РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

АВТОМЕТРИЯ

№ 5 1997

УДК 519.6 : 519.632

Я. Л. Гурьева

(Новосибирск)

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ СМЕШАННЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ОБЪЕМОВ

Рассматриваются технологические вопросы, возникающие при численном моделировании краевых задач: построение аппроксимаций уравнений, структур данных и алгоритмов.

Введение. Цель данной работы — описание и анализ технологических вопросов, возникающих при численной реализации метода конечных объемов для решения трех- и двумерных смешанных краевых задач. Под технологией решения понимается совокупность математического подхода и адекватных ему структур данных и алгоритмов. Подобное понимание технологии можно найти в [1], где через понятия «технология вычислительного эксперимента» и «технология программирования» вводится понятие «технология математического моделирования».

На каждом этапе численного решения задачи: дискретизации области, аппроксимации уравнений, формирования алгебраической системы уравнений и решения этой системы — выбор представления данных и алгоритмов их обработки является нетривиальной задачей, и усилия разработчиков при этом направлены, как правило, с одной стороны, на минимизацию объемов хранимой информации, а с другой — на быстроту и логическую простоту алгоритмов. Вопросы представления данных и алгоритмов как основы вычислительных технологий для решения задач математической физики рассматривались в [2]. В данной работе эти вопросы рассматриваются на следующем классе задач: найти решение уравнения диффузии в ограниченной трехмерной или двумерной области прямоугольной геометрии с применением различных аппроксимаций по методу конечных объемов и решением системы линейных алгебраических уравнений методом неполной факторизации. Область конструируется из подобластей, каждая из которых обладает своим набором коэффициентов дифференциального уравнения, или, другими словами, физическими характеристиками.

Существует несколько известных подходов к решению задач математической физики: метод конечных разностей, метод конечных элементов и методы интегральных балансных соотношений. Последние включают метод интегральных тождеств, интегроинтерполяционный метод, а также метод конечных объемов, или бокс-метод. Самым технологичным из перечисленных методов можно назвать метод конечных элементов [3]. В самом деле, при аппроксимации можно использовать h-, p- или h—p-версии метода, а при получении матрицы системы линейных алгебраических уравнений — поузловой или поэлементный подход. Эти вариации метода существенно влияют как на структуры данных для их представления, так и на алгоритмы расчета матрицы жесткости системы.

При исследовании метода конечных объемов, идея которого появилась довольно давно [4], а бурное развитие произошло в последнее десятилетие, аспектам технологии уделялось мало внимания в сравнении с вопросами аппроксимации и сходимости (см., например, [5—8]). Именно это и побудило автора обратиться к вопросам технологии метода.

В разд. 1 приводится постановка задачи, указывается подход к аппроксимации уравнений и выписывается матричная форма балансного соотношения после аппроксимации. В разд. 2 описывается пояческовое (поэлементное) построение локальных матриц баланса. Разд. 3 посвящен геометрическому определению расчетной области. Разд. 4 содержит описание некоторых структур данных и алгоритмов, используемых на этапе численной аппроксимации и решения результирующей системы алгебраических уравнений.

1. **Постановка задачи и аппроксимация.** Дальнейшие рассуждения относятся к трехмерному случаю, как более громоздкому по сравнению с двумерным. Аналогичные построения справедливы и в двумерном случае.

Рассматривается следующая задача: найти решение уравнения

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda(x, y, z)\frac{\partial u}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda(x, y, z)\frac{\partial u}{\partial y}\right)-\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda(x, y, z)\frac{\partial u}{\partial z}\right)+$$
$$+\mu(x, y, z)u = f(x, y, z), \qquad (x, y, z)\in\Omega=\bigcup_{k=1}^{N_s}\Omega_k, \tag{1}$$

где Ω — ограниченная трехмерная область, составленная из параллелепипедоидальных подобластей Ω_k, $k = 1, \ldots, N_s$. Функции λ, μ, f в каждой подобласти Ω_k обладают следующими свойствами: $\lambda \geq 0$ — константа, $\mu \geq 0$, f гладкие. На внешней границе области $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ заданы граничные условия в форме

$$u\,\Big|_{\Gamma_1} = g(x, y, z), \qquad \kappa u + \frac{\partial u}{\partial \bar{n}}\Big|_{\Gamma_2} = \gamma, \tag{2}$$

где g, κ, γ — некоторые заданные функции; $\bar{n}$ — внешняя нормаль к границе Γ. На поверхностях разрыва λ (внутренних границах) ставятся условия сопряжения

$$u\,|_{\Gamma_+} = u\,|_{\Gamma_-}, \qquad \lambda_+\frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{\Gamma_+} = \lambda_-\frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{\Gamma_-},$$

где знаки «+, −» означают односторонние значения функций и их нормальных производных.

