų mažesnis nei sekundė.

3.6 lentelėje pateikiami prediktoriaus – korektoriaus algoritmo, aprašyto 2.4 poskyryje, rezultatai (grafas yra skaidomas išsiskaidymo taškuose į vienmačius uždavinius). Algoritmo konvergavimo greitis sprendžiant tiesinį uždavinį yra $\tau + h^2 + \frac{\tau^2}{h}$ eilės.

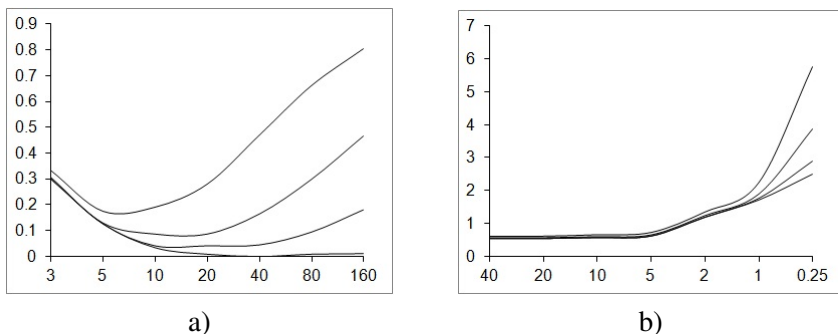
3.6 lentelė. Netiesinio uždavinio skaičiavimo prediktoriaus – korektoriaus metodu paklaida $\|Z(t = 2)\|_\infty$.

Table. 3.6. Global errors $\|Z(t = 2)\|_\infty$ of the solution of nonlinear problem for predictor-corrector scheme

N	$\tau = 0,2$	$\tau = 0,1$	$\tau = 0,05$	$\tau = 0,0125$	$\tau = 0,003125$
5	0,1763 (<1)	0,13090 (<1)	0,12542 (<1)	0,12621 (<1)	0,12705 (<1)
10	0,19201 (<1)	0,08783 (<1)	0,04110 (<1)	0,03461 (1)	0,03588 (4)
20	0,28073 (<1)	0,08783 (<1)	0,04110 (<1)	0,00968 (1)	0,00960 (8)
40	0,47006 (<1)	0,16544 (<1)	0,04459 (1)	0,00967 (3)	0,00260 (14)
80	0,66175 (<1)	0,29959 (1)	0,09359 (2)	0,00967 (7)	0,00238 (28)

Prediktoriaus – korektoriaus metodo rezultatai demonstruoja sąlyginę aproksimaciją. Pirmajame stulpelyje dominuojanti paklaidos dalis yra $\frac{C}{h}$, paskutiniame – Ch^2 , Aišku, šiuo atveju paklaidą galime sumažinti ne tik mažindami žingsnį τ , bet ir didindami h . Šiame skaičiavimo eksperimente mažiausia paklaida, kurią galime pasiekti didinant h , yra dalinant briaunas į 5 dalis. Jeigu reikia didesnio tikslumo, tenka skaičiuoti su mažesniu žingsniu τ , pavyzdžiui, su $\tau = 0,0125$ gauname 10^{-2} tikslumo sprendinį per 1s, kaip ir skaičiuojant visiškai neišreikštiniu metodu. Prediktoriaus – korektoriaus metodo paklaidos dinamika su įvairiomis fiksuotomis τ žingsnio reikšmėmis pavazduota 3.5 pav. b) dalyje pavaizduota paklaida su tolygiu erdvinio tinklu, tačiau ir šiuo atveju tinklas iš tiesų nevisur yra vienodas: trumpesnės briaunos, kurių ilgis $l_k < 2h$, vistiek yra dalinamos į dvi dalis. Kadangi trumpiausia briauna yra 0,5 mikrono ilgio, didžiausias įmanomas visur vienodas žingsnis yra $h = 0,25$, tačiau matome, kad dėl sąlyginės aproksimacijos paklaida su tokiu žingsniu yra labai didelė.

Prediktoriaus – korektoriaus metodas yra nežymiai greitesnis už neišreikštinių Eulerio metodą, nes šiuo testo metu sprendžiama tiesinių lygčių sistema yra nedidelė (174×174), todėl jos sprendimas nereikalauja daug laiko. Tačiau, tai-



3.5 pav. Prediktoriaus – korektoriaus metodo paklaida $\|Z(t=2)\|_\infty$ su fiksuotu žingsniu τ : a) dalimis tolygus erdvinis tinklas (horizontali ašis rodo padalijimų skaičių N); b) tolygus erdvinis tinklas (žingsnis h). τ reikšmės 0,2, 0,1, 0,05, 0,0125

Fig. 3.5. Predictor – corrector error $\|Z(t=2)\|_\infty$ with fixed step τ : a) kwazi-uniform spatial grid (horizontal axis indicated division number N); b) uniform spatial grid (step h). Values of τ are 0.2, 0.1, 0.05, 0.0125

kant sprendimo metodus, pritaikytus išretintoms matricoms (pavyzdžiui, jungtinių gradientų metodą), ši dalis yra apskaičiuojama atliekant $\mathcal{O}(J)$ veiksmų ir didelėms stipriai šakojančioms struktūroms. Todėl, turint omeny sąlyginę metodo aproksimaciją, darome išvadą, kad prediktoriaus – korektoriaus metodas nėra geresnis už klasikinius Eulerio ir Kranko-Nikolsono metodus.

Rempe, Chopp (2006) teigia, kad vienas iš šio metodo privalumų yra galimybė neskaičiuoti ramybės būsenoje esančių briaunų. Ši galimybė yra naudinga sprendžiant modelinius uždavinius, kai ląstelė yra sužadinoma vienu ar keliais signalais, ir yra stebimas tų signalų sklidimas. Tačiau modeliuojant sudėtingas dideles sistemas, tokias kaip Blue Brain projekte (Markram 2006), kiekviena ląstelė yra sujungta tūkstančiais sinapsinių ryšių su kitomis ląstelėmis, ir nuolat gauna didelį skaičių impulsų, todėl yra būtinas visos struktūros skaičiavimas kiekviename laiko sluoksnyje.

3.5.2. Neuronų sužadinimo skaitinis eksperimentas

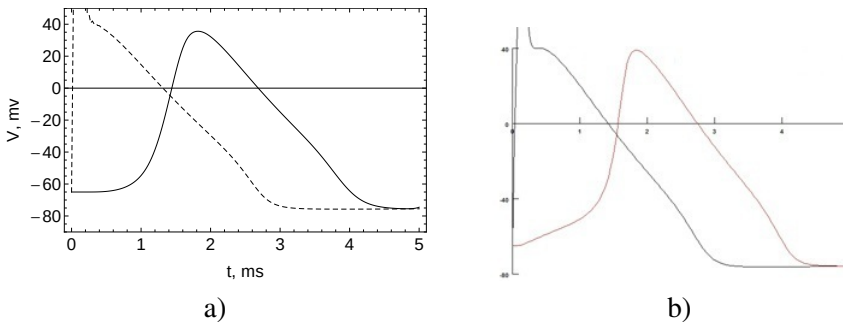
Neuronų sužadinimo skaitinis eksperimentas buvo atliktas taikant Kranko-Nikolsono metodą. Skaičiavimuose naudojome klasikinį Hodžkino ir Hakslio modelį, aprašytą 1.1 poskyryje. Modelio parametrai pateikiami 3.7 lentelėje.

Skaitinio eksperimento metu 100 nA dydžio elektros srovė buvo įterpiama į somą (pažymėtą 1 rodykle 3.4 pav.) laiko intervale iki 0,2 ms. Ląstelės at-

3.7 lentelė. Klasikinio Hodžkino ir Hakslio modelio parametrai**Table. 3.7.** Parameters of classical Hodgkin-Huxley model

Membranos elektrinė talpa C_m	$1 \mu\text{f}/\text{cm}^2$
Specifinė citoplazmos varža R_a	$35,4 \Omega \text{ cm}$
Maksimalus natrio laidumas $\bar{g}_{Na}$	$120 \text{ mmho}/\text{cm}^2$
Natrio pusiasvyros potencialas V_{Na}	115 mv
Maksimalus kalio laidumas $\bar{g}_K$	$36 \text{ mmho}/\text{cm}^2$
Kalio pusiasvyros potencialas V_K	-12 mv
Nespecifinis nuotekio laidumas $\bar{g}_l$	$0,3 \text{ mmho}/\text{cm}^2$
Nuotekio srovės pusiasvyros potencialas V_l	$10,6 \text{ mv}$

sakas buvo matuojamas vieno iš aksonų vidurio taške (pažymėtame 2 rodykle pav. 3.4). Skaitinio eksperimento rezultatai pateikti pav. 3.6 a. Palyginę gautą sprendinį su NEURON paketu apskaičiuotu sprendiniu (3.6 pav. b) matome, kad sprendiniai kokybiškai sutampa.



3.6 pav. Skaitinio eksperimento rezultatas: a) apskaičiuotas Kranko-Nikolsono metodu, aprašytu 2.2 poskyryje; b) apskaičiuotas NEURON paketu. Brūkšninė kreivė rodo įtampos pokyčius somoje, ištisinė – matavimo taške

Fig. 3.6. The results of numerical experiment: a) calculated with Crank-Nicolson method described in subsection 2.2; b) calculated with NEURON environment. The dashed curve shows voltage change in somma, the solid line – in the control point

Aukščiau pateikti rezultatai gauti su pakankamai stambiu diskrečiuoju tinklu, kiekvieną briauną dalinant į 20 dalių (briaunų ilgiai nuo 0,5 mikrono iki 488 mikronų), todėl skaičiavimo laikas yra trumpas. Lygiagrečiam testui apjungėme 100 tokių ląstelių į vieną grupę (šiuo atveju nenaudojome sudė-

3.8 lentelė. Lygiagretaus Kranko-Nikolsono algoritmo vykdymo rezultatai skaičiuojant netiesinį Hodžkino ir Hakslio modelį

Table. 3.8. Performance results for the parallel Crank-Nicolson solver for the Hodgkin-Huxley model

$p(n \times c)$	1×2	2×1	1×4	2×2	4×1	2×4	4×2	8×1	4×4	8×2	8×4
θ	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,02
$\gamma \times v$	1x4	1x4	2x4	2x4	2x4	3x6	3x6	3x6	4x8	4x8	4x9
$T_0 = 947$											
T_p	478	470	273	240	235	138	121	114	69	63	34
S_p	1,98	2,01	3,47	3,95	4,03	6,86	7,83	8,31	13,7	15,0	27,9
E_p	0,99	1,01	0,87	0,99	1,01	0,86	0,99	1,04	0,86	0,94	0,87

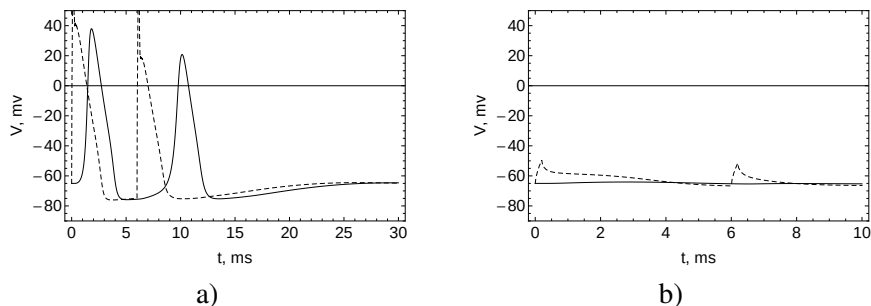
tingų sinapsės mechanizmų, paprastumo dėlei pasinaudojome tiesiog srautų tvermės dėsniais), o sprendinį skaičiavome pakankamai ilgame laiko intervale $T = 80ms$.

Lygiagrečiojo algoritmo efektyvumas gali būti palygintas su lygiagrečiojo neišreikštinio Eulerio rezultatais 3.1 lentelėje, nes atliekama tik viena iteracija. Tikėtina, kad efektyvumas turi didėti, nes netiesinio modelio skaičiavimas padidina lokalių skaičiavimų apimtį, kadangi koeficientų skaičiavimas yra pilnai išlygiagretinamas, o komunikacijų dalis nepadidėja. Lygiagrečiojo Kranko-Nikolsono algoritmo vykdymo rezultatai pateikti 3.8 lentelėje.

Kaip ir tikėjomes, lygiagrečiojo algoritmo efektyvumo rodikliai yra geresni netiesinio uždavinio atveju. Kai skaičiavimo mazguose naudojama po vieną branduolį, stebimas supertiesinis pagreitėjimas.

Pateiksime dar kelis skaitinių eksperimentų rezultatus (3.7 pav.), kai soma yra stimuliuojama dviems 2 ms trukmės srovės impulsais, kai $t = 0$ ir $t = 6$ ms.

Pirmoji kreivė rodo veikimo potencialą somoje, antroji – matavimo taške. Pirmuoju atveju srovė yra 100 nA, matome veikimo potencial sklidimą. Antruoju atveju srovė yra 7 nA – permaža įveikti bangos inicijavimo slenkstį ir sukelti bangos propagavimą (matavimo taške įtampa nesikeičia). Skaičiavimai rodo, kad 8 nA srovės pakanka slenksčiui įveikti.



3.7 pav. Skaitinio eksperimento rezultatas, kai soma stimuliuojama 2 kartus 2 ms trukmės srove: a) $I = 100$ nA ; b) $I = 7$ nA, bangos inicijavimo slenkstis nėra pasiektas ir banga nesklanda

Fig. 3.7. Numerical experiment, when soma is stimulated twice for 2 ms:

a) $I = 100$ nA ; b) $I = 7$ nA, the threshold is not reached and no peak is initiated

3.6. Trečiojo skyriaus išvados

Šiame skyriuje nagrinėjome lygiagrečius algoritmų versijas ir neurono sužadinimo skaitinį eksperimentą. Apibendrinsime pasiektus rezultatus:

1. Pateikti trys lygiagretieji algoritmai, skirti spręsti parabolinį uždavinį grafuose. Visi algoritmai grindžiami duomenų lygiagretumo paradigma ir realizuoja neišreikštinę ir prediktoriaus – korektoriaus schemas. Atlikta algortimų efektyvumo ir išplečiamumo analizė. Teorinė analizė ir skaičiavimo eksperimentai rodo gerą algoritmų išplečiamumą. Įrodyta, kad skaičiavimų efektyvumas daugiausiai priklauso nuo duomenų paskirstymo kokybės ir atminties magistralės riboto pralaidumo, kai yra naudojami 2 ar 4 branduoliai skaičiavimo mazge.
2. Naginėjamų algoritmų eksperimentinis tikslumo palyginimas rodo, kad prediktoriaus – korektoriaus schema pasižymi ne tik sąlygine aproksimacija, bet ir mažesniu tikslumu.
3. Atliktas skaitinis eksperimentas, nustatant žiurkės piramidinio neurono atsaką į stimuliaciją elektros srove. Skaičiavimų rezultatai kokybiškai sutampa su NEURON paketu apskaičiuotu atsaku.
4. Pateikti lygiagrečiojo Kranko-Nikolsono algoritmo vykdymo rezultatai. Kaip ir tikėtasi, lygiagretusis algoritmas rodo geresnius efektyvumo rodiklius netiesiniam uždaviniui, o naudojant po 1 branduolį skaičiavimo mazge stebimas supertiesinis pagreitėjimas.

