DELAUNAY: технологическая среда генерации сеток *

В.П.Ильин

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирский государственный университет, Новосибирск

УДК 519.632

Рассматривается концепция технологической среды построения многомерных сеток для решения задач математического моделирования в расчетных областях со сложной конфигурацией неодносвязных кусочно-гладких границ, включая прямые и обратные междисциплинарные постановки, описываемые системами дифференциальных и/или интегральных уравнений. Конструируемая сеточная расчетная область в общем случае состоит из подобластей, в каждой из которых сетки могут быть различных типов (в том числе структурированные или неструктурированные), а на смежных внутренних границах дискретизация может быть как согласованная, так и несогласованная. Методология данных квазиструктурированных сеток предполагает возможность использования разных алгоритмов и программ в подобластях, а также множественность форматов сеточных структур данных и их конвертацию. Предлагаемые технологии включают контроль критериев качества сеток, генерацию динамических сеток, адаптируемых под особенности исходной геометрической структуры данных, а также многосеточные подходы, локальные сгущения и учет априорной и/или апостериорной информации об особенностях решений. Масштабируемое распараллеливание алгоритмов поддерживается методами декомпозиции сеточных областей с автоматической балансировкой.

Ключевые слова: многомерные задачи, сеточная расчетная область, квазиструктурированные адаптивные сетки, методы генерации сеток, сеточные структуры данных, масштабируемое распараллеливание.

DELAUNAY: technological envirenment for grid generation

V.P.Il'in

The conception of technological envirement for multi-dimensional grid generation for solving mathematical modeling problems in computational domains with comlicated configuration of piecce-wise smooth bondaries is considered, including direct and inverse statements which are described by the systems of differential and/or integral equations. In general, the constructed computational grid domain consists of subclomains, in which grid can be of different types (structured or non-structured), and discretization at the internal boundaries can be consistent or non-consistent. Methodology of such quasi-structured meshes assumes the possibility of using various algorithms and codes in subdomains, as well as plurality of the formats of data structure and their convertation. The proposed technologies

*Работа поддержана грантом РФФИ N 11-01-00205, а также грантами Президиума РАН N 15.9-4 и ОМН РАН N 1.3.3-4.

include control of grid quality, generating dynamic grids, adapted to singularities of input geometric data structure, and multigrid approaches, local refinement, under taking into account the apriory and/or aposteriory information about the solution. Scalable parallelezation is supported by the grid somain balanced decomposition.

Key words: multi-dimensional boundary value problems, grid computational domain, adaptive quasi-structured grids, grid generation method, grid data structures, scalable parallelezation.

1 Введение

Построение сетки является важным звеном в математическом моделировании природных явлений и научно-технических процессов. От ее выбора зависит эффективность применяемых численных алгоритмов, включая точность и вычислительную сложность решения поставленной дифференциальной начально-краевой задачи (или соответствующей вариационной формулировки). Вопросам построения сеток посвящена обширная литература (см., например, [1-12])и цитируемые там работы. Данным проблемам посвящены конференции, специальные выпуски журналов и обширные материалы в интернете [13,14]. Кроме того, имеется большое количество программных реализаций генераторов сеток, как общедоступных, так и коммерческих, адреса многочисленных сайтов которых легко находятся с помощью поисковиков.

Сеточная тематика включает значительное количество разнообразных вопросов. Важные аспекты касаются способов дискретизации исходной расчетной области (т.е. построения сеточной расчетной области), которые охватывают конформные и квазиконформные отображения [2], вариационные принципы [5], методы дифференциальной геометрии [1] и различные технологические приемы [3], [4], [7], [8]. Актуальными моментами являются определение качества, а также подходы к улучшению или оптимизации сеток. Не менее существенны, особенно с практической точки зрения, и технологии реализации: организация сеточных структур данных (ССД), допускающая множественные представления с возможностью их конвертирования и переиспользования существующих программ построения сеток, а также информационное взаимодействие с системами геометрического моделирования, автоматизации проектирования (САПР), постобработки и визуализации сеточных функций.

В настоящей работе рассматриваются концепция и технологии построения проблемно-независимой библиотеки сеточных генераторов для многомерных краевых задач со сложными конфигурациями расчетных областей и различными материальными свойствами сред. Цель создания такой библиотеки – организация инструментальной поддержки и средств интеграции различных сеточных генераторов для широкого круга 2D и 3D приложений, снабдив ее удобными средствами управления, задания исходных данных, визуализации и анализа характеристик построенной сетки. Отметим, что генераторы сеток являются существенной частью САПР-овских разработок (CAD, CAE, CAM и др.), которые в перспективе ориентированы на интеграцию с наукоемким моделированием процессов и явлений, так что описываемая в представляемом проекте методология является встречным движением в данной тенденции.

Библиотека ориентирована на конструирование широкого спектра адаптивных сеток (формально – практически без ограничений): структурированных и неструктурированных, статических и динамических, имеющих различные конфигурации элементарных объемов (тетраэдры, октаэдры, призмы и т.д.). Предлагаемая методика заключается в гибкой организации квазиструктурированных сеток: расчетная область представляется объединением подобластей, в каждой из которых строится сетка, или подсетка, со своей топологией и структурой данных. При этом на общих границах смежных подобластей устанавливаются интерфейсные правила согласования примыкающих подсеток.

Библиотечные средства предусматривают вычислительные инструментарии для оценки и анализа сеточных характеристик, а также типовых сеточных преобразований: сгущение или разрежение узлов в определяемых априори или апостериори окрестностях, организация последовательности вложенных сеток, локальные модификации или сглаживание, реализация динамических сеток и т.д.

Библиотека DELAUNAY рассматривается как составная часть базовой системы моделирования (БСМ, [15]), которая включает все основные алгоритмические компоненты крупномасштабного вычислительного эксперимента: геометрическое и функциональное моделирование для создания компьютерной модели решаемой задачи, аппроксимация исходных уравнений методами конечных объемов, конечных элементов (МКО, МКЭ) или другими сеточными алгоритмами, решение возникающих алгебраических задач, постобработка и визуализация результатов, реализация многовариантных расчетов или методов оптимизации для решения обратных задач. При этом описываемой нами библиотеке отводится только следующая роль: по заданным геометрической и функциональной структурам данных (ГСД и ФСД, см. [16]), однозначно отображающим всю поставленную проблему, сформировать сеточную структуру данных, которая должна обеспечивать выполнение всех этапов численного решения больших задач (аппроксимация, решение алгебраических проблем, оптимизация и т.д.). В силу такой узкой специализации, представляется реальным охватить достаточно широкий круг чисто сеточных аспектов, не затрагивая остальные звенья технологической цепочки математического моделирования.

