На правах рукописи

Чернышенко Алексей Юрьевич

Технология построения адаптируемых многогранных сеток и численное решение эллиптических уравнений 2-го порядка в трехмерных областях и на поверхностях

05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2013

Работа выполнена в *Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики Российской академии наук.*

Научный руководитель:	*Василевский Юрий Викторович, доктор физико-математических наук, доцент.*
Официальные оппоненты:	*Гасилов Владимир Анатольевич, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук,* *Финогенов Сергей Александрович, кандидат физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук.*
Ведущая организация:	*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Вычислительный центр им. А. А. Дородницына Российской академии наук.*

Защита состоится «18» декабря 2013 г. в 15 часов на заседании диссертационного совета *Д 002.045.01* при *Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики Российской академии наук (ИВМ РАН)*, расположенном по адресу: *119333, г. Москва, ул. Губкина, д. 8, ауд. 727.*

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке *ИВМ РАН.*

Автореферат разослан «____» ноября 2013 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук *Бочаров Г. А.*

Общая характеристика работы

Актуальность темы. При решении прикладных трехмерных задач в сложных областях возникает необходимость создания технологии построения расчетных сеток, методов дискретизации дифференциальных уравнений на них и способов решения полученных систем алгебраических уравнений. Проблеме построения качественных расчетных сеток для сложных геометрических областей уделяется большое внимание. Особый интерес представляют экономичные гексаэдральные сетки, однако необходима технология для более точного приближения криволинейной границы области такими сетками. Кроме этого, в связи с ограничением вычислительных ресурсов, интересны технологии построения сеток, адаптирующихся к изменению численного решения. Известные на сегодняшний день комплексы программ, позволяющие строить сетки с преимущественно гексаэдральными ячейками, а также многогранными ячейками, являются закрытыми. При этом, используемые алгоритмы не опубликованы, поэтому не представляется возможным судить о их надежности и эффективности.

Дискретизация уравнений математической физики на многогранных сетках является отдельной задачей. Во многих прикладных задачах важно соблюдение определенных физических свойств решения, например, сохранение неотрицательности решения или удовлетворение дискретному принципу максимума. Кроме этого, при моделировании физических процессов часто приходится сталкиваться с анизотропными свойствами среды. Таким образом, в настоящее время особый интерес вызывают монотонные консервативные схемы дискретизации уравнений диффузии для анизотропных сред на многогранных сетках.

Уравнения в частных производных на поверхностях возникают во многих естественных процессах, в компьютерных, инженерных и биомедицинских приложениях. В последнее время интерес представляют численные методы, основанные на расширении уравнения на поверхности в некоторую ее окрестность. В результате полученные уравнения будут решаться в пространстве большей размерности, однако для решения может быть использован широкий набор численных методов в декартовых координатах на различных сетках.

Цель диссертационной работы. Целями диссертационной работы являются разработка технологии построения многогранных сеток с преимущественно гексаэдральными ячейками, разработка нелинейной монотонной схемы дискретизации уравнения диффузии на многогранных сетках, в том числе на предлагаемых сетках, а также разработка метода решения уравнений на поверхностях с помощью продолжения уравнения в окрестность поверхности.

Научная новизна. В работе предложена технология построения многогранных сеток типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками для сложных областей с несколькими материалами; предложена и численно исследована трехмерная версия монотонной нелинейной схемы на основе метода конечных объемов для уравнения диффузии на многогранных сетках; предложена и численно исследована новая переформулировка эллиптических уравнений на поверхности, приводящая к невырожденному эллиптическому уравнению в окрестности поверхности.

Практическая значимость. Практическая значимость диссертационной работы заключается в создании генератора многогранных сеток типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками. Генератор внедрен в расчетный комплекс GeRa [1], в котором является частью технологической цепочки расчетов геомиграции радионуклидов в слоистых геологических областях. Кроме этого, создана технологическая цепочка на платформе INMOST, включаю-

[1] Geomigration of Radionuclides - совместный проект ИВМ РАН и ИБРАЭ РАН в рамках проекта "Прорыв" ГК Росатом

щая в себя построение расчетной многогранной сетки со сколотыми ячейками и численное решение на ней диффузионных задач. С помощью этого комплекса программ также были решены тестовые уравнения на поверхности.

