

На правах рукописи

Васильев Олег Викторович

**Адаптивные вейвлетные коллокационные методы
многомасштабного численного моделирования задач
механики жидкости и газа**

Специальность: 01.01.07 — «Вычислительная математика»

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Москва — 2021

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук».

Официальные оппоненты: **Гаранжа Владимир Анатольевич**,
доктор физико-математических наук, профессор РАН,
Вычислительный центр им. А.А. Дородницына
ФИЦ ИУ РАН,
зав. сектором параллельных вычислений отдела
прикладных проблем оптимизации

Зайцев Дмитрий Кириллович,
доктор физико-математических наук, доцент,
Санкт-Петербургский политехнический универси-
тет Петра Великого, Институт прикладной матема-
тики и механики,
профессор Высшей школы прикладной математики
и вычислительной физики

Кудрявцев Алексей Николаевич,
доктор физико-математических наук,
Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН,
старший научный сотрудник Лаборатории вычис-
лительной аэродинамики

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учре-
ждение науки Институт вычислительной матема-
тики им. Г.И. Марчука Российской академии наук

Защита состоится 10 июня 2021 г. в 11 часов на заседании диссертационного
совета Д 002.024.03, созданного на базе ИПМ им. М.В. Келдыша РАН по адресу:
125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИПМ им. М.В.
Келдыша РАН <https://keldysh.ru/council/3/D00202403/defence3.htm>.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 002.024.03,
кандидат физ.-мат. наук



Корнилина М.А.

Общая характеристика работы

Актуальность. Численное моделирование задач механики жидкости и газа является одной из самых сложных областей вычислительной математики, в основном из-за нелинейности уравнений Эйлера и Навье—Стокса, большого разнообразия режимов и физики течений и необходимости разрешения широкого спектра масштабов, неравномерно распределённых в пространстве и времени.

Вейвлетный подход к решению задач механики жидкости и газа — довольно новая область исследований, появившаяся около тридцати пяти лет назад. Способность вейвлетного анализа идентифицировать и выделять локализованные структуры решения, такие как ударные волны и вихри, математическая строгость многомасштабного анализа в оценке ошибки вейвлетного разложения и регулярности решения, а также возможность эффективного представления решения вейвлетным разложением с пороговым сжатием и существование быстрого $O(N)$ вейвлетного преобразования делают вейвлеты очень привлекательными при разработке адаптивных численных методов.

Вейвлетные адаптивные методы могут быть разделены на два больших класса: подходы на основе аппроксимации Галеркина¹ или Петрова—Галеркина² и на основе методов коллокаций [42]. Основные сложности при использовании вейвлетных методов Галеркина связаны с определением общих граничных условий и вычислением нелинейных членов уравнений. В адаптивных вейвлетных коллокационных методах задача решается в узлах адаптивной вычислительной сетки, что устраняет две основные сложности, связанные с аппроксимацией Галеркина. В ранних работах по разработке вейвлетных коллокационных методов³, включая ранние работы автора диссертации [42—44], помимо применения сеточной адаптации на основе анализа вейвлетных коэффициентов и вейвлетной многоуровневой интерполяции, были попытки использовать операторное сжатие на основе прямого дифференцирования вейвлетного разложения с посчитанными значениями производных вейвлетных функций в бинарных точках. Однако эта процедура оказалась неэффективна по сравнению с более поздними разработками на основе интерполяционных свойств вейвлетов и многоуровневой конечно-разностной аппроксимации производных на фиксированном шаблоне с использованием фантомных узлов [37; 38] или с переменным динамическим шаблоном⁴.

¹*Maday, Y.* Dynamic adaptivity using wavelets basis for the approximation of partial-differential equations / Y. Maday, V. Perrier, J. C. Ravel // *Comptes Rendus Acad. Sci. Ser. I-Math.* 1991. Feb. Vol. 312, no. 5. P. 405—410.

²*Fröhlich, J.* Numerical simulation of decaying turbulence in an adaptive wavelet basis / J. Fröhlich, K. Schneider // *Applied and Computational Harmonic Analysis.* 1996. Vol. 3. P. 393—397.

³*Prosser, R.* On the use of wavelets in computational combustion / R. Prosser, R. S. Cant // *Journal of Computational Physics.* 1998. Vol. 147. P. 337—361.