Организация сеточной инструментальной среды рассчитана на длительный жизненный цикл с обеспечением эффективного переиспользовнаия внешних программных продуктов, расширения собственного системного и функционального наполнения с участием различных групп разработчиков, а также с возможностями гибкой сборки конфигураций из имеющихся компонент по принципу детского конструктора LEGO. Назначение предлагаемой библиотеки — функционирование в составе каких-либо приложений (пакетов прикладных программ – ППП), осуществляющих решение задач наукоемкого моделирования в определенной предметной области.

Разрабатываемое математическое и программное обеспечение концептуально включает междисциплинарные проблемы, описываемые системами дифференциальных и/или интегральных уравнений, а также решение обратных задач на основе универсальных оптимизационных подходов, что значительно раздвигает круг потенциальных пользователей и участников предлагаемого проекта, составляющий широкий контингент вычислительного сообщества. Важно отметить, что структуры рассматриваемых алгоритмов и программных окружений должны конструироваться с учетом неизбежной адаптации к динамически меняющимся архитектурам суперкомпьютеров, в соответствии с “дорожной картой” IESP (International Exascale Software Project, [15]).

2 Формальные постановки прямых и обратных задач

Пусть в замкнутой ограниченной области

$$\bar{\Omega} = \Omega \bigcup \Gamma = \bigcup_k \bar{\Omega}_k \tag{1}$$

требуется найти вектор-функцию $\vec{u} = \{u_\mu, \mu = 1, ..., m\}$, удовлетворяющую дифференциальному уравнению

$$L\vec{u}(\vec{x}, t) = \vec{f}(\vec{x}, t), \ \ \vec{x} \in \Omega, \tag{2}$$

а также граничным и начальным условиям

$$l\vec{u} = \vec{g}(\vec{x}, t), \ \ \vec{x} \in \Gamma, \ \ \vec{u}(\vec{x}, 0) = \vec{u}^0(\vec{x}). \tag{3}$$

Здесь Ω – открытая односвязная область в трехмерном или двумерном евклидовом пространстве, Γ – ее граница, L, l – операторы исходного уравнения и граничных условий.

Например, оператор L может иметь вид

$$L = A\frac{\partial}{\partial t} + \nabla B \nabla + C\nabla + D, \tag{4}$$

где A, B, C, D –матрицы, зависящие от независимой переменной $\vec{x}$, представляющей радиус-вектор в декартовой, цилиндрической или какой-то другой системе координат. Граница представляется в виде двух частей $\Gamma = \Gamma_D \bigcup \Gamma_N$, на первой из которых задаются условия первого рода (Дирихле)

$$\vec{u} = \vec{g}_D \ \ \vec{x} \in \Gamma_D, \tag{5}$$

а на другой – условия второго или третьего рода

$$D_N \vec{u} + A_N \nabla_n \vec{u} = \vec{g}_N, \ \ \vec{x} \in \Gamma_N, \tag{6}$$

где ∇_n означает внешнюю нормальную производную к Γ_N, а D_N и A_N – в общем случае матричные коэффициенты. Отметим также, что на общих границах смежных подобластей могут ставиться условия сопряжения, конкретный вид которых зависит от свойств решаемых уравнений и здесь нами не рассматривается.

Уравнение (2) может принимать различный вид в разных подобластях $\bar{\Omega}_k$ расчетной области. Зачастую это означает, что в подобластях заданы среды с различными материальными свойствами или даже решаются разные уравнения. С точки зрения приложений это означает "многофизичность", или междисциплинарность, задач, когда, например, необходимо моделировать взаимосвязанные процессы тепло-массопереноса, упруго-пластичности, электромагнетизма и химической кинетики.

Если в уравнениях (2), (3) какие-то из членов зависят от искомого решения, то после применения методов линеаризации алгоритмы приводят к итерационному процессу, на каждом шаге которого решается линейное уравнение. С точки зрения дискретизации задачи, это может привести только к необходимости перестройки сетки на некоторых "нелинейных" итерациях.

Характерной особенностью ряда актуальных задач является наличие сингулярностей, т.е. наличие подобластей с резко меняющимися свойствами решения. К такому классу относятся уравнения с малыми коэффициентами при старших производных, для которых типичным является появление пограничных и/или внутренних слоев с огромными градиентами, а также присутствие границ с входящими углами, имеющими соответствующие асимптотические формулы об особенностях поведения решения в их окрестностях. В таких случаях адаптация сетки производится путем ее сгущения по определенному закону или априори, или на основе апостериорного анализа полученных предварительных результатов. Последняя ситуация связана с перестройкой сетки в процессе счета. Динамические дискретизации неизбежны также в задачах с движущимися границами, перемещения которых или заданы, или определяются в процессе моделирования.

Наряду с прямыми задачами вида (1)–(6), когда все коэффициенты уравнений заданы, мы рассматриваем обратные задачи, удовлетворяющие следующей математической постановке. Требуется найти минимум целевого функционала

$$\Phi_0(\vec{u}(\vec{x}, t, \vec{p}_{opt})) = \min_{\vec{p}} \Phi_0(\vec{u}(\vec{x}, t, \vec{p})), \tag{7}$$

определенного на решении $\vec{u}$ и зависящего от вектора оптимизируемых параметров $\vec{p} = (p_1, ..., p_{m_0})$, при соблюдении линейных или нелинейных (функциональных) ограничений

$$p_k^{min} \le p_k \le p_k^{max}, \quad k = 1, ..., m_1 \tag{8}$$

$$\Phi_l(\vec{u}(\vec{x},t,\vec{p})) \le \delta_l, \quad l=1,...,m_2, \quad m_1+m_2=m_0. \tag{9}$$

Решение обратных задач мы предусматриваем с помощью оптимизационных подходов (см. [17] и цитируемую там литературу), что приводит к необходимости многократной реализации прямых задач, а это требует (как и в "нелинейных" итерациях) неоднократного перестроения сеток. Один из востребованных типов обратных задач связан с оптимизацией геометрии расчетной области, что обуславливает варьирование отдельных частей ее границы и, как следствие, динамическую адаптацию сетки.