Для дискретизации задачи в области Ω построена неравномерная ортогональная сетка:

$$x_{i+1} = x_i + h_i^x, \qquad y_{j+1} = y_j + h_j^y, \qquad z_{k+1} = z_k + h_k^z,$$
$$i = 1, \ldots, L+1; \quad j = 1, \ldots, M+1; \quad k = 1, \ldots, N+1,$$

такая, что граница области (внешняя и внутренняя ее части — грани раздела сред) пересекает сеточные линии только в узлах сетки. Обозначим общее число узлов сетки через N_m: $N_m = (L+1)\times(M+1)\times(N+1)$.

При аппроксимации уравнения (1) в некотором узле сетки вокруг этого узла вводятся два элементарных объема — малый и большой:

$$V_{ijk} = \Big\{x_i - h_{i-1}/2 \leq x \leq x_i + h_i/2,\; y_j - h_{j-1}/2 \leq y \leq y_j + h_j/2,\; z_k - h_{k-1}/2 \leq z \leq z_k + h_k/2\Big\}, \tag{3}$$

$$\overline{V}_{ijk} = \Big\{x_{i-1} \leq x \leq x_{i+1},\; y_{j-1} \leq y \leq y_{j+1},\; z_{k-1} \leq z \leq z_{k+1}\Big\}.$$

Для получения разностных уравнений методом конечных объемов аппроксимируется линейная комбинация с весовым параметром p двух балансных соотношений по большому и малому объемам:

$$J \equiv p\int\limits_{S} J^n dS + (1-p)\int\limits_{\overline{S}} J^n d\overline{S} = p\int\limits_{V} (f-\mu u)dV + (1-p)\int\limits_{\overline{V}} (f-\mu u)d\overline{V}. \tag{4}$$

Здесь J^n — плотность потока в направлении внешней нормали; f — источник; S и $\overline{S}$ — поверхности малого и большого объемов (индексы i, j, k опущены для краткости).

Каждый из элементарных объемов делится координатными плоскостями $x = x_i$, $y = y_j$, $z = z_k$ на восемь частей. Тогда каждый интеграл в (4) также может быть представлен как сумма соответствующих восьми интегралов:

$$J = \sum_{k=1}^{8} J_k,$$

где J_k — полный поток через поверхность k-го подобъема. Аппроксимация балансных соотношений в подобъемах проводится в два этапа: аппроксимация интегралов и аппроксимация производных в интегралах — при помощи формул центральных прямоугольников и трапеций, а специальный выбор весового параметра позволяет повысить порядок аппроксимации с $O(h^2)$ до $O(h^4)$ [9, 10]. Результирующая матричная форма балансного соотношения вокруг узла (i, j, k) выглядит как

$$(Au_h)_0 \equiv a_0u_0 - \sum_{q\in Q} a_q u_q = f_0, \tag{5}$$

где $u_0 \equiv u_{ijk}$, Q — аппроксимационный шаблон вокруг узла; q — узлы шаблона. Шаблон в трехмерном случае может быть 7-, 19- или 27-точечным, а в двумерном — 5- или 9-точечным. Аппроксимационный шаблон определяет количество ненулевых коэффициентов в строке матрицы (5), отвечающей центральному узлу шаблона. Тип шаблона определяется требуемым порядком аппроксимации и весовым параметром, при этом в общем случае на неравномерных сетках и при произвольном значении весового параметра порядок аппроксимации есть $O(h)$:

трехмерный случай:

$O(h)$ — 7-точечный шаблон при $p = 16/15$ и общем случае неравномерных сеток;

$O(h^2)$ — 27-точечный при $p = 16/17$ и общем случае неравномерных сеток или при любом $0 \le p \le 1$ и кусочно-равномерной сетке;

$O(h^4)$ — 19-точечный при $p = 32/31$, равномерной сетке, граничных условиях Дирихле и постоянных λ, μ;

двумерный случай:

$O(h)$ — 5-точечный при $p = 8/7$ и общем случае неравномерных сеток;

$O(h^2)$ — 9-точечный при $p = 8/9$ и общем случае неравномерных сеток или при любом $0 \le p \le 1$ и кусочно-равномерной сетке;

$O(h^4)$ — 9-точечный при $p = 16/15$, $\mu(x, y) \equiv 0$, равномерной сетке, граничных условиях Дирихле и постоянных λ, μ.