⁴*Rastigejev, Y. A.* Wavelet-based adaptive multiresolution computation of viscous reactive flows / Y. A. Rastigejev, S. Paolucci // *International Journal for Numerical Methods in Fluids.* 2006. Nov. Vol. 52, no. 7. P. 749—784.

Ранние работы по разработке вейвлетных коллокационных методов⁵, включая работы автора диссертации [42—44], продемонстрировали возможности применения метода для численного решения уравнений математической физики, но отличались рядом существенных недостатков и ограничений, в основном связанных с использованием вейвлетов первого поколения, определённых операциями сдвига и масштабирования базисного вейвлета, а именно:

- отсутствием вейвлетного преобразования на адаптивной сетке;
- необходимостью использования квадратур для оценки вейвлетных коэффициентов на адаптивной сетке;
- неэффективным прямым дифференцированием вейвлетного разложения;
- плохой обусловленностью вейвлетов первого поколения в ограниченных областях, ухудшающей сходимость численных методов.

В 1996-ом году Свелденс⁶ разработал вейвлеты второго поколения, построение которых, в отличие от вейвлетов первого поколения, осуществляется в физическом пространстве и не накладывает требования инвариантности сдвига и масштабирования. Уникальные свойства двухстадийного вейвлетного преобразования второго поколения позволили автору диссертации устранить все вышеупомянутые недостатки подходов на основе вейвлетов первого поколения и разработать быстрое $O(N)$ вейвлетное преобразование на адаптивной сетке [37; 38], а также класс адаптивных вейвлетных коллокационных методов (AWCM) для решения эллиптических [41], параболических [37; 38] и гиперболических [32] систем уравнений.

Несмотря на более чем тридцатипятилетнюю историю вейвлетов со дня их открытия Гроссманом и Морле⁷ и широкого применения в науке и технике, параллельные вейвлетные технологии развивались лишь усилиями небольших групп исследователей, включая автора диссертации. До недавнего времени основное внимание было направлено на развитие неадаптивных параллельных вейвлетных алгоритмов, таких как параллельное вейвлетное преобразование для параллельных компьютеров с распределённой и общедоступной архитектурой памяти⁸ и параллельное вейвлетное преобразование для графических процессоров⁹. Помимо параллельного адаптивного вейвлетного коллокационного метода (P-AWCM), разработанного автором диссертации [28], также отметим

⁵ Cai, W. Adaptive multiresolution collocation methods for initial boundary value problems of nonlinear PDEs / W. Cai, J. Z. Wang // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. 1996. Vol. 33. P. 937—970.

⁶ Sweldens, W. The lifting scheme: a custom-design construction of biorthogonal wavelets / W. Sweldens // *Applied and Computational Harmonic Analysis*. 1996. Vol. 3, no. 2. P. 186—200.

⁷ Grossmann, A. Decomposition of hardy functions into square integrable wavelets of constant shape / A. Grossmann, J. Morlet // *SIAM Journal on Mathematical Analysis*. 1984. Vol. 15, no. 4. P. 723—736.

⁸ Kutil, R. Parallel adaptive wavelet analysis / R. Kutil, A. Uhl // *Future generation computer systems - the international journal of grid computing and e-science*. 2001. Sept. Vol. 18, no. 1. P. 97—106.

⁹ Galiano, V. Parallel strategies for 2D discrete wavelet transform in shared memory systems and GPUs / V. Galiano, O. Lopez, M. P. Malumbres, H. Migallon // *J. Supercomput.* 2013. Apr. Vol. 64, no. 1. P. 4—16.

существенный вклад в развитие параллельных адаптивных вейвлетных технологий таких методов, как многоблочный адаптивный вейвлетный метод¹⁰, метод адаптивной вейвлетной многомасштабной аппроксимации¹¹ и адаптивный вейвлетный метод для уравнений мелкой воды на сфере¹².

