РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

АВТОМЕТРИЯ

№ 1 2000

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

УДК 681.3.06 : 518.5

В. П. Ильин

(Новосибирск)

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНО-ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рассматриваются вычислительно-информационные технологии решения междисциплинарных математических задач с широкой областью приложений на основе современных алгоритмов, включающих построение адаптивных сеток и аппроксимаций, методы расщепления, декомпозиции областей и последовательности вложенных сеток. Описываются структуры данных (геометрическая, функциональная, сеточная и алгебраическая), а также поддерживающие их вычислительные инструментарии, предназначенные для конструирования пакетов прикладных программ.

Введение. Под вычислительно-информационными технологиями (ВИТ) будем понимать совокупность соглашений, алгоритмов и структур данных, программных инструментариев, прикладных пакетов и окружений для решения заданного круга задач на вычислительной системе определенной архитектуры.

Взаимосвязь охватываемых данной дисциплиной областей знаний можно условно изобразить в виде тетраэдра, стоящего на некотором фундаменте (рис. 1).

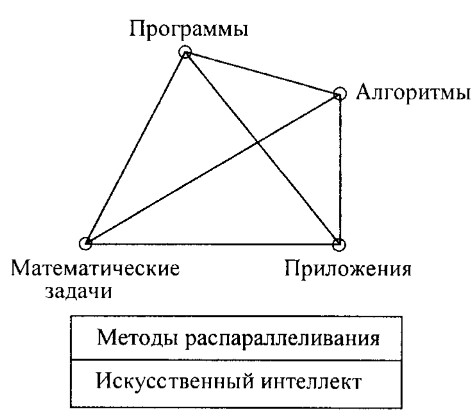

Рис. 1. Компоненты ВИТ для математического моделирования

Эта картина декларирует общую проблему математического моделирования в том плане, что:

а) рассматриваются главным образом «большие» математические задачи, требующие крупномасштабных вычислительных экспериментов, отличаемых как высокой вычислительной ресурсоемкостью, так и функциональной сложностью, зачастую связанной с междисциплинарным характером решаемых проблем; отсюда следуют два пункта:

б) высокопроизводительные расчеты должны рассматриваться в контексте распараллеливания на многопроцессорных компьютерных системах различной архитектуры с распределенной и/или общей памятью;

в) информационно-вычислительные технологии должны обладать высокой интеллектуальностью, что ставит сложную задачу вовлечения в технологическую цепочку математического моделирования таких традиционных атрибутов искусственного интеллекта, как средства принятия решений, экспертные системы и проблемно-ориентированные базы знаний.

Проблемы из пунктов «б», «в» являются самостоятельными областями и остаются за рамками данной работы. Мы также не останавливаемся на вопросах внешних интерфейсов предполагаемого технологического комплекса как с конечными пользователями, так и со штатными программными окружениями. Здесь можно ограничиться констатацией того факта, что хорошая технологическая система должна быть многопользовательской и многоплатформенной.

Наша главная цель – классификация и анализ структур данных и алгоритмов, которые могли бы обеспечить эффективное решение широкого круга математических задач для многочисленных приложений, включая междисциплинарные проблемы.

Рассматриваются прямые и обратные, или оптимизационные, математические постановки. Прямая задача определяется размерностью и геометрией своей расчетной области, в различных подобластях которой задаются решаемые системы дифференциальных и/или интегральных уравнений (или эквивалентные вариационные соотношения). Каждое функциональное уравнение (соотношение) характеризуется своим типом и видом участвующих коэффициентов. Формулировка краевой задачи замыкается граничными условиями и начальными данными (в нестационарном случае). Оптимизационные задачи (включая обратные) заключаются в нахождении таких решений параметризованных или недоопределенных прямых задач, которые удовлетворяют поставленным дополнительным условиям. В типичном случае требуется минимизировать целевой функционал, определенный на искомом решении, при заданных линейных и/или нелинейных ограничениях.

Численные методы решения прямых задач включают этапы дискретизации расчетной области (построение сетки), аппроксимации уравнений (методы конечных элементов (МКЭ), конечных разностей (МКР), конечных объемов (МКО)), решения линейных и нелинейных алгебраических систем высокого порядка. Среди современных подходов здесь следует отметить такие эффективные, но достаточно сложные алгоритмические структуры, как декомпозиция областей, методы расщепления и адаптивные многосеточные технологии. В оптимизационных задачах эти процедуры многократно повторяются на различных шагах алгоритмов математического программирования.

Такой класс задач и алгоритмов охватывает самые разные прикладные области (электрофизика, микроэлектроника, теплофизика и геофизика, химические технологии, экология и т. д.).

Основная идея рассматриваемого подхода состоит в том, что математические постановки описываются формально конечным набором универсальных и гибких структур данных (СД): геометрической (ГСД), функциональной (ФСД), сеточной (ССД), алгебраической (АСД) и графической, а стадии вычислительного процесса представляются последовательным выполнением модулей, формируемых из совокупности объектно-ориентированных алгоритмических инструментариев.

