

Об Интегрированном вычислительном окружении для построения сеток

В.П. Ильин

Институт вычислительной математики
и математической геофизики
Новосибирский Государственный
Университет
e-mail: ilin@sscc.ru

Международная конференция
PCT — 2020
1 апреля 2020
Пермь

СОДЕРЖАНИЕ

Цели и концепция проекта

Объекты и понятия начально-краевых задач

Задачи и свойства дискретных подходов Системы моделирования и САПР (CAD, CAE, ...)

Сеточные объекты и преобразования

Алгоритмы и структуры данных

Принципы построения системы DELAUNAY как интегрированного вычислительного окружения (ИВО)

Научно-организационные проблемы

Литература

1. Глассер А.Г., Лисейкин В.Д., Шокин Ю.И. и др. Построение разностных сеток с помощью уравнений Белотрами и диффузии. Новосибирск, Наука, 2006.
2. Годунов С.К., Роменский Е.И., Чумаков Г.А. Построение сеток в сложных областях с помощью квазиконформных отображений.–Труды ИМ СОРАН, Новосибирск, Наука, т. 18, 1990, 75-84.
3. Василевский Ю.В., Данилов А.А. Взаимодействие с САПР при построении расчетных сеток в сложных областях.//Труды мат. общ. им.Н.И.Лобачевского, Казань, Казан. мат. общ., 2009, 5-12.
4. Garanzha V.A. Variational principles in grid generation and geometric modelling. –Numer. Lin. Alg., v. 11, N 5-6, 2003, 535-563.
5. Ushakova O.V. (editor). Advanced in Grid Generation. Nova Sci. Publ., N.Y., 2007.

6. Ильин В.П. Геометрическое и функциональное моделирование в задачах математической физики.//Вычислительные технологии, т. 6, ч. 2, 2001, 315-321.
7. Ильин В.П. DELAUNAY: технологическая среда генерации сеток.–СибЖИМ, т.16, №2(54), 2013, 83-97.
8. International Meshing Roundtable:
www.imr.sandia.gov/18imr.
9. Internat. J. for Numer. Math. in Eng., v. 58(2), 2003, special issue "Trends in Unstructured Mesh Generation".
10. Ильин В.П., Гладких В.С. Базовая система моделирования (БСМ): концепция, архитектура и методология. Труды конференции "Современные проблемы математического моделирования , обработки изображений и параллельных вычислений 2017"(СПММОИиПВ-2017),Ростов-на-Дону, изд. ДГТУ, 2017, 151-158

Дискретизация многомерной начально-краевой задачи



Формальная постановка задачи

$$x = (x_1, x_2, x_3) \in \bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma, \quad 0 < t \leq T < \infty :$$

$$L u = f(x, t), \quad u = \{u_\mu, \mu = 1, \dots, m_f\} : f = \{f_\mu, \mu = 1, \dots, m_f\},$$

$$| u = g(x, t), \quad x \in \Gamma, \quad u(x, 0) = u^0(x), \quad u_\mu, f_\mu = u_\mu, f_\mu(x, t),$$

$$L = A \frac{\partial}{\partial t} + \nabla B \nabla + C \nabla + D,$$

$$\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N : u = g_D \quad x \in \Gamma_D;$$

$$D_N u + A_N \nabla_n u = g_N, \quad x \in \Gamma_N,$$

Оптимизационная формулировка

вектор оптимизируемых параметров модели

$$\rho = (\rho_1, \dots, \rho_{m_0})$$

целевой (минимизируемый) функционал

$$\Phi_0(\mathcal{U}(\tilde{x}, t, \rho_{opt})) = \min_{\rho} \Phi_0(\mathcal{U}(\tilde{x}, t, \rho))$$

линейные ограничения

$$m_1 + m_2 = m_0 : \rho_k^{min} \leq \rho_k \leq \rho_k^{max}, \quad k = 1, \dots, m_1$$

нелинейные (функциональные) ограничения

$$\Phi_l(\mathcal{U}(\tilde{x}, t, \rho)) \leq \delta_l, \quad l = 1, \dots, m_2$$

уравнение состояния (прямая задача)

$$\mathcal{U} = F(\tilde{x}, t)$$

Геометрические объекты

расчетная область

$$\bar{\Omega} = \bigcup_k \bar{\Omega}_k \quad \Omega_{k^0} = 0, \quad k \in \mathcal{K}, \quad k^0 = 1, \dots, N_{\Omega}$$