На защиту выносятся следующие основные результаты:

1. Предложен алгоритм и разработана технология надежного построения многогранных сеток типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками для сложных областей с несколькими материалами.

2. Предложена и численно исследована трехмерная версия монотонной нелинейной схемы дискретизации на многогранных сетках уравнения диффузии, удовлетворяющая принципу максимума.

3. Предложена и численно исследована новая формулировка эллиптических уравнений на поверхностях, приводящая к невырожденной эллиптической задаче в окрестности поверхности. Для ее численного решения применялись как метод конечных элементов, так и метод конечных объемов на многогранных сетках.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались автором и обсуждались на научных семинарах Института вычислительной математики РАН, Института прикладной математики РАН им. М. В. Келдыша, Вычислительного центра РАН им. А. А. Дородницына, Института проблем безопасного развития атомной энергетики РАН и на следующих научных конференциях: конференция молодых ученых “Технологии высокопроизводительных вычислений и компьютерного моделирования” (СПбГУ ИТМО, С.-Петербург, апрель 2009); конференция “Лобачевские чтения” (КГУ, Казань, ноябрь 2009); конференции “Тихоновские чтения” (МГУ, октябрь 2012); конференции “Актуальные проблемы прикладной математики и механики” (Абрау-Дюрсо, сентябрь 2012); международная конференция “NUMGRID-2012”

(ВЦ РАН, Москва, июнь 2012); международная конференция “CRC-NAA-2013” (Ростов-на-Дону, июнь 2013); международная конференция “Mathematical modeling of natural disasters and technical hazards” (Сьон, Швейцария, август 2013).

Публикации. Основные материалы диссертации опубликованы в 6 печатных работах, из них 2 статьи в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК [1, 2], и 4 - в сборниках тезисов конференций [3–6].

Личный вклад автора. Все результаты главы 1 и главы 2 получены автором самостоятельно. В совместной работе [2] вклад автора заключался в разработке новой формулировки эллиптического уравнения на поверхности и реализации численных экспериментов. Программная реализация всех методов и все расчеты выполнены лично автором.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, обзора используемой терминологии, трех глав, заключения и списка литературы из 97 наименований. Диссертационная работа содержит 31 рисунок и 11 таблиц. Общий объем диссертационной работы – 125 страниц.

Содержание работы

Во Введении обосновывается актуальность диссертационной работы, сформулированы ее цели, приводится обзор известных сеточных генераторов, обзор консервативных схем метода конечных объемов для решения диффузионных задач, а также обзор методов численного решения дифференциальных уравнений на поверхностях, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В обзоре используемой терминологии приводится краткое разъяснение используемых в работе понятий и терминов.

В первой главе предложен алгоритм построения многогранных сеток типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками для сложных областей, состоящих из нескольких материалов. Предложенная технология, ее анализ и результаты экспериментов опубликованы в работе [1].

В **разделе 1.1** описывается алгоритм кубических марширующих квадратов (Cubical marching squares, CMS) и процесс создания сколотых ячеек с помощью него. Сколотой ячейкой называется часть кубической ячейки, полученная в результате ее среза поверхностной сеткой. Алгоритм CMS позволяет строить конформную триангуляцию поверхности на сетках типа восьмеричное дерево, которая используется для создания сколотых ячеек.