Parabolinis uždavinys su nelokaliąja integraline kraštine sąlyga

Šiame skyriuje nagrinėjamas parabolinis uždavinys su nelokalioja integraline sąlyga:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(d(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) - q(x)u(x) + f(x), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \quad (4.1)$$

$$u(0, t) = \mu_0, \quad au(1, t) + b \int_0^1 \gamma(x)u(x, t)dx = g(t), \quad t > 0, \quad (4.2)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (4.3)$$

Uždavinio koeficientai tenkina sąlygas:

$$0 < d_0 \leq d(x) \leq d_M, \quad q(x) \geq 0, \quad \gamma(x) \geq 0.$$

Tolygiajame tinkle $\bar{\omega}_h \times \omega_\tau$, kur

$$\begin{aligned}\omega_h &= \{x_j : x_j = jh, j = 1, \dots, J-1\}, \quad hJ = 1, \quad \bar{\omega}_h = \omega_h \cup \{x_0, x_J\}, \\ \omega_\tau &= \{t^n : t^n = n\tau, n > 0\},\end{aligned}$$

apibrėžkime skirtuminių operatorių:

$$S_h U = \frac{h}{2}(\gamma_0 U_0 + \gamma_J U_J) + \sum_{j=1}^{J-1} \gamma_j U_j h.$$

Uždavinį 4.1 – 4.3 aproksimuojame neišreikštine Eulerio schema:

$$\partial_t U_j^n = \partial_x \left(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x U_j^n \right) - q_j U_j^n + f_j^n, \quad x_j \in \omega_h, \quad n > 0, \quad (4.4)$$

$$U_0^n = \mu_0^n, \quad a U_J^n + b S_h U^n = g^n, \quad n > 0, \quad (4.5)$$

$$U_j^0 = u_{0j}, \quad x_j \in \bar{\omega}_h. \quad (4.6)$$

R. Čiegio, A. Štikono, O. Štikonienės ir O. Suboč straipsniuose (Čiegis *et al* 2001, 2002) nagrinėjami stacionarus ir nestacionarus uždaviniai su dviem nelokaliosiomis sąlygomis bendresnio pavidalo:

$$u(l, t) = \alpha_l \left(\beta_l(t) u(\tilde{x}_l(t), t) + \int_0^1 \gamma_l(x, t) u(x, t) dx \right) + g_l(t), \quad l = 0, 1,$$

čia $0 \leq \tilde{x}_l \leq 1$, o parametrai $\alpha_l \geq 0$. Darbuose rastos vienintelio neneigiamo sprendinio egzistavimo sritys, pakankamos diskretaus uždavinio išsprendžiamumo sąlygos.

Vienmačio parabolinio uždavinio su dviem integralinėmis sąlygomis išreikštinės ir neišreikštinės Eulerio schemų stabilumo analizė diskrečiojo operatoriaus matricos spektro pagrindu aprašė Sapagovas (2008). Darbe parodyta, kad diskrečiosios schemos yra stabilios (neišreikštinė schema besąlygiškai, o išreikštinė – sąlygiškai) su bet kokiais laiko diskrečiojo žingsnio reikšmėmis, kai diskrečiojo operatoriaus tikrinės reikšmės yra realios ir teigiamos, ir stabilios su pakankamai mažomis diskrečiojo žingsnio reikšmėmis, kai diskrečiojo operatoriaus tikrinių reikšmių realiosios dalys yra teigiamos. Darbe nuodugnai išnagrinėti keli funkcijos $\gamma(x)$ atvejai. Parabolinis uždavinys su Bicadzės-Samarskio tipo nelokaliosiomis sąlygomis šiuo metodu yra nagrinėjamas darbe (Ivanauskas *et al* 2009).

Nelokalios integralinės sąlygos taip pat nagrinėjamos darbuose (Day

1983; Dehghan 2005; Ekolin 1991; Fairweather, Lopez-Marcos 1996), kur abi kraštinės sąlygos yra nelokalių integralinės. Diskrečių schemų analizė daugiausia pagrįsta maksimumo principu.

Darbe (Ekolin 1991) įrodyta, kad išreikštinės ir neišreikštinės Eulerio schemų diskretusis sprendinys egzistuoja ir konverguoja į diferencialinio uždavinio sprendinį, jei išpildytos sąlygos

$$\int_0^1 |\gamma_1(x)| dx \leq \mu < 1, \quad \int_0^1 |\gamma_2(x)| dx \leq \mu < 1. \quad (4.7)$$

Kranko-Nikolsono schemos analizė atlikta energetiniu metodu ir reikalaujama, kad būtų išpildyta sąlyga

$$\left(\int_0^1 |\gamma_1(x)|^2 dx \right)^2 + \left(\int_0^1 |\gamma_2(x)|^2 dx \right)^2 < \frac{\sqrt{3}}{2}. \quad (4.8)$$

Kaip teigiama darbe (Friedman 1986), sąlygos (4.7) yra pakankamos, norint įrodyti ir diferencialinio uždavinio su integralinėmis kraštinėmis sąlygomis monotoninio sprendinio egzistavimą ir vienatį. Darbe (Fairweather, Lopez-Marcos 1996) Kranko-Nikolsono Galerino aproksimacijos konvergavimas įrodytas, jei išpildytos sąlygos

$$\int_0^1 |\gamma_1(x)|^2 dx \leq \mu^2 < 1, \quad \int_0^1 |\gamma_2(x)|^2 dx \leq \mu^2 < 1. \quad (4.9)$$

Funkcijų $\gamma_{1,2}(x)$ ženklas šiose sąlygose nėra nagrinėjamas. Tačiau nagrinėdami šių funkcijų ženklą integralinėse sąlygose galime įrodyti tikslesnius įverčius.

Šio skyriaus rezultatai skelbti autorės publikacijoje (Čiegis, Tumanova (2010a)).

4.1. Koeficientai $a = 1$, $b = -1$

Šiame poskyryje atliekama baigtinių skirtumų schemos (4.4)–(4.6) analizė maksimumo principu. Naudojant aprašyta darbuose (Čiegis 2006,a; Sapagovas, Čiegis 1987) metodologiją vietoje sąlygų (4.7)–(4.9) gali būti gautos mažiau ribojančios sąlygos.

Pirma nagrinėjame pagalbinį stacionarų diskretųjį uždavinį

$$-\partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}}\partial_x W_j) + q_j W_j = F, \quad x_j \in \omega_h, \quad (4.10)$$

$$W_0 = 0, \quad W_J - S_h W = G, \quad (4.11)$$

čia konstantos $F, G \geq 0$.

4.1 lema. *Kai $\gamma(x) \leq \gamma_M$ yra pakankamai mažas, diskretusis uždavinys (4.10)–(4.11) turi vienintelį sprendinį*

$$0 \leq W_j \leq C, \quad j = 0, \dots, J. \quad (4.12)$$

Irodymas. Perrašome diskretųjį sprendinį pavydalu $W_j = W_j^1 + cW_j^2$, čia W^1 ir W^2 apibrėžiami taip:

$$\begin{cases} -\partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}}\partial_x W_j^1) + q_j W_j^1 = F, & x_j \in \omega_h, \\ W_0^1 = 0, & W_J^1 = 0, \end{cases}$$

ir

$$\begin{cases} -\partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}}\partial_x W_j^2) + q_j W_j^2 = 0, & x_j \in \omega_h, \\ W_0^2 = 0, & W_J^2 = 1. \end{cases}$$

Iš maksimumo principo seka, kad

$$0 \leq W_j^1 \leq c_1 F, \quad 0 \leq W_j^2 \leq 1, \quad 0 \leq j \leq J.$$

Naudodami nelokalios kraštinės sąlygos išraišką (4.11) gauname

$$c = (G + S_h W^1)/(1 - S_h W^2).$$

Kai $\gamma(x) \leq \gamma_M$ yra pakankamai mažas, galioja įvertis $1 - S_h W^2 \geq \delta > 0$, todėl įvertis (4.12) tesingas su konstanta $C = c_1 F + (G + \gamma_M F)/\delta$. $\square$

Toliau nagrinėjame antrą pagalbinį diskretųjį uždavinį

$$\partial_{\bar{t}} V_j^n = \partial_{\bar{x}}(d_{j+\frac{1}{2}}\partial_x V_j^n) - q_j V_j^n + \varphi_j^n, \quad x_j \in \omega_h, \quad n > 0, \quad (4.13)$$

$$V_0^n = 0, \quad V_J^n - S_h V^n = \varphi_J^n, \quad n > 0, \quad (4.14)$$

$$V_j^0 = 0, \quad x_j \in \bar{\omega}_h. \quad (4.15)$$

4.2 lema. *Tegul $\varphi_j \geq 0, j = 1, \dots, J$. Tada apręžtoms $\gamma(x) \leq \tilde{\gamma}_M$ egzis-*

tuoja pakankamai maži laiko ir erdvės tinklelio žingsniai $\tau \leq \tau_0(\tilde{\gamma}_M)$ ir $h \leq h_0(\tilde{\gamma}_M)$, tokie, kad diskretusis uždavinys (4.13)–(4.15) turi vientintelį sprendinį, ir $V_j^n \geq 0$ visiems $(x, t) \in \bar{\omega}_h \times \omega_\tau$.

Įrodymas. Iš pradinių sąlygų (4.15) seka, kad $V_j^0 \geq 0$. Padarykime prielaidą, kad lemos teiginiai yra teisingi, kai $0 \leq k \leq n-1$. Taikydami standartinį perkelties metodą, užrašome diskretųjį sprendinį pavydalu $V_j^n = \alpha_j V_{j+1}^n + \beta_j$, kur

$$\alpha_j = d_{j+\frac{1}{2}}/c_j, \quad \beta_j = \left(V_j^{n-1} \frac{h^2}{\tau} + \varphi_j h^2 + \beta_{j-1} d_{j-\frac{1}{2}} \right) / c_j, \quad j = 1, \dots, J-1,$$

$$c_j = \frac{h^2}{\tau} + d_{j+\frac{1}{2}} + d_{j-\frac{1}{2}} + q_j h^2 - \alpha_{j-1} d_{j-\frac{1}{2}}, \quad \alpha_0 = 0, \beta_0 = 0.$$

Kadangi matrica, apibrėžta diskrečiosiomis lygtimis (4.13) yra M-matrica, galioja įverčiai $0 \leq \alpha_j \leq 1$ ir $\beta_j \geq 0$. Tada, parinkę pakankamai mažą laiko žingsnį $\tau \leq h^2/d_M$, gausime $\alpha \leq \frac{1}{2}$.

Antrajame perkelties algoritmo žingsnyje užrašome diskretųjį sprendinį suma $V_j^n = \tilde{\alpha}_j V_J^n + \tilde{\beta}_j$, kur

$$\tilde{\alpha}_j = \alpha_j \tilde{\alpha}_{j+1}, \quad \tilde{\alpha}_J = 1, \quad \tilde{\beta}_j = \beta_j + \alpha_j \tilde{\beta}_{j+1}, \quad \tilde{\beta}_J = 0, \quad j = J-1, \dots, 1.$$

Išstatę perkelties formules į nelokaliją kraštinę sąlygą (4.14), gauname lygtį

$$\left[1 - h \left(\frac{\gamma_J}{2} + \sum_{j=1}^{J-1} \gamma_j \tilde{\alpha}_j \right) \right] V_J^n = \varphi_J^n + \sum_{j=1}^{J-1} \gamma_j \tilde{\beta}_j h.$$

Iš aukščiau pateiktų įverčių seka, kad

$$\tilde{\beta}_j \geq 0, \quad \tilde{\alpha}_{J-j} \leq (1/2)^j, \quad j = 1, \dots, J-1.$$

Tada pakankamai mažiems erdvės tinklelio žingsniams $h \leq 1/(3\tilde{\gamma}_M)$ teisingas įvertis

$$h \left(\frac{\gamma_J}{2} + \sum_{j=1}^{J-1} \gamma_j \tilde{\alpha}_j \right) \leq \frac{3}{2} \tilde{\gamma}_M h \leq \frac{1}{2}.$$

Todėl egzistuoja vienintelis diskretusis sprendinys V_j^n , $x_j \in \bar{\omega}_h$, ir teisingas įvertis $V_j^n \geq 0$. Lemos įrodymas baigiamas taikant matematinės indukcijos metodą. $\square$

Dabar galime įrodyti pagrindinį baigtinių skirtumų schemos (4.4)–(4.6) rezultatą.

4.1 teorema. *Kai parametras $\gamma(x) \leq \gamma_M$ yra pakankamai mažas, diskretusis uždavinys (4.4)–(4.6) turi vienintelį sprendinį, kuris konverguoja į diferencialinio uždavinio (4.1)–(4.3) sprendinį, ir teisingas toks paklaidos įvertis:*

$$|u(x_j, t^n) - U_j^n| \leq C(\tau + h^2), \quad (x, t) \in \bar{\omega}_h \times \omega_\tau. \quad (4.16)$$

Įrodymas. Paklaidos funkcijos diskretusis uždavinys yra

$$\partial_{\bar{t}} Z_j^n = \partial_{\bar{x}} \left(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x Z_j^n \right) - q_j Z_j^n + \psi_j^n, \quad x_j \in \omega_h, \quad n > 0, \quad (4.17)$$

$$Z_0^n = 0, \quad Z_j^n - S_h Z^n = \psi_j^n, \quad n > 0, \quad (4.18)$$

$$Z_j^0 = 0, \quad x_j \in \bar{\omega}_h, \quad (4.19)$$

čia ψ_j^n yra diskrečiosios schemos (4.4)–(4.6) netiktis, vertinama $|\psi_j^n| \leq C(\tau + h^2)$, $j = 1, \dots, J$. Netikties režius apibrėžiamo taip:

$$F = \max_{(x,t) \in \omega_h \times \omega_\tau} |\psi_j^n|, \quad G = \max_{t \in \omega_\tau} |\psi_j^n|.$$

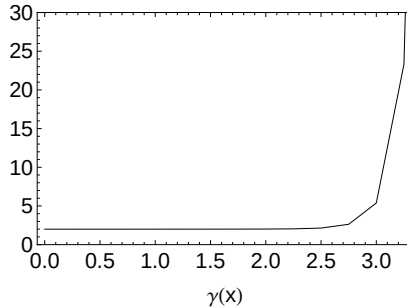
Tada galime pritaikyti stacionaraus uždavinio (4.10)–(4.11) sprendinį paklaidos funkcijai apręžti $|Z_j^n| \leq W_j$. Tam pakanka panagrinėti funkcijas $V_j^{\pm, n} = W_j \pm Z_j^n$ ir pritaikyti lemą 4.2. $\square$

PASTABA: Teoremoje 4.1 paklaidos režis yra įrodomas tik pakankamai mažai $0 \leq \gamma(x) \leq \gamma_M$, nors lemos 4.2 rezultatai teisingi bet kuriai apręžtai $\gamma(x)$, nes tik tada teisingi lemos 4.1 įverčiai. Kai $\gamma(x) \geq \gamma_M$, diskretaus uždavinio (4.4)–(4.6) operatorius turi vieną teigiamą tikrinę reikšmę, todėl tokiu atveju diskretusis sprendinys auga $O(\exp(\lambda t))$ greičiu (4.1 pav.).