2. **Матрица баланса.** Рассмотрим поэлементный подход к вычислению коэффициентов матрицы (5). Заметим, что обычно соотношение (5) записывается для каждого узла сетки полностью, т. е. при аппроксимации уравнения (1) в рассмотрение включаются все малые и большие подобъемы, опирающиеся на данный узел сетки. Проводя аналогию с методом конечных элементов, можно назвать этот подход поузловым: при заданном узле вычисления проводятся для всех боксов, которые содержат данный узел в качестве своей вершины. Альтернативным подходом в методе конечных элементов является поэлементная сборка матрицы жесткости, когда для фиксированного элемента при

интегрировании по нему вычисляется локальная матрица жесткости, элементы которой добавляются в строки глобальной матрицы жесткости, отвечающие опорным узлам элемента. Ниже приводится именно такой, поэлементный (или поячеечный) способ вычисления коэффициентов результирующей матрицы. По аналогии с локальной и глобальной матрицами жесткости вводятся локальная и глобальная матрицы баланса.

Рассматривается ячейка сетки

$$\omega = \left\{x_i \le x \le x_{i+1},\ \ y_j \le y \le y_{j+1},\ \ z_k \le z \le z_{k+1}\right\}.$$

Для удобства описания восемь углов прямоугольной ячейки с сеточными индексами (i, j, k), $(i+1, j, k)$, $(i, j+1, k)$, $(i, j, k+1)$, $(i+1, j+1, k)$, $(i+1, j, k+1)$, $(i, j+1, k+1)$, $(i+1, j+1, k+1)$ пронумеруем следующим образом: 0, 3, 4. 6, 8, 9, 10, 14. В двумерном случае введем аналогично для углов (i, j, k), $(i+1, j, k)$, $(i, j+1, k)$, $(i+1, j+1, k)$ номера 1, 3, 4, 8. Обозначим через M множество введенных локальных номеров.

В ячейке вводится локальный вектор решения $u_\omega = \{u_\omega^m\}$, $m \in M$, и потоки вокруг угловых точек ячейки J_ω^m. Каждый J_ω^m после аппроксимации представляет собой линейную комбинацию элементов локального вектора решения:

$$J_\omega^m = \sum_{l \in M} a_{ml}\, u_\omega^l\ .$$

Тогда полный поток через ячейку ω можно представить в матричном виде:

$$J_\omega = A_J u_\omega, \tag{6}$$

где A_J — 8×8-матрица в трехмерном случае и 4×4 — в двумерном:

$$A_J = \begin{pmatrix} a_{0,0} & a_{0,3} & \dots & a_{0,10} & a_{0,14} \\ a_{3,0} & a_{3,3} & \dots & a_{3,10} & a_{3,14} \\ & & \dots & & \\ a_{10,0} & a_{10,3} & \dots & a_{10,10} & a_{10,14} \end{pmatrix}, \qquad A_J = \begin{pmatrix} a_{0,0} & a_{0,3} & a_{0,4} & a_{0,8} \\ a_{3,0} & a_{3,3} & a_{3,4} & a_{3,8} \\ a_{4,0} & a_{4,3} & a_{4,4} & a_{4,8} \\ a_{8,0} & a_{8,3} & a_{8,4} & a_{8,8} \end{pmatrix}.$$

Матрица A_J есть потоковый член локальной матрицы баланса. Локальная матрица баланса в рассматриваемом случае является симметричной. Элементы матрицы A_J в трехмерном случае вычисляются по формулам:

$$a_{0,0} = B(r_{jki} + r_{ikj} + r_{ijk}) = a_{ii},$$

$$a_{0,3} = Br_{jki} - C(r_{ikj} + r_{ijk}) = a_{4,8} = a_{6,9} = a_{10,14},$$

$$a_{0,4} = Br_{ikj} - C(r_{jki} + r_{ijk}) = a_{3,8} = a_{6,10} = a_{9,14},$$

$$a_{0,6} = Br_{ijk} - C(r_{jki} + r_{ikj}) = a_{3,9} = a_{4,10} = a_{8,14},$$

$$a_{0,8} = -Dr_{ijk} + C(r_{jki} + r_{ikj}) = a_{3,4} = a_{6,14} = a_{9,10},$$

$$a_{0,9} = -Dr_{ikj} + C(r_{jki} + r_{ijk}) = a_{3,6} = a_{8,10} = a_{4,14},$$

$$a_{0,10} = -Dr_{jki} + C(r_{ikj} + r_{ijk}) = a_{3,14} = a_{8,9} = a_{4,6},$$

$$a_{0,14} = D(r_{ijk} + r_{jki} + r_{ikj}) = a_{3,10} = a_{6,8} = a_{4,9},$$

где $r_{nml} = \lambda h_n h_m / h_l$, $h_i^x \equiv h_i$, $h_j^y \equiv h_j$, $h_k^z \equiv h_k$. Здесь λ — значение функции $\lambda(x, y, z)$ в рассматриваемой ячейке, а множители B, C, D зависят от весового коэффициента p и в случае 27-точечной аппроксимации имеют значения:

$$B = (32 - 23p)/64, \quad C = (32 - 29p)/64, \quad D = (32 - 31p)/64,$$

а в случае 19-точечной аппроксимации вычисляются по формулам:

$$B = p/8, \quad C = 1 - 15p/16, \quad D = 0.$$

В двумерном случае выражения для вычисления элементов имеют вид:

$$a_{0,0} = B(r_{ji} + r_{ij}) = a_{ii}, \qquad a_{0,3} = Br_{ji} - Cr_{ij} = a_{4,8},$$

$$a_{0,4} = Br_{ij} - Cr_{ji} = a_{3,8}, \qquad a_{0,8} = C(r_{ji} + r_{ij}) = a_{3,4},$$

где $B = 1 - 5/8p$, $C = 1 - 7/8p$, $r_{nm} = \lambda h_n/h_m$.

После аппроксимации интегралов в правой части уравнения (1) можно записать полную матричную форму уравнения в ячейке:

$$A_\omega u_\omega = f_\omega, \tag{7}$$

где A_ω — локальная матрица баланса; f_ω — локальный вектор правой части: $f_\omega = \{f_\omega^m\}$, $m \in M$. Аппроксимируя балансное соотношение вокруг всех вершин сеточной ячейки, как, например, вокруг узла с номером 0:

$$p\int_V f dV + (1-p)\int_{\overline{V}} f d\overline{V} \approx$$

$$\approx h_i h_j h_k (p(f_{i,j,k} + f_{i+1/2,j+1/2,k+1/2} + f_{i,j,k+1/2} + f_{i+1/2,j+1/2,k})/8 +$$

$$+ (1-p) f_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}),$$

получаем выражения для вычисления элементов локального вектора правой части:

$$f_0 = C(3f0 + f4 + f6 + f3) + B(f3 + f4 + f9 + f10),$$

$$f_3 = C(3f3 + f0 + f9 + f8) + B(f0 + f8 + f6 + f14),$$

$$f_4 = C(3f4 + f0 + f8 + f10) + B(f0 + f8 + f6 + f14),$$

$$f_8 = C(3f8 + f3 + f4 + f14) + B(f3 + f4 + f9 + f10),$$

$$f_6 = C(3f6 + f0 + f9 + f10) + B(f3 + f4 + f9 + f10),$$

$$f_9 = C(3f9 + f3 + f6 + f14) + B(f0 + f8 + f6 + f14),$$

$$f_{10} = C(3f10 + f4 + f6 + f14) + B(f0 + f8 + f6 + f14),$$

$$f_{14} = C(3f14 + f8 + f9 + f10) + B(f3 + f4 + f9 + f10),$$

где fn есть значение функции $f(x, y, z)$ в соответствующей вершине ячейки и $C = ph_ih_jh_k/64$, $B = (1 - 31p/32)h_ih_jh_k/4$. В двумерном случае аналогично получаем

$$f_0 = Cf0 + B(f3 + f4), \qquad f_3 = Cf3 + B(f0 + f8),$$

$$f_4 = Cf4 + B(f0 + f8), \qquad f_8 = Cf8 + B(f3 + f4).$$

Здесь $C = (1 - 7/16p)h_ih_j/4$, $B = (1 - 13/16p)h_ih_j/4$.

