

УНИВЕРСАЛЬНАЯ МНОГОСЕТОЧНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ

Владимир Николаевич БАКУЛИН родился в 1949 г. в городе Новомосковске Тульской области. Ведущий научный сотрудник Института прикладной механики РАН. Кандидат технических наук, старший научный сотрудник. Основные научные интересы — в области механики, численных методов, вычислительной механики, математического моделирования. Автор более 170 научных работ. E-mail: vbak@yandex.ru.

Vladimir N. BAKULIN, Ph.D., was born in 1949, in the Tula Region. He is a Principal Research Associate at the Institute of Applied Mechanics RAS. His research interests are in mechanics, numerical methods, computational mechanics, mathematical modeling. He has published over 170 technical papers. E-mail: vbak@yandex.ru

Сергей Иванович МАРТЫНЕНКО родился в 1965 г. в городе Балашихе Московской области. Научный сотрудник ФГУП ЦИАМ им. П.И. Баранова. Кандидат физико-математических наук. Основные научные интересы — в области вычислительной гидродинамики, математического моделирования, численных методов. Автор 18 научных работ. E-mail: martyn_s@mail.ru

Sergey I. MARTYNENKO, Ph.D., was born in 1965, in the Moscow Region. He is a Research Associate at the P.I. Baranov Central Institute of Aviation Motors (CIAM). His research interests are in computational hydrodynamics, mathematical modeling, numerical methods. He has published 18 technical papers. E-mail: martyn_s@mail.ru

Статья посвящена проблеме создания вычислительной технологии для решения широкого класса прикладных задач. Данная технология предназначена для перспективного программного обеспечения, устроенного по принципу «черного ящика».

A problem statement is suggested to solve a broad class of application problems. The problem associates with computing technology development providing advanced black-box type software generation to solve continuum mechanics problems.

Ключевые слова: универсальная многосеточная технология, численные решения, задачи механики сплошной среды, программное обеспечение.

Key words: robust multigrid technique, numerical solutions, continuum mechanics problems, software.

Введение

В настоящее время широкое распространение получили автономные программы (устроенные по принципу «черного ящика»), используя которые инженер только формулирует задачу, а детали вычислительного алгоритма ему могут быть даже не известны. Применительно к техническим приложениям работу автономных программ упрощенно можно представить следующим образом: конструктор проектирует некоторый узел при помощи графической программы, например AutoCAD. Затем геометрия узла переносится в вычислительный модуль, конструктор задает граничные и начальные условия, после чего проводит тепловой, прочностной, гидродинамический или другой расчет и анализирует результаты. Как правило, после анализа полученных результатов нужно внести изменения в конструкцию и повторить расчет [1]. Обычно конструктор выполняет несколько подобных

итераций, чтобы получить оптимальную, с его точки зрения, конструкцию. Еще большую практическую ценность будет представлять возможность расчета машины в целом, а не только отдельных ее узлов, поскольку поэлементное моделирование часто связано с погрешностями постановки граничных условий.

Однако широкому внедрению методологии математического моделирования в расчетную практику в машиностроении препятствует несовершенство методов вычислений. Применение традиционных численных методов подразумевает возможность контроля математиком хода вычислительного процесса и внесения изменений в написанную им же программу. Ранее такой подход был оправдан, но с появлением мощных персональных компьютеров возникла острая потребность в новых вычислительных методах, обладающих достаточной точностью, эффективностью, высоким уровнем формализации

и параллелизма без контроля со стороны пользователя. Уже сейчас такие программные продукты, как ANSYS, STAR-CD, FLUENT, CFX, PHOENICS, и др. получили широкое применение в НИИ и ОКБ для решения разнообразных прикладных задач. Конечно, подобные программные средства еще далеки от совершенства и часто вызывают обоснованные претензии пользователей, что обусловлено использованием в них традиционных численных методов.

Разработка универсальной многосеточной технологии (УМТ) для перспективного программного обеспечения началась в 90-е годы [2—7]. УМТ определяется как наиболее рациональная организация вычислений при решении краевых задач без контроля хода вычислительного процесса пользователем автономной программы.

1. Постановка задачи о создании универсального алгоритма

Сформулируем задачу о построении универсального алгоритма для автономных программных продуктов. Пусть дана исходная дифференциальная задача

$$L(u) = f(x),$$

где $x \in \Omega$, Ω — область N -мерного пространства; $f(x)$ — заданная функция; L — (не)линейный дифференциальный оператор. Полагается, что граничные условия учтены оператором L и правой частью $f(x)$. В области Ω строится сетка и/или триангуляция, на которой осуществляется контрольно-объемная и/или конечно-элементная аппроксимация дифференциальной задачи. Обозначим результирующую систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), полученную в результате аппроксимации, как

$$Ax = b.$$

Предположим, что имеется множество итерационных методов Y , при помощи которых можно решить полученную СЛАУ. Тогда задача о построении универсального алгоритма состоит в отыскании такой стратегии применения итерационных методов из множества Y к решению СЛАУ $Ax = b$, которая позволит достичь скорости сходимости, близкой к оптимальной, т.е. для численного решения краевых задач нужно выполнить $O(N \lg^k N)$ арифметических операций, где N — число неизвестных, $k = 1, 2$.

