На правах рукописи

Данилов Александр Анатольевич

Технология построения неструктурированных сеток и монотонная дискретизация уравнения диффузии

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Москва – 2010

Работа выполнена в *Учреждении Российской академии наук Институт вычислительной математики РАН.*

Научный руководитель:	*доктор физико-математических наук, доцент, Василевский Юрий Викторович*
Официальные оппоненты:	*доктор физико-математических наук, профессор, Агошков Валерий Иванович*
	кандидат физико-математических наук, Гаранжа Владимир Анатольевич
Ведущая организация:	*Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН*

Защита состоится «24» сентября 2010 г. в 15 часов на заседании диссертационного совета *Д 002.045.01* при *Учреждении Российской академии наук Институт вычислительной математики РАН*, расположенном по адресу: *119333, г. Москва, ул. Губкина, д. 8, ауд. 727.*

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке *Учреждения Российской академии наук Институт вычислительной математики РАН.*

Автореферат разослан «21» августа 2010 г.

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

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Для решения прикладных трёхмерных задач в сложных областях возникает необходимость создания технологии построения расчётных сеток, методов дискретизации дифференциальных уравнений на них и способов решения полученных систем алгебраических уравнений. Задачам построения расчётных сеток для сложных геометрических областей уделяется большое внимание. Существующие методы построения тетраэдральных, призматических, гексаэдральных и многогранных сеток, как правило, требуют ручного вмешательства пользователя для получения результата, или применимы только для узкого класса геометрических областей. Перспективным направлением видится разработка методов построения гибридных сеток, состоящих из многогранных ячеек.

Дискретизация уравнений математической физики на сетках с многогранными ячейками является отдельной задачей. Во многих прикладных задачах важно соблюдение определённых физических свойств решения, например, неотрицательности концентрации в задачах диффузии. В последнее время особый интерес привлекают монотонные консервативные схемы дискретизации уравнений диффузии для сред с анизотропными свойствами.

Цель диссертационной работы. Целью диссертационной работы является разработка технологической цепочки для приближённого решения трёхмерной задачи диффузии в сложных областях, включающая создание технологии надёжного построения неструктурированных треугольных и тетраэдральных сеток и разработку новой монотонной нелинейной схемы дискретизации для трёхмерного численного моделирования диффузионных процессов на сетках с многогранными ячейками.

Научная новизна. В работе предложена технология автоматического надёжного построения тетраэдральных сеток для сложных областей на основе метода продвигаемого фронта. Проведён анализ влияния вычислительных погрешностей на алгоритмы при их реализации на ЭВМ, представлено теоретическое обоснование конечности работы предложенных алгоритмов. Предложена и исследована монотонная нелинейная схема на основе метода конечных объёмов для уравнения диффузии на неструктурированных сетках с многогранными ячейками.

Практическая значимость. Практическая значимость диссертационной работы заключается в создании и поддержке комплекса программ для автоматического построения тетраэдральных сеток и для приближённого решения задач диффузии на многогранных сетках. Программы для построения поверхностных треугольных и тетраэдральных сеток включены в библиотеку программ Ani3D и находятся в свободном доступе. Решена практическая задача о стационарном распределении интерферона в лимфоузле.

На защиту выносятся следующие основные результаты:

1. Разработана технология надёжного построения неструктурированных тетраэдральных сеток, реализованы разные способы задания области, в том числе с помощью САПР.

2. Предложена и исследована новая монотонная нелинейная схема дискретизации уравнения диффузии на основе метода конечных объёмов на сетках с многогранными ячейками.