подобласти

$$\bar{\Omega}_k = \Omega_k \cup \bigcup_{k^0 \in \omega_k} \Gamma_{k,k^0}, \quad \Gamma_k = \bigcup_{k^0 \in \omega_k} \Gamma_{k,k^0}, \quad \Omega_0 = \mathbb{R}^d \setminus \bar{\Omega}$$

$$\bar{\Omega}_k \cap \bar{\Omega}_{k^0} = \Gamma_{k,k^0} = \Gamma_{k^0,k} \quad \mathcal{G} =$$

внешняя граница расчетной области:

$$\Gamma = \Gamma^{(e)} = \bigcup_k \Gamma_{k,0}$$

границы подобластей

$$\Gamma_k = \Gamma_k^{(e)} \cup \bigcup_{k^0 \in \mathcal{G}} \Gamma_{k,k^0}, \quad \Gamma_k^{(e)} = \Gamma_{k,0}, \quad \Gamma_k^{(i)} = \bigcup_{k^0 \in \mathcal{G}} \Gamma_{k,k^0}$$

вершины (точки): $V_p = (x_p, y_p, z_p), p = 1, \dots, N_V$

поверхности: $S_q(x, y, z) = 0, q = 1, \dots, N_S$

линии: $C_r(x, y, z) = 0, r = 1, \dots, N_C$

поверхностные сегменты: $F_l, l = 1, \dots, N_F$

отрезки (ребра): $E_s, s = 1, \dots, N_E$

$$x = x(T), \quad y = y(T), \quad z = z(T),$$

$$x = x(T^{(1)}, T^{(2)}), \quad y = y(T^{(1)}, T^{(2)}), \quad z = z(T^{(1)}, T^{(2)}),$$

Топологические связи между геометрическими объектами

матрицы инцидентности (смежности):

$$M_{VE} = \{ m_{i,j}^{VE} : i = 1, \dots, N_V; j = 1, \dots, N_E \}$$

$$M_{EF} = \{ m_{i,j}^{EF} : i = 1, \dots, N_E; j = 1, \dots, N_F \}$$

$$M_{F\Omega} = \{ m_{i,j}^{F\Omega} : i = 1, \dots, N_F; j = 1, \dots, N_\Omega \}$$

Функциональные объекты (материальные свойства) в соответствии с подобластями и граничными сегментами

типы и коэффициенты уравнений

$$\Omega_k: -\nabla \lambda_k \nabla u + \alpha_k u = f_k$$

виды и коэффициенты краевых условий

$$\Gamma_l: u = g_l \quad \text{или} \quad \lambda_l u + \beta_l u_n = \gamma_l$$

начальные данные ($t = 0$)

описание параметрической оптимизации
(постановка обратной задачи, идентификация
параметров модели)

Сеточные объекты

сеточные подобласти и сеточная расчетная область

$$\bar{\Omega}^h = \bigcup_k \bar{\Omega}_k^h \quad \bar{\Omega}_k^h = \Omega_k^h \cup \Gamma_k \quad k = 1, \dots, N_\Omega^h \quad \Omega_k^h \approx \Omega_k$$

сеточные границы

$$\Gamma_{k,k^0}^h = \bar{\Omega}_k^h \cap \bar{\Omega}_{k^0}^h \quad \Gamma_l^h = \bigcup_k \Gamma_{k,l}^h \quad \Gamma_k^h \cap \Gamma_{k'}^h = \emptyset$$

узлы сетки $V_p^h = (x_p, y_p, z_p), p = 1, \dots, N_V^h$

сеточные ребра $E_s^h, s = 1, \dots, N_E^h$

сеточные грани $F_l^h, l = 1, \dots, N_F^h$

сеточные (конечные) объемы $T_m^h, m = 1, \dots, N_T^h$

Топологические связи сеточных объектов

$$\bar{\Omega}^h = \sum_m^S \bar{T}_m^h, F_l^h = F_{m,m^0}^h \equiv \bar{T}_m^h{}^T \bar{T}_{m^0}^h$$

$$E_s^h = E_{l,l^0}^h \equiv \bar{F}_l^h{}^T \bar{F}_{l^0}^h, V_p^h = V_{s,s^0}^h \equiv \bar{E}_s^h{}^T \bar{E}_{s^0}^h =$$

$$= V_{l,l^0,p}^h \equiv \bar{F}_l^h{}^S \bar{F}_{l^0}^h{}^S \bar{F}_{l^0}^h$$

матрицы инцидентности:

$M_{V,E}^h$ – (узлы-ребра), $M_{V,T}^h$ – (узлы-объемы)

$M_{E,F}^h$ – (ребра-границы), $M_{F,T}^h$ – (границы-объемы)

Связи сеточных объектов с функциональными данными:

сеточный объем \rightarrow принадлежность
подобласти ($T_m^h \in \Omega_k^h$)

сеточная грань \rightarrow принадлежность границе
($F_l^h \in \Gamma_k^h$)