При этом на универсальный алгоритм накладываются следующие ограничения:

1. *Минимальное использование ресурсов компьютера.* Темпы развития современных математических моделей опережают совершенствование аппаратной части вычислительной техники. Поэтому в отдельных случаях ресурсы компьютера могут быть задействованы преимущественно для хранения разностной задачи, а не промежуточных вычислений. Минимальный объем хранимых данных составит $\sim 2N$ вещественных чисел, т.е. в оперативной памяти могут размещаться только векторы x и b результирующей СЛАУ. В общем случае матрицу коэффициентов A хранить не имеет смысла, поскольку ее элементы будут пересчитываться после каждой итерации по нелинейности. Большинство реальных процессов описывается нелинейными уравнениями, и лишь в первом приближении эти уравнения можно заменить линейными [8]. Рациональное использование ресурсов компьютера позволит применять достаточно мелкие вычислительные сетки для численного решения краевых задач в автономных программах.

2. *Возможность изменения способа и/или порядка аппроксимации в процессе решения задачи.*

3. *Отсутствие проблемно-зависимых компонент.* В универсальном алгоритме не допускается применение компонент, которые зависят от решаемой задачи и обеспечивают высокую скорость сходимости. Однако возможно использование проблемно-зависимых параметров (например, верхней и/или нижней релаксации) при условии, что существует эффективная методика определения их оптимальных значений без контроля со стороны пользователя.

4. *Возможность эффективного распараллеливания вычислений вне зависимости от используемых итерационных методов из множества Y .*

По-видимому, отсутствие проблемно-зависимых компонент в универсальном алгоритме не позволит достичь оптимальной скорости сходимости ($k = 0$), хотя этот факт не доказан. Поэтому оценка максимального проигрыша в эффективности является основным вопросом в сравнении узкоспециализированных и универсальных алгоритмов.

2. основополагающие идеи УМТ

УМТ основана на адаптации краевых задач к вычислительному алгоритму, поэтому технология состоит из двух частей: аналитической и вычислительной [2]. Основное назначение аналитической части УМТ заключается в приведении краевых задач к виду, удобному для последующего численного решения унифицированным многосеточным методом. В отличие от классических многосеточных методов, индивидуальные особенности краевых задач

проявляются не в выборе проблемно-зависимых компонент, а в способе адаптации краевых задач к УМТ. Ряд новых конструктивных решений и априорная аналитическая адаптация краевых задач позволили исключить проблемно-зависимые компоненты из вычислительной части УМТ для ее последующей формализации и использования в автономном обеспечении [5].

Другой отличительной чертой УМТ является построение грубых сеток, которые обладают следующими свойствами:

1) каждый контрольный объем на сетках более мелких сетках представим в виде объединения 3^N ($N=2, 3$) контрольных объемов на более грубых сетках, что в сочетании со свойством аддитивности определенного интеграла относительно подобластей при использовании интегро-интерполяционного метода аппроксимации краевых задач позволит существенно расширить класс краевых задач, решаемых унифицированным образом;

2) каждая сетка представима в виде объединения 3^N соответствующих ей грубых сеток, что позволит исключить интерполяцию из УМТ;

3) сетки одного уровня не имеют общих точек, что позволит эффективно распараллеливать вычисления и экономно использовать память компьютера.

В качестве примера приведем результаты численного решения следующей краевой задачи:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda^x(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda^y(u) \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda^z(u) \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -f(x, y, z); \quad (1)$$

$$u(0, y, z) = e^{2y+3z}; \quad u(1, y, z) = e^{1+2y+3z};$$

$$u(x, 0, z) = e^{x+3z}; \quad u(x, 1, z) = e^{x+2+3z};$$

$$u(x, y, 0) = e^{x+2y}; \quad u(x, y, 1) = e^{x+2y+3}.$$

В случае если $\lambda^x(u) = u^{-\alpha}$, $\lambda^y(u) = u^{-\beta}$ и $\lambda^z(u) = u^{-\gamma}$, точное решение данной краевой задачи имеет вид

$u^a(x, y, z) = e^{x+2y+3z}$. Поставленная задача является модельной по отношению к нелинейным задачам теплопроводности в анизотропных средах. Коэффициенты α, β и γ предназначены для иллюстрации негативного влияния анизотропии среды на скорость сходимости итерационных методов.