Локальную матрицу баланса можно представить в виде суммы трех слагаемых:

$$A_\omega = A_J + A_N + A_H,$$

где первое слагаемое есть потоковый член матрицы, второе — матрица добавок, отвечающая учету условий Неймана и Ньютона, а третье — матрица вкладов от слагаемого $\mu(x, y, z)u$ из уравнения (1). Каждая из них имеет вид, аналогичный представлению A_J.

Приведенные выражения для вычисления элементов локальной матрицы A_J суть выражения, полученные после аппроксимации уравнения Пуассона без учета коэффициента Гельмгольца и без учета граничных условий. Это целесообразно с точки зрения экономии вычислений: во-первых, существует большой класс задач, где $\mu(x, y, z) \equiv 0$, во-вторых, так как объем граничной информации и количество граничных ячеек есть величины, на порядок меньшие размерности задачи, то отдельный обход граничных ячеек с целью учета граничных условий экономичнее выяснения того, не являются ли грани сеточной ячейки граничными при обходе всех ячеек сетки подряд. При дальнейшем описании вкладов в полученную локальную матрицу баланса также имеется в виду аспект экономии объема вычислений. Поэтому и приведенные выше вычисления в сеточной ячейке производятся только в том случае, если в ней $\lambda \neq 0$.

Добавки в локальную матрицу от члена $\mu(x, y, z)u$ производятся также только при $\mu(x, y, z) \neq 0$ в ячейке сетки. Аппроксимация может быть аналогична аппроксимации правой части с той лишь разницей, что для приближения произведения $\mu(x, y, z)u$ в точке, например, $(x_i, y_j, z_{k+1/2})$ берем точное значение функции μ, а значение неизвестной u аппроксимируем полусуммой:

$$\mu(x_i, y_j, z_{k+1/2})(u_{i,j,k} + u_{i,j,k+1})/2.$$

Аппроксимацию этого произведения в средней точке ячейки можно взять как

$$\mu(x_{i+1/2}, y_{j+1/2}, z_{k+1/2})(u_{i+1,j,k} + u_{i,j+1,k} + u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k})/2.$$

Это дает вклад соответственно и в диагональные, и во внедиагональные элементы локальной матрицы. Приведем для примера вид добавок для первой строки локальной матрицы A^H (после рассмотрения баланса вокруг узла с номером 0) с учетом знаков внедиагональных коэффициентов из (5):

$$a^H_{0,0} = h_i h_j h_k (p(\mu_{i,j,k} + \mu_{i,j,k+1/2}/2)/32 - (1 - 31p/32)\mu_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}/2),$$

$$a^H_{0,3} = -h_i h_j h_k (p\,\mu_{i+1/2,j+1/2,k}/64 + (1 - 31p/32)\mu_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}/2),$$

$$a^H_{0,4} = -h_i h_j h_k (p\,\mu_{i+1/2,j+1/2,k}/64 + (1 - 31p/32)\mu_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}/2),$$

$$a^H_{0,6} = -h_i h_j h_k (p\,\mu_{i,j,k+1/2}/64 + (1 - 31p/32)\mu_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}/2).$$

Здесь для краткости введено обозначение $\mu_{i,j,k} \equiv \mu(x_i, y_j, z_k)$.

Сборку глобальной матрицы из локальных можно представить в матричном виде:

$$A \equiv \sum_{i}^{L\times M\times N} \overline{A}_i = \sum_{i=1}^{L\times M\times N} P_i^{-1} A_i P_i.$$

Здесь каждая A_i — это локальная матрица; $\overline{A}_i$ есть расширенная локальная матрица размером $N_m \times N_m$ с ненулевыми элементами, совпадающими с элементами локальной матрицы и стоящими на местах, которые соответствуют глобальным номерам узлов ячейки сетки; N_m — общее число узлов; P_i — расширяющая матрица размером $8 \times N_m$. Результирующая система линейных алгебраических уравнений имеет вид

$$Au = f. \qquad (8)$$

Учет граничных условий Неймана и Ньютона, а именно вид элементов матрицы A_N, подробно описан в [10]. Так как эти действия связаны с аппроксимацией интегралов по некоторому объему (вокруг узла или, как в нашем случае, по сеточной ячейке), то они осуществляются именно при построении локальных матриц баланса.

Кратко поясним учет граничных условий Дирихле. Он производится после обхода всех ячеек сетки, вычисления всех локальных матриц и сборки глобальной матрицы баланса. Так как в этом случае значение искомой функции u задано на некоторых участках границы, то уравнение (5) для узла с условием Дирихле принимает вид $u = u_D$, где u_D — известная величина. Кроме того, для всех узлов, связанных с таким узлом, заданное значение, умноженное на соответствующий коэффициент, вычитается из правых частей уравнений для узлов.