3 Геометрические и функциональные объекты

Будем для простоты сначала предполагать, что подобласти Ω_k в Ω не пересекаются, то есть

$$\Omega_k \bigcap \Omega_{k'} = 0, \;\; k \ne k', \quad k,k'=1,...,N_\Omega, \tag{10}$$

где N_Ω – заданное число подобластей. Каждая подобласть вместе со своей границей Γ_k образует замыкание, т.е. $\bar{\Omega}_k = \Omega_k \bigcup \Gamma_k$.

Общую границу двух соседних подобластей $\Omega_k, \Omega_{k'}$ обозначаем через $\Gamma_{k,k'} \subset \Gamma_k$:

$$\bar{\Omega}_k \bigcap \bar{\Omega}_{k'} = \Gamma_{k,k'} = \Gamma_{k',k} \ne 0. \tag{11}$$

Внешняя граница расчетной области Γ представляется в виде совокупности поверхностных сегментов $\Gamma_{k,0}$, $\Gamma = \bigcup\limits_k \Gamma_{k,0}$, ($\Gamma_{k,0} = \bar{\Omega}_k \bigcap \bar{\Omega}_0$, где через $\bar{\Omega}_0$ обозначается формально вся "внешность" по отношению к Ω), каждый из которых отличается своей геометрией или/и заданным на нем краевым условием. Границы подобластей представляются в виде

$$\Gamma_k = \Gamma_k^{(e)} \bigcup \Gamma_k^{(i)}, \tag{12}$$

где $\Gamma_k^{(e)}$ – сегменты, принадлежащие внешней границе, а $\Gamma_k^{(i)} = \bigcup\limits_{k' \ne 0} \Gamma_{k,k'}$ – фрагменты внутренней границы. Отметим, что на $\Gamma_k^{(i)}$ не ставится никаких граничных условий, если соответствующая кривая или поверхность вводятся только из информационного удобства и не являются границами раздела различных сред.

Расчетная область в целом задается при помощи следующих геометрических объектов, помимо подобластей (объемов Ω_k): вершины (точки) $V_p = (x_p, y_p, z_p)$, $p = 1,...,N_V$, поверхности $S_s(x,y,z) = 0$, $s = 1,...,N_S$, линии C_l $l = 1,...,N_C$, поверхностные сегменты (грани) F_f, $f = 1,...,N_F$, отрезки (или ребра – односвязные куски линий, в том числе криволинейных, снабженные своей начальной и конечной точками) E_e, $e = 1,...,N_E$. Кроме того, для экономии объема задаваемой информации целесообразно ввести понятие базовых, или опорных, координат (например, $X_c = \{X_1,...,X_{NX}\}$, $Y_c = \{Y_1,...,Y_{NY}\}$ в двумерной декартовой системе), с помощью номеров которых удобно задавать координаты вершин.

Помимо использованной выше декартовой системы координат, могут использоваться и другие: цилиндрическая, сферическая и какие-либо специальные координаты. Более того, для удобства могут применяться различные локальные системы координат, с указанием их привязки к (единственной!) глобальной системе.

Для эффективного задания типовых кривых или поверхностей в их каноническом виде (сфера, цилиндр, конус и т.д.) вводятся локальные системы координат, с указанием их положения и ориентации относительно глобальной системы координат. В более сложных случаях допускается задание отрезков линий и сегментов поверхностей (в том числе криволинейных) в параметрическом виде (например, в форме кривых или поверхностей Безье [18]):

$$\begin{aligned} &x = x(\tau), \quad y = y(\tau), \quad z = z(\tau), \\ &x = x(\tau^{(1)}, \tau^{(2)}), \quad y = y(\tau^{(1)},\, \tau^{(2)}), \quad z = z(\tau^{(1)}, \tau^{(2)}), \end{aligned} \tag{13}$$

где $\tau, \tau^{(1)}, \tau^{(2)}$ – параметры с задаваемыми границами их изменения.

Существует большое разнообразие способов задания геометрических объектов. Например, линия в трехмерном пространстве может задаваться или уравнениями двух пересекающихся поверхностей, или каким-то специальным образом (например, окружность задается тремя точками). Канонические поверхности экономично также описываются: сфера – своим центром и радиусом, конус – основанием и вершиной, и т.д. При использовании множественных представлений геометрических объектов необходимо, естественно, иметь средства перевода информации из одних форматов в другие.

Между геометрическими объектами устанавливаются топологические связи при помощи матриц инцидентности (смежности):

$$M_{VE} = \{m_{i,j}^{VE}: \;\; i = 1, ..., N_V; \;\; j = 1, ..., N_E\} \text{ – (вершины – ребра)},$$

$$M_{EF} = \{m_{i,j}^{EF}: \;\; i = 1, ..., N_E; \;\; j = 1, ..., N_F\} \text{ – (ребра – грани)},$$

$$M_{F\Omega} = \{m_{i,j}^{F\Omega}: \;\; i = 1, ..., N_F; \;\; j = 1, ..., N_\Omega\} \text{ – (грани – подобласти)}.$$

Здесь матричными элементами являются номера соответствующих объектов, а сами матрицы M_{VE}, M_{EF} и $M_{F\Omega}$ устанавливают взаимосвязи между вершинами и ребрами, между ребрами и поверхностными сегментами, между поверхностными сегментами и подобластями соответственно.

Отметим, что иногда из алгоритмических соображений, например, при использовании метода декомпозиции областей, целесообразно задавать пересекающиеся подобласти. В этом случае общая область перекрытия может принадлежать нескольким подобластям. Принципиально это не меняет геометрического формализма, надо только контролировать корректность определения материальных, или функциональных, свойств в пересечениях.

Из комбинаций простейших, или примитивных, объектов могут составляться типовые фигуры, которые целесообразно использовать при конструировании сложных расчетных областей. Более того, для ускорения сборки можно предусмотреть также иерархию составных тел.

Функциональные объекты, отображающие материальные свойства сред и другие условия задачи, устанавливаются с приведением в соответствие с подобластями и граничными сегментами. К ним относятся типы уравнений и их коэффициенты (например, в подобласти Ω_k может быть определено скалярное уравнение Гельмгольца $-\nabla\lambda_k\nabla u + æ_k u = f_k$), виды и коэффициенты краевых условий (пример – задание на граничном сегменте Γ_l условия Ньютона $\alpha_l u_l + \beta_l \dfrac{\partial u}{\partial n} = \gamma_l$), а также – в нестационарных задачах – начальные данные для искомого решения. При этом числовые или функциональные представления величин задаются с помощью своих значений или определяемых пользователем процедур.