В большинстве традиционных и вейвлетных адаптивных методов используются пространственная адаптация и маршевые методы с адаптивным глобальным или варьирующимся в пространстве шагом по времени¹³. Основным недостатком всех маршевых методов является накопление ошибки во времени, даже при контроле пространственно-временных ошибок интегрирования. В настоящий момент существует два подхода контроля глобальной ошибки во времени. Первый основан на вариационном подходе¹⁴, в котором глобальная ошибка интегрирования по времени может быть уменьшена до желаемой точности для любого конечного промежутка времени, второй — на использовании пространственно-временных конечных элементов¹⁵. Автором диссертации исследован альтернативный адаптивный подход к численному решению задач в пространственно-временной области, не базирующийся на маршевых методах. Разработанный пространственно-временной адаптивный вейвлетный коллокационный метод (ST-AWCM) [1] для решения параболических уравнений устраняет две основные проблемы классических методов, а именно, неэффективность использования общего, не меняющегося в пространстве шага интегрирования по времени и отсутствие возможности контролировать глобальную ошибку во времени.

Эффективное численное моделирование течений жидкости и газа со сложной геометрией, особенно с движущимися элементами или деформируемыми границами, представляет собой довольно сложную задачу. В настоящий момент существует два основных подхода численного моделирования задач сложной геометрии: методы на основе согласованных сеток, отслеживающих границы

¹⁰Rossinelli, D. Multicore/multi-GPU accelerated simulations of multiphase compressible flows using wavelet adapted grids / D. Rossinelli, B. Hejazialhosseini, D. G. Spampinato, P. Koumoutsakos // *SIAM Journal on Scientific Computing*. 2011. Vol. 33, no. 2. P. 512—540.

¹¹Paolucci, S. WAMR: an adaptive wavelet method for the simulation of compressible reacting flow. Part II. The parallel algorithm / S. Paolucci, Z. J. Zikoski, T. Grenga // *Journal of Computational Physics*. 2014. Vol. 272. P. 842—864.

¹²Kevlahan, N. K. R. WAVETRISK-1.0: an adaptive wavelet hydrostatic dynamical core / N. K. R. Kevlahan, T. Dubos // *Geoscientific Model Development*. 2019. Nov. Vol. 12, no. 11. P. 4901—4921.

¹³Müller, S. Fully adaptive multiscale schemes for conservation laws employing locally varying time stepping / S. Müller, Y. Stiriba // *Journal of Scientific Computing*. 2007. Vol. 30, no. 3. P. 493—531.

¹⁴Kane, C. Variational integrators and the newmark algorithm for conservative and dissipative mechanical system / C. Kane, J. E. Marsden, M. Ortiz, M. West // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 1999. Vol. 49. P. 1295—1325.

¹⁵Tremblay, P. Control of discretization error for time-continuous space-time FEM through mesh movement / P. Tremblay, Y. Bourgault, S. Tavoularis // *Computational Fluid and Solid Mechanics 2003*, Vols 1 and 2, Proceedings / ed. by K. Bathe. 2003. P. 2156—2159.

области¹⁶, и методы погруженных (затопленных) границ¹⁷. В общепринятом подходе на основе согласованных структурированных и неструктурированных сеток узлы расчётной сетки совпадают с границей области, что позволяет напрямую накладывать граничные условия в узлах сетки. Основной сложностью использования согласованных сеток является дороговизна их построения, контроль качества вычислительных сеток и невозможность применения декартовых сеток. Построение согласованных сеток сильно усложняется для геометрии с движущимися или деформируемыми границами, так как требует непрерывной адаптации или построения новой сетки с интерполяцией решения со старой сетки на новую.

Метод погруженных границ позволяет избежать затрат и сложностей, связанных с построением согласованных сеток, и дает возможность численного моделирования с использованием декартовых сеток посредством изменений уравнений, обеспечивающих выполнение граничных условий без сосредоточения узлов сетки вдоль поверхности. Методы погруженных границ могут быть разделены на два больших класса: дискретные и дифференциальные (объёмные) методы. Дискретные подходы основаны на прямой манипуляции дискретизированных уравнений, обеспечивающей выполнение тех или иных граничных условий, что делает их трудно обобщаемыми ввиду прямой зависимости от методов дискретизации¹⁸. Самым большим недостатком дискретных методов погруженных границ является отсутствие математических доказательств их сходимости и сложность контроля ошибки аппроксимации граничных условий. Дифференциальные методы погруженных границ^{19,20,21} основаны на решении модифицированных уравнений, пенализированных штрафными функциями в виде дополнительных сил или членов обратной связи, обеспечивающих выполнение граничных условий.