Глобальная матрица баланса A из системы (8), строка которой для одного узла представлена левой частью соотношения (5), является разреженной симметричной матрицей: строка матрицы содержит столько ненулевых элементов, сколько соседних узлов входит в аппроксимационный шаблон вокруг узла, номер которого равен номеру строки.

3. **Геометрическое моделирование.** Как было указано в постановке задачи, рассматриваемая трехмерная область составляется из подобластей-параллелепипедов. С точки зрения геометрического моделирования их можно назвать трехмерными примитивами. После задания каждой из подобластей требуется задать их геометрическое взаимное расположение, определяющее расчетную область.

К проблемам технологии геометрического моделирования относятся определение и адекватное описание (представление) набора геометрических примитивов (элементарных объектов) и операций над ними и собственно моделирование — применение разработанных средств для представления реальных объектов. В силу большого количества специальных вопросов, касающихся этой области, которая не является целью настоящего изложения, укажем лишь несколько общих подходов, используемых для решения практических задач.

Первый подход — использование над объектами точка, ребро, грань, оболочка так называемых эйлеровых операторов, которые претерпели бурное развитие в 80-х годах и широко использовались при разработке САПР. Основные результаты данной тематики можно найти у М. Мантюлы [11, 12].

Второй подход — направление, развитое в работах А. Реквичи [13—15] и К. Вейлера [16, 17] и связанное с моделированием твердых тел. А. Реквича называет наиболее полезными схемами для представления твердых тел две схемы: конструктивную геометрию твердых тел и граничное представление. Первая есть применение булевых операций и/или движений над заданными примитивами. Это направление часто применяется на практике при моделировании достаточно широкого класса реальных областей (см., например, [18, 19]). Вторая — граничное представление — есть определение отношений топологического соседства (смежности) над точками, ребрами, гранями и его представление в виде, например, графа.

Для описания расчетной области в рассматриваемой задаче предлагается использовать подход, который можно назвать конструктивно-граничным. Пусть область составлена из N прямоугольников, таких, что грань любого параллелепипеда не может пересекать ребро любого другого параллелепипеда, но параллелепипеды могут касаться друг друга полными гранями или частями граней или находиться один в другом. Такую область можно представить как некоторый параллелепипед (назовем его максимальным), в котором выделены параллелепипеды меньшего размера с разными физическими характеристиками и из которого, возможно, «вырезаны» другие параллелепипеды меньшего объема. Заметим, что «дырку» можно рассматривать как подобласть с коэффициентом $\lambda(x, y, z) = 0$. Свяжем с одним из углов этого максимального параллелепипеда начало прямоугольной системы координат. Тогда подобласть задается двумя узлами: с минимальными координатами и с максимальными координатами. Для определения отношений между параллелепипедами введем квадратную $N_s \times N_s$-матрицу инцидентности $\{m_{ij}\}$, $i, j = 1, \ldots, N_s$, элементы которой могут принимать следующие значения:

$m_{i,j} > 0$ — номер грани i-го параллелепипеда, касающегося снаружи j-го параллелепипеда;

$m_{i,j} < 0$ — номер грани i-го параллелепипеда, касающегося изнутри j-го параллелепипеда;

7 — i-й параллелепипед полностью включает j-й параллелепипед;

-7 — i-й параллелепипед полностью входит в j-й параллелепипед, при этом подразумевается, что грани каждого параллелепипеда пронумерованы числами 1, ..., 6 в следующем порядке: левая, передняя, правая, задняя, нижняя, верхняя. Матрица инцидентности используется для построения сеточной структуры данных, описание которой приводится в следующем разделе.

4. **Структуры данных и алгоритмы.** Входные данные необходимо преобразовать в некоторую внутреннюю структуру данных, на которой можно было бы численно реализовать вычисление глобальной матрицы баланса. Предлагается строить глобальную матрицу баланса, обходя последовательно ячейки сетки, т. е. можно представить алгоритм ее вычисления в следующем виде:

```
построение сеточной структуры данных;
do i = 1, число_ячеек_сетки
   вычисление локальной матрицы баланса;
   учет граничных условий 3-го рода и Неймана;
   добавление локальной матрицы в глобальную;
end do
учет граничных условий Дирихле;
```

В данном разделе представлена структура сеточных данных, построение которой проходит на первом этапе алгоритма вычисления глобальной матрицы и которая используется на последующих шагах алгоритма. Дальнейшие рассуждения проводятся для трехмерного случая, так как структуры данных в двумерном случае строятся аналогично, но являются более простыми.