Геометрическая и функциональная СД обеспечивают информационное отображение всего многообразия математических постановок, а сеточная и алгебраическая предназначены для гибкой и эффективной реализации численных методов. Основные информационные структуры существуют, по крайней мере, в трех представлениях: числовые данные ориентированы на экономичное исполнение вычислительных модулей в пакетах прикладных программ, пользовательский интерфейс предполагает гибкую операбельность и «дружественность» изобразительных средств, а графические форматы должны обеспечивать экономичную обработку и наглядную визуализацию исходных данных и результатов расчетов.

Различные вычислительные этапы реализации математического моделирования формально могут рассматриваться как преобразования одних структур данных в другие [1]. Например, начальная стадия препроцессирования исходных данных есть перевод ГСД и ФСД из текстово-графических форматов, получаемых в результате экранного ввода, в числовые форматы. Дискретизация краевой задачи есть преобразование ГСД + ФСД $\to$ ССД, а этап аппроксимации функциональных уравнений является фактически алгебраизацией задачи ССД$\to$ АСД. Решение систем алгебраических сеточных уравнений с разреженными матрицами высокого порядка есть специальная область вычислительной алгебры, где наибольшая эффективность достигается за счет применения предобусловливателей, декомпозиции областей и многосеточных подходов, успешная реализация которых требует гибких АСД. Некоторые варианты структур данных для двумерных краевых задач рассматривались в [2].

Создание «большой» вычислительно-информационной технологии, в том числе пакета прикладных программ (ППП), всегда сопряжено с поиском «золотой середины» между универсальностью и экономичностью. Достижение компромисса здесь представляется возможным на основе использования многоверсионности структур данных одинакового или близкого функционального содержания, с одновременной разработкой «переходников» от одних форматов СД к другим. Это не просто позволяет использовать методы, наиболее эффективные в отдельных частных случаях, т. е. построение метаалгоритмов с контекстным применением, но и вносит существенный вклад в решение извечной проблемы переиспользования программ, написанных разными авторами и в разных условиях.

1. **Геометрические объекты и структуры данных.** Решение $u(x)$ математической задачи ищется в расчетной области, представляющей собой замыкание $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$, где Ω – открытая область, в которой задано решаемое уравнение

$$Lu = f, \quad x \in \Omega, \tag{1}$$

а Γ – граница, на которой задаются краевые условия

$$lu = g, \quad x \in \Gamma. \tag{2}$$

Здесь u есть в общем случае вектор-функция; L и l – операторы решаемого функционального уравнения и граничных условий соответственно; $x = =(x_1, ..., x_d)$ – точка d-мерного вещественного пространства R^d. Область $\Omega \subset R^d$ предполагается ограниченной (одно-, дву- или трехмерной, т. е. $d = 1, 2$ или 3), а Γ есть $(d-1)$-мерное многообразие, одно- или многосвязное. Сама расчетная область $\bar{\Omega}$ предполагается односвязной, так как в противном случае задачи (1), (2) распадаются на независимые подзадачи.

Задание геометрии расчетной области заключается в однозначном описании ее составляющих объектов (возможно, с использованием локальных систем координат, задаваемых указанием своего типа, положения начала координат и углов наклона осей относительно «глобальной» системы координат), а также их взаимосвязей. В трехмерном случае к элементарным, или базовым, объектам относятся:

точки – граничные вершины или вспомогательные точки, определяемые своими координатами; точка может быть определена также как пересечение двух линий или трех поверхностей, или же задана совокупностью уравнений (и возможно, неравенств);

линии – прямые или кривые различных порядков, замкнутые или разомкнутые, плоские или пространственные; каждая линия определяется явно своим типом, т. е. видом описывающего ее уравнения (возможно, в локальной системе координат) и значениями коэффициентов; в трехмерном случае линия может быть определена неявно как общее множество точек двух пересекающихся поверхностей и описана системой соответствующих двух уравнений (для определенности с возможными дополнительными условиями); допускается также неявное задание линии с помощью точек или других линий (например, окружность с заданными центром и радиусом, общая касательная к двум заданным окружностям, определение окружности по трем точкам или по условию сопряжения двух прямых при заданном радиусе);

отрезки – прямолинейные или криволинейные – определяются номером (или идентификатором) своей линии, а также указателями (номерами) двух точек, задаваемых как начало и конец отрезка; возможно также параметрическое задание отрезка с указанием типа соответствующего описания, значений коэффициентов и границ изменения параметров;

ломаная, или ветвь, – это односвязная совокупность заданной последовательности прямолинейных или криволинейных отрезков; замкнутая ломаная называется контуром;

поверхности определяются явным образом своими типами и коэффициентами уравнений (возможно, в локальных системах координат); допускается также неявное описание поверхностей с помощью точек или линий (например, сфера заданного радиуса с указанным центром или поверхность вращения, идентифицируемая осью и образующей);

поверхностные сегменты – объекты, определяемые идентификаторами (номерами) своей поверхности, ограничительных линий и, возможно, вершин; допускается также параметрическое задание сегмента указанием его типа, значений коэффициентов и границ изменений параметров;

набор поверхностных сегментов – это заданная односвязная или многосвязная совокупность «простых» поверхностных сегментов (т. е. рекурсии вложенных наборов поверхностных сегментов не рассматриваются);

подобласть Ω_k – это открытая область, ограниченная своей границей Γ_k, вместе с которой она образует замыкание подобласти $\overline{\Omega}_k = \Omega_k \cup \Gamma_k$; граница определяется набором составляющих ее сегментов и может быть одно- или многосвязной;

составная подобласть – это заданная односвязная или многосвязная совокупность подобластей (только «простых», т. е. не допускается многократная вложенность составных подобластей).