Отметим также, что некоторые из числовых исходных данных могут быть определены как варьируемые параметры в целях организации многовариантных расчетов или оптимизационных алгоритмов решения обратных задач. В этих случаях их изменения осуществляются пользовательскими функциями и средствами управления вычислительными процессами в рамках БСМ.

Для обеспечения вариаций геометрических примитивов или более сложных тел необходимо предусмотреть набор операций над объектами: сдвиг, поворот, масштабирование и др., – которые должны сопровождаться согласованным изменением взаимосвязанной информацией и не нарушать топологию расчетной области в целом. Более сложные геометрические модификации должны предусматривать и изменение топологии, например, добавление или удаление каких-то фигур, т.е. тел с какими-то своими материальными свойствами, что может привносить более кардинальные изменения математической постановки, которое должно обеспечиваться диалоговыми средствами для поддержки "человеческого фактора".

4 Сеточные объекты и операции

Основные задачи данного раздела – формализация основных понятий сеточных технологий, а также краткое описание принципов построения и модификации сеток, которые составляют алгоритмическое (функциональное) наполнение инструментальной системы DELAUNAY.

4.1 Основные понятия и спецификации сеток

Дискретизация расчетной области заключается в построении сетки $\bar{\Omega}_h$, которая представляет собой сеточную расчетную область и включает следующие сеточные объекты, аналогичные "макрообъектам" расчетной области:

сеточные подобласти $\bar{\Omega}^h_k$: $\bar{\Omega}^h = \bigcup\limits_k \bar{\Omega}^h_k,\ \ \bar{\Omega}^h_k = \Omega^h_k \bigcup \Gamma_k,\ k = 1, ..., N^h_\Omega,\ \ \Omega^h_k \approx \Omega_k,$

сеточные границы подобластей $\Gamma^h_{k,k'} = \bar{\Omega}^h_{k'} \bigcap \bar{\Omega}^h_k,\ \ \Gamma^h_l = \bigcup\limits_k \Gamma^h_{k,0},\ \ \Gamma^h_k \approx \Gamma_k,\ k, k', l = 1, ..., N^h_\Gamma,$

узлы сетки $V^h_p = (x_p, y_p, z_p), p = 1, ..., N^h_V,$

сеточные ребра $E^h_s, s = 1, ..., N^h_E,$

сеточные грани $F^h_l, l = 1, ..., N^h_F,$

сеточные (конечные) объемы, или элементы, $T^h_m, m = 1, ..., N^h_T,$

где $N^h_\Omega, N^h_\Gamma, N^h_V, N^h_E, N^h_F, N^h_T$ означают соответственно общее количество сеточных подобластей, граней, узлов, ребер, граней и элементарных объемов.

Сетки мы будем рассматривать адаптивные в следующем смысле: вершины расчетной области являются узлами сетки, а ребра (макроребра), грани (макрограни) и подобласти аппроксимируются соответствующими сеточными (элементарными) объектами, а в идеальном случае макрообъекты составляются в точности из совокупности элементарных объектов. Последнее означает, что сетки в общем случае могут быть криволинейными или, по крайней мере, в конечных элементах, или объемах, некоторые ребра и грани допускаются непрямолинейными.

Между сеточными объектами существуют следующие топологические связи. Сетку можно представить как совокупность конечных объемов $\bar{\Omega}^h = \bigcup\limits_m \bar{T}^h_m$, грани – как поверхности пересечения соседних конечных объемов с номерами m и m', $F^h_l = F^h_{m,m'} \equiv \bar{T}^h_m \bigcap \bar{T}^h_{m'}$, ребра – как линии пересечения смежных граней ($E^h_s = E^h_{l,l'} \equiv \bar{F}^h_l \bigcap \bar{F}^h_{l'}$) и, наконец, узлы – как точки пересечения ребер e и e', $V^h_p = V^h_{e,e'} \equiv \bar{E}^h_e \bigcap \bar{E}^h_{e'}$, или как точки пересечения граней l, l', l'', $V^h_{l,l',l''} \equiv \bar{F}^h_l \bigcup \bar{F}^h_{l'} \bigcup \bar{F}^h_{l''}$. Аналогично тому, как это делается с геометрическими объектами, можно ввести матрицы инцидентности, устанавливающие следующие связи между сеточными объектами: матрицы инцидентности $M^h_{V,E}$ – (узлы-ребра), $M^h_{V,T}$ – (узлы-объемы), $M^h_{E,F}$ – (ребра-грани), $M^h_{F,T}$ – (грани-объемы).

Кроме того, указывается связь сеточных объектов с функциональными данными, а именно принадлежность конечного объема T^h сеточной подобласти ($T^h_m \in \Omega^h_k$) и сеточной грани F^h_l – границе Γ^h_k ($F^h_l \in \Gamma^h_k$). Имеется в виду, что по номерам подобластей и граничных сегментов из ГСД и

ФСД могут быть определены коэффициенты решаемых уравнений и граничных условий исходной краевой задачи, необходимые для выполнения сеточной аппроксимации (с помощью МКО или МКЭ) математической постановки. Совокупность всей описанной информации о сеточных объектах и их топологических взаимосвязях составляет сеточную структуру данных.

По структурным, или топологическим, свойствам мы будем различать следующие типы сеток: структурированные, неструктурированные, квазиструктурированные, согласованные и несогласованные.

Сетку Ω_h будем называть структурированной, если она образована при помощи семейства однотипных координатных плоскостей (линий – в двумерном случае), имеет топологически подобные конечные объемы и простые правила нумерации ее элементов, граней, ребер и узлов, позволяющие легко находить соседний объект. В противном случае будем называть сетку неструктурированной. Частным случаем неструктурированной сетки является квазиструктурированная сетка, состоящая из сеточных подобластей Ω_k^h, в каждой из которых задана своя структурированная подсетка. Если $\Gamma_{k,k'}^h \neq \Gamma_{k',k}^h$, то есть сеточные границы двух смежных сеточных подобластей $\Omega_k^h, \bar{\Omega}_{k'}^h$ совпадают, то такие подсетки назовем согласованными, а в противном случае – несогласованными.

Качественная дискретизация расчетной области должна обладать двумя следующими свойствами, определяющими адаптивность сетки, а именно: обеспечивать хорошую аппроксимацию границы и иметь возможность изменения шага вблизи больших градиентов решения. Первое свойство означает выполнение следующих требований: вершины подобластей являются узлами сетки $V \subset V^h$, а границы и ребра подобластей достаточно точно аппроксимируются соответствующими сеточными объектами ($E \overset{\sim}{\subset} E^h,\ \ F \overset{\sim}{\subset} F^h$). Второе свойство обеспечивается за счет регулировки плотности узлов сетки в сеточных подобластях.