3. На основе предложенных методов разработана модель стационарного распределения интерферона в лимфоузле с учётом геометрических особенностей лимфоузла.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались автором и обсуждались на научных семинарах Института вычислительной математики РАН, Института математического моделирования РАН, Вычислительного центра РАН, Механико-математического факультета МГУ им. М. В. Ломоносова, в Институте прикладной математики и информационных технологий, г. Павия (Италия), в Лос-Аламосской национальной лаборатории, г. Лос-Аламос (США) и на следующих научных конференциях: конференции "Тихоновские чтения" (МГУ, Москва, ноябрь 2007, октябрь 2009); конференции "Ломоносов" (МГУ, Москва, апрель 2008, апрель 2010); конференции "Ломоносовские чтения" (МГУ, Москва, апрель 2009, апрель 2010); конференция молодых учёных "Технологии высокопроизводительных вычислений и компьютерного моделирования" (СПбГУ ИТМО, С.-Петербург, апрель 2009); конференция "Лобачевские чтения" (КГУ, Казань, ноябрь 2009); международные конференции "NUMGRID-2006" и "NUMGRID-2008" (ВЦ РАН, Москва, июнь 2006, июнь 2008); международная конференция "SIAM Geosciences 2009" (Лейпциг, Германия, июнь 2009); международный научный семинар "Computational Mathematics and Applications" (Технологический университет Тампере, Тампере, Финляндия, сентябрь 2009).

Публикации. Основные материалы диссертации опубликованы в 6 печатных работах, из них 3 статьи в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК, [1–3].

Личный вклад автора. В совместной работе [1] вклад автора заключался в разработке нелинейной схемы дискретизации уравнения диффузии в трёхмерном пространстве, в программной реализации метода и в постановке численных экспериментов.

В совместной работе [4] вклад автора заключался в разработке методов построения треугольных и тетраэдральных неструктурированных сеток.

В совместной работе [5] вклад автора заключался в разработке методов взаимодействия с САПР при построении сеток, в программной реализации алгоритмов и проведении численных экспериментов.

Структура и объём диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, обзора методов построения сеток и комплексов программ, четырёх глав, заключения и списка литературы из 73 наименований. Диссертационная работа содержит 32 рисунка и 15 таблиц. Общий объём диссертационной работы – 148 страниц.

Содержание работы

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В обзоре методов построения сеток и комплексов программ проведён краткий анализ широко распространённых методов построения треугольных и тетраэдральных неструктурированных сеток, сделан обзор наиболее известных комплексов программ для построения неструктурированных сеток: Triangle, TetGen, TetMesh, NETGEN и CUBIT. Автор диссертационной работы является основным разработчиком библиотек для построения неструктурированных треугольных и тетраэдральных сеток, входящих в свободно распространяемые пакеты библиотек Ani2D[1] и Ani3D[2]. В обзор включено описание особенностей разработанной библиотеки и её сравнение с остальными комплексами программ. Отметим, что в пакете Ani3D предусмотрен богатый выбор способов построения поверхностных сеток [3, 4].

В первой главе предложены алгоритмы построения неструктурированных треугольных сеток для многоугольных областей.

В **разделе 1.1** введены основные обозначения и понятия, используемые в первой главе.

[1] `http://sourceforge.net/projects/ani2d/`

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

В **разделе 1.2** описаны основные шаги метода продвигаемого фронта, записывается формальный алгоритм (*Алгоритм 1.1*). В качестве исходных данных выступает фронт многоугольной области – дискретная граница области с определённой ориентацией. При построении сетки алгоритм сохраняет заданный след на границе. Предложенный алгоритм применим как к простым многоугольникам, так и к произвольным многокомпонентным, многосвязным многоугольным областям, границы которых могут не быть одномерными многообразиями. На каждой итерации алгоритма около границы фронта строится *подходящий* треугольник, лежащий внутри расчётной области, этот треугольник добавляется в сетку, а фронт продвигается внутрь области, ограничивая в каждый момент времени не разбитую на треугольники область. Предложенный способ построения треугольников позволяет контролировать желаемые размеры элементов в полученной сетке.