Выберем в качестве начального приближения

$$u^{(0)}(x, y, z) = 0 \text{ и } \lambda^x(u^{(0)}) = 1, \\ \lambda^y(u^{(0)}) = 1, \lambda^z(u^{(0)}) = 1.$$

Вычисления проводились на равномерной сетке $101 \times 101 \times 101$. В качестве сглаживающей процедуры выбран метод Зейделя с точечным упорядочиванием неизвестных, т.е. рассматривался один из самых медленных вариантов УМТ.

В качестве критериев оценки точности численного решения выберем:

1) относительную норму вектора невязки

$$R = \frac{\|Au - b\|}{\|b\|},$$

2) погрешность численного решения

$$E = \max_{i,j,k} |u_{ijk} - u^a|.$$

Для выбранного начального приближения $u^{(0)}(x, y, z) = 0$ данные параметры равны $R^{(0)} = 1$ и

$E^{(0)} \approx e^6$. Результаты вычислительного эксперимента приведены в табл. 1, где T — время решения (в секундах) модельной задачи на компьютере с процессором Intel Pentium IV Celeron с тактовой частотой 2 ГГц, полученного после выполнения четырех многосеточных итераций.

Сравнение этих результатов со случаем $\alpha = \beta = \gamma = 0$ (линейное изотропное уравнение) показывает, что нелинейность и анизотропия не оказывают существенного влияния на скорость сходимости УМТ.

В прикладных задачах коэффициенты λ^x, λ^y и λ^z могут быть разрывными. Предположим, что область Ω , которая является единичным кубом, состоит из двух материалов с коэффициентами теплопроводности λ_i во внутренней подобласти $\tilde{\Omega}$ размера $1/3 \times 1/3 \times 1/3$ и λ_e . Вычислительный эксперимент предназначен для решения уравнения (1), где коэффициент теплопроводности принимает вид

$$\lambda^x = \lambda^y = \lambda^z = \begin{cases} \lambda_i, & (x, y, z) \in \tilde{\Omega}; \\ \lambda_e, & (x, y, z) \notin \tilde{\Omega}. \end{cases} \quad (2)$$

Разрывность коэффициента теплопроводности осложняет построение многосеточных алгоритмов [9, 10]. Известно, что полиномиальная интерполяция через поверхности разрыва коэффициентов приводит к большим погрешностям и, как следствие, к потере вычислительной эффективности алгоритма. Отсутствие интерполяции в УМТ позво-

Результаты вычислительного эксперимента при решении краевой задачи для уравнения (1)

α	β	γ	R	E	T, c
0,00	0,00	0,00	$4,423 \cdot 10^{-9}$	$1,766 \cdot 10^{-3}$	551
0,00	0,00	0,25	$4,622 \cdot 10^{-8}$	$8,451 \cdot 10^{-4}$	555
0,00	0,00	0,50	$2,075 \cdot 10^{-5}$	$6,700 \cdot 10^{-4}$	556
0,00	0,25	0,00	$2,555 \cdot 10^{-8}$	$2,078 \cdot 10^{-3}$	556
0,00	0,25	0,25	$4,631 \cdot 10^{-8}$	$6,961 \cdot 10^{-4}$	561
0,00	0,25	0,50	$5,376 \cdot 10^{-7}$	$2,714 \cdot 10^{-4}$	560
0,00	0,50	0,00	$9,241 \cdot 10^{-6}$	$2,499 \cdot 10^{-3}$	556
0,00	0,50	0,25	$3,099 \cdot 10^{-7}$	$7,577 \cdot 10^{-4}$	560
0,00	0,50	0,50	$6,840 \cdot 10^{-7}$	$1,781 \cdot 10^{-4}$	560
0,25	0,00	0,00	$1,521 \cdot 10^{-8}$	$2,131 \cdot 10^{-3}$	554
0,25	0,00	0,25	$2,408 \cdot 10^{-8}$	$1,055 \cdot 10^{-3}$	560
0,25	0,00	0,50	$4,981 \cdot 10^{-7}$	$8,569 \cdot 10^{-4}$	561
0,25	0,25	0,00	$1,310 \cdot 10^{-8}$	$2,618 \cdot 10^{-3}$	562
0,25	0,25	0,25	$1,633 \cdot 10^{-8}$	$9,347 \cdot 10^{-4}$	566
0,25	0,25	0,50	$1,110 \cdot 10^{-7}$	$3,436 \cdot 10^{-4}$	567
0,25	0,50	0,00	$2,547 \cdot 10^{-7}$	$3,260 \cdot 10^{-3}$	562
0,25	0,50	0,25	$4,912 \cdot 10^{-8}$	$1,083 \cdot 10^{-3}$	566
0,25	0,50	0,50	$1,259 \cdot 10^{-7}$	$1,893 \cdot 10^{-4}$	566
0,50	0,00	0,00	$3,423 \cdot 10^{-6}$	$2,406 \cdot 10^{-3}$	558
0,50	0,00	0,25	$1,748 \cdot 10^{-7}$	$1,217 \cdot 10^{-3}$	561
0,50	0,00	0,50	$4,370 \cdot 10^{-7}$	$1,014 \cdot 10^{-3}$	562
0,50	0,25	0,00	$1,496 \cdot 10^{-7}$	$3,034 \cdot 10^{-3}$	562
0,50	0,25	0,25	$2,305 \cdot 10^{-8}$	$1,127 \cdot 10^{-3}$	566
0,50	0,25	0,50	$5,244 \cdot 10^{-8}$	$4,237 \cdot 10^{-4}$	567
0,50	0,50	0,00	$2,432 \cdot 10^{-7}$	$3,850 \cdot 10^{-4}$	562
0,50	0,50	0,25	$2,272 \cdot 10^{-8}$	$1,365 \cdot 10^{-3}$	566
0,50	0,50	0,50	$3,693 \cdot 10^{-8}$	$2,398 \cdot 10^{-4}$	566