Для вычисления локальной матрицы баланса требуется знать значения функций λ, μ, f в ячейке, поэтому вводится трехмерный $L \times M \times N$ массив $\mathrm{med}(i, j, k)$ такой, что элемент $\mathrm{med}(i, j, k)$ равняется номеру подобласти в ячейке сетки. Для того чтобы по номеру подобласти получить значения функций $\lambda(x, y, z)$, $\mu(x, y, z)$, $f(x, y, z)$ в нужной точке, предполагается, что если эти функции имеют постоянные по подобластям значения, то они хранятся в некоторых массивах, а в противном случае сами функции по номеру подобласти реализуют нужные вычисления. Массив номеров подобластей в ячейках строится следующим образом. По заданным минимальным и максимальным координатам прямоугольной подобласти и заданной сетке вычисляются минимальные $i_{\min}$ = (i_н, j_н, k_н) и максимальные $i_{\max}$ = (i_к, j_к, k_к) сеточные индексы каждой прямоугольной подобласти, и затем применяется следующая процедура:

```
do ii = 1, Ns
  do i = i_н, i_к
     do j = j_н, j_к
        do k = k_н, k_к
           med(i, j, k) = ii
```

Заметим, что этот алгоритм корректен именно в случае, когда имеется максимальный параллелепипед, внутри которого определены параллелепипеды меньшего размера, и при этом запрещена двойная вложенность параллелепипедов.

Следующий момент, требующий специальных данных, — это учет граничных условий. Для вычисления вкладов в локальную матрицу баланса от граничных условий Неймана или Ньютона требуется определить, на какой грани сеточной ячейки задано это условие. Пусть все грани подобластей в области пронумерованы подряд натуральными числами от 1 до $6 \times N_s$ (в дальнейшем будем называть такой номер грани сквозным) и граничные условия также пронумерованы подряд натуральными числами, а на каждой грани каждого параллелепипеда задан номер граничного условия (если грань внутренняя, т. е. на ней не задано граничное условие, то номер равен нулю). Вводятся трехмерные массивы: *iface* размером $(L + 1) \times M \times N$, *jface* размером $L \times (M + 1) \times N$ и *kface* размером $L \times M \times (N + 1)$, которые обозначают соответственно сквозные номера граней подобластей на перпендикулярных осям X, Y и Z гранях ячеек сетки (размеры массивов совпадают с числом сеточных граней в соответствующем направлении). Заметим, что хотя массивы трехмерные, их тип можно описать как короткое целое. Алгоритм построения массивов довольно прост: сначала в цикле по подобластям, а в нем по граням при известных сеточных индексах $i_{\min}$, $i_{\max}$ в массивы *iface*, *jface*, *kface* заносится сквозной номер граней, а затем в массивах производятся корректировки в соответствии с топологией области, что определяется при исследовании элементов матрицы инцидентности: если подобласть 1 касается подобласти 2 изнутри и является при этом «дыркой», то грань касания подобласти 1 зануляется; если же касание произошло снаружи, то зануляем часть грани на пересечении (так как выполняются условия сопряжения).

Учет граничных условий Дирихле производится при обходе только тех граней, на которых задано условие этого типа. Модификация значений правых частей в соседних узлах должна производиться только в том случае, если соседний узел сам не является узлом с условием Дирихле. Эту проверку легко осуществлять, если для всех узлов сетки введен признак «дирихлевости»: массив размером N_m с элементами, равными единице, для узлов с условием Дирихле и нулевыми для всех остальных узлов элементами. Построение такого признакового массива не представляет трудностей: в цикле по подобластям проверяем тип условия на всех гранях, и в случае грани, на которой задано условие Дирихле, имея сеточные индексы $i_{\min}$, $i_{\max}$, заносим единичное значение в элементы массива, соответствующие узлам на этой грани.

Для решения системы (8) применяется метод неполной факторизации [20] с использованием модификации Айзенштадта и ускорением итераций сопряженными градиентами. Матрица системы представляется массивами коэффициентов из уравнения (5). С учетом симметричности матрицы количество массивов в трехмерном случае равняется четырнадцати, а в двумерном — пяти. Использование представления коэффициентов системы по схеме «разреженный строчный формат» [21] позволяет сделать модуль решения независимым от вида матрицы A.