При решении стационарных прямых задач мы имеем дело со статическими сетками, а при решении задач геометрической оптимизации и/или при решении нестационарных задач с движущимися границами или перемещающимися сингулярностями — с динамическими сетками.

Сетки могут содержать следующие виды конечных, т.е. микро-уровня, объемов, причем в различных сеточных подобластях могут быть различные типы сеточных элементов: тетраэдры, шестигранники (в том числе – параллелепипеды), призмы или симплексы разных конфигураций и т.д.

Важно понимать, что построение сетки в задачах математического моделирования — это не самоцель, а лишь средство эффективного решения исходной задачи. В этом плане надо отметить два основных последующих вычислительных этапа. Первый заключается в аппроксимации функциональных уравнений с помощью МКО или МКЭ, а второй — в решении систем получаемых линейных или нелинейных алгебраических уравнений. Как правило, и аппроксимационные, и алгебраические свойства дискретных систем являются наилучшими в случае равномерных сеток, которые состоят из одинаковых элементов (например, прямоугольников или треугольников). Более того, идеальные сетки — это правильные, или равносторонние (например, когда элемент – это квадрат или куб). Заметим также, что такие сетки хороши не только в математическом отношении, но и в технологическом: для их конструирования и хранения нужен минимум операций и объема оперативной памяти.

Хотя конфигурация расчетных областей в практических задачах очень редко позволяет такие сетки применять, зачастую можно выбрать относительно большую подобласть и построить в ней равномерную или даже правильную сетку, что в целом даст значительную экономию вычислительных ресурсов. Минимальное обобщение таких сеток — переход на кусочно-равномерные сетки, в которых по координатным линиям задаются “зоны равномерности”, например,

$$X^{(k)},\ k = 0, 1, ..., N_x;\ \ Y^{(l)},\ l = 0, 1, ..., N_y,$$

в каждой из которых шаги выбираются одинаковыми:

$$h_k^x = (X^{(k)} - X^{(k-1)})/N_k^x,\ \ h_l^y = (Y^{(l)} - Y^{(l-1)})/N_l^y,$$

где N_k^x и N_l^y – количество шагов в каждой из зон. Дальнейшее обобщение таких сеток состоит в том, что в каждой зоне шаги изменяются по заданному правилу арифметической или геометрической прогрессии. Укажем здесь и на полезность таких сеток, как квазиравномерные, в которых соседние шаги меняются на относительно малую величину, что не меняет практически аппроксимационных и алгебраических свойств алгоритмов.

Для неструктурированных многомерных сеток под шагами подразумеваются расстояния между ближайшими узлами. Одной из количественных характеристик сетки является отношение максимального шага к минимальному: $\ae = h_{max}/h_{min}$. Надо сказать, что набросанные по какому-то закону в области точки еще не определяют сетку, так как при этом ребра, грани и конечные объемы могут строиться разными способами. Наиболее естественный подход заключается в построении ячеек Вороного, или Дирихле–Вороного: для данного узла такая ячейка — это множество (всегда однозначное!) точек, расположенных к нему ближе, чем к остальным узлам. Формально для этого достаточно соединить точку со всеми остальными узлами, провести через середины полученных отрезков перпендикулярные к ним плоскости и выбрать определяемый ими минимальный объем, см. пример на рис. 1.

Отметим, что такая дискретизация является двойственной к так называемой триангуляции Де-

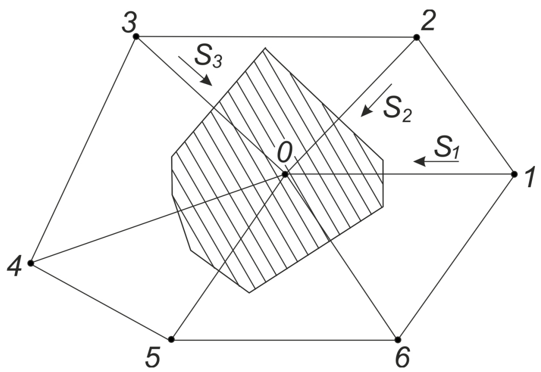

Рис. 1: Ячейка Дирихле в двумерном случае

.

лоне, т.е. получаемые в ячейке Дирихле треугольники (или тетраэдры в трехмерном случае) обладают тем свойством, что построенные по их вершинам круги (шары для 3D) не содержат внутри себя других узлов сетки.

Для характеризации сеток имеется большое количество критериев качества, например, – величина минимального угла в ячейке. Узлы построенной сетки, которые соединены ребрами, называются соседними, а совокупность узлов, соседних к узлу $V_p, p = 1, ..., N_V^h$, называется соответствующим сеточным шаблоном и обозначается через ω_p. Фактически ω_p можно определить как совокупность номеров ($p' \in \omega_p$) узлов, являющихся соседними к V_p. Введенную выше матрицу инцидентности $M_{V,E}^h$ (узлы – ребра) можно интерпретировать как определение графа, изоморфного сетке.

Для большого класса сеточных МКЭ- или МКО- аппроксимаций (которые будем называть узловыми) получаемая система алгебраических уравнений (СЛАУ) имеет вид

$$(Au)_p = a_{p,p}u_p + \sum_{p' \in \omega_p} a_{p,p'}u_{p'} = f_p,\ \ p = 1, ..., N_V^h, \tag{14}$$

где ненулевые внедиагональные элементы матрицы $A = \{a_{p,p'}\}$ соответствуют ребрам сетки. Таким образом, портрет матрицы, или матричный граф, характеризующий расположение ненулевых элементов, является изоморфным сеточному графу.

Одна из важнейших сеточных технологий заключается в использовании для решения задачи не одной, а нескольких сеток $\Omega_0^h, \Omega_1^h, ...$, как правило, сгущающихся, т.е. имеющих характерные шаги $h_0 > h_1 > ...$, теоретически стремящиеся к нулю. Такие многосеточные методы позволяют строить оптимальные по порядку методы, в которых объем вычислений пропорционален общему количеству узлов. Наиболее распространенный класс таких алгоритмов — алгебраические (в отличие от геометрических) многосеточные методы (AMG). Здесь важное место занимают последовательности вложенных сеток, когда узлы редких сеток являются также узлами более густых сеток. Простейшим примером построения вложенной сетки является деление каждого ребра исходной сетки пополам, а также добавление новых узлов в центрах тяжестей граней и конечных объемов. Помимо "глобального" сгущения, используются и локальные сгущения сетки, использующих мельчение шагов только в некоторых подобластях.