В **разделе 1.2** описывается алгоритм марширующих кубов для областей с несколькими материалами (Multiple material marching cubes, M^3C). На практике существует множество задач, в которых расчетная область разбита некоторыми интерфейсами на подобласти с различными свойствами. Такие подобласти называют составными или состоящими из нескольких материалов. Алгоритм M^3C позволяет строить конформную триангуляцию поверхности области и интерфейсов на равномерных гексаэдральных сетках. Однако получающиеся триангуляции приближают гладкую границу области и интерфейсы с первым порядком точности. Поэтому в данном разделе предлагается модификация этого метода, приводящая к триангуляциям, приближающим гладкие поверхности со вторым порядком точности. При этом модификация также может быть применена для сеток типа восьмеричное дерево, так как алгоритм CMS становится частным случаем предлагаемой модификации.

В **разделе 1.3** описывается общий алгоритм построения сетки типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками для сложных составных областей. Для создания сколотых ячеек используется предложенная модификация алгоритма M^3C. В результате получаются конформные сетки для областей с одним материалом и слабо-конформные сетки для областей с несколькими материалами, в том смысле, что некоторые ячейки могут иметь более одной общей грани.

В **разделе 1.4** проведен анализ алгоритма построения сетки. Доказана конечность алгоритма, в частности, конечность процесса построения триангуляции. Проведен анализ вычислительной сложности алгоритма, показана линейная сложность алгоритма скалывания ячеек.

В **разделе 1.5** описаны дополнительные операции над сеткой. Рассмотрены способы улучшения качества построенной сетки, а именно объединение маленьких ячеек с соседними ячейками, а также удаление излишних граней из сетки. Также описан алгоритм динамического перестроения сетки типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками. Таким образом, сетки могут динамически адаптироваться под изменение численного решения.

В **разделе 1.6** описан алгоритм построения сеток для слоистых областей специального вида. Сетки получаются в результате отображения сетки типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками вдоль оси Oz. В результате получается сетка, ячейки которой располагаются вдоль искривленных слоев области. Такие сетки могут быть построены для геологических областей специального вида, допускающих выклинивания слоев и разломы. По сравнению с обычными сетками со сколотыми ячейками, эти сетки имеют значительно меньшее количество сколотых ячеек, однако ячейки сетки могут иметь неплоские грани.

В **разделе 1.7** представлены примеры сеток, построенных с помощью сеточного генератора, основанного на описанном алгоритме построения сетки типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками. Представлены сетки для областей с одним и несколькими материалами, см. Рис. 1, приведены параметры сеток и время их построения, подтверждающие линейную оценку сложности создания сколотых ячеек. Также представлен набор динамически перестраивающихся сеток для слоистой области, см. Рис. 2.

В **разделе 1.8** сформулированы выводы о результатах первой главы.

В второй главе предложена и исследована трехмерная версия нелиней-

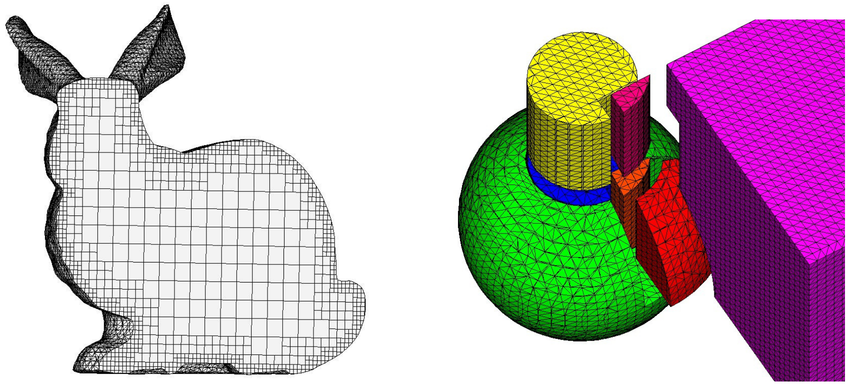

Рис. 1. Сетки для области с одним и несколькими материалами.