Расчетная область есть замыкание «самой большой» составной подобласти (очевидно, что в простейшем случае расчетная область состоит из одной подобласти, и тогда специального описания последней не требуется).

Отметим еще такое понятие, как базовые координаты по каждой из осей глобальной системы координат, указаниями на номера которых задаются координаты всех точек, участвующих в построении расчетной области. И наконец, для глобальной и всех локальных систем координат указываются их типы: декартова, цилиндрическая, сферическая или специальные, в последнем случае с заданием формул для определения независимых переменных.

Геометрическая структура данных должна содержать полную информацию для однозначного описания всех базовых объектов и идентификации расчетной области вместе со всеми подобластями.

Топологические свойства геометрических объектов могут быть описаны следующим образом. Подчеркнем, что открытая область Ω есть объединение непересекающихся подобластей, т. е. $\Omega = \bigcup\limits_k \Omega_k$, $\Omega_k \cap \Omega_{k'} = 0$ при $k \neq k'$, где $k, k' = 1, \ldots, K$. Граница k-й подобласти может быть представлена как объединение смежных границ с примыкающими подобластями: $\overline{\Omega}_k = \Omega_k \cup \Gamma_k$, $\Gamma_k = \bigcup\limits_l \Gamma_{k,l}$, $\overline{\Omega}_k \cap \overline{\Omega}_l = \Gamma_{k,l} = \Gamma_{l,k} \neq 0$. Если внешнее пространство по отношению к Ω обозначить формально как подобласть $\Omega_0 = R^n / \overline{\Omega}$, то внешняя граница расчетной области представляется как $\Gamma = \Gamma^{(e)} = \bigcup\limits_k \Gamma_{k,0}$, а граница каждой подобласти может быть разбита на ее внешнюю и внутреннюю часть, т. е. $\Gamma_k = \Gamma_k^{(e)} \cup \Gamma_k^{(i)}$, $\Gamma_k^{(e)} = \Gamma_{k,0}$, $\Gamma_k^{(i)} = \bigcup\limits_{l \neq 0} \Gamma_{k,l}$. Предполагается, что все граничные сегменты $\Gamma_{k,l}$ каким-то образом упорядочены и пронумерованы одним индексом, т. е. $\Gamma_{k,l} = \Gamma'_s$, $s = s(k,l) = 1, \ldots, S$.

Совокупность всех внутренних границ подобластей будем называть внутренней границей расчетной области и обозначать как

$$\Gamma^{(i)} = \bigcup_{k,\, l \neq 0} \Gamma_{k,e} = \bigcup_k \Gamma_k^{(i)}.$$

В трехмерном случае пересечения смежных границ $\Gamma_{k,l'}$ и $\Gamma_{k,l''}$, $l' \neq l''$, будем называть граничными ребрами и обозначать через R_m, $m = 1, \ldots, M$. Соответственно точки пересечения разных граничных ребер называем граничными вершинами и обозначаем через P_t, $t=1,\dots,T$. Замкнутая расчетная область в целом является объединением своих составляющих объектов:

$$\overline{\Omega}=\bigcup_k \Omega_k \bigcup_s \Gamma'_s \bigcup_m R_m \bigcup_t P_t .$$

Топологическая структура данных может быть представлена следующими квадратными симметричными целочисленными матрицами:

– матрица инцидентности «подобласть–подобласть» размерностью $K+1$:

$$A^{SD}=\{a^{SD}_{k,k'}\},$$

внедиагональные ненулевые элементы $a^{SD}_{k,k'}$ которой суть номера s смежных границ Γ'_s между соответствующими примыкающими подобластями Ω_k и $\Omega_{k'}$; диагональные элементы содержат адреса информации о «своей» подобласти в ФСД;

– матрица инцидентности «граница–граница» порядка S:

$$A^{BB}=\{a^{BB}_{s,s'}\},$$

где внедиагональные ненулевые элементы $a^{BB}_{s,s'}$ представляют номера граничных ребер R_m, по которым пересекаются границы Γ'_s и $\Gamma'_{s'}$; диагональные элементы содержат адреса информации о «своих» граничных сегментах;

– матрица инцидентности «ребро–ребро» порядка M:

$$A^{RR}=\{a^{RR}_{m,m'}\},$$

где внедиагональные ненулевые элементы $a^{RR}_{m,m'}$ суть номера t граничных вершин P_t, являющихся точками пересечения граничных ребер R_m и $R_{m'}$, а диагональные элементы содержат адреса информации о граничных отрезках, составляющих соответствующие ребра.

Поскольку данные матрицы инцидентности являются, как правило, разреженными, то их хранение целесообразно в разреженном строчном формате [2] (для каждой строки матрицы указывается количество ненулевых элементов, их номера и значения).