Отметим еще одну важную операцию над сетками – декомпозиция сеточной расчетной области Ω^h на подобласти Ω_k^h, которая связывается с проблемой масштабируемого распараллеливания алгоритмов. Здесь возникает много своих вопросов: сбалансирование разбиений, перенумерация узлов, переформирование сеточной структуры данных и др.

4.2 Способы построения и модификации сеток

4.2.1 Некоторые подходы к генерации сеток

Один из естественных подходов — это конструирование сетки "сверху вниз". При этом расчетная область Ω разбивается из каких-то соображений на подобласти Ω_k, которые в совокупности со своими гранями F_f, ребрами E_e и вершинами V_p могут рассматриваться как макросетка, у которой топологические связи между макрообъектами описываются с помощью матриц инцидентности $M_{VE}, M_{EF}, M_{F\Omega}$, см. выше п. 3.

Иерархическая генерация сетки заключается в последовательной дискретизации макроребер, затем – макрограней (с использованием уже построенных узлов на их границах) и в заключение – макрообъемов, т.е. подобластей. При этом мы получаем согласованные сетки, которые обладают очевидными хорошими свойствами, но не могут быть просто использованы в случае, например, взаимного перемещения контактирующих моделируемых тел.

Описанный способ обладает рядом положительных качеств:

- легко обеспечивается адаптивность сетки к особенностям граничных поверхностей области, ребер и вершин;
- имеются хорошие возможности построения качественных сеток в подобластях за счет выбора их конфигураций, а также подбора соответствующих алгоритмов типа конформных или квазиконформных преобразований;
- естественным образом осуществляется декомпозиционное представление сеточной расчетной области, необходимое для распараллеливания алгоритмов;
- решается связанный с предыдущим вопрос о создании иерархической структуры сеточных данных: последовательно нулевой размерности, первой, второй и третьей.

Самый сложный вопрос в данном случае — как автоматически реализовать "хорошую" декомпозицию области? Естественно, что опытный пользователь, оснащенный наглядным графическим интерфейсом, сделает это быстро, интуитивно и почти не задумываясь. Однако переложить эту задачу на искусственный интеллект – не совсем тривиальная проблема.

Альтернативный выше рассмотренному способ состоит в построении локально модифицированных сеток. На расчетную область (или подобласть), вместе с ее ближайшим окружением, наносится какая-то регулярная сетка, а затем точки пересечения ее ребер с границей (а скорее всего, и некоторые геометрически соседние узлы) каким-нибудь образом передвигаются, чтобы сделать ее адаптивной и удовлетворяющей некоторым критериям качества (например, условию Делоне). Очевидно, что если при этом окажется относительно много регулярных узлов, то это позволит сформировать экономичную ССД. А в случае присутствия разномасштабных объектов в области на последующих этапах сетку можно где-то сгущать, а где-то разреживать.

Наиболее универсальными генераторами сеток используются алгоритмы фронтального типа, в которых узлы сетки определяются последовательно от границы внутрь области. При этом степени сгущения или разрежения узлов могут регулироваться априорно заданными функциями плотности. Локальные сгущения сетки могут также производиться и апостериори, на основе анализа промежуточного характера численного решения с помощью функций, называемых "эстиматорами" (estimators).

4.2.2 Вопросы формирования поузловой информации

Различные модификации, декомпозиции или объединения сеток — это в первую очередь операции над структурами данных, а другими словами — преобразования графов, отображающих топологические связи между сеточными объектами. Эти сеточные графы тесно связаны с соответствующими матричными графами, что особенно наглядно в простейшем случае, когда одному узлу соответствует после аппроксимации одно алгебраическое уравнение и в узле определена только одна неизвестная функция.

В этом случае топология неструктурированной сетки может быть описана с помощью целых массивов, составляющих сжатый разреженный формат (CSR – compressed sparse row), который является стандартным для алгебраических универсальных решателей. В применении к сеткам CSR содержит для каждого узла минимально необходимую информацию: количество соседних (соединенных ребрами) узлов и номера самих соседей. ССД должна содержать также поузловые вещественные данные, т.е. координаты узлов и определенные в них (заданные значениями или вычисляемые) функции.

Содержание CSR зависит от нумерации узлов и естественной выглядит иерархическая упорядоченность, когда подряд нумеруются (неважно как) сначала внутренние узлы первой сеточной подобласти, затем – второй, и т.д., после чего следуют все граневые узлы, все реберные узлы (со своими внутренними разбивками) и макровершины. Для необходимой идентификации типа узла, т.е. какому макроребру, какой макрограни или подобласти он принадлежит, требуется еще сформировать макроструктурный формат (MCSR), в котором указывается количество узлов различного типа, множества номеров этих типов и связи между ними. Таким образом, например, для каждого внутреннего узла подобласти можно определить ее номер, является ли он околограничным и, если да, к какой макрограни примыкает.

Отсюда становится целесообразной иерархическая упорядоченность узлов, в том числе локальная и глобальная нумерации, а также неизбежность, в силу различных вычислительных потребностей, перенумерация узлов (в том числе из локальной в глобальную и наоборот).

4.2.3 Поэлементные технологии

Замечательные достижения методов конечных элементов обязаны не только развитию уникальной теории численного решения широкого класса дифференциальных и интегральных уравнений с применением финитных базисных функций высокого порядка на неструктурированных сетках, но и созданию эффективных вычислительных поэлементных технологий, основанных на определении локальных матриц и сборки глобальной матрицы задачи. Этот подход значительно упрощает программную реализацию алгоритмов, а также обеспечивает масштабируемое распараллеливание аппроксимационного этапа, поскольку обработка каждого конечного элемента выполняется независимо от других. Аналогичные поэлементные технологии с вычислениями локальных матриц баланса разработаны и в методах конечных объемов, см. [19], [20].