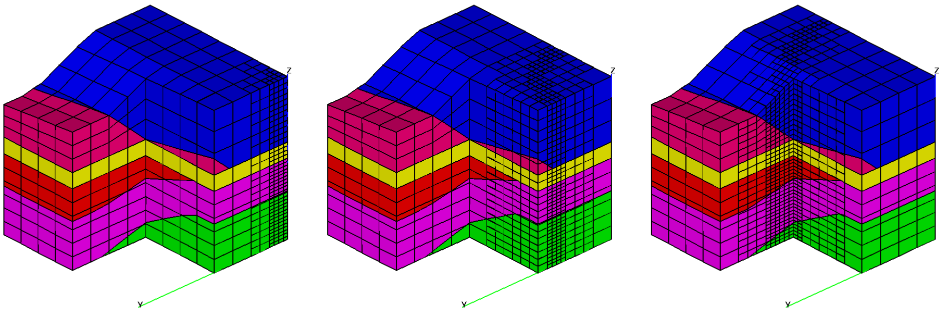

Рис. 2. Срезы динамически перестраивающейся сетки.

ной схемы дискретизации уравнения диффузии на основе метода конечных объемов на сетках с многогранными ячейками, удовлетворяющей дискретному принципу максимума. Данная схема используется для апробации дискретизаций на предлагаемых многогранных сетках типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками.

В **разделе 2.1** дана постановка задачи. Пусть Ω – трехмерная многогранная область, граница которой состоит из двух частей, $\Gamma = \Gamma_N \cup \Gamma_D$, причем множество Γ_D замкнуто и непусто, $\Gamma_D = \bar{\Gamma}_D$, $\Gamma_D \neq \emptyset$. Рассматривается задача диффузии для неизвестной концентрации c:

$$\begin{aligned} -\mathrm{div}(\mathbb{K}\nabla c) &= g \quad &\text{в} \quad &\Omega, \\ c &= g_D \quad &\text{на} \quad &\Gamma_D, \\ -\mathbf{n}\cdot\mathbb{K}\nabla c &= g_N \quad &\text{на} \quad &\Gamma_N, \end{aligned} \tag{1}$$

здесь $\mathbb{K}(\mathbf{x}) = \mathbb{K}^{\mathrm{T}}(\mathbf{x}) > 0$ – полный анизотропный тензор диффузии, g –

внешние источники, g_D и g_N – граничные условия Дирихле и Неймана, соответственно, $\mathbf{n}$ – вектор внешней нормали.

В **разделе 2.2** предложена трехмерная версия схемы дискретизации на основе метода конечных объемов с использованием нелинейного многоточечного шаблона для аппроксимации диффузионного потока на гранях расчетной сетки. Для аппроксимации диффузионного потока на грани рассматривается линейная комбинация двух потоков с обеих сторон, причем относительные вклады потоков сбалансированы. В результате дискретный диффузионный поток q_f на грани f между двумя ячейками T_1 и T_2 имеет два эквивалентных алгебраических представления вида:

$$q_f \;=\; A_{12}(C_{T_1} - C_{T_2}) + A_{13}(C_{T_1} - C_{T_3}) + A_{14}(C_{T_1} - C_{T_4}), \qquad (2)$$

где T_3 и T_4 - соседние с T_1 ячейки, C_{T_i} – значения дискретных концентраций в ячейках T_i, а A_{12}, A_{13}, A_{14} – неотрицательные коэффициенты, зависящие от значений концентрации в окружающих ячейках. Эквивалентность представлений потока g_f приводит к монотонности итоговой схемы, которая имеет компактный шаблон, в который входят только соседние ячейки по граням (в большинстве случаев). Так, например, на регулярных кубических сетках и с диагональным тензором диффузии получается стандартный 7-точечный шаблон, причем 7-точечность шаблона сохраняется и для полного тензора.

В этом же разделе приводится схема дискретизации диффузионного потока на грани, в которой происходит разрыв тензора диффузии, а также проводится краткий анализ предлагаемой схемы. Возникающая система нелинейных алгебраических уравнений решается с помощью метода Пикара, на каждой итерации которого решается система линейных уравнений с помощью метода бисопряженных градиентов (BiCGStab) с использованием предобуславливателя ILU второго порядка. Численное решение удовлетворяет дискретному принципу максимума на каждой пикаровской итерации.