Подчеркнем, что в целях гибкого геометрического моделирования, включающего операции редактирования и модификаций, допускается избыточность (но согласованная!) информации со средствами перекрестного определения базовых объектов через другие объекты различной размерности, например, линий через точки или поверхности, и наоборот. Это означает, что ГСД должна поддерживать такие геометрические операции, как, например, необходимые модификации объектов, связанных сдвигом одного граничного отрезка. В общем случае различные операции геометрических модификаций должны определять свои активные изменяемые параметры и пассивные параметры, а также характер зависимостей между ними.

Кроме базовых объектов, ГСД может включать составные объекты или фигуры, например, параллелепипед, определяемый своими размерами и положением в пространстве.

Естественными инструментариями для создания технологий геометрического моделирования являются объектно-ориентированные средства, поддерживающие свойства наследования и развитие системы на основе доопределения новых типов объектов.

Примером конкретного представления ГСД является описанная в [3] внутренняя (числовая) структура данных для двумерных расчетных областей. Вопросы общего и частного характера по созданию трехмерных геометрических структур рассматриваются в огромном количестве работ (см., например, [4, 5] и приведенную там библиографию).

2. **Функциональные объекты и структуры данных.** Описание математической постановки задачи при уже заданной геометрии расчетной области состоит из следующих основных компонент:

– формулировка решаемых функциональных уравнений или других соотношений; в качестве содержательного примера можно привести систему дифференциальных уравнений второго порядка:

$$D\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = \nabla A \nabla \bar{u} + B\nabla \bar{u} + C\bar{u} = \bar{f}, \qquad x \in \Omega, \tag{3}$$

где $\bar{u} = (u_1, \ldots, u_n), \bar{f} = (f_1, \ldots, f_n)$ суть вектор-функции, ∇ есть оператор градиента в декартовой или какой-либо другой системе координат, а A, B, C, D – некоторые матрицы порядка *n*, элементы которых – это или постоянные величины, или функции независимых переменных или искомых решений; в зависимости от вида матричных коэффициентов векторное уравнение (3) описывает стационарные или нестационарные процессы в линейной или нелинейной постановке в огромном числе приложений;

– граничные условия для искомых решений; конкретизацией (2) для уравнения (3) может быть смешанная краевая задача, когда граница расчетной области Γ состоит из частей Γ_D, Γ_N, на которых задаются условия разных типов:

$$\bar{u} = \bar{g}_D, \quad x \in \Gamma_D; \qquad D_N \bar{u} + A_N \nabla_n \bar{u} = \bar{g}_N, \quad x \in \Gamma_N, \tag{4}$$

где D_N и A_N – матрицы (в общем случае прямоугольные, так как на разных участках границы может быть задано разное число условий); $\bar{g}_D$, $\bar{g}_N$ – вектор-функции, элементы которых или известны, или зависят от искомых решений (∇_n – оператор дифференцирования по направлению внешней нормали к границе);

– начальные данные (для нестационарных задач, т. е. $D \neq 0$) в рассматриваемом примере (3) с производной первого порядка по временной переменной *t* выглядят просто:

$$\bar{u}(x, t=0) = \bar{u}^0(x), \qquad x \in \Omega, \tag{5}$$

где $\bar{u}(x)$ – заданная вектор-функция; при этом решение ищется на ограниченном отрезке времени $0 < t \le T < \infty$.

Такая примерная начально-краевая задача (3)–(5) описывает прямую постановку, которая переходит в обратную, или оптимизационную, если рассматриваемые данные (и решение) зависят от варьируемых параметров $\bar{p} = (p_1, \ldots, p_m)$. Для этих параметров требуется найти значения, минимизирующие целевой функционал

$$\Phi_0(\bar{u}(x, t, \bar{p}_0)) = \min_{\bar{p}} \Phi_0(\bar{u}(x, t, \bar{p})) \tag{6}$$

при дополнительных линейных или нелинейных ограничениях:

$$p_k^i \le p_k \le p_k^s, \quad k = 1, \ldots, m_1;$$
$$\Phi_l(\bar{u}(x, t, \bar{p})) \le r_l, \quad l = 1, \ldots, m_2, \tag{7}$$

где m_1, m_2, p_k^i, p_k^s, r_l – заданные числа, а Φ_l – некоторые ограничительные функционалы.

С точки зрения эффективной реализации алгоритмов большое значение имеет системная классификация решаемых задач по виду исходных уравнений, краевых условий и геометрии расчетной области: стационарные и нестационарные задачи, постоянные или переменные (в том числе нелинейные) коэффициенты, тип решаемых уравнений (эллиптические, параболические или смешанные, самосопряженные или несамосопряженные), вид граничных условий (1-го, 2-го или 3-го рода или смешанные), прямолинейные или криволинейные (в том числе гладкие или кусочно-гладкие) границы, возможный сингулярный характер решений.

Важно подчеркнуть, что функциональные данные имеют прямую связь с геометрическими. Коэффициенты и правая часть уравнения (3) могут иметь различные представления и свойства в разных подобластях расчетной области, а части границы Γ_D и Γ_N – различные сегменты, на которых заданы разные конкретные условия (4).