Типы сеток

структурированные, неструктурированные,
квазиструктурированные, согласованные и
несогласованные (Γ_{k,k^0}^h $\overset{h}{k^0,k}$)

адаптивные: $V \subset V^h$, $E \subset \bar{E}^h$, $F \subset \tilde{F}^h$

измельчение шагов вблизи больших градиентов
статические и динамические (зависимость от
времени)

вид координатной системы: декартовая,
цилиндрическая, сферическая, криволинейная,
ортогональная

тип конечных объемов: параллелепипеды,
призмы, тетраэдры, октаэдры, симплексы
равномерные, неравномерные,

квазиравномерные вложенные $\bar{\Omega}_{hk} \supset \bar{\Omega}_{h,k+1}$

Структурированные сетки

Регулярные сетки с постоянными шагами, или изменяемыми по геометрической, или арифметической прогрессии

Кусочно-регулярные сетки

Топологически регулярные (прямоугольные, треугольные и т.д.)

**Квазиструктурированные сетки:
структурированные по подобластям,
согласованные или несогласованные**

Неструктурированные сетки

Методы конформных и квазиконформных отображений

фронтальные алгоритмы

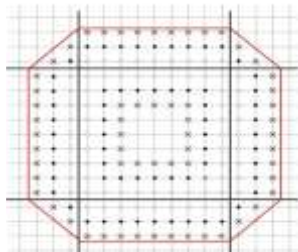
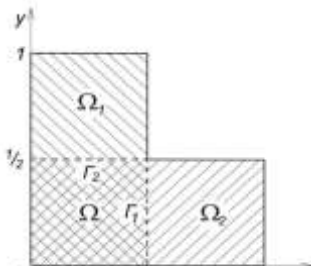
Вариационные методы

Построение сеток на принципах дифференциальной геометрии

**Иерархические методики дискретизации:
ребра, поверхностные сегменты, объемы,
сгущение и разрежение сеток**

Методы декомпозиции сеточных подобластей

- Альтернирующий метод Шварца
- Аддитивные методы декомпозиции с различными интерфейсными условиями
- Двухуровневые итерационные процессы в подпространствах Крылова
- Грубосеточные и другие приёмы ускорения

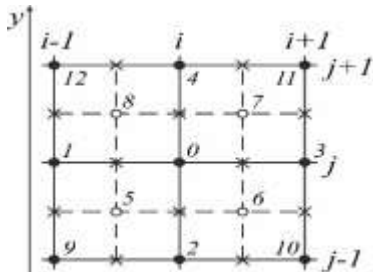


Принципы построения библиотеки

проблемная независимость и универсальная применимость, гибкие входные и выходные интерфейсы со множественными форматами данных (ГСД+ФСД \Rightarrow ССД)
возможность взаимодействия с САПР (САД, САЕ,...) и существующими ППП
свободный доступ к библиотеке (Open Source) для использования в некоммерческих проектах
возможность использования сторонних программ для построения сеток в подобластях
анализ и контроль качества с визуализацией сеток

Алгебраические, геометрические и комбинаторные многосеточные методы

- Многоуровневые итерационные алгоритмы на семействе вложенных сеток
- Операции сглаживания, проектирования, грубосеточной коррекции и продолжения
- Многосеточное предобуславливание в подпространствах Крылова



Технологические требования к ИВО

Гибкая расширяемость состава моделей, алгоритмов и технологий построения сеток.

Адаптация к эволюции суперкомпьютерных архитектур и платформ.

Отсутствие программных ограничений на число степеней свободы задачи и количество используемых вычислительных устройств.

Возможности переиспользования внешних программных продуктов.

Высокая производительность программного кода с масштабируемым параллелизмом.

Согласованное участие различных групп разработчиков.

Системное наполнение ИВО

Средства автоматизации для валидации, тестирования различных типов алгоритмов, в том числе в разных внешних окружениях.

Конфигурационное управление многоверсионных программных модулей.

Управление вычислительным процессом и организация расчетных сеансов.

Автоматизация построения и распараллеливания алгоритмов, их отображение на архитектуру ЭВМ.

Конкретизация и поддержка стилей программирования: модульное, сборочное, фрагментарное, функциональное.

Компонентные технологии для поддержки многоязыковости и кросс-платформенности проекта.

Создание отечественного конкурентно-способного импортозамещающего программного обеспечения.

Академические учебные и производственные версии.

Межведомственное взаимодействие групп разработчиков и пользователей. Организация сообщества и форумов ИВО.

Поддержка сопровождения, развития и инноваций ИВО.

Информационное обеспечение проекта и международные сотрудничество.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ



THANKS FOR ATTENTION