В **разделе 1.3** проведено исследование устойчивости алгоритма к вычислительным погрешностям, возникающим при реализации алгоритма на современных ЭВМ, предлагается устойчивый алгоритм проверки пересечения треугольника и отрезка на плоскости, основанный на вычислении знака определителя матрицы 2×2. Отметим, что при использовании в реализации на ЭВМ типов вещественных чисел с двойной точностью знак определителя может быть вычислен точно.

В **разделе 1.4** проведён анализ *Алгоритма 1.1*, доказана конечность числа операций, необходимых для завершения алгоритма. В частности доказано существование *подходящего* треугольника на каждой итерации алгоритма, и получена оценка на максимальное количество построенных треугольников:

$$N_T \le \frac{8S}{\pi\delta^2} + \frac{4p}{\pi\delta} + 2K - 5,$$

где N_T – количество треугольников, S – площадь многоугольной области, p –

периметр области, K – количество компонент связности и δ – параметр, зависящий от минимального расстояния между вершинами начального фронта и от функции распределения желаемых размеров треугольников в области.

В **разделе 1.5** проведён анализ вычислительной сложности *Алгоритма 1.1*, выделены критические участки алгоритма, предложены способы ускорения работы этих участков с использованием структур данных на основе четверичных деревьев поиска. В результате анализа сложности были получены оценки в среднем и в худшем случае для количества операций *Алгоритма 1.1*. В упрощённом виде эти оценки записываются следующим образом: в среднем количество операций пропорционально $N_T \log N_T$, и в худшем случае пропорционально N_T^3. Предложены две модификации *Алгоритма 1.1* с улучшенными оценками количества операций в худшем случае. Первая модификация основана на результатах, полученных в разделе 1.4 при доказательстве существования *подходящего* треугольника, и в худшем случае требует количество операций пропорциональное N_T^2. Во второй предложенной модификации накладываются дополнительные ограничения на равномерность дискретизации начального фронта: отношение минимальной и максимальной длин отрезков не должно превышать двух. В этом случае количество операций в худшем случае будет пропорционально $N_T \log N_T$. Отметим, что все предложенные алгоритмы имеют среднюю сложность пропорциональную $N_T \log N_T$, и на практике применяется исходный вариант *Алгоритма 1.1*, описанный в разделе 1.2.

В **разделе 1.6** рассмотрены способы улучшения качества построенной с помощью *Алгоритма 1.1* сетки. Автором диссертационной работы предложен метод, основанный на псевдоминимизации функционала качества сетки. Предложенный алгоритм прост в реализации и на практике даёт хорошие результаты.

В **разделе 1.7** проведены эксперименты, подтверждающие на практике среднюю оценку количества операций *Алгоритма 1.1*, исследовано влияние способа выбора желаемого шага сетки на качество сетки и на структуру сетки. Проведена проверка работы алгоритма на сложном нерегулярном начальном фронте, а также продемонстрированы возможности алгоритма для улучшения сеток, полученных для сложных областей.

Во второй главе предложена модификация алгоритма продвигаемого фронта для построения треугольных сеток на криволинейных поверхностях, введены и используются дополнительные обозначения и понятия.

В **разделе 2.1** рассмотрены способы задания и представления в памяти ЭВМ кусочно-гладких поверхностей, предложен общий способ построения дискретизации криволинейных рёбер и криволинейных граней.

В **разделе 2.2** описаны возможности взаимодействия с геометрическим ядром системы автоматизации проектных работ (САПР). В работе [5] детально рассмотрен способ организации взаимодействия с промежуточной библиотекой Common Geometry Module (CGM), предоставляющей универсальный способ доступа к данным разных САПР. В пакет Ani3D была добавлена возможность подключения библиотек CGM и свободно распространяемой САПР Open CASCADE, для этого автором диссертационной работы была реализована базовая поддержка САПР Open CASCADE в библиотеке CGM.