Отсюда главное требование к функциональной структуре данных заключается в необходимости информационной поддержки рассматриваемого многообразия типов объектов, их представлений, свойств, взаимосвязей и возможных модификаций.

Среди основных компонент ФСД можно назвать следующие:

1. Общий тип решаемой задачи (например, диффузия, магнитостатика, тепломассоперенос, упругость и т. д.), который определяет состав членов решаемых уравнений и характер участвующих коэффициентов.

2. Размерность расчетной области и используемая система координат.

3. Тип краевой задачи (например, задача Дирихле, Неймана, третья краевая или смешанная, линейные или нелинейные граничные условия).

4. Представление коэффициентов уравнений (в зависимости от содержания п. 1) вместе с их значениями или описывающими формулами, или со ссылками на вычисляющие их процедуры; данные описания при необходимости формулируются отдельно для каждой из подобластей с соответствующими ссылками.

5. Аналогичные представления для коэффициентов краевых условий (4) с привязкой к конкретным участкам границ Γ_D и Γ_N.

6. Оптимизационные данные: описание варьируемых параметров p_k, т. е. ссылки на соответствующие переменные из предыдущих разделов ФСД (в принципе меняться может любая величина, например, координата какой-либо точки границы, коэффициент решаемого уравнения или краевого условия), а также их возможные начальные значения p_k^0 и допустимые границы изменений p_k^i, $p_k^s, k = 1, \ldots, m$; кроме того, должны быть даны ссылки на процедуры, вычисляющие целевой и ограничительные функционалы.

3. **Сеточные объекты и структуры данных.** Чтобы представить многообразие рассматриваемых сеток, перечислим ключевые слова, характеризующие их допустимые виды: иерархические, вложенные, составные, согласо-

ванные и несогласованные, регулярные и нерегулярные, локально-модифицированные, равномерные и неравномерные, треугольные и четырехугольные (в двумерном случае), прямолинейные и криволинейные.

Формально сетка (в трехмерном случае) представляет собой взаимосвязанную совокупность своих объектов: конечных объемов, или элементов, их граней, ребер и узлов. Односвязное объединение сеточных элементов Ω^e будем называть сеточной областью: $\Omega^h = \bigcup_l \Omega_l^e$, а ее замыкание обозначим через $\overline{\Omega}^h = \Omega^h \cup \Gamma^h$, где граница Γ^h есть множество (не обязательно односвязное) граничных граней. Сеточная расчетная область $\overline{\Omega}^h$ включает в себя расчетную область $(\overline{\Omega} \subset \overline{\Omega}^h)$ и может состоять из сеточных подобластей $\left(\Omega^h = \bigcup_k \Omega_k^h\right)$, причем последние могут соответствовать или не соответствовать исходным геометрическим подобластям Ω_k.

Важным моментом в дискретизации расчетной области является соотношение геометрических Γ и сеточных Γ^h границ, которые в идеальном случае должны быть совпадающими, что несложно обеспечить только в простейших случаях. Если граница Γ криволинейна, то будем считать, что граничные узлы из Γ^h лежат на Γ, а граничные ребра и грани или совпадают, или аппроксимируют соответствующие участки исходной границы (например, отрезок криволинейной дуги заменяется прямолинейным отрезком).

Для дискретизации границ, главным образом в сложных случаях, будем применять локально-модифицированные сетки. Это означает, что первоначально в расчетной области строится исходная сетка $\widetilde{\Omega}^h$, граница $\widetilde{\Gamma}^h$ которой не совпадает с Γ. Затем околограничные узлы из $\widetilde{\Omega}^h$ сдвигаются по каким-то правилам при минимальном изменении топологии $\widetilde{\Omega}^h$ на границу Γ (в первую очередь в ее угловые и реберные точки).

Сеточная расчетная область $\overline{\Omega}^h$ может быть простой и составной, последний случай относится к наличию более чем одной сеточной подобласти $\Omega_k^h, k = 1, \ldots, K_h > 1$. Для сеточной подобласти определяется своя сеточная граница $\Gamma_k^h = \Gamma_k^e \cup \Gamma_k^i$, где $\Gamma_k^e = \Gamma^h \cap \Gamma_k^h$ и Γ_k^i – соответственно внешняя и внутренняя граница Ω_k^h. Если через $\Gamma_{k,k'}^i$ обозначить часть внутренней границы Γ_k^i, примыкающую к соседней сеточной подобласти с номером $k' \neq k$, то можно записать $\Gamma_k^i = \bigcup_{k'} \Gamma_{k,k'}^i$, где суммирование проводится по всем сеточным подобластям $\Omega_{k'}^h$, смежным с Ω_k^h. Отметим, что в Γ_k^i и Γ_k^e, кроме «граневых» узлов, входят еще граничные узлы, лежащие на граничных ребрах и в вершинах Ω_k^h, которые инцидентны более чем двум подобластям.

Если $\Gamma_{k,k'}^i = \Gamma_{k',k}^i$, т. е. граничные узлы двух сеточных подобластей Ω_k^h, $\Omega_{k'}^h$ совпадают, то соответствующие сетки называются согласованными, а в противном случае – несогласованными.