4.2. Koeficientai $a = 1$, $b = 1$

Tokio tipo nelokalios sąlygos savo skaičiavimuose naudojo Dehghan (2005); Ekolin (1991); Martin-Vaquero, Vigo-Aguiar (2009,a). Funkcijos $\gamma_1(x)$, $\gamma_2(x)$ buvo parinktos taip, kad galima būtų taikyti ankstesnio poskyrio prielaidas.

Šiame poskyryje nagrinėjamas baigtinių skirtumų schemos (4.4)–(4.6) su koeficientais $a = 1$, $b = 1$ konvergavimas. Pirma, taikant modifikuotą perkėl-



4.1 pav. Diskretašs sprendinio U taške $x = 1, t = 1$ priklausomumas nuo $\gamma(x)$ reikšmės. Tikslusis sprendinys $u(1,1) = 2$. Skaičiavimai atlikti su žingsnių reikšmėmis $h = 0,04, \tau = 0,001$

Fig. 4.1. The dependance of the discrete solution U at a point $x = 1, t = 1$ on $\gamma(x)$. The exact solution $u(1,1) = 2$. Calculations performed with step values $h = 0.04, \tau = 0.001$

ties algoritmą, galime įrodyti diskrečiojo sprendinio egzistavimą ir vienetį su bet kuriomis diskrečiųjų žingsnių τ ir h reikšmėmis. Globaliosios paklaidos $Z_j^n = U_j^n - u(x_j, t^n)$ diskretusis uždavinys yra

$$\partial_t Z_j^n = \partial_{\bar{x}} \left(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x Z_j^n \right) - q_j Z_j^n + \psi_j^n, \quad x_j \in \omega_h, \quad n > 0, \quad (4.20)$$

$$Z_0^n = 0, \quad Z_j^n + S_h Z^n = \psi_j^n, \quad n > 0, \quad (4.21)$$

$$Z_j^0 = 0, \quad x_j \in \bar{\omega}_h, \quad (4.22)$$

čia ψ_j^n yra diskrečiosios schemos (4.4)–(4.6) netiktis, vertinama $|\psi_j^n| \leq C(\tau + h^2), j = 1, \dots, J$.

4.2 teorema. Kai parametras $\gamma(x) \leq \tilde{\gamma}_M$ yra aprėžtas, o diskrečiojo uždavinio operatoriaus tikrinių reikšmių realiosios dalys yra neigiamos, baigtinių skirtumų uždavinys (4.4)–(4.6) turi vienintelį sprendinį, kuris konverguoja į diferencialinio uždavinio (4.1)–(4.3) sprendinį, ir yra teisingas įvertis

$$|u(x_j, t^n) - U_j^n| \leq C(\tau + h^2), \quad (x, t) \in \bar{\omega}_h \times \omega_\tau. \quad (4.23)$$

Įrodymas. Užrašykime globaliąją paklaidą dviejų funkcijų suma $Z_j^n = V_j^n +$

W_j^n , kur funkcija V^n tenkina diskretųjį uždavinį

$$\begin{aligned}\partial_t V_j^n &= \partial_{\bar{x}} \left(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x V_j^n \right) - q_j V_j^n + \psi_j^n, \quad x_j \in \omega_h, \quad n > 0, \\ V_0^n &= 0, \quad V_J^n = \psi_J^n, \quad n > 0, \\ V_j^0 &= 0, \quad x_j \in \bar{\omega}_h.\end{aligned}\tag{4.24}$$

Taikydami maksimumo principą ir netikties įvertį gauname, kad $|V_j^n| \leq C(\tau + h^2)$, $(x, t) \in \bar{\omega}_h \times \omega_\tau$. Pagalbinė funkcija W tenkina diskretųjį uždavinį

$$\partial_t W_j^n = \partial_{\bar{x}} \left(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x W_j^n \right) - q_j W_j^n, \quad x_j \in \omega_h, \quad n > 0, \tag{4.25}$$

$$W_0^n = 0, \quad W_J^n + S_h W^n = \varphi_J^n, \quad n > 0, \tag{4.26}$$

$$W_j^0 = 0, \quad x_j \in \bar{\omega}_h, \tag{4.27}$$

čia $\varphi_J^n = -S_h V^n$. Asižvelgdami į V^n įvertį, gauname, kad $|\varphi_J^n| \leq C(\tau + h^2)$. Tarkime, kad egzistuoja apriorinis įvertis

$$|S_h W^n| \leq B_1, \quad n > 0. \tag{4.28}$$

Tada iš nelokalios sąlygos (4.26) seka, kad

$$|W_J^n| \leq |\varphi_J^n| + |S_h W^n| \leq C(\tau + h^2) + B_1.$$

Taikydami maksimumo principą diskrečiajam uždaviniui (4.25) su pirmojo tipo kraštinėmis sąlygomis, įrodome įvertį

$$|W_j^n| \leq C(\tau + h^2) + B_1, \quad (x, t) \in \bar{\omega}_h \times \omega_\tau.$$

Dabar reikia pagrįsti (4.28) įvertį. Padarykime prielaidą, kad dydis φ_J^n yra apribotas: $|\varphi_J^n| \leq G$. Nagrinėkime pagalbinį kraštinį uždavinį

$$\begin{aligned}\partial_t P_j^n &= \partial_{\bar{x}} \left(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x P_j^n \right) - q_j P_j^n, \quad x_j \in \omega_h, \quad n > 0, \\ P_0^n &= 0, \quad P_J^n = \mu > 0, \quad n > 0, \\ P_j^0 &= 0, \quad x_j \in \bar{\omega}_h.\end{aligned}$$

Šio uždavinio sprendinys yra monotoninė funkcija

$$P_j^n \geq 0, \quad P_j^n \geq P_j^{n-1}, \quad (x, t) \in \bar{\omega}_h \times \omega_\tau,$$

monotoniškai priklausanti nuo kraštinių sąlygų

$$\frac{\partial P_j^n}{\partial \mu} > 0, \quad j = 1, \dots, J.$$

Kadangi $\gamma \geq 0$, tai funkcionalas $S_h P$ irgi yra didėjanti funkcija P_j atžvilgiu:

$$\frac{\partial S_h P}{\partial P_j} = h\gamma_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, J.$$

Todėl $S_h P^n \leq S_h B$, čia B yra atitinkamo stacionaraus kraštinio uždavinio sprendinys.

Pagal teoremos sąlygą visų diskrečiojo operatoriaus tikrinių reikšmių realiosios dalys yra neigiamos, todėl stacionarusis uždavinys apibėžia dydžio $|S_h W^n|$ viršutinį rėžį, t. y. $|S_h W^n| \leq S_h R$, čia R_j yra stacionaraus diskretaus uždavinio su nelokalėmis kraštinėmis sąlygomis

$$\begin{aligned} -\partial_{\bar{x}} \left(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x R_j \right) + q_j R_j &= 0, \quad x_j \in \omega_h, \\ R_0 &= 0, \quad R_J + S_h R = G, \end{aligned}$$

sprendinys. Kadangi $R_J > 0$, iš nelokalios kraštinės sąlygos seka paprastas įvertis $S_h R \leq G \leq C(\tau + h^2)$. Teorema įrodyta. $\square$

4.3. Koeficientai $a = 0$, $b = 1$

Šiame poskyryje nagrinėjamas parabolinis uždavinys su paprasta integraline kraštine sąlyga. Tokius uždavinius nagrinėjo Cannon *et al* (1990); Cannon, Matheson (1993); Goolin *et al* (2001); Ionkin (1980), darydami prielaidą apie uždavinio koedicientų ir sprendinio glodumą ir transformuodami integralinę sąlygą į kitą nelokalią kraštinę sąlygą. Parodysime, kad tokios transformacijos gali būti traktuojamos, kaip parabolinio uždavinio su nelokalioje integraline sąlyga reguliarizacija. Nagrinėsime diskretaus uždavinio (4.4)–(4.6) konvergavimą darydami minimalias prielaidas apie sprendinio glodumą.

Taikydami modifikuotą perkelties algoritmą gauname, kad baigtinių skirtumų schema (4.4)–(4.6) turi vienintelį sprendinį su bet kuriomis diskrečiųjų

žingsnių τ ir h reikšmėmis. Paklaidos funkcijos diskretusis uždavinys yra

$$\partial_t Z_j^n = \partial_{\bar{x}} \left(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x Z_j^n \right) - q_j Z_j^n + \psi_j^n, \quad x_j \in \omega_h, \quad n > 0, \quad (4.29)$$

$$Z_0^n = 0, \quad S_h Z^n = \psi_J^n, \quad n > 0, \quad (4.30)$$

$$Z_j^0 = 0, \quad x_j \in \bar{\omega}_h, \quad (4.31)$$

čia ψ_j^n yra diskrečiosios schemos (4.4)–(4.6) netiktis, vertinama $|\psi_j^n| \leq C(\tau + h^2)$, $j = 1, \dots, J$. Vėl užrašome globaliąją paklaidą dviejų funkcijų suma $Z_j^n = V_j^n + W_j^n$, kur funkcija V^n tenkina diskretųjį uždavinį (4.24). Pagalbinė funkcija W^n tenkina diskretųjį uždavinį

$$\partial_t W_j^n = \partial_{\bar{x}} \left(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x W_j^n \right) - q_j W_j^n, \quad x_j \in \omega_h, \quad n > 0, \quad (4.32)$$

$$W_0^n = 0, \quad S_h W^n = \varphi_J^n, \quad n > 0, \quad (4.33)$$

$$W_j^0 = 0, \quad x_j \in \bar{\omega}_h, \quad (4.34)$$

čia $\varphi_J^n = -S_h V^n$. Atsižvelgdami į V^n įvertį, gauname, kad $|\varphi_J^n| \leq C(\tau + h^2)$.

Iš pateiktos ankstesniame poskyryje analizės seka, kad diskrečiosios schemos sprendinio stabilumas priklauso nuo W_J^n jautrumo φ_J^n atžvilgiu. Stabilumo konstanta gaunama sprendžiant pagalbinį uždavinį

$$-\partial_{\bar{x}} \left(d_{j+\frac{1}{2}} \partial_x P_j \right) + \tilde{q}_j P_j = 0, \quad x_j \in \omega_h, \quad (4.35)$$

$$P_0 = 0, \quad P_J = 1, \quad (4.36)$$

čia $\tilde{q}_j = \frac{1}{\tau} + q_j$, ir apskaičiuojant stabilumo daugiklį $c = 1/S_h P$. Šiame poskyryje įrodysime, kad duota diskrečioji schema bendru atveju konverguoja tik esant tam tikram santykiui tarp laiko ir erdvės žingsnių. Todėl apsiribojame asimptotinė analize ir darome prielaidą, kad $d(x) \equiv d_0$, $q(x) \equiv q_0$, $\gamma(x) \equiv \gamma_0$. Iš standartinės baigtinių skirtumų schemos, aproksimuojančios kraštinių uždavinį su pirmojo tipo kraštinėmis sąlygomis, analizės seka, kad

$$P_j = \frac{\exp(lx) - \exp(-lx)}{\exp(l) - \exp(-l)} + \mathcal{O}(h^2), \quad l = \sqrt{(1/\tau + q_0)/d_0} = \mathcal{O}(1/\sqrt{\tau}),$$

$$S_h P = \frac{1}{l} \mathcal{O}(1) = \mathcal{O}(\sqrt{\tau}), \quad c = \mathcal{O}(1/\sqrt{\tau}).$$

Todėl, jei tikrinių reikšmių realioji dalis yra neigiama, diskrečiosios schemos

(4.4)–(4.6) sprendinio paklaida gali būti įvertinta taip:

$$|Z_j^n| \leq Ct^n(\sqrt{\tau} + \frac{h^2}{\sqrt{\tau}}) \quad j = 1, \dots, J.$$

Dėl sąlyginio konvergavimo diskrečiosios schemos reguliarizacija turi būti atlikta susiejant τ ir h . Optimalus konvergavimo greitis pasiekiamas, kai $\tau = Ch^2$.

PASTABA: Stacionari diskrečioji schema (4.4)–(4.6) yra besąlygiškai stabili, t. y. šiuo atveju $c = \mathcal{O}(1)$.

4.3.1. Ionkino diskrečioji schema

Kai $\gamma(x) \equiv 1$ ir $q(x) \equiv 0$, Ionkinas pasiūlė keisti integralinę kraštinę sąlygą (4.5) ekvivalenčiomis. Jis naudojo transformaciją, gautą diferencijuojant nelokaliją sąlygą pagal laiko kintamąjį, ir taikant diferencialinę lygtį (4.1). Tada nauja nelokalioji kraštinė sąlyga formuluojama taip:

$$Tu := d(1) \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) - d(0) \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = g'(t) - \int_0^1 f(x, t) dx.$$

Ši sąlyga aproksimuojama diskrečiąja lygtimi

$$\begin{aligned} T_h U &:= d_{J-\frac{1}{2}} \partial_x U_{J-1}^n - d_{\frac{1}{2}} \partial_x U_0^n + \frac{h}{2} (\partial_t U_0^n + \partial_t U_J^n) \\ &= g'(t^n) - S_h f^n + \frac{h}{2} (f_0^n + f_J^n). \end{aligned} \quad (4.37)$$

Diskrečiojo sprendinio stabilumo nelokalios kraštinės sąlygos (4.37) atžvilgiu analizė rodo, kad

$$T_h P = l\mathcal{O}(1) = \mathcal{O}(1/\sqrt{\tau}), \quad c = \mathcal{O}(\sqrt{\tau}),$$

todėl diskrečioji schema (4.4), (4.37) yra stabili, o paklaida įvertinama taip

$$|Z_j^n| \leq C(\tau + h^2), \quad j = 1, \dots, J.$$

Pagrindiniai Ionkino schemos apribojimai yra būtinos prielaidos dėl diferencialinio uždavinio koeficientų ir funkcijos $g(t)$ pakankamo glodumo reikalavimas.

