

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ РЕШЕНИЯ 3-МЕРНЫХ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ НА ОСНОВЕ КОНЦЕПЦИИ БСМ

Л. А. Голубева¹, В. С. Горшунов^{1,2}, В. П. Ильин¹, Э. Б. Эрдыниева^{1,2}

¹ *Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

² *Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск*

УДК 519.632

Для решения задач математической физики можно выделить три важных этапа: построение геометрической модели, построение сеточной модели, решение уравнений. Цель настоящей работы - разработать и реализовать программный комплекс для решения 3-мерных задач математической физики на основе концепции базовой системы моделирования (БСМ), охватывающий все три данных этапа.

Ключевые слова: математическая физика, САПР, геометрическая структура данных, сеточная структура данных, функциональная структура данных, базовая система моделирования (БСМ)

Введение

Самый простой, на первый взгляд, метод исследования мира — натуральный эксперимент. Но порой натуральный эксперимент сложно воспроизвести и/или на его проведение требуется чрезвычайно много ресурсов. В качестве инструмента, способного нивелировать вышеописанные недостатки, может служить численный эксперимент. Нельзя сказать, что численный эксперимент является альтернативой, в полном смысле этого слова, натуральному эксперименту, так как его основаниями служат факты, полученные эмпирическим путём. Но всё же, при его помощи можно существенно облегчить натуральный эксперимент и значительно снизить издержки на проведение такового.

Математическая модель — это математическое представление реальности, один из вариантов модели как системы, исследование которой позволяет получать информацию о некоторой другой системе. Как правило, под математическим представлением в смысле математической модели понимают некоторую систему уравнений, которая описывает поведение исходной системы. Численный эксперимент — это эксперимент над математической моделью, как правило, с использованием ЭВМ, объекта исследования, который состоит в том, что по одним параметрам модели вычисляются другие её параметры и на этой основе делаются выводы о свойствах объекта, описываемого математической моделью. Данный вид эксперимента можно лишь условно отнести к эксперименту, потому как он не отражает природные явления, а лишь является численной реализацией созданной человеком математической модели. Действительно, при некорректности в математической модели, её численное решение может быть строго расходящимся с физическим экспериментом.

Математическая модель физических явлений используется для постановки задач математической физики. Решение таких задач можно разбить на три этапа: построение геометрической модели, построение сеточной модели, решение уравнений [1]. Один из основных аспектов БСМ (базовая система моделирования) [2,3] — обеспечить возможность выполнения всех трёх вышеозначенных этапов как единого целого. В рамках этой идеи предлагается реализовать три основных компоненты, в дальнейшем будем называть их модулями:

1. “Вороной” — задание геометрической и функциональной структуры данных.
2. “Делоне” — построение сеточной структуры данных.

3. “Чебышёв” — аппроксимация уравнений.

Программный комплекс предполагает предоставление понятного графического интерфейса, построение сетки, возможности отображения геометрической и сеточной модели, решение и визуализация решения. В качестве современного отечественного программного обеспечения, которое может служить основой для реализации модулей БСМ была выбрана ИИПП «Гербарий» [4].

1 Гербарий

«Гербарий» — российская интегрированная инженерная программная платформа (ИИПП) — платформенное решение, служащее основой для создания современных САПР. «Гербарий» включает в себя набор программных компонентов (модулей) — библиотеки классов на языке программирования C++, сгруппированные в модули в соответствии с решаемыми с их помощью задачами — SDK, и Демонстратор; где SDK — software development kit, набор разработчика, а Демонстратор ИИПП (рис. 1) является приложением, демонстрирующим возможности платформы.