Сеточную область, или сетку $\overline{\Omega}_k^h$, будем называть регулярной, если она образована с помощью семейств однотипных координатных линий, имеет топологически подобные конечные объемы и простые формулы для определения инцидентности (или нумерации, или же адресации) смежных элементов, ребер и узлов. В противном случае сетку называем нерегулярной, или хаотической. Характерная для нее информационная сложность объясняется тем, что взаимосвязи между сеточными объектами описываются только полным перечислением всех необходимых адресов и ссылок. Значительный опыт по построению и организации нерегулярных сеток описан в обширной литературе по МКЭ (см., например, [6] и библиографию).

Простейшим примером регулярной сетки в двумерном случае является прямоугольная сетка, образованная двумя семействами координатных линий, параллельных осям x, y декартовой системы координат:

$$x_{i+1} = x_i + h_i^x, \quad i = 0, 1, \ldots, I_j; \qquad y_{j+1} = y_j + h_j^y, \quad j = 0, 1, \ldots, J_i. \quad (8)$$

Если шаги сетки одинаковы ($h_i^x = h_x$, $h_j^y = h_y$), то она называется равномерной, а в противном случае – неравномерной. Сеточную область Ω_k^h будем называть регулярной прямоугольной, если в (8) для всех i, j имеем $I_j = I$, $J_i = J$. Прямолинейная или криволинейная сетка называется топологически эквивалентной прямоугольной, если образована, как и (8), двумя семействами координатных линий, и с помощью аффинных преобразований может быть трансформирована в прямоугольную сетку с сохранением топологических свойств (характерный пример – сеточный прямоугольник в полярной системе координат). Две сеточные подобласти Ω_k^h, $\Omega_{k'}^h$ являются топологически эквивалентными, если у них совпадают все соотношения инцидентности, т. е. каждому элементу из Ω_k^h взаимооднозначно соответствует элемент из $\Omega_{k'}^h$, то же самое относится к их ребрам, вершинам, а также к смежным элементам.

Под иерархическими вложенными сетками понимаются такие совокупности сгущающихся сеток, в которых все узлы редких сеток остаются узлами более густых сеток. Для простоты рассматриваем только трехуровневые (или двухуровневые) сетки, для которых вводим определения редкой, средней и густой сеток, или 1-го, 2-го и 3-го уровней. Правила сгущения сеток могут быть разными, и одним из простейших является метод бисекции. В этом случае новые узлы сетки $(k+1)$-го уровня являются серединами ребер сетки k-го уровня плюс, возможно, внутренними точками «больших» конечных элементов. Новые сеточные ребра образуются соединениями новых узлов, а d-мерный конечный объем (элемент) при этом делится на 2^d новых топологически подобных элемента. Может применяться также неполная бисекция, когда делится пополам не каждое ребро сгущаемой сетки и соответственно конечный объем делится на меньшее чем 2^d число элементов (примером может быть сгущение прямоугольной сетки только в одном из координатных направлений). Примеры полной и неполной бисекции треугольного и четырехугольного элементов приводятся на рис. 2.

Более сложными логически являются топологически неэквивалентные деления конечных элементов: четырехугольник делится на треугольники и т. п. Примеры таких делений приводятся на рис. 3.

Сгущение регулярной сеточной подобласти Ω_k^h будем называть регулярным, если оно осуществляется по одинаковым правилам для всех ее элементов, и нерегулярным в противном случае.

Описанная выше локальная модификация сетки осуществляется обязательно (если только граница расчетной области не согласована с сеткой, т. е. пересекает сеточные линии лишь в узлах) на верхнем (первом) уровне, т. е.

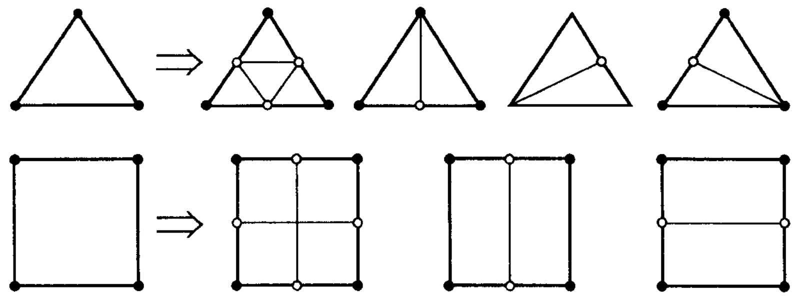

Рис. 2. Примеры полной и неполной бисекции треугольного и четырехугольного элементов

для редкой сетки. Для сгущающихся вложенных сеток на более низких уровнях проводить локальную модификацию не требуется, так как их конечные объемы пересекаться границей области не могут.

Сеточная структура данных должна быть, во-первых, полна, т. е. поддерживать однозначное определение всех сеточных объектов и их взаимосвязей, и, во-вторых, экономична в смысле обеспечения быстрого ее анализа при реализации этапов аппроксимации задачи.