Uždavinio reguliarizavimui siūlome dar vieną metodą: diferencijuojame

integralinę sąlygą pagal laiką:

$$Tu := \frac{\partial}{\partial t} \int_0^1 \gamma(x)u(x,t)dx = g'(t)$$

ir ją aproksimuojame diskrečiąja lygtimi

$$T_h U := S_h U^n = \tau g'(t^n) + S_h U^{n-1}.$$

Stabilumo daugiklis šiuo atveju irgi yra $c = \mathcal{O}(\sqrt{\tau})$.

4.3.2. Skaiciavimo eksperimentas

Šiame poskyryje pateikiami uždavinio su nelokalia integraline sąlyga skaičiavimo rezultatai. Nagrinėjamas uždavinys (4.1)–(4.3) su koeficientais:

$$d(x) = 1, \quad q(x) = 0, \quad f(x) = x, \quad u_0(x) = x, \quad 0 < x < 1,$$

$$\gamma(x) = 1, \quad a = 0, \quad b = 1, \quad g(t) = (1+t)/2, \quad 0 < t < 1,$$

o uždavinio sprendinys yra funkcija $u(x,t) = (1+t)x$. Diskrečioji kraštinė sąlyga (4.5) sutrikdyta funkcija

$$g_h(t^n) = 10h^2(-1)^n.$$

Kadangi funkcija $g_h(t^n)$ yra trūki, teorinė analizė garantuoja tik sąlyginę konvergavimą $\mathcal{O}(h^2/\sqrt{\tau})$ eilės. 4.1 lentelėje pateiktos diskrečiojo uždavinio (4.1)–(4.3) sprendinio paklaidos maksimumo normoje.

4.1 lentelė. Diskrečiojo uždavinio (4.1)–(4.3) sprendinio paklaida $\|U - u\|_\infty$

Table. 4.1. Global errors $\|U - u\|_\infty$ of the solution of the discrete scheme (4.1)–(4.3)

h	$\tau = 0,04$	$\tau = 0,02$	$\tau = 0,01$	$\tau = 0,005$	$\tau = 0,0025$
0,04	0,1122	0,1569	0,2177	0,2971	0,3939
0,02	0,0283	0,0400	0,0560	0,0784	0,1089
0,01	0,0071	0,0100	0,0141	0,0199	0,0280

Šie rezultatai patvirtina diskrečiojo sprendinio konvergavimą $\mathcal{O}(h^2/\sqrt{\tau})$. 4.2 lentelėje pateiktos tokio pat diskrečiojo uždavinio sprendinio paklaidos

su kraštinė sąlyga

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^1 \gamma(x) u(x, t) dx = g'(t) + g_h(t^n), \quad g'(t) = \frac{1}{2}.$$

4.2 lentelė. Diskrečiojo uždavinio (4.1)–(4.3) su diferencijuota kraštine sąlyga sprendinio paklaida $\|U - u\|_\infty$

Table. 4.2. Global errors $\|U - u\|_\infty$ of the solution of the discrete scheme (4.1)–(4.3) with differentiated boundary condition

h	$\tau = 0,04$	$\tau = 0,02$	$\tau = 0,01$	$\tau = 0,005$	$\tau = 0,0025$
0,04	$2,884 \cdot 10^{-3}$	$1,2491 \cdot 10^{-3}$	$9,287 \cdot 10^{-4}$	$6,628 \cdot 10^{-4}$	$4,524 \cdot 10^{-4}$
0,02	$7,252 \cdot 10^{-4}$	$3,181 \cdot 10^{-4}$	$2,401 \cdot 10^{-4}$	$1,7612 \cdot 10^{-4}$	$1,2608 \cdot 10^{-4}$
0,01	$1,8157 \cdot 10^{-4}$	$7,988 \cdot 10^{-5}$	$6,053 \cdot 10^{-5}$	$4,475 \cdot 10^{-5}$	$3,251 \cdot 10^{-5}$

Šie rezultatai rodo geresnį diskrečiojo sprendinio konvergavimą $\mathcal{O}(\sqrt{\tau}h^2)$.

4.4. Ketvirtojo skyriaus išvados

Šiuolaikiniai taikomieji uždaviniai dažnai reikalauja neklasikinių kraštinų sąlygų taikymo matematiniuose modeliuose. Šiame skyriuje nagrinėjome vienmatės parabolinės lygties su nelokalia integraline kraštine sąlyga aproksimaciją neišreiškine Eulerio baigtinių skirtumų schema. Apibendriname pasiektus rezultatus:

1. Atlikta stabilumo analizė maksimumo normoje ir įrodyta, kad diskrečiosios schemos standumas ir stabilumo srities spindulys priklauso nuo nelokalios kraštinės sąlygos koeficientų ženklų.
2. Pagerinti žinomi stabilumo rezultatai. Kai nelokalios sąlygos koeficientai $a = 1$, $b = \pm 1$, įrodytos mažiau ribojančios stabilumo sąlygos.
3. Paprastos integralinės kraštinės sąlygos atveju įrodytas sąlyginis konvergavimas ir pasiūlytas regularizuojantis sąryšis tarp diskrečiųjų žingsnių. Teoriniai rezultatai patvirtinti skaičiavimo eksperimento rezultatais. Pateiktas naujas regularizavimo algoritmas, kai $g(t)$ yra glodi funkcija.

Krūvininkų rekombinacijos modelis

Šiame skyriuje nagrinėjamas sužadintų krūvininkų lazeriu apšviestame puslaidininkyje rekombinacijos modelis. Elektrinio laidumo reiškinys puslaidininkiuose visada yra lydimas krūvininkų pagavimo į lokalizuotas energetines būsenas. Šias lokalizuotas energetines būsenas sukuria priemaišos ir struktūros defektai puslaidininkyje. Tokie krūvininkai vėliau gali būti išlaisvinti (šviesos, elektrinio lauko, temperatūros pagalba) (toks lygmuo vadinamas prilipimo centru) arba gali rekombinuoti su priešingo ženklo krūvininkais (rekombinacijos centras). Dėl šių prilipimo ir rekombinacijos centrų šviesa apšviesto puslaidininkio laidumo kitimo procese atsiranda netiesiniai efektai: nors pagauti krūvininkai tiesiogiai nedalyvauja elektriniame laidume, tačiau stipriai jį įtakoja, nes lokalizuotas krūvis pakeičia elektrinio lauko pasiskirstymą, tuo pačiu ir laidumo sąlygas jame. Rekombinacijos proceso kinetika yra aprašoma naudojant Shockley-Read-Hall (SRH) rekombinacijos modelį (Hall 1952; Shockley, Read 1952). Šis modelis jungia elektronų laidumo juostoje, skylių valenti-

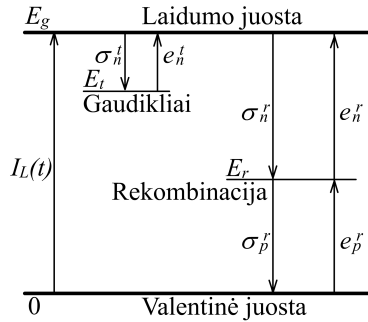
nėje juostoje ir pagautų krūvininkų tankius. Toks vykstančio proceso traktavimas išlieka aktualus ir mūsų dienomis ir yra taikomas kituose modeliuose (Schmerler *et al* 2008). Mums šis modelis yra įdomus dar ir tuo, kad modelio netiesiškumai yra kvadratiniai, todėl dauguma gautųjų teorinių rezultatų gali būti apibendrinti netiesiniams ląstelės sužadinimo modeliams. Be to, pastaruoju metu vystomi bioelektronikos tyrimai, nagrinėjantys elektrinių prietaisų ir gyvųjų ląstelių sąveiką. Samardak *et al* (2010) paskelbė, kad sukonstravo puslaidininkinį neuroną, kurio atsakas imituoja tikrojo neurono elektrines savybes (eksperimento rezultatai atitinka FitzHugh-Nagumo modelio veikimą). Ir kas žino, gal laidumo relaksacijos modeliavimo uždavinys bus sprendžiamas stipriai šakotose struktūrose?

Šiame skyriuje nagrinėsime netiesinį matematinį modelį ir linearizuotą skaitinę schemą. Šis tyrimas yra rezultatų, publikuotų straipsnyje (Pincevičius, Meilūnas, Tumanova (2007)) vystymas, kurio pagrindinis tikslas yra gauti apriorinius sprendinio įverčius ir įrodyti integravimo metodo konvergavimą. Kitas sprendžiamas uždavinys yra modelio identifikavimas, nustatant giliųjų centrų parametrus ir nagrinėjant jų identifikuojamumo galimybes.

Netiesinis krūvininkų rekombinacijos puslaidininkyje matematinis modelis aprašomas 5.1 poskyryje. Apriorinė analizė rodo, kad uždavinio sprendinys yra neneigiamas ir aprėžtas. 5.2 poskyryje pateikiama linearizuota neišreikštinė Eulerio schema. Įrodysime, kad diskretusis sprendinys atkartoja pagrindines diferencialinio uždavinio sprendinio savybes, taip pat įrodysime nagrinėjamos schemas konvergavimą. 5.3 poskyryje spręsimė modelio identifikavimo uždavinį. Identifikavimo procedūra atliekama naudojant genetinį algoritmą, kuris nereikalauja žinių apie optimizuojamos funkcijos gradientą. Genetinis algoritmas yra atsitiktinės paieškos variacija, todėl identifikavimo procedūra gali būti lengvai lygiagretinama taikant šeimininko – darbininkų algoritmą. Šiame skyriuje taip pat nagrinėjamos modelio identifikuojamumo galimybės.

5.1. Matematinis modelis

Nagrinėsime sužadinto puslaidininkio trumpalaikio atsako matematinį modelį, kurį pasiūlė Ichimura (2006). 5.1 pav. parodyti galimi krūvininkų (elektronų ir skylių) šuoliai p -tipo puslaidininkyje. Šiuo atveju prilipimo centras sąveikauja tik su laidumo juosta, todėl prilipimo koeficientas σ_p^t yra artimas 0. Paprastumo dėlei nagrinėsime po vieną prilipimo ir rekombinacijos lygmenį.



5.1 pav. Supaprastinta schema procesų, aprašytų modelyje; rodyklės žymi galimus krūvininkų šuolius
Fig. 5.1. A simplified diagram of processes considered in the mathematical model; arrows indicate possible transitions of carriers

Sprendžiame netiesinių diferencialinių lygčių sistemą

$$\frac{dn}{dt} = I_L(t) - \sigma_n^t v_{th}^n n (N_t - n_t) + e_n^t n_t - \sigma_n^r v_{th}^n n (N_r - n_r) + e_n^r n_r - \frac{n}{\tau_0}, \quad (5.1)$$

$$\frac{dn_t}{dt} = \sigma_n^t v_{th}^n n (N_t - n_t) - e_n^t n_t, \quad (5.2)$$

$$\frac{dn_r}{dt} = \sigma_n^r v_{th}^n n (N_r - n_r) - e_n^r n_r - \sigma_p^r v_{th}^p p n_r + e_p^r (N_r - n_r), \quad (5.3)$$

$$\frac{dp}{dt} = I_L(t) - \sigma_p^r v_{th}^p p n_r + e_p^r (N_r - n_r) - \frac{p}{\tau_0}, \quad (5.4)$$

$$n(0) = 0, \quad n_t(0) = 0, \quad n_r(0) = 0, \quad p(0) = 0, \quad (5.5)$$

čia n yra perteklinių elektronų koncentracija laidumo juostoje, p yra perteklinių skylių koncentracija valentinėje juostoje, n_t ir n_r yra užpildytų elektronais prilipimo ir rekombinacijos centrų koncentracijos. σ yra giliojo centro krūvininko pagavimo skerspjūvis, čia indeksas n ar p žymi elektroną arba skyelę, o indeksas t ar r žymi prilipimo arba rekombinacijos centrą. N_t ir N_r yra prilipimo ir rekombinacijos centrų koncentracijos, v_{th} yra vidutinis krūvininkų šiluminio judėjimo greitis, τ_0 yra vidutinė krūvininkų gyvavimo trukmė, t. y. vidutinis laikas, kurį išbūna elektronas laidumo juostoje arba skyelė valentinėje juostoje iki rekombinacijos. Lazerio impulsu generuojamas fotonų skaičius yra $I_L = I_0 \exp \left(- \left(\frac{t-\Delta}{\Delta/2} \right)^2 \right)$, čia I_0 yra maksimalus fotonų skaičius. Krūvininkų

išlaisvinimo koeficientai e susieti su pagavimo koeficientais lygtimis

$$\begin{aligned} e_n^t &= \sigma_n^t v_{th} N_c \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right), & e_n^r &= \sigma_n^r v_{th} N_c \exp\left(-\frac{E_r}{kT}\right), \\ e_p^r &= \sigma_p^r v_{th} N_v \exp\left(-\frac{E_g - E_r}{kT}\right), \end{aligned}$$

čia E nurodo prilipimo centro, rekombinacijos centro ir draustinės juostos energijos lygmenis, T žymi temperatūrą, N_c ir N_v yra laidumo ir valentinės juostų efektingieji tankiai.

Apriorinis sprendinio įvertinimas

Šiame poskyryje įrodysime netiesinės sistemos (5.1)–(5.5) sprendinio apriorinį įvertį. Šio įvertio išvedimas iš esmės naudoja kvadratinę netiesinių narių formą.