В **разделе 2.3** проведены эксперименты, показывающие выполнение дискретного принципа максимума, в том числе на сетках типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками. Полученные результаты демонстрируют второй порядок сходимости концентрации в дискретной L_2-норме на гексаэдральных сетках и сетках типа восьмеричное дерево. Порядок сходимости падает ниже второго при сильной анизотропии сетки.

В **разделе 2.4** сформулированы выводы о результатах второй главы.

В третьей главе предлагается и исследуется новая переформулировка эллиптического уравнения на поверхности, приводящая к невырожденному эллиптическому уравнению в окрестности поверхности [2]. Для численного решения полученных уравнений можно использовать различные известные методы. В частности, представлены результаты тестов при решении нелинейной схемой метода конечных объемов на многогранных сетках типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками. Кроме того, в случае тетраэдральных сеток используется метод конечных элементов для численного решения полученного пространственного уравнения, обоснованного с помощью хорошо разработанного аппарата численного анализа.

В **разделе 3.1** приводятся предварительные сведения и обозначения. Пусть Γ является связной C^2 компактной гиперповерхностью. В качестве базового эллиптического уравнения рассматривается уравнение Лапласа-Бельтрами:

$$-\Delta_\Gamma u + \alpha u = f \text{ на } \Gamma, \tag{3}$$

с заданной неотрицательной функцией $\alpha \in L^\infty(\Gamma)$. Здесь через Δ_Γ обозначен оператор Лапласа-Бельтрами на Γ, $\Delta_\Gamma = \nabla_\Gamma \cdot \nabla_\Gamma$, где $\nabla_\Gamma g = \nabla g - \nabla g \cdot \mathbf{n}_\Gamma \mathbf{n}_\Gamma$ - тангенциальный градиент.

Введем d-окрестность поверхности Γ:

$$\Omega_d = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : dist(\mathbf{x}, \Gamma) < d\}.$$

Пусть $\phi(\mathbf{x}) : \Omega_d \to \mathbb{R}$ - функция расстояния со знаком, $|\phi(\mathbf{x})| := dist(\mathbf{x}, \Gamma)$ для всех $\mathbf{x} \in \Omega_d$. Тогда поверхность Γ является изоповерхностью нуля функции уровня ϕ:

$$\Gamma = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \phi(\mathbf{x}) = 0\}.$$

Гессиан функции ϕ обозначим через $\mathbf{H}$, $\mathbf{H} = \nabla^2\phi$ для всех $\mathbf{x} \in \Omega_d$. Введем ограничение на ширину области Ω_d:

$$|\phi(\mathbf{x})| = dist(\mathbf{x}, \Gamma) \leq \frac{1}{2}||\mathbf{H}(\mathbf{x})||^{-1}, \tag{4}$$

где $||\cdot||$ обозначает спектральную норму. Внешний вектор нормали к Γ может быть записан в виде $\mathbf{n} := \nabla\phi$ для всех $\mathbf{x} \in \Omega_d$. Для функции v на Γ определим ее продолжение, или расширение, следующим образом:

$$v^e(\mathbf{x}) := v(\mathbf{x} - \phi(\mathbf{x})\mathbf{n}(\mathbf{x})) \quad \text{для всех} \quad \mathbf{x} \in \Omega_d.$$

Таким образом, функция v^e является продолжением v вдоль нормалей к Γ и удовлетворяет $\mathbf{n} \cdot \nabla v^e = 0$ в Ω_d, другими словами, v^e постоянна вдоль нормалей к Γ.