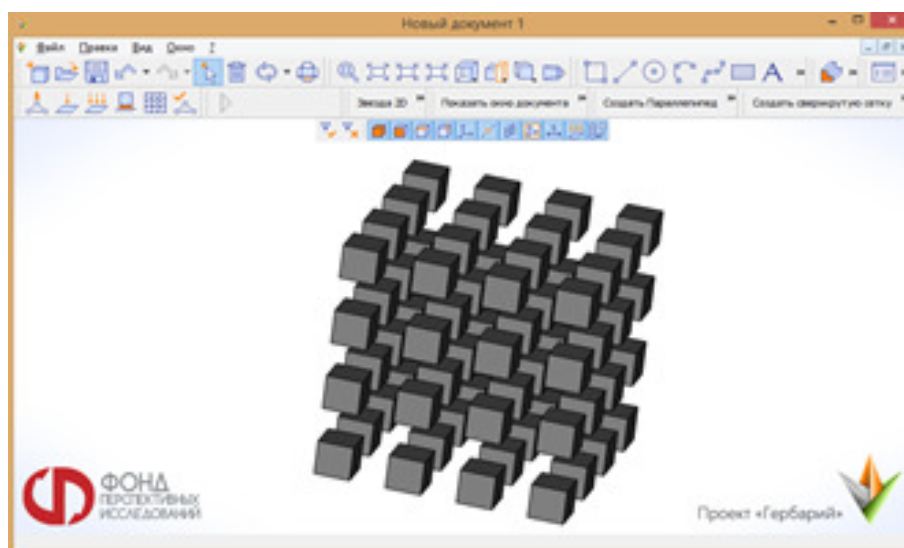


Рис. 1: Демонстратор "Гербарий"

Возможности ИИПП “Гербарий” :

- Геометрическое 2D и 3D моделирование деталей и сборочных единиц изделия.
- Управление моделью изделия и редактирование свойств объекта.
- Сохранение и восстановление данных модели.
- Конвертация хранимых данных в файл формата STEP и обратно.
- Управление и отображение структуры и взаимосвязей объектов модели изделия.
- Возможность написания модулей (плагинов).
- Запуск и выполнение команд пользовательского интерфейса для создания и редактирования объектов модели, редактирование свойств объектов, поддержка графических манипуляторов.

2 Модуль обработки геометрии

Геометрическая структура данных представляет собой информацию о геометрии области/тела, для которого считается задача. Расчётная область, для которой нужно посчитать задачу, представляет из себя сложное

тело, полученное с помощью теоретико-множественных операций, применённых к геометрическим примитивам: параллелепипедам, цилиндрам, сферам и т.д. Например, это может быть куб, внутри которого вырезан цилиндр. Составляя алгоритмы и программные модули, моделирующие те или иные задачи, необходимо хранить данные о том, как геометрически устроена область, в которой считается задача.

Для описания расчётной области используются базовые координаты. Базовые координаты — это все уникальные значения координат вершин по каждой из осей. Рассмотрим область в виде куба, внутри которого вырезан цилиндр. Нам необходимо хранить информацию о кубе, о цилиндре, их расположение и размеры, и о том что из чего вырезано или дополнено. И базовые координаты по каждой из осей являются границами этих тел, цилиндра или куба. Они являются информацией о том что и где вырезается или дополняется. Это и составляет структуру данных, в которой хранится информация о том, как геометрически устроена область

Функциональная структура данных представляет собой информацию о значениях функций на границах области. Она накладывается на базовые координаты и указывает граничные условия на границах областей для задачи.

В рамках данной работы был реализован ряд модулей для САПР Гербарий. Один из них формирует входные данные для генератора сеток (рис. 2). Его работа заключается в следующем: пользователь САПР вводит данные о геометрии рассчитываемой области, размеры тел, их расположение относительно друг друга, условия функций на границах, и затем плагин запоминает это в описанную выше структуру данных и формирует входной файл для генератора сеток.

Работу плагина можно разделить на несколько этапов:

1. Задание геометрии расчётной области:
 - а) задание размеров и расположение подобластей (параллелепипед, цилиндр, сфера);
 - б) задание материалов для заданных подобластей;
 - в) задание приоритетов — необходимо в случае пересечения подобластей, чтобы задать материал подобласти полученной в пересечении;
 - г) получение итоговой расчётной области, полученной в результате объединения и пересечения указанных подобластей.
2. Задание функциональных данных, параметров сетки, формирование структуры данных и запись этой структуры как входных данных для программы осуществляющей генерацию сетки:
 - а) формирование базовых координат;
 - б) задание номеров граничных условий для каждой базовой координаты;
 - в) задание числа узлов сетки между базовыми координатами и сгущения.

3 Модуль построения сеточной модели

Как правило, сеточная модель состоит из сеточных вершин, сеточных рёбер и сеточных граней. В качестве элементов разбиения, которые образуют сеточную модель, могут быть выбраны тетраэдры — такие сетки называют тетраэдральными, параллелепипеды — такие сетки называют параллелепипедными и т.д. Также сетки обладают различными качествами, рассмотрим некоторые из них.

Структурированные (регулярные) сетки — это сетки, множество сеточных узлов которых является упорядоченным (рис. 3, рис. 4). Использование структурированных сеток (по сравнению с неструктурированными) позволяет, как правило, уменьшить продолжительность расчета и необходимый объём оперативной памяти ЭВМ. В то же время процедура построения криволинейной регулярной сетки, как правило, требует больших затрат труда и ресурсов ЭВМ по сравнению с процедурой построения нерегулярной сетки.