5.1 lema. *PDL pradinis uždavinys (5.1)–(5.5) turi neneigiamą ir apręžtą sprendinį:*

$$0 \leq n(t) \leq C_n, \quad 0 \leq n_t(t) \leq N_t, \quad 0 \leq n_r(t) \leq N_r, \quad 0 \leq p(t) \leq C_p, \quad (5.6)$$

čia konstantos

$$C_n = \tau_0(I_0 + e_n^t N_t + e_n^r N_r), \quad C_p = \tau_0(I_0 + e_p^r N_r).$$

Įrodymas. Dviems papildomoms funkcijoms

$$m_t(t) = N_t - n_t(t), \quad m_r(t) = N_r - n_r(t)$$

apibrėžkime papildomas lygtis, kurias gauname pasinaudoję (5.2) ir (5.3):

$$\frac{dm_t}{dt} = -\sigma_n^t v_{th} n m_t + e_n^t n_t, \quad (5.7)$$

$$\frac{dm_r}{dt} = -\sigma_n^r v_{th} n m_r - e_p^r m_r + e_n^r n_r + \sigma_p^r v_{th} p n_r. \quad (5.8)$$

Norėdami įrodyti sprendinio teigiamumą, pasinaudosime tokiu rezultatu (Gerisch, Chaplan 2006; Hundsdorfer, Verwer 2003): sistemos

$$\frac{dU(t)}{dt} = F(t, U(t)), \quad U(t) = (u_1(t), \dots, u_N(t))^T$$

sprendinys yra neneigiamas tada ir tik tada, kai su bet kuriuo $U \geq 0$ teisingas teiginys

$$u_i(t) = 0 \quad \Rightarrow \quad f_i(t, U(t)) \geq 0. \quad (5.9)$$

Šios teoremos taikymas lygtims (5.2), (5.3), (5.7) ir (5.8) įrodo įverčius:

$$n_t(t), n_r(t) \geq 0, \quad n_t \leq N_t, \quad n_r \leq N_r.$$

Tada teigiamumas $n(t) \geq 0$, $p(t) \geq 0$ akivaizdžiai seka iš lygčių (5.1), (5.4).

Telieka įvertinti funkcijų $n(t)$ ir $p(t)$ aprėžtumą. Panagrinėkime detaliau tik vieną iš funkcijų $p(t)$, nes $n(t)$ analizė atliekama panašiai. Apibrėžkime konstantą $P = \tau_0(I_0 + e_p^r N_r)$. Tada funkcija $z(t) = P - p(t)$ tenkina diferencialinę lygtį

$$\frac{dz}{dt} = I_0 - I_L(t) + \sigma_p^r v_{th}^p p n_r + e_p^r n_r - \frac{z}{\tau_0}.$$

Įverčio (5.9) taikymas rodo, kad $z(t) \geq 0$, t. y. $p(t) \leq P$. □

Šis matematinis rezultatas turi aiškią fizikinę prasmę: užpildytų elektronais centrų koncentracijos negali viršyti bendrų centrų koncentracijų, o perteklinių krūvininkų skaičiai negali būti didesni už lazerio sugeneruotų ir giliųjų centrų išlaisvintų krūvininkų skaičių.

5.2. Skaitinis integravimas

Šiame skyriuje pateiksime netiesinės sistemos (5.1)–(5.5) skaitinio integravimo schemą. Egzistuoja daug skaitinio integravimo metodų, skirtų spręsti standžias ir nestandžias PDL (Gerisch, Chaplan 2006; Hairer *et al* 1993; Hairer, Wanner 1996; Hundsdorfer, Verwer 2003). Apsiribosime linearizuotu neišreištinu Eulerio metodu, kaip gera pradžia prieš konstruojant veiksmingesnius skaitinius sprendimo metodus.

Apibrėžkime tolygų laiko tinklą ω_τ :

$$\omega_\tau = \{t^k : t^k = k\tau, k = 0, \dots, K, K\tau = T_f\}.$$

Sprendinio tikslųjų reikšmių tinklo taškuose $n(t^k)$, $n_r(t^k)$, $n_t(t^k)$, $p(t^k)$ aproksimacijas žymėsime n_τ^k , $n_{r\tau}^k$, $n_{t\tau}^k$ ir p_τ^k .

Linearizuota neišreikštinė Eulerio schema apibrėžiama taip:

$$\frac{n_{t\tau}^k - n_{t\tau}^{k-1}}{\tau} = \sigma_n^t v_{th}^n n_{\tau}^{k-1} (N_t - n_{t\tau}^k) - e_n^t n_{t\tau}^k, \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{n_{r\tau}^k - n_{r\tau}^{k-1}}{\tau} = & \sigma_n^r v_{th}^n n_{\tau}^{k-1} (N_r - n_{r\tau}^k) - e_n^r n_{r\tau}^k - \sigma_p^r v_{th}^p p_{\tau}^{k-1} n_{r\tau}^k \\ & + e_p^r (N_r - n_{r\tau}^k), \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{n_{\tau}^k - n_{\tau}^{k-1}}{\tau} = & I_L(t^k) - \sigma_n^t v_{th}^n n_{\tau}^k (N_t - n_{t\tau}^k) + e_n^t n_{t\tau}^k \\ & - \sigma_n^r v_{th}^n n_{\tau}^k (N_r - n_{r\tau}^k) + e_n^r n_{r\tau}^k - \frac{n_{\tau}^k}{\tau_0}, \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$\frac{p_{\tau}^k - p_{\tau}^{k-1}}{\tau} = I_L(t^k) - \sigma_p^r v_{th}^p p_{\tau}^k n_{r\tau}^k + e_p^r (N_r - n_{r\tau}^k) - \frac{p_{\tau}^k}{\tau_0}. \quad (5.13)$$

Šios schemos realizacija yra labai paprasta, nes nereikalauja iteracijų.

Toliau parodysime, kad lemos 5.1 įvertis yra teisingas diskrečiojo uždavinio (5.10)–(5.13) sprendinio atžvilgiu.

5.2 lema. *Jei n_{τ}^{k-1} , $n_{t\tau}^{k-1}$, $n_{r\tau}^{k-1}$ ir n_{τ}^{k-1} tenkina (5.14), tai diskretus uždavinys (5.10)–(5.13) turi neneigiamą ir apręžtą sprendinį:*

$$0 \leq n_{\tau}^k \leq C_n, \quad 0 \leq n_{t\tau}^k \leq N_t, \quad 0 \leq n_{r\tau}^k \leq N_r, \quad 0 \leq p_{\tau}^k \leq C_p, \quad (5.14)$$

čia konstantos C_n ir C_p apibrėžtos 5.1 lemoje.

Įrodymas. Įrodymas seka iš sprendinių išreikštinės formos. Pavyzdžiui, panagrinėkime lygtį (5.10). Jos sprendinys gali būti užrašytas išreikštine forma

$$n_{t\tau}^k = \frac{n_{t\tau}^{k-1} + \tau \sigma_n^t v_{th}^n n_{\tau}^{k-1} N_t}{1 + \tau (\sigma_n^t v_{th}^n n_{\tau}^{k-1} + e_n^t)}.$$

Funkcijos $n_{t\tau}^k$ teigiamumas ir apręztumas seka iš lemos prielaidų. Funkciją $n_{r\tau}^k$ galime tirti panašiai. Dabar panagrinėkime p_{τ}^k . Lygties (5.13) sprendinį galime užrašyti taip:

$$p_{\tau}^k = \frac{p_{\tau}^{k-1} + \tau (I_L(t^k) + e_p^r (N_r - n_{r\tau}^k))}{1 + \tau (\sigma_p^r v_{th}^p n_{r\tau}^k + 1/\tau_0)}. \quad (5.15)$$

Funkcijos p_τ^k neneigiamumas seka iš prielaidos, kad $p_\tau^{k-1} \geq 0$, $I_L(t^k) \geq 0$ ir iš jau įrodyto įverčio $0 \leq n_{r\tau}^k \leq N_r$. Dabar, įstatę nelygybes $n_{r\tau}^k \geq 0$, $I_L(t^k) \leq I_0$, $n_{r\tau}^k \geq 0$ ir $p_\tau^{k-1} \leq \tau_0(I_0 + e_p^r N_r)$ į lygtį (5.15), gauname įverčius

$$p_\tau^k \leq \frac{\tau_0(I_0 + e_p^r N_r) + \tau(I_0 + e_p^r N_r)}{1 + \tau/\tau_0} \leq \tau_0(I_0 + e_p^r N_r).$$

Funkcijos n_τ^k įvertis įrodomas tokiu pat būdu. □

Konvergavimo analizė

Šiame poskyryje panagrinėsime stabilumo ir konvergavimo įverčius. Apibrėžime paklaidos funkcijas:

$$z_n^k = n(t^k) - n_\tau^k, \quad z_{n_t}^k = n_t(t^k) - n_{t\tau}^k, \quad z_{n_r}^k = n_r(t^k) - n_{r\tau}^k, \quad z_p^k = p(t^k) - p_\tau^k.$$

Vektoriaus normą $Z^k = (z_n^k, z_{n_t}^k, z_{n_r}^k, z_p^k)$ apibrėžiame taip:

$$\|Z^k\| = \max(|z_n^k|, |z_{n_t}^k|, |z_{n_r}^k|, |z_p^k|).$$

Konvergavimo analizė pagrįsta maksimumo principu ir diskrečiųjų netiesinių narių forma. Įstatę paklaidos funkciją į diskrečiąsias lygtis (5.10)–(5.13) gauname paklaidos diskretųjį uždavinį:

$$\frac{z_{n_t}^k - z_{n_t}^{k-1}}{\tau} = \sigma_n^t v_{th}^n (z_n^{k-1} (N_t - n_{t\tau}^k) - n_\tau^{k-1} z_{n_t}^k) - e_n^t z_{n_t}^k + \psi_{n_t}^k, \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{z_{n_r}^k - z_{n_r}^{k-1}}{\tau} &= \sigma_n^r v_{th}^n (z_n^{k-1} (N_r - n_{r\tau}^k) - n_\tau^{k-1} z_{n_r}^k) - e_n^r z_{n_r}^k \\ &\quad - \sigma_p^r v_{th}^p (z_p^{k-1} n_r^k + p_\tau^{k-1} z_{n_r}^k) - e_p^r z_{n_r}^k + \psi_{n_r}^k, \end{aligned} \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{z_n^k - z_n^{k-1}}{\tau} &= -\sigma_n^t v_{th}^n (z_n^k (N_t - n_{t\tau}^k) - n_\tau^k z_{n_t}^k) + e_n^t z_{n_t}^k + e_n^r z_{n_r}^k \\ &\quad - \sigma_n^r v_{th}^n (z_n^k (N_r - n_{r\tau}^k) - n_\tau^k z_{n_r}^k) - \frac{z_n^k}{\tau_0} + \psi_n^k, \end{aligned} \quad (5.18)$$

$$\frac{z_p^k - z_p^{k-1}}{\tau} = -\sigma_p^r v_{th}^p (z_p^k n_r^k + p_\tau^k z_{n_r}^k) - e_p^r z_{n_r}^k - \frac{z_p^k}{\tau_0} + \psi_p^k, \quad (5.19)$$

čia $\psi_n^k, \psi_{n_t}^k, \psi_{n_r}^k, \psi_p^k$ yra atitinkamų diskrečiųjų lygčių netiktys.

5.3 lema. *Egzistuoja konstanta M , su kuria teisinga nelygybė*

$$\|Z^k\| \leq (1 + M\tau)\|Z^{k-1}\| + \tau \max(|\psi_n^k|, |\psi_{n_t}^k|, |\psi_{n_r}^k|, |\psi_p^k|), \quad (5.20)$$

čia $M = \max(M_n, M_{n_t}, M_{n_r}, M_p)$ ir

$$\begin{aligned} M_n &= (\sigma_n^t + \sigma_n^r) v_{th}^n C_n + e_n^t e_n^r, & M_{n_t} &= \sigma_n^t v_{th}^n N_t, \\ M_{n_r} &= (\sigma_n^r v_{th}^n + \sigma_p^r v_{th}^p) N_r, & M_p &= \sigma_p^r v_{th}^p C_p + e_p^r. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Įrodymas. Taikydami apriorinius įverčius, įrodytus lemoje 5.2, iš diskrečiųjų lygčių (5.16)–(5.19) gauname

$$\begin{aligned} |z_n^k| &\leq (1 + M_n\tau)\|Z^{k-1}\| + \tau|\psi_n^k|, & |z_{n_t}^k| &\leq (1 + M_{n_t}\tau)\|Z^{k-1}\| + \tau|\psi_{n_t}^k|, \\ |z_{n_r}^k| &\leq (1 + M_{n_r}\tau)\|Z^{k-1}\| + \tau|\psi_{n_r}^k|, & |z_p^k| &\leq (1 + M_p\tau)\|Z^{k-1}\| + \tau|\psi_p^k|, \end{aligned}$$

čia konstantos yra apibrėžtos (5.21). Pritaikę maksimumo principą gauname stabilumo rezultatą (5.20). Lema įrodyta. $\square$

5.1 teorema. *Tegul diferencialinio uždavinio (5.1)–(5.5) sprendiniai yra pakankamai glodžios funkcijos. Tada egzistuoja konstanta $C = C(M, t^k)$, su kuria teisingas įvertis*

$$\|Z^k\| \leq C\tau, \quad k = 1, 2, \dots, K. \quad (5.22)$$

Įrodymas. Kai sistemos sprendiniai yra pakankamai glodžios funkcijos, netiktis galime aprėžti iš viršaus

$$\|\Psi^k\| := \max(|\psi_n^k|, |\psi_{n_t}^k|, |\psi_{n_r}^k|, |\psi_p^k|) \leq C_A\tau, \quad k = 1, 2, \dots, K.$$

Kartodami įvertį (5.20), taip pat pritaikę netikčių įvertį ir lygybę $Z^0 = 0$, gauname

$$\begin{aligned} \|Z^k\| &\leq (1 + M\tau)^k \|Z^0\| + \tau \sum_{j=0}^{k-1} (1 + M\tau)^j \|\Psi^{k-j}\| \\ &\leq \frac{\exp(Mt^k)}{M} \max_{1 \leq j \leq k} \|\Psi^j\| \leq C(M, t^k)\tau. \end{aligned}$$

Teorema įrodyta. $\square$

5.3. Modelio identifikavimas

Virtualusis eksperimentas dažnai yra naudojamas spręsti modelio identifikavimo uždavinį. Parenkant modelio parametrų rinkinį skaičiavimo rezultatas yra lyginamas su atliktais eksperimentiniais bandymais, taip nustatomas geriausiai tinkantis parametrų rinkinys. Šiame poskyryje sprendžiamas giliųjų centrų parametrų nustatymo uždavinys.

Gilusis centras modelyje yra nusakomas krūvininkų pagavimo skerspjūviais σ ir koncentracija N . Apibrėžkime koeficientų, kurių reikšmes norime nustatyti, vektorių $\theta = (\sigma_n^t, \sigma_n^r, \sigma_p^r, N_t, N_r)$. Stebimų dydžių vektorių y sudaro dydžiai, kuriuos galime išmatuoti eksperimento metu: $y = (n(t))$.