Методы штрафных функций (МШФ) представляют отдельный подкласс дифференциальных методов погруженных границ, в которых эффект присутствия объектов сложной геометрии достигается посредством введения дополнительных объёмных источников членов в дифференциальные уравнения,

¹⁶Thompson, J. F. Boundary fitted coordinate systems for numerical solution of partial differential equations – A review / J. F. Thompson, Z. U. A. Warsi, C. W. Mastin // Journal of Computational Physics. 1982. Vol. 47. P. 1–108.

¹⁷Peskin, C. S. The immersed boundary method / C. S. Peskin // Acta Numerica. 2002. P. 479–517.

¹⁸Lai, M. C. An immersed boundary method with formal second order accuracy and reduced numerical viscosity / M. C. Lai, C. S. Peskin // Journal of Computational Physics. 2000. Vol. 160. P. 705–719.

¹⁹Бугров, А. Н. Метод фиктивных областей в краевых задачах для уравнений Навье-Стокса / А. Н. Бугров, Ш. С. Смагулов // Математические модели течений жидкости: Сборник научных трудов / Институт теоретической и прикладной механики Сибирского отделения Академии наук СССР. Новосибирск, 1978. С. 79–90.

²⁰Вабищевич, П. Н. Численная реализация метода фиктивных областей для нестационарных уравнений Навье-Стокса / П. Н. Вабищевич // Численные методы механики сплошной среды. Новосибирск. 1985. Т. 16, № 6. С. 19–37.

²¹Goldstein, D. Modeling a no-slip boundary with an external force field / D. Goldstein, R. Handler, L. Sirovich // Journal of Computational Physics. 1993. Vol. 105. P. 354–366.

описывающие эволюцию течения жидкости или газа, после чего модифицированные пенализированные уравнения дискретизируются и решаются с помощью соответствующего вычислительного метода. Метод штрафных функций Бринкмана (МШФБ), первоначально предложенный Аркусом и Калтагионом²² для численного моделирования вязких течений несжимаемой жидкости, заключается в использовании физически мотивированных штрафных функций, моделирующих твёрдое тело как пористую среду с малой, приближающейся к нулю, проницаемостью. Основным преимуществом МШФБ по сравнению с другими известными методами погруженных границ является возможность аналитической оценки и активного контроля ошибки решения пенализированных уравнений через изменение штрафного параметра. Ввиду простоты, лёгкости и общности применения, а также малой вычислительной стоимости, метод штрафных функций Бринкмана подходит для численного моделирования течений сложной геометрии, включая течения с движущимися и деформируемыми границами. МШФБ был обобщён и применён в контексте разнообразных численных методов, таких как псевдоспектральные методы²³, методы конечных элементов²⁴, методы конечных объёмов²⁵, и вейвлетные методы²⁶, включая работы автора диссертации [2; 3; 7; 19—24; 40].

В отечественной литературе получило развитие независимое параллельное направление исследований дифференциального подкласса метода погруженных границ, широко известного как метод *фиктивных областей* (МФО), основная идея которого заключается в решении приближенной задачи не в исходной сложной области Ω_f , а в более простой области Ω_s , включающей $\Omega_f \subset \Omega_s$. Вспомогательная задача в фиктивной (комплементарной) области $\Omega_p = \Omega_s \setminus \Omega_f$ формулируется таким образом, чтобы в ней присутствовал малый параметр η , определяющий величину разрыва коэффициентов уравнений на границе области $\partial\Omega_p$, и имела место сходимость приближенного решения параметризованной задачи к точному решению в области Ω_f при $\eta \rightarrow 0$. Детальный обзор литературы

²²Arquis, E. Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide - milieu poreux : application à la convection naturelle / E. Arquis, J. P. Caltagirone // Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series II. 1984. Vol. 299. P. 1—4.

²³Kolomenskiy, D. A Fourier spectral method for the Navier–Stokes equations with volume penalization for moving solid obstacles / D. Kolomenskiy, K. Schneider // Journal of Computational Physics. 2009. Vol. 228, no. 16. P. 5687—5709.

²⁴Ramière, I. A fictitious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions / I. Ramière, P. Angot, M. Belliard // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 2007. Vol. 196. P. 766—781.

²⁵Абалакин, И. В. Метод погруженных границ на деформируемых неструктурированных сетках для моделирования аэроакустики крылового профиля / И. В. Абалакин, А. П. Дубень, Н. С. Жданова, Т. К. Козубская, Л. Н. Кудрявцева // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2019. Т. 59, № 12. С. 2046—2059.