В **разделе 2.3** рассмотрены геометрические особенности построения треугольных сеток на криволинейных поверхностях с помощью алгоритма продвигаемого фронта, проведён анализ конечности числа операций и устойчивости алгоритма к вычислительным погрешностям.

В **разделе 2.4** проведены эксперименты, подтверждающие на практике среднюю оценку количества операций алгоритма продвигаемого фронта на криволинейных поверхностях: количество операций в среднем пропорционально $N_T \log N_T$, где N_T – количество построенных треугольников. В качестве демонстрации взаимодействия с геометрическим ядром САПР на Рис. 1

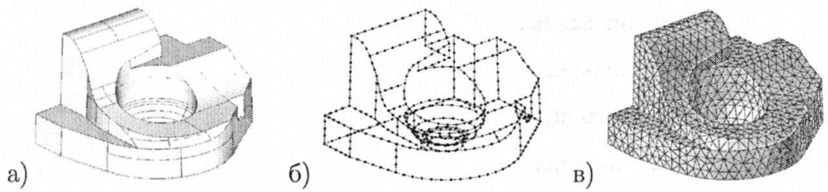

Рис. 1. Модель, заданная в САПР: а) геометрическая модель, б) дискретизация криволинейных рёбер, в) поверхностная квазиравномерная треугольная сетка.

приведён пример построения поверхностной сетки для модели, заданной в САПР.

В третьей главе предложено расширение алгоритма продвигаемого фронта для построения тетраэдральных сеток в трёхмерном пространстве, введены и используются дополнительные обозначения и понятия.

В **разделе 3.1** рассмотрены особенности построения тетраэдральных сеток с помощью алгоритма продвигаемого фронта, проведён анализ конечности числа операций и устойчивости алгоритма к вычислительным погрешностям, предложен устойчивый алгоритм проверки пересечения тетраэдра и треугольника, основанный на вычислении знака определителя матрицы 3×3. Рассмотренный алгоритм не всегда строит сетку для всей области, иногда остаются лакуны – локальные несвязные части области, в которых алгоритм продвигаемого фронта не работает. На практике лакуны занимают менее 1% объёма области.

Для построения тетраэдральных сеток в лакунах в **разделе 3.2** предложен второй метод, основанный на тетраэдризации Делоне [6]. Доказана конечность работы второго метода. Комбинация двух методов позволяет строить сетки в трёхмерных многоугольных многосвязных многокомпонентных областях с заданным следом дискретизации на границе.

В **разделе 3.3** сделан краткий обзор доступных методов улучшения качества полученной тетраэдральной сетки.

В **разделе 3.4** проведено экспериментальное подтверждение оценки количества операций алгоритма продвигаемого фронта, проведено исследование распределения объёмных частей области, для которых строится сетка с помощью алгоритма продвигаемого фронта и с помощью алгоритма на основе тетраэдризации Делоне. Проведено исследование качества элементов сеток, полученных на разных этапах построения, а также изучены возможности улучшения качества с помощью доступных алгоритмов и методов. На Рис. 2 продемонстрирован разрез тетраэдральной сетки, полученной с помощью методов, изложенных во второй и третьей главах, на основе модели, заданной в САПР.

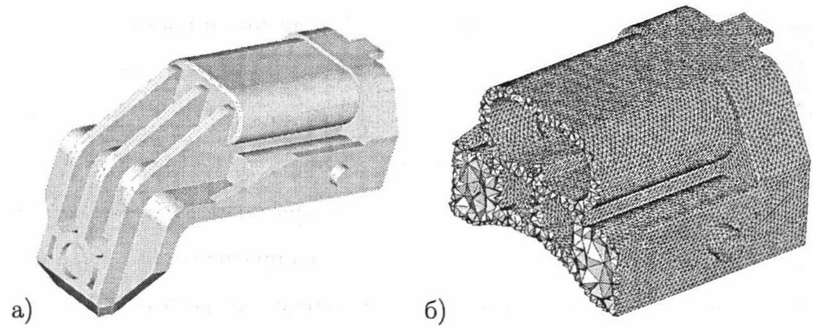

Рис. 2. Модель, заданная в САПР: а) геометрическая модель, б) разрез тетраэдральной сетки.