Для составной сетки ССД содержит информацию о макросетке, т. е. о совокупности сеточных подобластей Ω_k^h (которые можно считать макроэлементами), включая соотношения инцидентности ее ребер, граней и вершин. Каждое из «макроребер» (как и «макрогрань» в трехмерном случае) представляет собой подмножество узлов и ребер из Ω^h.

Для простой сеточной расчетной области, как и для каждой Ω_k^h при $K_h > 1$, ССД содержит информацию «микроуровня», т. е. об «обычных» сеточных объектах. Эти данные в общем случае делятся на поузловые, пореберные, пограневые и поэлементные. Так, например, для каждого элемента (конечного объема) должны быть определены номер его расчетной подобласти, а также номера всех граней и узлов. Соответственно для каждой сеточной грани должен быть задан или номер граничного сегмента, или признак ее «внутренности», т. е. принадлежности $\Gamma_k^{\prime}$.

Таким образом осуществляется связь ССД с ГСД и ФСД, что позволяет при построении локальных матриц баланса в МКО (или матриц жесткости в МКЭ) в поэлементной технологии определять типы решаемых уравнений, краевых условий, а также значения их коэффициентов (см. [7, 8]). Кроме того, наличие макро- и микроуровней информационных связей помогает по выполнении этапа аппроксимации формировать гибкие алгебраические структуры данных, позволяющие реализовывать, например, эффективные методы декомпозиции областей, различные поточечные и блочные алгоритмы решения систем алгебраических сеточных уравнений.

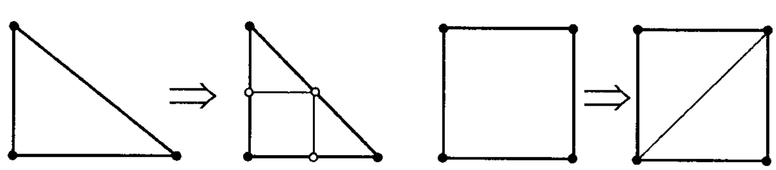

Рис. 3. Примеры топологически неэквивалентных делений конечных элементов

Естественно, при использовании многосеточных методов на иерархических сетках рассмотренные информационные связи формируются и используются во время аппроксимационных процедур на каждой из подсеток.

Мы не будем останавливаться на особенностях конструирования динамических ССД, например, при использовании адаптивных сеток для решения сингулярных, нестационарных или оптимизационных задач. Отметим только, что здесь наиболее просто реализуются динамические сетки без нарушения их топологии. В общем же случае проблема информационной поддержки движущихся сеток достаточно сложна и напрашивающийся подход – это классификация наиболее характерных ситуаций и реализация «поштучно» отдельных частных случаев. Наибольший опыт имеется в задачах газодинамики, сопровождаемых резкой сменой режимов течений (см., например, [9]).

4. **Алгебраические задачи, методы и структуры данных.** Если этап аппроксимации исходной начально-краевой задачи пройден и исходная задача алгебраизирована, то далее главной проблемой является выполнение векторно-матричных операций. При всем их разнообразии здесь формально можно выделить достаточно ограниченный класс задач, введя обозначения f_h, u_h, A_h соответственно для известной и неизвестной сеточных функций, определенных в узлах сетки, а также для матрицы сеточного оператора, определяющего на дискретном уровне все исходные функциональные преобразования и соотношения. Подчеркнем тот принципиальный момент, что матрица A_h имеет очень высокий порядок и является сильно разреженной, а ее ключевая характеристика – портрет матрицы, определяющий расположение ненулевых элементов. Сеточным эквивалентом последнего понятия является сеточный шаблон, указывающий для каждого узла его связи с соседними узлами, а другой близкий по смыслу алгебраический термин – это граф матрицы.

Итак, основные алгебраические операции заключаются в следующем:

– вычисление рекуррентных соотношений:

$$u_h^n = A_h u_h^{n-1} + f_h, \qquad n = 1, 2, \ldots, \tag{9}$$

– решение систем уравнений:

$$A_h u_h = f_h, \tag{10}$$

– нахождение собственных чисел λ_p и соответствующих собственных векторов z_h^p:

$$A_h z_h^p = \lambda_p z_h^p, \qquad p = 1, 2, \ldots . \tag{11}$$

Решение задач (10), (11) разбивается, в свою очередь, на подэтапы, связанные с умножением векторов на промежуточные матрицы или решением вспомогательных подсистем с треугольными, трехдиагональными или другими простыми матрицами.

В соотношениях (9)–(11) элементы матрицы A_h и вектора f_h могут зависеть от искомого решения u_h (нелинейные задачи), и тогда алгоритмы включают многократное решение соответствующих линейных задач с организацией итерационных процессов «по нелинейности».

В динамических задачах данные алгебраические операции могут выполняться на каждом шаге по времени, а сама временная переменная t при этом может рассматриваться формально как параметр ($A_h = A_n(t)$, $f_h = f_n(t)$), меняемый дискретно от своего начального до конечного значений.

В оптимизационных задачах, кроме того, алгебраические объекты зависят от варьируемых параметров исходных данных в ГСД и ФСД, что приводит к дополнительным повторным реализациям соотношений (9)–(11) в процессе минимизации целевого функционала.