Пусть, например, треугольный конечных элемент T_m^h имеет вершинами точки $V_p^m, p = 1, 2, 3$, координаты которых x_p^m, y_p^m могут быть найдены в ССД по номерам p, m. Предполагается также, что по значению m могут быть определены "материальные свойства среды" внутри T_m^h, т.е. коэффициенты исходного уравнения (2) и краевых условий (3) на гранях T_m^h, если они являются граничными сегментами расчетной области Ω. Тогда по этим данным с помощью некоторых формул определяются элементы соответствующей локальной матрицы $A_m^{loc} = \{a_{i,j}^{(m)}; i, j = 1, 2, 3\}$, из которых, в свою очередь, складываются элементы глобальной матрицы задачи, определяемой с помощью скалярного произведения

$$(Au, v) = \sum_{m=1}^{N_T^h} \sum_{i,j=1}^{3} a_{i,j}^{(m)} \bar{u}_i^{(m)}, \bar{v}_j^{(m)}. \tag{15}$$

Здесь обозначены через $\bar{u}^{(m)} = \{u_1^{(m)}, u_2^{(m)}, u_3^{(m)}\}$ "локальные" подвекторы третьего порядка, а через u, v – "глобальные" подвекторы размерности, равной количеству узлов N_V^h. Компоненты локальных и глобальных векторов совпадают для одинаковых узлов, надо только установить взаимнооднозначное соответствие их локальных и глобальных номеров.

Таким образом, возникает задача формирования поэлементной ССД, состоящей из совокупности данных EIN(m) о каждом T_m^h: номера вершин-узлов, номера соответствующей подобласти и граничных сегментов, которым принадлежат грани (ребра – в 2D) T_m^h (соответствующий номер полагается равным нулю, если сеточная грань не лежит на границе расчетной области). В отличие от поузловой информации CSR, каждая m-я порция EIN содержит информацию только о своем элементе, и здесь формально никак не присутствуют межэлементные связи.

4.3 Задача построения сеточных подобластей

В данном пункте мы кратко рассмотрим нетрадиционную задачу, актуальную с точки зрения распараллеливания алгоритмов,– сбалансированное разбиение сеточной расчетной области на сеточные подобласти (с приблизительно равным количеством узлов в каждой). Цель заключается в том, что исходная задача разбивается на подзадачи — каждая для своей подобласти,– которые решаются одновременно на соответствующих процессорах, что в идеале дает ускорение вычислений, близкое к линейному, т.е. пропорциональному числу подобластей. Для полного решения решаемой задачи между подобластями необходимы информационные обмены, что приводит к неизбежным коммуникационным потерям.

Данная проблема не представляет труда для пользователя, если он визуально наблюдает изображение сетки и может с помощью графических средств сделать это практически не задумываясь. Однако задача автоматической декомпозиции области для неструктурированной сетки с узлами, геометрические связи между которыми заданы с помощью CSR-форматов, требует анализа топологии сеточных графов, а реализация их расщепления совсем не тривиальна.

Декомпозиция сетки осуществляется в два этапа. На первом разбиение осуществляется на непересекающейся подобласти, а на втором каждая из них расширяется на некоторое количество сеточных слоев, или фронтов. Иллюстрация такого расширения приводится на рис. 2 для простого случая квадратной сетки.

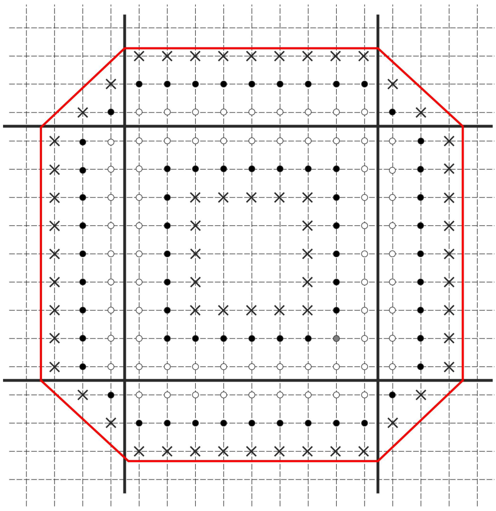

Рис. 2: Построение расширенных сеточных подобластей

Необходимость такой декомпозиции с пересекающимися подобластями обуславливается скоростью сходимости итерационного метода Шварца, на котором основываются параллельные вычислительные процессы [21].

Мы не будем останавливаться на алгоритмах решения данных логически сложных задач, а отметим только, что трудоемкость второго этапа (расширение уже построенных непересекающихся подобластей) значительно повышается в параллельном варианте, когда построенные на первом этапе сеточные подобласти располагаются в памяти различных процессоров. Данное обстоятельство является необходимым условием решения сверхбольших сеточных задач.

5 Принципы организации библиотеки DELAUNAY

Состав функциональных модулей библиотеки формально осуществляет преобразование геометрической и функциональной структур данных в сеточную структуру данных, т.е. реализует отображение

$$\Gamma CD + \Phi CD \rightarrow CCD.$$

Исходная информация полностью и однозначно описывает математическую постановку решаемой задачи, а итоговая — представляет все необходимые данные для реализации ее сеточной аппроксимации с помощью МКО или МКЭ и для формирования систем линейных или нелинейных алгебраических уравнений (СЛАУ или СНАУ).

Предполагается, что вычислительный процесс этапа генерации сетки выполняется в автоматическом или полуавтоматическом режиме. Последнее означает, что для частных подзадач пользователем могут указываться применяемые алгоритмы из состава библиотеки, а также их счетные параметры. В случае отсутствия таких данных они выбираются по умолчанию. Кроме того, реализация скомпилированной исполняемой программы подразумевает визуальный контроль результатов, т.е. графическое и текстовое представление исходных данных, а также изображение конструируемой сетки и выдачу количественных характеристик ее качества. Важно также иметь в виду, что при решении задач или с динамическим изменением геометрии расчетной области, или с качественной перестройкой свойств моделируемого решения в процессе счета сетка может неоднократно модифицироваться.

Напомним, что исходными данными для построения сетки являются массивы данных по геометрическим и функциональным объектам, в том числе:

- описание расчетной области со списками макровершин, макроребер, макрограней и подобластей, а также сегментов граничных поверхностей;
- информация о коэффициентах решаемых уравнений и краевых условиях, с их привязкой к подобластям и граничным сегментам;
- дополнительная необходимая информация по методам построения или по модификациям сеток, характеризующая как общее число узлов, так и особенности их распределения в подобластях.

Создаваемая ССД должна содержать поэлементную информацию обо всех T_m^h с ее привязкой к узловым и функциональным данным, обеспечивающим выполнение последующего этапа аппроксимации.