ляет решать задачи теплопроводности унифицированным образом вне зависимости от гладкости коэффициентов.

Таблица 2

Результаты вычислительного эксперимента при решении краевой задачи для уравнения (1) с разрывными коэффициентами

λ_e	λ_i	R	E	T, c
1	10^{+0}	$4,446 \cdot 10^{-9}$	$1,496 \cdot 10^{-7}$	338
1	10^{-1}	$4,409 \cdot 10^{-9}$	—	327
1	10^{-2}	$1,229 \cdot 10^{-8}$	—	329
1	10^{-3}	$1,516 \cdot 10^{-8}$	—	328
1	10^{-4}	$1,537 \cdot 10^{-8}$	—	336
1	10^{-5}	$1,896 \cdot 10^{-8}$	—	330

Вычислительный эксперимент проводился на четырехуровневой многосеточной структуре с самой мелкой сеткой $91 \times 91 \times 91$, остальные условия совпадают с условиями предыдущего эксперимента. Результаты, приведенные в табл. 2, показывают высокую скорость сходимости УМТ.

Примеры решения разнообразных краевых задач математической физики приводятся в [6].

Выводы

Дальнейшее совершенствование автономных программных продуктов для решения прикладных задач потребует разработки специальных вычислительных технологий, обладающих скоростью сходимости, близкой к оптимальной, и высоким уровнем формализации и параллелизма.

Библиографический список

1. Бакулин В.Н., Каледин В.О. Численно-аналитический подход к исследованию деформирования оболочечных конструкций из композитов // Изв. АН СССР. МТТ. 1989. № 4. С. 184-188.

2. Мартыненко С.И. Универсальная многосеточная технология для численного решения краевых задач на структурированных сетках // Вычислительные методы и программирование. 2000. Т.1. Раздел 1. С.85-104.

3. Мартыненко С.И. Универсальная многосеточная технология для численного решения систем дифференциальных уравнений в частных производных // Вычислительные методы и программирование. 2001. Т.1. Раздел 1. С.1-11.

4. Мартыненко С.И. Программное обеспечение для универсальной многосеточной технологии: строительные блоки и диагностические инструменты // Вычислительные методы и программирование. 2001. Т.4. Раздел 1. С.1-6.

5. Мартыненко С.И. Программное обеспечение для универсальной многосеточной технологии // Математическое моделирование. 2002. Т.14. № 9. С. 87-90.

6. Martynenko S.I. Robust Multigrid Technique for black box software // Comp. Meth. in Appl. Math. 2006. V. 6. № 4. P. 413-435.

7. Бакулин В.Н., Мартыненко С.И. Универсальная многосеточная технология для численного решения задач механики сплошной среды // Международная конференция «Шестые Окуневские чтения» 23-27 июня 2008 г., Санкт-Петербург: Материалы докладов. Т. II / Балт. гос. техн. ун-т. СПб., 2008, С. 47-50

8. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. — М.: Наука, 1989.

9. Wesseling P. An Introduction to Multigrid Methods, Wiley, Chichester, 1991. 10. Hackbusch W. Multi-grid methods and applications, Springer, Berlin, 1985.

Институт прикладной механики
Российской академии наук

ФГУП ЦИАМ им. П.И. Баранова
Статья поступила в редакцию 23.12.2008

Сдано в набор 12.05.09. Подписано в печать 5.06.09.
Бумага офсетная. Формат 60×84 1/8. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 20,46. Уч.-изд. л. 22,00. Тираж 160 экз.
Заказ 4263/240.

Издательство МАИ-ПРИНТ
(МАИ), Волоколамское ш., д. 4, Москва, А-80, ГСП-3 125993
Типография Издательства МАИ
(МАИ), Волоколамское ш., д. 4, Москва, А-80, ГСП-3 125993