В различных явных или неявных сеточных алгоритмах (см., например, [10]) построение адаптивных схем связано с выбором той или иной упорядоченности узлов, что определяет конкретную структуру матрицы A_h и организацию последовательности вычислений. Например, в неявных методах переменных направлений для прямоугольной сетки на различных стадиях необходимо решать одномерные задачи вдоль разных координатных линий. Аналогичные подходы широко применяются в методах расщепления по физическим процессам, когда полная матрица A_h разбивается на сумму матриц более простой структуры для выделения более простых алгебраических подзадач. Отметим также, что различные прямые и итерационные методы решения задач (10), (11) связаны формально с разложением A_h в произведение легко обратимых матричных множителей. Более сложные ситуации возникают в методах декомпозиции области, основанных на последовательности решений выделяемых независимых подсистем в подобластях, при различных реализациях информационных обменов между ними и возможных специальных операциях на разделительных границах.

Для технологической поддержки такого типа комплексных методов требуются развитые средства представления матриц и векторов в блочном, аддитивном и мультипликативном видах, с возможностями описаний и реализаций различных вычислительных стратегий. Формально это записывается просто:

$$A_h = \{A^h_{k,l},\ k, l = 1, \ldots, N_B\} = \sum_{m=1}^{N_a} A^h_m = \prod_{n=1}^{N_m} A^h_n,$$

а конкретные структуры данных для матричных компонент и соответствующего представления векторов могут быть самыми разными. Например, векторы u^h, f^h могут быть разбиты на подвекторы, соответствующие внутренним узлам сеточных подобластей Ω^h_k и внутренних границ $\Gamma^h_{k,k'}$. Если при этом определены как информационные объекты соответствующие матричные блоки $A^h_{k,l}$ с простыми средствами доступа к своим элементам, то это позволяет экономично реализовать нужные подзадачи и проблему в целом.

Отметим, что для обеспечения выбора подходящего алгоритма или быстрого подключения нового алгебраического метода АСД должна включать разнообразные представления своих объектов и средства возможного их перевода из одной формы в другую. Многочисленные универсальные и специализированные матричные форматы достаточно хорошо описаны, например, в [5].

Заключение. Подчеркнем два основных тезиса данной работы, следующих из современных тенденций развития математического моделирования и численных методов. Во-первых, «большие» задачи, в том числе междисциплинарные и оптимизационные, связаны не только с критическими объемами вычислительных ресурсов, но и со сложной входной информацией, требующей гибкого и оперативного отображения в структурах данных. Во-вторых, наиболее эффективные алгоритмы основаны на применении иерархических нерегулярных сеток, декомпозиции областей и адаптивных принципах, экономичная и быстрая реализация которых также предъявляет высокие требования к качеству структур данных.

Таким образом, развитие новых вычислительно-информационных технологий является главным условием успешности вычислительного эксперимента, который должен самодостаточно обеспечить адекватность применяемых моделей, гарантированную точность численных результатов и экономичность расчетов. Разработка гибких структур данных и поддерживающих их вычислительных инструментариев в методологическом плане является углублением принципов модульного программирования и построения ППП (см., например, [11]).

Что касается технологий программирования, то здесь, по-видимому, основным средством повышения производительности и уровня автоматизации построения алгоритмов является объектно-ориентированное программирование.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 99-01-00579, № 99-07-90422).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ильин В. П.** О структурах данных и алгоритмов в задачах математической физики. Новосибирск, 1991. (Препр. /ВЦ СО РАН; 938).
2. **Писсанецки С.** Технология разреженных матриц. М.: Мир, 1988.
3. **Гурьева Я. Л., Ильин В. П., Ларин М. Р.** Внутренняя структура данных в двумерных краевых задачах. Новосибирск, 1997. (Препр. /ИВМиМГ СО РАН: 1090).
4. **Юдин А. Н.** Теоретико-множественное описание геометрии и дискретизация трехмерной области с неоднородными средами // Труды ВЦ СО РАН. Сер. Вычислительная математика. 1996. № 5. С. 128.
5. **Препарата Ф., Шеймос М.** Вычислительная геометрия. Введение. М.: Мир, 1989.
6. **Kozlovsky G.** Solving partial differential equations using recursive grids // Appl. Num. Math. 1994. **14**. P. 165.
7. **Gurieva Y. L., Il'in V. P.** On the finite volume technology for mixed boundary value problems // Advanced Mathematics, Computations and Applications: Proc. Internat. Conf. AMCA-95, Novosibirsk, Russia, 20–24 June, 1995. Novosibirsk: NCC Publ., 1995. P. 550.
8. **Babuska I., Szabo B.** Finite Element Analysis. N. Y.: John Wiley & Sons, Inc., 1991.
9. **Лисейкин В. Д., Петренко В. Е.** Адаптивно-инвариантный метод численного решения задач с пограничными и внутренними слоями. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1981.
10. **Марчук Г. И.** Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1980.
11. **Ершов А. П., Ильин В. П.** Пакеты программ как методология решения прикладных задач // Пакеты прикладных программ. Проблемы и перспективы. М.: Наука, 1982. С. 1.

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН

Поступила в редакцию
2 апреля 1999 г.