Kai reikia nustatyti arba patikslinti abiejų centrų parametrus, arba draustinėje juostoje egzistuoja daugiau nei vienas centras, keliamas optimizavimo uždavinys daugiamatėje erdvėje (galio arsenido laidumo relaksacijos modelis, aprašantis 4 prilipimo lygmenis, aprašytas Pincevičiaus, Meilūno ir Tumanovos (2007) darbe). Priklausančio nuo kelių parametrų netiesinio modelio paklaidos funkcija dažnai yra labai sudėtinga ir pasižymi daugybe lokaliųjų minimumų. Deja, daugiaparametrinės paieškos atveju sunku įvertinti lokalių minimumų skaičių, todėl dažnai pirminybė teikiama globalios optimizacijos metodams. Weise (2009) pateikė sudėtingų optimizuojamų funkcijų pavyzdžių ir apžvelgė globalios optimizacijos metodus.

Skaičiavimo eksperimentui atlikti parinkome genetinį algoritmą. Lyginant su optimizacijos metodais, grindžiamais funkcijos gradientu, genetinis algoritmas yra labiau tinkamas, kai funkcija yra trūki, netiesinė ir/ar pasižymi kitais sudėtingumais. Genetinio algoritmo mutacijos mechanizmas leidžia neužstrigti ties lokaliojo minimumo tašku ir padidina tikimybę pasiekti globalų minimumą (Goldberg 2002). Barth (1992); Charbonneau (2002); Paterakis *et al* (1998) nagrinėjo genetinių algoritmų pritaikymą sprendžiant sudėtingesnius parametrų identifikavimo uždavinius ir palygino optimizavimo rezultatus su atkaitinimo modeliavimo metodu (ang. *simulated annealing*) ir tradiciniais laiptiniais algoritmais (ang. *hill climbing*). Aprašyta daug pavyzdžių šio optimizavimo metodo naudojimo taikomiesiems parametrų nustatymo uždaviniams spręsti, pavyzdžiui, optimizuojant skaitmeninius filtrus (Yao, Sethares 1994) ar konstruojant eksperimentus (Barth 1992).

Dėl panašumo į gamtoje egzistuojančius gyvybės evoliucinius mechanizmus genetiniai algoritmai operuoja tokiomis sąvokomis, kaip individas (atskiras sprendinys), chromosoma (optimizuojamų parametrų rinkinys), genai (optimizuojamų parametrų reikšmių aibės), sukryžminimo ir mutacijos procesai (naujų sprendinių konstravimo būdai) ir t.t. Individui įvertinti naudojama tin-

kamumo funkcija, sukonstruota mažiausių kvadratų metodu:

$$\varepsilon_i = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K (n_{Exp}^k - n(t^k, \theta^i))^2, \quad i = 1, \dots, P, \quad k = 1, \dots, K, \quad (5.23)$$

čia P žymi nagrinėjamos populiacijos dydį (sprendinių aibės dydį), o K – matavimo taškų skaičių. Norėdami rasti parametrus θ , sprendžiamo minimizavimo uždavinį

$$\theta^* = \arg \min_{i=1, \dots, P} \varepsilon_i.$$

5.3.1. Parametrų identifikuojamumas

Prieš atliekant skaičiavimus reikia įsitikinti, kad modelis yra identifikuojamas. Struktūrinės identifikuojamumo analizės metodai reikalauja, kad nagrinėjamų lygčių išraiškose nebūtų nestebimų dydžių. Kai ne visi modelio kintamieji yra stebimi, nestebimi kintamieji eliminuojami, skaičiuojant aukštesnės eilės stebimų kintamųjų išvestines ir atliekant algebrinius pertvarkius. Tokiu būdu gaunamos lygtys, kurias sudaro stebimi kintamieji ir ieškomi parametrai. Nors struktūrinės analizės metodai dažnai leidžia spręsti apie globalų modelio parametrų identifikuojamumą, tačiau jie nėra plačiai taikomi sudėtingiems modeliams dėl skaičiavimų sudėtingumo. Šiuo atveju, kai stebimas tik vienas dydis iš keturių, o lygtyse yra kvadratiniai netiesiškumai, tokios funkcijos konstravimas tikrai yra sudėtingas.

Jautrumo analizės (ang. *sensitivity analysis*) metodai, klasifikuojami kaip tarpiniai tarp struktūrinės analizės ir praktinių identifikuojamumo nustatymo metodų, leidžia daryti išvadas apie parametrų identifikuojamumą tam tikro parametrų vektoriaus taško atžvilgiu (ang. *at-a-point analysis*). Šią analizę atlikome taško $\theta^* = (1,5 \cdot 10^{-19}, 1,7 \cdot 10^{-19}, 2 \cdot 10^{-19}, 35 \cdot 10^{16}, 35 \cdot 10^{16})$ atžvilgiu, nes būtent šios parametrų reikšmės buvo siūlomos fizikų. Jautrumo matricos elementai skaičiuojami pagal formulę

$$s_{ij}(t_k) = \frac{\partial y_i(t_k, \theta^*)}{\partial \theta_j},$$

čia $i = 1, \dots, d$ žymi sistemos stebimų kintamųjų indeksą, $j = 1, \dots, q$ – parametro indeksą, o $k = 1, \dots, K$ – matavimo taško indeksą. Išvestinę skaičiavimuose pakeitėme baigtiniais skirtumais. Šiuo atveju vektorius $y = (n(t))$, o matricos reikšmės apskaičiuojamos 30 taškų: $k = 1, \dots, 30$. Dalis jautrumo matricos duomenų pateikta 5.1 lentelėje.

5.1 lentelė. Jautrumo matrica taško $\theta^* = (1,5 \cdot 10^{-19}, 1,7 \cdot 10^{-19}, 2 \cdot 10^{-19}, 35 \cdot 10^{16}, 35 \cdot 10^{16})$ atžvilgiu

Table. 5.1. Sensitivity matrix at a point $\theta^* = (1.5 \cdot 10^{-19}, 1.7 \cdot 10^{-19}, 2 \cdot 10^{-19}, 35 \cdot 10^{16}, 35 \cdot 10^{16})$

k	t_k , ns	σ_n^t	σ_n^r	σ_p^r	N_t	N_r
1	10	$-5,35 \cdot 10^{33}$	$-5,72 \cdot 10^{33}$	$-7,34 \cdot 10^{27}$	$-2,37 \cdot 10^{-3}$	$-2,78 \cdot 10^{-3}$
2	20	$-9,30 \cdot 10^{33}$	$-1,10 \cdot 10^{34}$	$-7,17 \cdot 10^{28}$	$-4,34 \cdot 10^{-3}$	$-5,34 \cdot 10^{-3}$
3	30	$-1,08 \cdot 10^{34}$	$-1,43 \cdot 10^{34}$	$-2,19 \cdot 10^{29}$	$-5,38 \cdot 10^{-3}$	$-6,97 \cdot 10^{-3}$
4	40	$-1,09 \cdot 10^{34}$	$-1,63 \cdot 10^{34}$	$-4,43 \cdot 10^{29}$	$-5,79 \cdot 10^{-3}$	$-7,96 \cdot 10^{-3}$
5	50	$-1,00 \cdot 10^{34}$	$-1,74 \cdot 10^{34}$	$-7,26 \cdot 10^{29}$	$-5,80 \cdot 10^{-3}$	$-8,51 \cdot 10^{-3}$
6	60	$-8,62 \cdot 10^{33}$	$-1,79 \cdot 10^{34}$	$-1,05 \cdot 10^{30}$	$-5,54 \cdot 10^{-3}$	$-8,75 \cdot 10^{-3}$
7	70	$-7,02 \cdot 10^{33}$	$-1,79 \cdot 10^{34}$	$-1,39 \cdot 10^{30}$	$-5,14 \cdot 10^{-3}$	$-8,79 \cdot 10^{-3}$
...						
30	300	$2,98 \cdot 10^{33}$	$-9,77 \cdot 10^{33}$	$-7,51 \cdot 10^{30}$	$6,01 \cdot 10^{-4}$	$-4,85 \cdot 10^{-3}$

Koreliacijos metodas jautrumo matricos pagrindu leidžia ištirti parametru porų priklausomybę. Parametru koreliacija skaičiuojama kaip koreliacija tarp dviejų matricos stulpelių reikšmių, nes matricos stulpelis parodo sistemos atsaką į parametro pokyčius. Jei apskaičiuotas dviejų parametru koreliacijos koeficientas yra artimas vienetui, šie du parametrai laikomi neatskiriamais, jų nustatyti kartu neįmanoma. Siūloma arba vieną iš jų fiksuoti, arba keisti matematinį modelį pašalinus parametru. Apskaičiuoti koreliacijos koeficientai pateikti 5.2 lentelėje.

5.2 lentelė. Koreliacija tarp parametru

Table. 5.2. Correlation between parameters

	σ_n^t	σ_n^r	σ_p^r	N_t	N_r
σ_n^t	-	0,47	-0,91	0,94	0,46
σ_n^r	0,47	-	-0,53	0,72	1,00
σ_p^r	-0,91	-0,53	-	-0,94	-0,51
N_t	0,94	0,72	-0,94	-	0,71
N_r	0,46	1,00	-0,51	0,71	-

Matome, kad artimiausios vienetui koreliacijos reikšmės yra tarp koefici-

entų porų (σ_n^t, N_t) ir (σ_n^r, N_r) . Todėl tolimesniuose skaičiavimuose koeficientus N_t ir N_r fiksuosime.

Reikšmingumo nustatymo (ang. *tuning importance*) metodas, irgi priklausantis jautrumo analizės metodų grupei buvo sukurtas tam, kad jo pagalba galima būtų atskirti nereikšmingus koeficientus ir taip supaprastinti identifikavimo procesą. Šis metodas naudoja normalizuotą jautrumo matricą, kurios elementai apskaičiuojami pagal formulę

$$s_{ij}(t_k) = \frac{\theta_j}{y_i} \frac{\partial y_i(t_k, \theta^*)}{\partial \theta_j} = \frac{\partial \ln y_i(t_k, \theta^*)}{\partial \ln \theta_j}.$$

Naudodami normalizuotą jautrumo matricą, apskaičiuojame bendrą sistemos jautrumą parametru (ang. *overall sensitivity*) pagal formulę

$$os(\theta_j) = \frac{\partial e}{\partial \ln \theta_j} = \sum_{k=1}^N \sum_{i=1}^d \left[\frac{\partial \ln y_i(t_k, \theta^*)}{\partial \ln \theta_j} \right]^2 = \sum_{k=1}^N \sum_{i=1}^d \left(s_{ij}(t_k) \right)^2.$$

Kuo didesnis jautrumo koeficientas, tuo didesnis yra sistemos atsakas į šio parametro trikdžius. Literatūroje rekomenduojama parametrus, kuriems bendras jautrumas yra labai mažas, laikyti neidentifikuojamais.

5.3 lentelė. Sistemos jautrumas parametrų pokyčiui

Table. 5.3. Overall sensitivity for the parameters

σ_n^t	σ_n^r	σ_p^r	N_t	N_r
2,15	31,7	$1,14 \cdot 10^{-5}$	1,56	32,8

5.3 lentelėje pateiktos bendro sistemos jautrumo parametrų reikšmės. Matome, kad jautrumas parametru σ_p^r yra labai mažas, todėl tikėtina, kad jo nustatyti nebus įmanoma. Šiai prielaidai patikrinti atlikome Monte Carlo testą, priklausantį praktinių identifikuojamumo metodų grupei (Miao *et al* 2011). Šis metodas leidžia ištirti parametrų identifikuojamumo priklausomybę nuo eksperimento matavimų paklaidų ir įvertinti identifikavimo algoritmą. Taikant Monte Carlo metodą generuojami įvairūs sistemos atsakai su skirtingu tikslumu arba matavimo paklaida. Tokie daugybiniai matavimai dažnai yra neįmanomi praktiškai. Sugeneruoti duomenys naudojami patikrinimui, ar įmanoma patikimai nustatyti parametrų reikšmes prie skirtingų sąlygų. Bendru atveju Monte Carlo algoritmas apibūdinamas taip:

- Nustatyti nominalų parametų rinkinį θ_0 , kuris gali būti parenkamas iš literatūros ar kitų šaltinių.
- Apskaičiuoti stebimų dydžių reikšmes numatytuose taškuose su nominaliu parametų rinkiniu.
- Naudojant apskaičiuotas stebimų dydžių reikšmes sugeneruoti N dydžio aibę eksperimentinių duomenų su tam tikra nustatyta matavimo paklaida.
- Priderinti modelį kiekvienam sugeneruotam duomenų rinkiniui, taip nustatyti parametų rinkinį $\tilde{\theta}_i$, $i = 1, 2, \dots, N$.
- Kiekvienam parametrai apskaičiuoti vidutinę santykinę įvertinimo paklaidą pagal formulę

$$ARE = 100\% \cdot \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|\theta_0^{(j)} - \tilde{\theta}_0^{(j)}|}{\theta_0^{(j)}},$$

čia $j = 1, \dots, q$ yra parametro indeksas.

ARE reikšmės rodo, ar parametro reikšmė gali būti nustatyta pakankamu tikslumu. Su labai mažomis eksperimentinių duomenų paklaidomis parametrai turi būti nustatomi pakankamai tiksliai ir jų ARE paklaidos turi būti labai mažos. Esant didesnėms eksperimentinių duomenų paklaidoms, ARE paklaida irgi bus didesnė. Jei ARE reikšmė yra netoleruotina, parametro nustatymas yra neįmanomas. Taigi, šis metodas leidžia ne tik nustatyti, ar parametras gali būti identifikuojamas, bet ir numatyti kritinę eksperimento duomenų matavimo paklaidą, prie kurios identifikavimo uždavinys tampa neįmanomas. Be to, šis metodas leidžia iš dalies įvertinti ir suderinti optimizavimo algoritmo parametrus: atlikus seriją skaičiavimų, parenkami optimizavimo algoritmo parametrai, leidžiantys tiksliausiai nustatyti modelio parametų reikšmes. Pagrindinis šio metodo trūkumas yra būtinybė atlikti didelės apimties skaičiavimus, nes optimizavimo procedūra atliekama daug kartų.

Atlikome Monte Carlo testą patikrinti parametų $(\sigma_n^t, \sigma_n^r, \sigma_p^r)$ identifikavimo galimybes. ARE paklaidos apskaičiuojamos atlikus 960 optimizavimo bandymų. Rezultatai pateikiami 5.4 lentelėje. Testo rezultatai patvirtina, kad parametras σ_p^r šiuo atveju negali būti identifikuojamas, nes jo paklaida statistškai yra labai didelė net tada, kai lyginama su visiškai tiksliais eksperimento duomenimis. O esant net nedideliui triukšmui, paklaida ženkliai išauga, ir parametras tampa neidentifikuojamas. Toks jautrumo sumažėjimas gali būti paaiškintas, pavyzdžiui, rekombinacijos centro išotiniu, dėl ko sumažėja jo

5.4 lentelė. Praktinė identifikuojamumo analizė Monte Carlo metodu

Table. 5.4. Practical identifiability by Monte-Carlo method

Eksperimento duomenų matavimo paklaida (%)	$ARE_{\sigma_n^t}$	$ARE_{\sigma_n^r}$	$ARE_{\sigma_p^r}$
0	0,13	0,20	27,19
2	1,19	0,40	$1,5 \cdot 10^5$
5	4,95	0,50	$1,1 \cdot 10^5$
10	7,39	2,62	$1,0 \cdot 10^6$
20	83,8	6,00	$1,7 \cdot 10^6$

efektyvumas. Sistema yra labai jautri parametro σ_n^r trikdžiams, todėl šis parametras nustatomas pakankamai tiksliai net su labai dideliu triukšmo lygiu. Parametras σ_n^t gali būti nustatyti esant eksperimento duomenų matavimo paklaidai iki 10%.