Адаптивные сетки — сетки, позволяющие использование малых пространственных шагов, где это необходимо, для соблюдения жестких требований к численным методам, но при этом сохраняющие умеренные требования к вычислительной технике.

Одним очень важным свойством сетки является её качество. Основной и наиболее точный метод оценки качества сетки предлагает нам выполнять последовательное уменьшение размера элементов до тех пор, пока какой-нибудь значимый результат, такой как, например, максимальное напряжение в определенной

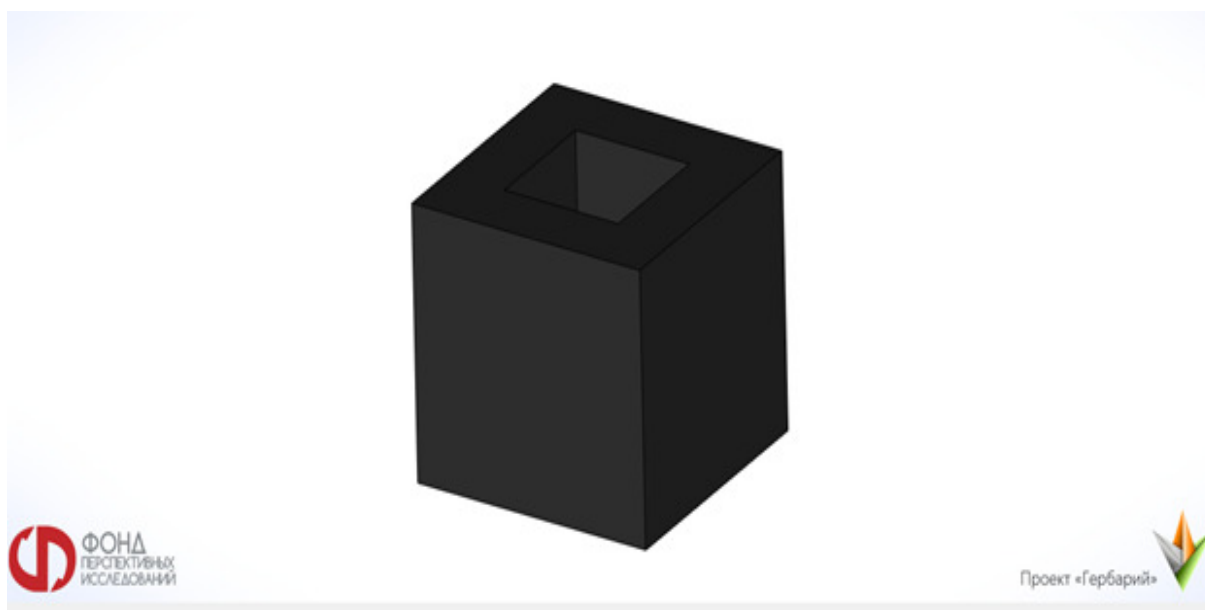


Рис. 2: Пример геометрической области

зоне, не сойдется к некоторому значению (то есть с каждой итерацией изменение напряжения будет меньше заданного допуска). Из этого вытекают следующие критерии качества: максимальный и минимальный угол по всем конечным элементам, их отношение; максимальная и минимальная длина ребра. На основе таких критериев становится возможным оценить те или иные алгоритмы построения сеток, сеточные генераторы, до проведения физических расчётов. С этой точки зрения весьма выгодны структурированные сетки, однако, как это было указано выше, построение таких сеток требует повышенных вычислительных мощностей в сравнении с построением неструктурированных.

Теперь разобьем исходную геометрическую область на некоторое количество подобластей, в каждой из которых построим свою сетку, которая согласованна на границах областей. В данном случае, под согласованностью подразумевается следующее: если сеточный элемент (вершина, ребро, грань) одной из смежных сеток лежит на общей границе подобластей, то этот сеточный элемент является также сеточным элементом и другой сетки. Будем говорить, что сетка является квазиструктурированной, если она структурирована в каждой из подобластей, в целом же такая сетка может быть неструктурированной. Таким образом, мы приходим к определению адаптивной квазиструктурированной сетки как наиболее ценной для решения физико-математических задач.