Рассмотренные методы и технология построения тетраэдральных сеток опубликованы в работе [2].

В четвёртой главе проведён обзор методов дискретизации уравнения диффузии и предложена новая монотонная нелинейная схема дискретизации на сетках с многогранными ячейками для полного анизотропного разрывного тензора диффузии. Предложенный метод, его анализ и результаты экспериментов опубликованы в работе [1].

В **разделе 4.1** дана постановка задачи. Пусть Ω – трёхмерная многогранная область, граница которой состоит из двух частей, $\Gamma = \Gamma_N \cup \Gamma_D$, причём 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 4.2** предложена новая схема дискретизации на основе метода конечных объёмов с использованием нелинейного двухточечного шаблона для аппроксимации диффузионного потока на гранях расчётной сетки. Диффузионный поток $\mathbf{q}_f^h$ на грани f между двумя ячейками T_+ и T_- представляется в виде

$$\mathbf{q}_f^h \cdot \mathbf{n}_f = M_f^+ C_{T_+} - M_f^- C_{T_-},$$

где $\mathbf{n}_f$ – нормаль к грани, направленная из T_+ в T_-, $C_{T_\pm}$ – значения дискретных концентраций в $T_\pm$, $M_f^\pm \geq 0$ – коэффициенты, зависящие от значений концентрации в окружающих ячейках.

В **разделе 4.3** приведён алгоритм решения задачи диффузии и проведён анализ монотонности предложенной схемы. Система нелинейных алгебраических уравнений решается с помощью метода Пикара, на каждой итерации которого решается система линейных уравнений с помощью метода бисопряжённых градиентов (BiCGStab) с использованием предобуславливателя ILU второго порядка. Сформулирована и доказана следующая теорема.

Теорема. *Пусть $g \geq 0$, $g_D \geq 0$, $g_N \leq 0$ и $\Gamma_D \neq \emptyset$ в* (1)*. Если начальное приближение $C^0 \geq 0$ и линейные системы в методе Пикара решаются точ-*

но, то полученное решение $C^k \geq 0$ *на каждой итерации метода Пикара,* $k \geq 1$.

В **разделе 4.4** проведены эксперименты, анализирующие сохранение неотрицательности решения и выполнение дискретного принципа максимума, проведено исследование количества итераций в методе Пикара и скорости сходимости метода при различных условиях. Полученные результаты демонстрируют второй порядок сходимости концентрации в дискретной L_2-норме на тетраэдральных, призматических и гексаэдральных сетках, в том числе с разрывным тензором диффузии и на ячейках с неплоскими гранями. Порядок сходимости падает ниже второго при сильной анизотропии сетки. Дискретный принцип максимума может нарушаться, но неотрицательность решения всегда сохраняется (если $g \geq 0$, $g_D \geq 0$, $g_N \leq 0$ и $\Gamma_D \neq \emptyset$ в (1), то решение $c \geq 0$). Наблюдается высокая скорость сходимости метода Пикара на первых итерациях, обратная зависимость количества итераций от шага сетки и слабая зависимость от типа сетки.

В **разделе 4.5** разработана модель стационарного распределения интерферона в лимфоузле с учётом геометрических особенностей вторичных лимфоидных органов на основе уравнения диффузии-реакции. Проведена проверка сходимости модели на упрощённой геометрической модели, и проведены расчёты для полной модели, состоящей из трёх подобластей, изображённой на Рис. 3.а. Отметим, что отношение характерных размеров вторичных лимфоидных органов и всего лимфоузла составляет величину порядка 10^3.