5.3.2. Skaiciavimo eksperimentas

Ankstesniame poskyryje įsitikinome, kad tik du giliųjų centrų parametrai gali būti patikimai nustatyti. Ieškomų parametrų vektorius sumažėja iki $\theta = (\sigma_n^t, \sigma_n^r)$. Sprendėme diskrečiosios paieškos uždavinį, o kiekvieno parametro reikšmių ieškojome plačiame intervale $[10^{-23}, 10^{-15}]$ dviejų reikšmingų skaičių tikslumu. Naudojomo genetinio algoritmo parametrai pateikti 5.5 lentelėje. Šitie parametrai buvo parinkti vadovaujantis literatūroje duotomis rekomendacijomis ir patikslinti taikant Monte Carlo testą.

5.5 lentelė. Genetinio algoritmo parametrai

Table. 5.5. Parameters of genetic algorithm

Populiacijos dydis	300
Reprodukcijai atrinktų geriausių individų skaičius	200
Reprodukcijos operatorius	1 taško
Reprodukcijos tikimybė	1
Mutacijos tikimybė	0,1
Elito atranka	Taip

5.6 lentelė. Skaičiavimuose naudojamų SiC parametrų reikšmės**Table. 5.6.** Values of SiC parameters used in the calculations

Temperatūra T	300 K
Draustinės juostos plotis E_g	2,38 eV
Prilipimo centro energijos lygmuo E_t	0,1 eV
Rekombinacijos centro energijos lygmuo E_r	1,2 eV
Prilipimo centrų koncentracija N_t	$35 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$
Rekombinacijos centrų koncentracija N_r	$35 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$
Krūvininko vidutinė gyvavimo trukmė τ_0	2000 ns
Elektronų efektinė masė	0,35
Skylių efektinė masė	0,6
Lazerio stiprumas I_{max}	2,6 mJ
Rekombinacijos centro skylės pagavimo skerspjuvis σ_p^r	$2 \cdot 10^{-19} \text{cm}^2$

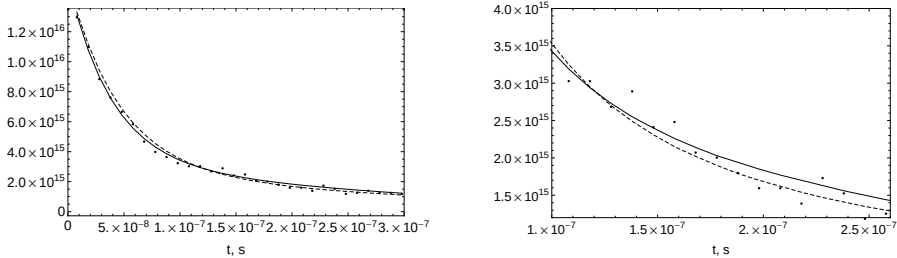
Toliau pateiksime skaičiavimo eksperimento rezultatus, gautus modeliuojant lazerio apšviesto p -tipo silicio karbido (SiC) krūvininkų rekombinaciją. Skaičiavimų rezultatus palyginsime su fizikų pasiūlytomis parametrų reikšmėmis, kurios buvo nustatytos vadovaujantis žiniomis apie tiriamą medžiagą, literatūroje pateiktomis apytikslėmis reikšmėmis ir bandant priderinti skaičiavimų rezultatus prie eksperimento duomenų. Parodėme, kad dalis parametrų negali būti patikslinti, todėl naudosime labiausiai tikėtinas reikšmes, pasiūlytas fizikų. Silicio karbido ir kiti modelio parametrai, naudojami skaičiavimuose, pateikti 5.6 lentelėje.

5.7 lentelė. Modelio identifikavimo rezultatai**Table. 5.7.** Results for parameters identification

	Parametrų reikšmės	ε
Fizikų nustatyti parametrai	$\{1,5 \cdot 10^{-19}, 1,7 \cdot 10^{-19}\}$	$3,98 \cdot 10^{28}$
GA nustatyti parametrai	$\{1,7 \cdot 10^{-19}, 1,7 \cdot 10^{-19}\}$	$3,43 \cdot 10^{28}$

Pritaikant skaičiavimo rezultatus prie eksperimento metu gautų duomenų buvo nustatytos likusių parametrų reikšmės. Rezultatas pateikiamas 5.7 lentelėje. Matome, kad šie rezultatai yra labai artimi, o lyginant su eksperimentiniais duomenimis vidutinė paklaida skaičiavimo rezultatų, atliktų su paieškos

algoritmo nustatytu parametru rinkiniu, yra mažesnė.



5.2 pav. Sprendinys $n(t)$: ištisinė kreivė atitinka skaičiavimo rezultatus su pirmuoju parametru rinkiniu lentelėje 5.7, brūkšninė – su antruoju, taškinė – eksperimentinius duomenis

Fig. 5.2. Electron decay $n(t)$: the solid curve corresponds to the calculation results for the first parameters set in Table 5.7, dashed curve – for the second, dots – to the experimental data

5.2 pav. pavaizduotas sprendinys su parametru rinkiniais, pateiktais 5.7 lentelėje. Grafikas patvirtina, kad sprendiniai su abiem parametru rinkiniais pakankamai gerai atitinka eksperimentinius duomenis.

5.4. Penktojo skyriaus išvados

Šiame skyriuje analizavome krūvininkų rekombinacijos modelį, kuri aprašo netiesinių diferencialinių lygčių sistema. Buvo pasiekti tokie rezultatai:

1. Atlikta apriorinė diferencialinio uždavinio sprendinio analizė ir parodyta, kad sprendinys yra neneigiamas ir aprėžtas. Pasiūlyta linearizuota Eulerio schema, kurios realizacija yra paprasta, nes nereikalauja iteracijų. Įrodyta, kad diskretusis sprendinys atkartoja diferencialinio sprendinio savybes: yra neneigiamas ir aprėžtas; taip pat įrodytas diskrečiosios schemos stabilumas maksimumo normoje ir įvertintas konvergavimo greitis.
2. Sprendžiant modelio identifikavimo uždavinį, atlikta modelio parametru identifikuojamumo analizė. Jautrumo analizė rodo, kad giliųjų centrų krūvininkų pagavimo skerspjūviai ir tų centrų koncentracijos yra susiję dydžiai, todėl negali būti nustatomi ar tikslinami kartu. Taip pat parodyta, kad skaičiavimų rezultatas yra mažai jautrus rekombinacijos centro skylių pagavimo skerspjūvio pokyčiams, todėl šis para-

metras irgi negali būti patikimai nustatytas.

3. Atliktas modelio identifikavimas naudojant genetinį algoritmą. Skaičiavimų rezultatai rodo, kad gautas parametų rinkinys leidžia gerai pritaikyti modelį prie eksperimento rezultatų. Šis rezultatas yra labai artimas nustatytoms fizikų giliųjų centrų parametų reikšmėms. Tačiau gaminant kompensuotus puslaidininkius, net ir tos pačios medžiagos atskirų kristalų parametrai gali skirtis, todėl parametų tikslinimo uždavinys gali būti keliamas ir pakankamai ištirtoms medžiagoms.

Bendrosios išvados

Disertacijoje nagrinėjami paraboliniai uždaviniai nestandartinėse srityse arba su neklasikinėmis kraštinėmis sąlygomis. Apibendrinsime pagrindinius rezultatus:

1. Sprendžiant reakcijos – difuzijos uždavinį šakotose struktūrose įrodytas neišreikštinės svorinės schemos besąlyginis stabilumas, kai svorinės schemos parametras $\theta \in [\frac{1}{2}, 1]$. Pavyko pagerinti gautus taikant maksimumo principą rezultatus ir įrodyti, kad konvergavimo greitis grafo viršūnėse yra toks pat, kaip ir vienmačio parabolinio uždavinio. Teoriniai rezultatai patvirtinti skaičiavimo eksperimento rezultatais.
2. Atlikta dviejų prediktoriaus – korektorius schemų, grindžiamų skirtingu skaičiavimo srities padalijimu, analizė. Taikant energetinius metodus įrodyta, kad abi prediktoriaus – korektorius schemos yra besąlygiškai stabilios, tačiau jų konvergavimas susijusioje normoje dėl prediktoriaus žingsnyje įneštos paklaidos yra sąlyginis. Naudojant prediktoriaus – korektorius ir Douglas schemų ekvivalentiškumą, gauti rezultatai palyginti su žinomu Douglas schemos konvergavimo įverčiu. Atlikto skaičiavimo eksperimento rezultatai patvirtina, kad prediktoriaus žingsnio netiktis yra $\mathcal{O}(\tau^2/h)$.
3. Aprašytos lygiagrečiosios algoritmų versijos. Atlikta algoritmų efektyvumo ir išplečiamumo analizė ir skaičiavimo eksperimentai rodo, kad

prediktoriaus – korektoriaus schemų išplėčiamumas yra tiesinis, o neišreikštinės schemos blogiausiu atveju gali būti kvadratinis. Įrodyta, kad skaičiavimų efektyvumas daugiausiai priklauso nuo duomenų paskirstymo kokybės ir atminties magistralės riboto pralaidumo, kai yra naudojami 2 ar 4 branduoliai skaičiavimo mazge.

4. Atlikta parabolinio uždavinio su integraline kraštine sąlyga stabilumo analizė maksimumo normoje ir įrodyta, kad diskrečiosios schemos standumas ir stabilumo srities spindulys priklauso nuo nelokalios kraštinės sąlygos koeficientų ženklų. Pagerinti žinomi stabilumo rezultatai. Paprastos integralinės kraštinės sąlygos atveju įrodytas sąlyginis konvergavimas ir pasiūlytas reguliarizuojantis sąryšis tarp diskrečiųjų žingsnių.

Literatūros sąrašas

- Abbott, L.F.; Farhi, E.; Gutmann, S. (1991). The Path Integral for Dendritic Trees. *Biol. Cybern.*, 66: 49–60.
- Achard P.; De Schutter E. 2006. Complex Parameter Landscape for a Complex Neuron Model. *PLoS Comput Biol*, 2(7): e94.
- Ascoli, G. A.; Donohue, D. E.; Halavi M. 2007. NeuroMorpho.Org: a central resource for neuronal morphologies. *J Neurosci.*, 27(35): 9247–51.
- Atkinson, K.E. 1989. *An introduction to numerical analysis*, Wiley.
- Barth, N.H. 1992. Oceanographic experiment design II: Genetic algorithm. *Journal of Atmospheric and Oceanic Technology*, 9(4):434–443.
- Berman, A.; Plemmons, R.J. 1994. *Nonnegative matrices in the mathematical sciences*, Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Bouziani, A. 1999. On a class of parabolic equations with nonlocal boundary condition. *Acad. Roy. Belg. Bull. Cl. Sci.*, 10: 61–77.
- Bower, J.M.; Beeman, D. 1998. *The Book of GENESIS: Exploring Realistic Neural Models with the GEneral NEural SIMulation System*, New York: Springer-Verlag.
- Cannon, J. 1963. The solution of the heat equation subject to the specification of energy. *Quart Appl Math.*, 21: 155–160.
- Cannon, J.; Lin, Y.; van der Hoek, J. 1990. An implicit finite difference scheme for the diffusion equation subject to the specification of mass. *Intern. J. Engrg. Sci.*,

28(7): 573–578.

Cannon, J.; Matheson, A. 1993. A numerical procedure for diffusion subject to the specification of mass. *Intern. J. Engrg. Sci.*, 31(3): 347–355.

Ciarlet, P.; Schultz, M.; Varga, R. 1968. Numerical methods of high-order accuracy for nonlinear boundary value problems. *Numerische Mathematik*, 1968(11): 331–345.

Charbonneau P. 2002. An introduction to genetic algorithms for numerical optimization, *NCAR TECHNICAL NOTE TN-450+IA*, National center for atmospheric research, Boulder

Chiegis, R.Y. 1992. Investigation of difference schemes for a class of models of excitability. *Comput. Maths Math. Phys.*, 32(6): 757–767.

Chis, O.T.; Banga, J.R.; Balsa-Canto, E. 2011. Structural Identifiability of Systems Biology Models: A Critical Comparison of Methods. *PLoS ONE*, 6(11): e27755.

Cohen, S.; Hindmarsh, A. 1996. CVODE, a Stiff/Nonstiff ODE Solver in C. *Computers in Physics*, 10(2): 138–43.

Cooley, J.W.; Dodge, J.R. 1966. Digital computer solutions for excitation and propagation of nerve impulse. *Biophysical Journal*, 6: 583–599.

Courant, R.; Hilbert, D. 1965. *Methods of mathematical physics. Partial differential equations*, 2.

Čiegis, R.; Štikonas, A.; Štikonienė, O.; Suboc, O. 2001. Stationary problems with nonlocal boundary conditions. *Mathematical Modelling and Analysis*, 6(2): 178–191.

Čiegis, R.; Štikonas, A.; Štikonienė, O.; Suboc, O. 2002. A monotonic finite-difference scheme for a parabolic problem with nonlocal conditions. *Differential Equations*, 38(7): 1027–1037.

Čiegis, R. 2005. *Lygiagreieji algoritmai ir tinklinės technologijos*, Technika, Vilnius.

Čiegis, R. 2006. Parallel LOD scheme for 3D parabolic problem with nonlocal boundary condition. In: Nagel, W.E. *et al.*, ed. *Lecture notes in computer science. International conference EurPar2006. Dresden, Germany, September 1-5, 2006*, 4128: 679–688.

Čiegis, R. 2006. Parallel numerical algorithms for 3D parabolic problem with nonlocal boundary condition. *Informatica*, 17(3): 309–324.

Day, W. A. 1983. A decreasing property of solutions of parabolic equations with application to thermoelasticity. *Quart. Appl. Math.*, 41: 468–475.

Day, W. A. 1992. Parabolic equations and thermodynamics. *Quart. Appl. Math.*, 50: 523–533.