Руководствуясь изложенным выше, был разработан модуль на базе платформы "Гербарий", основными задачами которого ставятся задачи построения и отображения сеточных моделей на основе различных алгоритмов, обеспечение возможности использования сторонних сеточных генераторов, сеточных моделей, записанных в различных форматах, и учёт качества построенных сеток. В качестве основных алгоритмов построения регулярной тетраэдральной сетки в модуле используются алгоритмы сеточного генератора "Cubdat" [6]. Пример построенной сетки приведён на рис. 3.

4 Модуль решения задач

Под функциональной структурой данных мы понимаем информацию, которая в совокупности с геометрическими данными, полностью определяет постановку решаемой задачи. Изложим описание в терминах дифференциальных уравнений, граничных и начальных условий. В принципе, эти данные можно было бы именовать «физической» структурой как отражающей более предметно прикладные стороны проблемы, но мы ориентируемся именно на математические формулировки как на более универсальные. Имеется ввиду, что одинаковой дифференциальной постановке могут соответствовать различные научно-технические процессы или явления, специально для которых возможно построение языковых надстроек для пользователей — специалистов в разных областях.

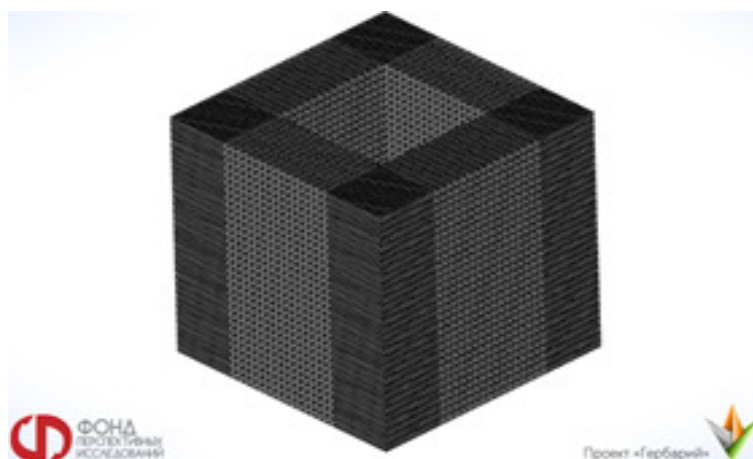


Рис. 3: Структурированная сетка

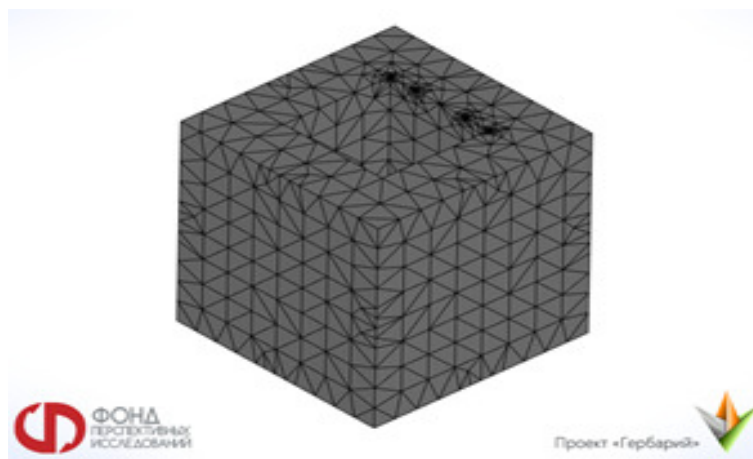


Рис. 4: Неструктурированная сетка

Описание решаемых дифференциальных уравнений целесообразно строить в соответствии с постепенным их усложнением, например, в следующей последовательности (в каждом случае задается признаковая информация — о типе уравнения и характеристическая — в виде соответствующих коэффициентов или функций). Рассмотрим те виды уравнений, которые решаются на данное время:

1. Уравнение Лапласа и Пуассона с кусочно-постоянными коэффициентами правыми частями типа $a_i * u = f_i$, $i = 1, 2, \dots, N$, где N — количество подобластей с разными материальными свойствами. Здесь возможны различные системы координат (декартова, цилиндрическая и др.), а числовая информация здесь минимальна — только значения постоянных a , f и номера соответствующих подобластей.
2. Линейные или нелинейные эллиптические уравнения вида, описанного в пункте «1», но с величинами a , f , являющимися в разных подобластях функциями координат или исходного решения. Здесь могут быть предусмотрены различные варианты: или функциональные зависимости допускаются «стандартного вида» (например, $f(x, y) = f + f_1 * x + f_2 * y$, с задаваемыми значениями постоянных f , f_1 , f_2), либо они описываются в форме арифметического выражения алгольного или фортрановского типа (в этом случае необходим «читающий» их препроцессор), либо пишутся пользователем на допускаемом языке программирования (самый общий случай, но не самый удобный).