В **разделе 3.2** вводится расширение уравнения на поверхности (3) в область Ω_d:

$$\begin{aligned} -\mathrm{div}(\mathbf{I} - \phi\mathbf{H})^{-2}\nabla u + \alpha^e u &= f^e \quad \text{в } \Omega_d, \\ \mathbf{n} \cdot \nabla u &= 0, \quad \text{на } \partial\Omega_d. \end{aligned} \tag{5}$$

В результате получается невырожденное эллиптическое уравнение с естественным граничным условием. В этом же разделе формулируется и доказывается следующая теорема:

Теорема. *При условии (4) задача* (5) *имеет единственное слабое решение $u \in H^1(\Omega_d)$, удовлетворяющее $\|u\|_{H^1(\Omega_d)} \leq C\,\|f^e\|_{L^2(\Omega_d)}$, где константа C зависит только от α, Γ и d; если $\Gamma \in C^3$, тогда $u \in H^2(\Omega_d)$ и $\|u\|_{H^2(\Omega_d)} \leq C\,\|f^e\|_{L^2(\Omega_d)}$, где константа C зависит только от α, Γ и d.*

Для численного решения краевой задачи (5) можно использовать различные известные методы.

В **разделе 3.3** описывается метод конечных объемов на многогранных сетках для численного решения (5). В этом же разделе описывается метод конечных элементов на треугольных и тетраэдральных сетках для приближенного решения (5), для которого в совместной работе [2] доказываются оценки сходимости в L^2 и L^∞ нормах на поверхности.

В **разделе 3.4** представлены результаты некоторых численных экспериментов. Подтверждающие аналитические оценки сходимости эксперименты представлены для метода конечных элементов на тетраэдральных сетках, построенных с помощью пакета Ani3D[2]. Также представлены эксперименты для метода конечных объемов на сетках типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками. Эксперименты показывают, что предлагаемый подход требует хорошую аппроксимацию гессиана функции расстояния со знаком.

В **разделе 3.5** сформулированы выводы о результатах третьей главы.

Основные результаты и выводы

1. Разработана технология надежного построения гибридных конформных сеток типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками. Они состоят преимущественно из гексаэдров, а также из многогранных ячеек, приближающих гладкие границы области со вторым порядком точности. Сетки могут динамически адаптироваться к изменениям численного решения. Была доказана конечность алгоритма скалывания и показана его линейная сложность, а также приведены примеры работы алгоритма, подтверждающие данную оценку.

[2] `http://sourceforge.net/projects/ani3d/`

2. Предложена и численно исследована трехмерная версия нелинейной схемы метода конечных объемов для дискретизации уравнения диффузии на многогранных сетках, удовлетворяющая дискретному принципу максимума. Проведено экспериментальное исследование скорости сходимости предложенной схемы на разных типах сеток, в том числе на предложенных сетках типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками.

3. Предложена и численно исследована новая переформулировка эллиптических уравнений на поверхностях, приводящая к невырожденному эллиптическому уравнению в окрестности поверхности. Это позволяет напрямую использовать стандартные методы дискретизаций в декартовых координатах. В работе используется предложенная нелинейная схема метода конечных объемов на сетках типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками, а также стандартный метод конечных элементов на треугольных и тетраэдральных сетках, для которого в [2] доказываются оценки сходимости.

Список публикаций по теме диссертации

1. Чернышенко А. Построение сеток типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками в неоднородных областях // Вычислительные методы и программирование. 2013. Т. 14. С. 229–245.

2. Chernyshenko A., Olshanskii M. Non-degenerate Eulerian finite element method for solving PDEs on surfaces // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2013. V. 28, № 2. P. 101–124.

3. Chernyshenko A. Generation of octree meshes with cut-cells for domains with

multiple materials // Proc. of Second China-Russia Conf. on Num. Algebra and Applications. 2013. P. 59–60.

4. Чернышенко А. Алгоритм генерации многогранных сеток типа восьмеричное дерево в областях с несколькими материалами // Тезисы конференции "Тихоновские чтения". 2012. С. 23.

5. Чернышенко А. Генерация сеток типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками в многоматериальных областях // Тезисы VI Российской конференции "Актуальные проблемы прикладной математики и механики". 2012. С. 85–86.

6. Чернышенко А. Численное решение уравнений Навье-Стокса на сетках типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками // Труды Математического центра им. Н.И. Лобачевского. Т. 39. 2009. С. 391–393.