- Dehghan, M. 2005. Efficient techniques for the second-order parabolic equation subject to nonlocal specifications. *Appl. Numer. Math.*, 52(1): 39–62.
- Dryja, M.; Tu, X. 2007. A domain decomposition of parabolic problems. *Numer. Math.*, 107: 625–640.
- Ekolin, G. 1991. Finite difference methods for a nonlocal boundary value problem for the heat equation. *BIT*, 31: 245–261.
- Fairweather, G.; Lopez-Marcos J.C. 1996. Galerkin methods for a semilinear parabolic problem with nonlocal boundary conditions. *Advances in Comput. Math.*, 6: 243–262.
- FitzHugh, R. 1961. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane. *Biophysical J.*, 1: 445–466.
- Friedman, A. 1986. Monotonic decay of solutions of parabolic equations with nonlocal boundary conditions. *Quart. Appl. Math.*, 44: 401–407.
- Gerisch, A.; Chaplan, M.A. (2006). Robust numerical methods for taxis-diffusion-reaction systems: Applications to biomedical problems. *Math. Comput. Model.*, 43: 49–75.
- Goldberg, D.E. 2002. *The design of innovation: lessons from and for competent genetic algorithms*, Kluwer Academic Publishers.
- Goolin, A.V.; Ionkin, N.I.; Morozova, V.A. 2001. Difference schemes with nonlocal boundary conditions. *Comp. Meth. Appl. Math.*, 1(1): 62–71.
- Grama, A.; Karypis, G.; Kumar, V.; Gupta, A. 2003. *Introduction to Parallel Computing: Design and Analysis of Algorithms*, Addison Wesley.
- Hairer, E.; Norset, S.P.; Wanner, G. 1993. *Solving Ordinary Differential Equations I – Nonstiff Problems*, Springer.
- Hairer, E.; Wanner, G. 1996. *Solving Ordinary Differential Equations II – Stiff and Differential-Algebraic Problems*, Springer.
- Hall, R.N. 1952. Electron-Hole Recombination in Germanium. *Phys. Rev.*, 87(2): 387–387.
- Hanslien, M.; Karlsen, K.H.; Tveito, A. 2005. A maximum principle for an explicit finite difference scheme approximating the Hodgkin-Huxley model. *BIT Numerical Mathematics*, 45: 725–741.
- Hayes, R.D.; Byrne, J.H.; Cox S.J.; Baxter, D.A. 2005. Estimation of single-neuron model parameters from spike train data. *Neurocomputing*, 65–66: 517–529.
- Hines, M.L. 1984. Efficient computation of branched nerve equations. *Int. J. Bio-Medical Computing*, 15: 69–76.
- Hines, M.L.; Carnevale, N.T. 1997. The NEURON Simulation Environment. *Neural*

Computation, 9: :1179–1209.

Hodgkin, A. L.; Huxley, A. F. 1952. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. *The Journal of Physiology*, 117(4): 500–544.

Hundsdoerfer, W.; Verwer, J. G. 2003. *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Difusion-Reaction Equations*, Springer.

Ichimura, M. 2006. Temperature dependance of a slow component of excess carrier decay curves. *Solid-State Electronics*, 50(11–12): 1761–1766.

Iliev, O. 2002. *Finite Volume Discretizations for Elliptic Problems with Discontinuous Coefficients*, University Kaiserslautern, Habilitation Dissertation.

Iliev, O. 2000. A finite difference scheme of second order for elliptic problems with discontinuous coefficient. *Differential equations*, 36(6): 837–848.

Ionkin, N.I. 1980. Stability of a problem in a heat transfer theory with non-classical boundary condition. *Differential Equations*, 15(7): 911–914.

Ivanauskas, F.; Meškauskas, T.; Sapagovas, M. 2009. Stability of difference schemes for two-dimensional parabolic equations with non-local boundary conditions. *Applied Mathematics and Computation*, 215(7): 2716–2732.

Izhikevich, E.M. 2007. *Dynamical systems in neuroscience: the geometry of excitability and bursting*, MIT Press.

Jachimavičienė, J.; Jesevičiūtė, Ž.; Sapagovas, M. 2009. The Stability of Finite-Difference Schemes for a Pseudoparabolic Equation with Nonlocal Conditions, *Numerical Functional Analysis and Optimization*, 30(9–10): 988–1001.

Karypis, G.; Kumar, V. 1999. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs, *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(1): 359–392.

Koch, C.; Poggio, T. 1985. A simple algorithm for solving the cable equation in dendritic trees of arbitrary geometry. *Journal of Neuroscience Methods*, 12: 303–315.

Koch, C.; Segev, I. 1998. *Methods in neuronal modeling: from ions to networks*, MIT Press.

Koch, C. 1999. *Biophysics of computation: information processing in single neurons*, Oxford University Press.

Ladyzhenskaya, O. A. 1973. *Boundary value problems of mathematical physics*, Moscow (rusų kalba).

LeVeque, R. 1992. *Numerical methods for conservation laws*. USA

Liu, L.; Huang, M.; Yuan, K.; Křížek, M. 2009. Numerical approximation of a non-linear 3D heat radiation problem, *Adv. Appl. Math. Mech.*, 1(1): 125–139.

Major, G.; Evans, J. D.; Jack, J. J. 1993. Solutions for transients in arbitrarily branching cables: I. Voltage recording with a somatic shunt, *Biophysical Journal*, 65: 423–449.

Markram, H. 2006. The Blue Brain Project. *Nature Reviews Neuroscience*, 7: 153–160.

Martin-Vaquero, J.; Vigo-Aguiar, J. 2009. A note on efficient techniques for the second-order parabolic equation subject to nonlocal conditions, *Appl. Numer. Math.*, 59: 1258–1264.

Martin-Vaquero, J.; Vigo-Aguiar, J. 2009. On the numerical solution of the heat conduction equations subject to nonlocal conditions, *Appl. Numer. Math.*, 59: 2507–2514.

Mascagni, M. 1990. The backward Euler method for numerical solution of the Hodgkin-Huxley equations of nerve conduction. *SIAM J. Numer. Anal.*, 27(4): 941–962.

Mascagni, M. 1991. A parallelizing algorithm for computing solutions to arbitrarily branched cable neuron models. *J. Neurosci. Methods*, 36: 105–114.

Mathew, T. 2008. *Domain Decomposition Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering 61. Berlin: Springer.

Miao, H.; Xia, X.; Perelson, A.; Wu, H. 2011. On identifiability of nonlinear ODE Models and Applications in Viral Dynamics. *SIAM Review*, 53(1): 3–39.

Migliore, M.; Cannia, C.; Lytton, W.W.; Markram, H.; Hines, M.L. 2006. Parallel network simulations with NEURON. *Journal of Computational Neuroscience*, 21(2): 119–129.

Notay, Y.; 2000. Flexible conjugate gradients, *SIAM J. Sci. Comput.*, 22(4): 1444–1460.

Paterakis, E.; Petridis, V.; Kehagias, A. 1998. Genetic algorithm in parameter estimation of nonlinear dynamic systems. *Parallel Problem Solving from Nature — PPSN V, Lecture Notes in Computer Science*, 1498: 1008–1017, Springer Berlin / Heidelberg.

Pečiulytė, S.; Štikonienė, O.; Štikonas, A. 2006. Sturm–Liouville problem for stationary differential operator with nonlocal integral boundary condition. *Mathematical Modelling and Analysis*, 10(4): 377–392.

Prinz, A.; Billimoria, C.; Marder, E. 2003. Alternative to hand-tuning conductance-based models: construction and analysis of databases of model neurons. *Journal of Neurophysiology*, 90(6): 3998–4015.

Quarteroni, A.; Valli, A. 1999. *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. Numerical Mathematics and Scientific Computation*, Oxford

University Press, USA.

Rall W. 1962. Theory of physiological properties of dendrites. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 96: 1071–1092.

Rall, W. 1964. Theoretical significance of dendritic trees for neuronal input-output relations. in *Neural Theory and Modeling*, ed. R. F. Reiss, Stanford University Press.

Rempe, M. J.; Chopp, D. L. 2006. A predictor-corrector algorithm for reaction–diffusion equations associated with neural activity on branched structures, *SIAM J. Sci. Comput.*, 28(6): 2139–2161.

Saad, Y. 2003. *Iterative methods for sparse linear systems* SIAM, Philadelphia, PA.

Saltelli, A. 2008. *Global sensitivity analysis: the primer* John Wiley.

Samardak, A.; Nogaret, A.; Janson, N.B.; Balanov, A.G.; Farrer, I.; Ritchie, D.A. 2010. Noise induced amplification of sub-threshold pulses in multi-thread excitable semiconductor ‘neurons’. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 42(10): 2853–2856.

Samarskii A. A. 1980. Some problems in differential equations theory. *Differential Equations*, 16(7): 1221–1228.

Samarskii, A. A. 2001. *The theory of difference scheme*, Marcek Dekker, Inc., New York-Basel.

Sapagovas, M.; Čiegis, R. 1987. Skaitinis nelokaliųjų uždavinių sprendimas. *Liet. mat. rink.*, 27(2): 348–356.

Sapagovas, M. 2007. *Diferencialinių lygčių kraštiniai uždaviniai su nelokaliosiomis sąlygomis*, Mokslo aidai, Vilnius.

Sapagovas, M. 2008. On the stability of a finite-difference scheme for nonlocal parabolic boundary-value problems. *Lithuanian Mathematical Journal*, 48(3): 339–356.

Schierwagen, A. K. 1990. Identification problems in distributed parameter convergence in multivariable recursive identification. *Automatica*, 26(4): 739–755.

Schmerler, S.; Hahn, T.; Hahn, S.; Niklas, J.; Gründig-Wendrock, G. 2008. Explanation of positive and negative PICTS peaks in SI-GaAs. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 19: 328–332.

Shi, H.; Liao, H. 2006. Unconditional stability of corrected explicit-implicit domain decomposition algorithms for parallel approximation of heat equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 44(4): 1584–1611.

Shockley, W.; Read, W.T. 1952. Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons, *Phys. Rev.*, 87(5): 835–842.

Starikovičius, V.; Čiegis, R.; Iliev, O.; Lakdawala, Z. 2009. A parallel solver for the 3D simulation of flows through oil filters, Čiegis, R. and D. Henty and B. Kagström

- and J. Žilinskas, *Parallel Linear Algebra and Optimization: Advances and Applications*. Springer Optimization and Its Applications, Springer, New-York, 27: 185–196.
- Starikovičius, V.; Čiegis, R.; Iliev, O. 2011. A parallel solver for optimization of oil filters, *Math. Model. Anal.*, 16(2):326–342.
- Sun, Z. Z. 1996. A second-order accurate finite difference scheme for a class of nonlocal parabolic equations with a natural boundary conditions. *J. Comput. Appl. Math.*, 76:137–146.
- Tikidji-Hamburyan, R. 2008. Genetic algorithm modification to speed up parameter fitting for a multicompartment neuron model. *BMC Neuroscience*, 9(1): P90.
- Toth, B.; Kostuk, M.; Meliza, C.; Margoliash, D.; Abarbanel, H. 2011. Dynamical estimation of neuron and network properties I: variational methods. *Biological Cybernetics*, 105(3): 217–237.
- Vabishchevich P. N. 2008. Domain decomposition methods with overlapping sub-domains for the time-dependent problems of mathematical physics. *CMAM*, 8(4): 393–405.
- Vabishchevich P. N. 2011. A substructuring domain decomposition scheme for unsteady problems. *Comp. Meth. Appl. Math.*, 11(2): 241–268.
- Van Geit, W.; De Schutter, E.; Achard, P. 2008. Automated neuron model optimization techniques: a review. *Biological Cybernetics*, 99(4): 241–251.
- Weise T. 2009. *Global Optimization Algorithms – Theory and Application*.
- Yao, L.; Sethares, W.A. 1994. Nonlinear parameter estimation via the genetic algorithm. *IEEE. Trans. Signal Processing*, 42(4):927–935.
- Zhuang, Y. 2006. A parallel and efficient algorithm for multicompartment neuronal modelling. *Neurocomputing*, 69: 1035–1038.

Autorės publikacijų disertacijos tema sąrašas

Recenzuojamuose mokslo žurnaluose

Tumanova, N.; Čiegis, R. 2012. Predictor-corrector domain decomposition algorithm for parabolic problems on graphs. *Mathematical Modelling and Analysis*, 17(1): 113–127, ISSN 1392-6292 [ISI Web of Science].

Čiegis, R.; Tumanova, N. 2012. Stability Analysis of Implicit Finite-Difference Schemes for Parabolic Problems on Graphs. *Numerical Functional Analysis and Optimization*, 33(1): 1–20, ISSN 0163-0563 [ISI Web of Science].

Čiegis, R.; Tumanova, N. 2010a. Numerical solution of parabolic problems with non-local boundary conditions. *Numerical Functional Analysis and Optimization*, 31(12): 1318–1329, ISSN 0163-0563 [ISI Web of Science].

Čiegis, R.; Tumanova, N. 2010b. Finite-difference schemes for parabolic problems on graphs. *Lithuanian Mathematical Journal*, 50(2): 164–178, ISSN 0363-1672 [ISI Web of Science].

Čiegis, R.; Tumanova, N. 2010c. Parallel predictor-corrector schemes for parabolic problems on graphs. *Comp. Meth. Appl. Math.*, 10(3): 275–282, ISSN 1609-4840.

Pincevičius, A.; Meilūnas, M.; Tumanova, N. 2007. Numerical simulation of the conductivity relaxation in the high resistivity semiconductor. *Mathematical Modelling and Analysis*, 12(3): 379–388, ISSN 1392-6292 [ISI Web of Science].

Kituose mokslo leidiniuose

Tumanova, N. 2008. Netiesiniai modeliai grafuose. *II-osios Lietuvos jaunųjų mokslininkų konferencijos „Mokslas – Lietuvos ateitis“*, įvykusios 2008 m. kovo 28 d. Vilniuje, pranešimų medžiaga, 193-200, ISBN 978-9955-28-300-3.

Natalija Tumanova

NETIESINIŲ MATEMATINIŲ MODELIŲ GRAFUOSE SKAITINĖ ANALIZĖ

Daktaro disertacija

Fiziniai mokslai, matematika (01P)

THE NUMERICAL ANALYSIS OF NONLINEAR MATHEMATICAL MODELS
ON GRAPHS

Doctoral Dissertation

Physical Sciences, Mathematics (01P)

2012 04 30. 12,5 sp. l. Tiražas 20 egz.

Vilniaus Gedimino technikos universiteto leidykla „Technika“,

Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius, <http://leidykla.vgtu.lt>

Spausdino UAB „Ciklonas“,

J. Jasinskio g. 15, LT-01111 Vilnius