Для решения задач разработан модуль на базе платформы «Гербарий» на основе алгоритмов [5]. Приводим пример решения задачи для кубика с различными граничными значениями (Рис. 5). В настоящее время решение задачи отображается в Paraview.

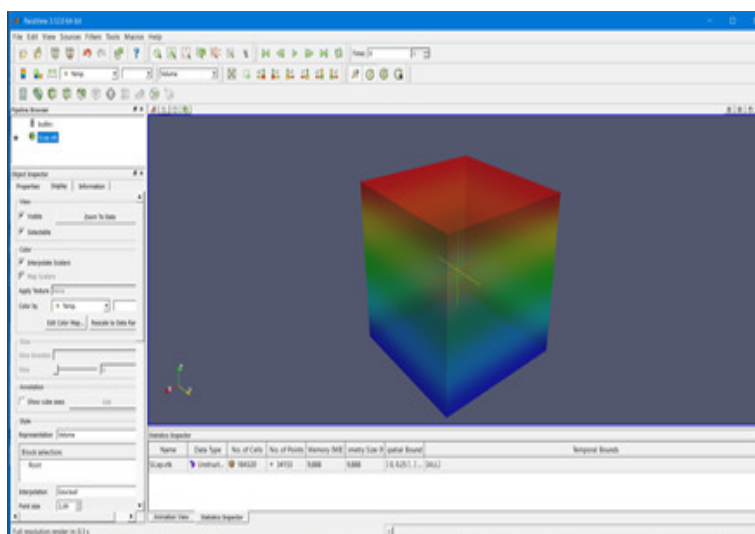


Рис. 5: Решение задачи в кубе

Заключение

На базе ИИПП “Гербарий” был реализован программный комплекс на основе идеи БСМ [3]. В настоящее время программный комплекс обладает следующими возможностями:

1. Построение геометрии в интерактивном режиме.
2. Формирование геометрической и функциональной структур данных, необходимых для функционирования сеточного генератора “Cubdat” [6].
3. Построение и отображение сеточной модели, сформированной при помощи сеточного генератора “Cubdat” [6].
4. Решение задач, описанных в разделе 4. Ведётся работа над расширением спектра решаемых задач, используемых алгоритмов построения сеточных моделей.

Список литературы

- [1] Ильин В.П. Фундаментальные вопросы математического моделирования. // Вестник Российской Академии Наук, т. 86, № 4, 2016, 26–36.
- [2] Голубева Л.А., Ильин В.П., Козырев А.Н. О программных технологиях в геометрических аспектах математического моделирования. – Вестник НГУ, серия Информационные технологии, т. 10, N 2, 2012, 25–33.
- [3] Ильин В.П., Гладких В.С. Базовая система моделирования (БСМ): концепция, архитектура и методология "Современные проблемы математического моделирования, обработки изображений и параллельных вычислений 2017" (СПММОИиПВ-2017), Ростов-на-Дону издательство ДГТУ, 2017, с. 151–158.
- [4] <http://tflex.ru/about/publications/detail/index.php?ID=3846>
- [5] Бутюгин Д.С., Гурьева Я.Л., Ильин В.П., Перевозкин Д.В., Петухов А.В., Скопин И.Н. Функциональность и технологии алгебраических решателей в библиотеке Krylov. – Вестник ЮУрГУ. Серия “Вычислительная математика и информатика”, т. 2, N 3, 2013, 92–105.
- [6] Gurieva Ya.L., Il'in V.P. Program package for 3D boundary-value elliptic Problem. – Bull. NCC, series: “Num. Anal.,” Iss. 11, 2002, 35–52.

*Людмила Андреевна Голубева — к.ф.-м.н., доцент, науч.сотр. Института
вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: golubeva@labchem.sscs.ru;*

*Горшунов Василий Сергеевич — инженер Института вычислительной
математики и математической геофизики СО РАН;
аспирант Новосибирского государственного университета
e-mail: basil.gorshunov@gmail.com;*

*Ильин Валерий Павлович — д.ф.-м.н., глав. науч.сотр. Института
вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
Новосибирский государственный университет;
e-mail: ilin@sscc.ru;*

*Эрдыниев Эрдэм Баирович — инженер Института вычислительной
математики и математической геофизики СО РАН;
аспирант Новосибирского государственного университета
e-mail: erdynieva@gmail.com.*

Дата поступления — 20 сентября 2018 г.