При моделировании стационарного распределения интерферона в лимфоузле была исследована зависимость распределения от количества источников интерферона – плазмацитоидных дендритных клеток (см. Рис. 3.б), а также от скорости деградации интерферона. Важным полученным результатом является значительная неоднородность концентрации интерферона внутри лимфоузла.

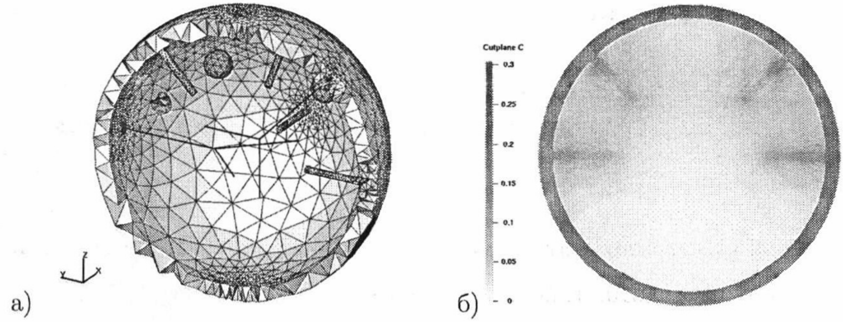

Рис. 3. Стационарное распределение интерферона в лимфоузле. а) разрез построенной сетки, б) распределение интерферона (пг/л), количество плазмацитоидных дендритных клеток – 10 клеток, случайно распределённых в верхней части краевого синуса.

Основные результаты и выводы. В диссертационной работе получены следующие результаты.

Разработана технология надёжного построения треугольных и тетраэдральных сеток. В работе проведён анализ влияния вычислительных погрешностей при реализации алгоритмов на ЭВМ, представлено теоретическое обоснование конечности числа операций предложенных алгоритмов. Программы для построения треугольных, поверхностных, и тетраэдральных сеток включены в пакет библиотек Ani3D и находятся в свободном доступе.

Разработанная технология является первым шагом на пути к созданию технологии автоматического построения конформных неструктурированных гибридных сеток с многогранными ячейками.

Для дискретизации уравнения диффузии на неструктурированных конформных сетках предложена новая монотонная схема на основе метода конечных объёмов. Проведено экспериментальное исследование скорости сходимости предложенной схемы на разных типах сеток. С использованием разработанных методов и алгоритмов решена практическая задача о стационарном распределении интерферона в лимфоузле.

Список публикаций

1. Danilov A., Vassilevski Y. A monotone nonlinear finite volume method for diffusion equations on conformal polyhedral meshes // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2009. V. 24, № 3. P. 207–227.

2. Danilov A. Unstructured tetrahedral mesh generation technology // Ж. Выч. Мат. и Мат. Физ. 2010. Т. 50, № 1. С. 146–163.

3. Данилов А. А. Способы построения трёхмерных поверхностных триангуляций и тетраэдральных сеток // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2010. Т. 65, № 1. С. 87–92.

4. Василевский Ю. В., Вершинин А. В., Данилов А. А., Плёнкин А. В. Технология построения тетраэдральных сеток для областей, заданных в САПР // Матричные методы и технологии решения больших задач / Под ред. Е. Тыртышникова. М.: ИВМ РАН, 2005. С. 21–32.

5. Василевский Ю. В., Данилов А. А. Взаимодействие с САПР для построения расчётных сеток в сложных областях // Труды Математического центра им. Н.И. Лобачевского. 2009. Т. 39. С. 5–12.

6. Данилов А. А. Построение тетраэдральных сеток для областей с заданными поверхностными триангуляциями // Численные методы, параллельные вычисления и информационные технологии. М.: МГУ, 2008. С. 119–130.

10

Заказ № 52-а/08/10 Подписано в печать 18.08.2010 Тираж 80 экз. Усл. п.л. 1

ООО "Цифровичок", тел. (495) 649-83-30
www.cfr.ru ; e-mail:info@cfr.ru