Ориентация на решение больших задач математического моделирования на МВС определяет актуальную проблему формирования данных о сеточных сбалансированных подобластях, распределенных по различным процессорам. С одной стороны, это является главным средством масштабируемого распараллеливания алгоритмов (вспомогательные подзадачи в подобластях рассчитываются на соответствующих процессорах), а с другой – обеспечивает интеграцию вычислительных ресурсов для создания программных реализаций практических без ограничений на размер генерируемой сетки. Если для нумерации сеточных объектов использовать стандартное 64-битовое машинное слово, то их допустимое количество в одной подобласти определяется объемом памяти процессора, а суммарное число узлов может быть увеличено фактически неограниченно за счет использования необходимого количества процессоров. Например, при оперативной памяти процессора в 4 Гб одна подобласть может насчитывать до $2 \cdot 10^5$, а на МВС с $5 \cdot 10^5$ процессорами их общее количество сможет достигать 10^{11}.

Один из основных принципов организации библиотеки DELAUNAY заключается в возможности переиспользования внешних программных разработок, что означает, с одной стороны, осуществление огромного мирового интеллектуального потенциала, заключенного в существующих продуктах, а с другой – интегрирование результатов различных групп разработчиков. Такими иллюстрациями могут служить "чужие" сеточные генераторы для отдельных подобластей, использование для визуализации существующих прекрасных графических систем, а также согласованное взаимодействие с САПР-овскими системами (CAD, CAE, CAM и др.). Способы достижения этих целей — это наличие множественных представлений данных и переходников (конверторов), а также система гибких настраиваемых интерфейсов.

Главное назначение предлагаемой библиотеки — это функционирование в составе какого-либо приложения, осуществляющего решение задач моделирования в определенной области и реализуемого, например (но не только), конфигурационными инструментариями БСМ.

Эффективная реализация алгоритмических и системных компонент библиотеки представляется наиболее естественной с помощью средств объектно-ориентированного программирования, например, на языках C++ или FORTRAN 90.

Принципиальным моментом существования библиотеки DELAUNAY является ее открытость (OPEN SOURSE) как инструментальной среды, из которой заинтересованный пользователь может брать необходимые ему компоненты, а внешний разработчик, наоборот, может вносить свои модули, расширяющие функциональность алгоритмического окружения. В этом смысле данная разработка рассматривается не как проект отдельной группы (group project), а как общественно развиваемый продукт (community project), разумеется, на основе некоторой системы регламентов. Данная концепция не противоречит созданию и коммерческих закрытых продуктов на основе общедоступных инструментариев, но при соблюдении определенной дисциплины и соглашений. Более того, такая парадигма хорошо согласуется с современным принципом открытых инноваций [22].

В заключение можно подчеркнуть двойственный характер предлагаемой концепции. С одной стороны, средства генерации сеток формируются как актуальная составляющая общей технологической цепочки математического моделирования в рамках БСМ, а с другой — библиотека DELAUNAY по своему замыслу является самодостаточным программным продуктом, который может автономно использоваться в других прикладных разработках.

Список литературы

[1] Глассер А.Г., Лисейкин В.Д., Шокин Ю.И. и др. Построение разностных сеток с помощью уравнений Бельтрами и диффузии.–Новосибирск, Наука, 2006.

[2] Годунов С.К., Роменский Е.И., Чумаков Г.А. Построение сеток в сложных областях с помощью квазиконформных отображений.–Труды ИМ СО РАН, Новосибирск, Наука, т. 18, 1990, 75-84.

[3] Василевский Ю.В., Данилов А.А. Взаимодействие с САПР при построении расчетных сеток в сложных областях.//Труды мат. общ. им.Н.И.Лобачевского, Казань, Казан. мат. общ., 2009, 5-12.

[4] Garanzha V.A. Variational principles in grid generation and geometric modelling. –Numer. Lin. Alg., v. 11, N 5-6, 2003, 535-563.

[5] Бронина Т.Н., Гасимова Н.А., Ушакова О.В. Алгоритмы построения трехмерных структурированных сеток.–ЖВММФ,т. 43, N 6, 2003, 875-883.

[6] Ильин В.П. Геометрическое и функциональное моделирование в задачах математической физики.//Вычислительные технологии, т. 6, ч. 2, 2001, 315-321

[7] Ильин В.П., Павлов М.В., Свешников В.М. Решение двумерных краевых задач на квазиструктурированных сетках.//Вычислительные технологии, т. 6, ч. 2, 2001, 168-175.

[8] Il'in V.P., Pavlov M.V., Volkov A.P. On the finite volume approach to the 3-D quasistructured grids. Novosibirsk.//Bull. Nov. Comp. Center, Num. Anal., N 13, 2005, 21-31.

[9] Fritzke B. Growing Cell Structuring – a self-organizing networks for unsupervised learning.–Neural Networks, 7(9), 1994, 1441-1460.

[10] Власов В.И. Краевые задачи в областях с криволинейной границей.–М., ВЦ АН СССР, 1987.

[11] Иваненко С.А. О существовании уравнений для описания классов невырожденных криволинейных координат в произвольной области.–ЖВММФ, т. 42, N 1, 2002, 47-52.

[12] Азаренок Б.Н. О построении структурированных сеток в двумерных невыпуклых областях с помощью отображений.–ЖВММФ, т. 49, N 5, 2009, 826-839.

[13] International Meshing Roundtable: www.imr.sandia.gov/18imr.

[14] Internat. J. for Numer. Math. in Eng., v. 58(2), 2003, special issue “Trends in Unstructured Mesh Generation”.

[15] Ильин В.П. Экзапроблемы математического моделирования.//Вестник ЮУрГУ, сер. "Математическое моделирование и программирование", вып. 6, N 35 (211), 2010, 28-39.

[16] Голубева Л.А., Ильин В.П., Козырев А.Н. О программных технологиях в геометрических аспектах математического моделирования.//Вестник НГУ, сер.: Информационные технологии, т. 10, вып. 2, 2012, 25-33.

[17] Ильин В.П. О численном решении прямых и обратных задач электромагнитной георазведки.–СибЖВМ, т. 6, N 4, 2003, 381-394.

[18] Ильин В.П. Численный анализ. Часть 1.–Новосибирск, изд. ИВМиМГ СО РАН, 2004.

[19] Ильин В.П. Методы и технологии конечных элементов.–Новосибирск, изд. ИВМиМГ СО РАН,2007.

[20] Ильин В.П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений.–Новосибирск, изд. ИВМ СО РАН, 2000.

[21] Ильин В.П. Параллельные методы и технологии декомпозиции областей.//Вестник ЮУрГУ, сер. "Вычислительная математика и информатика", 2012, N 46(305), 31-44.

[22] Чесбро Г. Открытые инновации.–М., изд. "Поколение", 2007.