Заключение. Рассмотрены некоторые вопросы, связанные с построением структур данных и алгоритмов для численного решения одного класса задач математической физики. Предложенные подходы реализованы в виде двумерного и трехмерного пакетов подпрограмм. Результаты численных расчетов по этим программам, которые показали применимость данных подходов, можно найти в [9, 10].

В качестве направлений дальнейших разработок и обсуждений можно указать разработку трехмерных структур данных для усложнения геометрии расчетной области и применение составных сеток и разных аппроксимаций по подобластям. Кроме того, процесс моделирования физических явлений, представляемых рассматриваемым классом задач, безусловно, нуждается также в создании интерфейса «программа — пользователь», который требует специального рассмотрения и исследования. Актуальный вопрос распараллеливания алгоритмов относительно данной задачи может быть исследован на разных уровнях: параллельное вычисление локальных матриц баланса в подобласти, параллельная обработка подобластей, параллельное по подобластям решение полученной системы уравнений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ильин В. П.** Вычислительная информатика: открытие науки. Новосибирск: Наука, 1991.
2. **Ильин В. П.** О структурах данных и алгоритмов в задачах математической физики. Новосибирск, 1991. (Препр. /СО АН СССР. ВЦ; 938).
3. **Szabo B., Babuska I.** Finite element analysis. N. Y.: John Wiley & Sons, Inc., 1991.
4. **Тихонов А. Н., Самарский А. А.** Однородные разностные схемы на неравномерных сетках // ЖВМиМФ. 1962. **2**, № 5. С. 812.
5. **Смелов В. В.** Лекции по теории переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1978.
6. **Weiser A., Wheeler M. F.** On convergence of block-centered finite differences for elliptic problems // SIAM J. Numer. Anal. 1988. **25**, N 2. P. 351.
7. **Cai Z.** On the finite volume element method // Numer. Math. 1991. **58**. P. 713.
8. **Ильин В. П.** Балансные аппроксимации повышенной точности для уравнения Пуассона // СМЖ. 1996. **37**, № 1. С. 151.
9. **Gurieva Y. L., Il'in V. P.** On the finite volume technology for mixed boundary value problems // Proc. of the International Conference AMCA-95. Novosibirsk: NCC Publisher, 1995. P. 650.
10. **Gurieva Y. L., Il'in V. P.** On second order finite-volume approximations for 3D mixed boundary value problems // Bull. of the Novosibirsk Computing Center. Ser. Numerical Analysis. Novosibirsk: NCC Publisher, 1996, N 7. P. 51.
11. **Mantyla M.** A note on the modeling space of Euler Operators // Computer Vision, Graphics and Image Process. 1984. **26**, N 1. P. 45.
12. **Mantyla M., Sulonen R.** GWB: a solid modeler with Euler Operators // IEEE CG&A. 1982. **2**, N 7. P. 17.
13. **Requicha A.** Representation for rigid solids — theory, methods and systems // ACM Comput. Surv. 1980. **12**, N 4. P. 437.
14. **Requicha A., Voelcker H.** Solid modeling: current status and research directions // IEEE CG&A. 1983. **3**, N 7. P. 25.
15. **Rossignac J., Requicha A.** Constructive non-regularized geometry // Computer-Aided Design. 1991. **23**, N 1. P. 21.
16. **Weiler K.** Edge-based data structures for solid modeling in curved-surface Environments // IEEE CG&A. 1985. **5**, N 1. P. 21.
17. **Weiler K.** Boundary graph operators for non-manifold geometric modeling topology representation // Geometric Modeling for CAD Applications. North-Holland, 1988. P. 37.
18. **Tanizume Y., Yamashita H., Nakamae E.** Tetrahedral elements generation using topological mapping and space dividing for 3-D magnetic field FEM // IEEE Trans. Magn. 1990. **26**, N 2. P. 775.
19. **Юдин А. Н.** Теоретико-множественное описание геометрии трехмерной области с неоднородными средами // Труды ВЦ СО РАН. Сер. Вычислительная математика. 1996. Вып. 5. С. 128.
20. **Ильин В. П.** Методы неполной факторизации для решения алгебраических систем. М.: Наука, 1995.
21. **Писсанецки С.** Технология разреженных матриц. М.: Мир, 1988.

Поступила в редакцию 19 декабря 1996 г.