²⁶Schneider, K. Adaptive wavelet simulation of a flow around an impulsively started cylinder using penalisation / K. Schneider, M. Farge // Applied and Computational Harmonic Analysis. 2002. Vol. 12. P. 374—380.

по истории развития и применению МФО можно найти в монографии Вабищевича²⁷. Метод фиктивных областей с продолжением по младшим коэффициентам математически идентичен методу штрафных функций Бринкмана, и в западной литературе названия этих методов используются взаимозаменяемо. Ввиду математической эквивалентности двух подходов и для простоты обсуждения, в данной диссертации все дифференциальные подклассы метода погруженных границ классифицируются как метод штрафных функций.

Методы штрафных функций и, в частности, МШФБ хорошо подходят для совместного использования с классическими методами сеточной адаптации и адаптивными подходами на основе вейвлетов. Для правильного определения геометрии вблизи границы и разрешения всех локальных структур решения, как правило, требуется высокое сеточное разрешение. Адаптация сетки позволяет воспроизводить геометрию с заданной точностью без чрезмерного разрешения вдали от границы и минимизировать количество узлов сетки внутри объекта сложной геометрии, необходимых для определения граничных условий. Динамическая адаптация сетки позволяет численное моделирование не только стационарных тел, но и объектов с движущимися или деформируемыми границами.

Большинство методов штрафных функций, включая МШФБ, разработано для численного моделирования течений несжимаемой жидкости. Одна из первых попыток обобщить метод погруженных границ для сжимаемого газа была предпринята Гиасом и соавторами²⁸, однако в формулировке работы не было учтено отражение и прохождение акустических волн через границу газа и твердой поверхности, что может привести к существенной ошибке, особенно при наличии ударных волн. Метод несогласованного импеданса²⁹ представляет более систематизированный подход, но его применение ограничено линеаризованными задачами со стационарными базовыми течениями. Обобщение метода штрафных функций Бринкмана для течений сжимаемого газа впервые было предложено автором диссертации на основе физически обоснованной математической модели течения через пористую среду [23; 24]. В разработанном методе, как и в случае несжимаемой жидкости, ошибка решения пенализированных уравнений может контролироваться через изменение параметров штрафных функций.

Методы штрафных функций Бринкмана, несмотря на возможность контроля ошибки численного решения изменением величин штрафных параметров, обладают существенным недостатком, связанным с отсутствием возможности накладывать общие граничные условия. Для устранения этого ограничения, автором диссертации разработан метод характеристических штрафных функций

²⁷ Вабищевич, П. Н. Метод фиктивных областей в задачах математической физики / П. Н. Вабищевич. Издательство Московского университета, 1991.

²⁸ Ghias, R. A non-body conformal grid method for simulation of compressible flows with complex immersed boundaries / R. Ghias, R. Mittal, T. S. Lund // AIAA Paper No. 2004-0080. 2004.

²⁹ Chung, C. Acoustic scattering from two- and three-dimensional bodies / C. Chung, P. J. Morris // Journal of Computational Acoustics. 1998. Vol. 6. P. 357–375.

(МХШФ) [2; 3], позволяющий задавать общие однородные и неоднородные граничные условия Неймана и Робена и сохраняющий возможность контролировать ошибку численного решения пенализированных уравнений с помощью параметров штрафных функций.

Таким образом, актуальность темы диссертации подтверждается

- необходимостью разработки эффективных адаптивных технологий численного моделирования, интерес к которым с увеличением применения компьютерных вычислений для проектирования сложных инженерных систем постоянно возрастает;
- большим количеством работ в области вейвлетных методов и методов погружённых границ при сравнительно недолгой истории развития темы;
- целесообразностью устранения недостатков и ограничений ранее разработанных адаптивных методов на основе вейвлетов первого поколения;
- необходимостью расширения области применения адаптивных вейвлетных методов для решения задач со сложной геометрией со стационарными, подвижными и деформируемыми границами;
- потребностью разработки более общих методов штрафных функций, расширяющих область применения для всех скоростных режимов течения жидкости и газа и обеспечивающих возможность задавать общие однородные и неоднородные граничные условия с контролируемой ошибкой решения; а также
- необходимостью разработки универсального и эффективного метода для численного решения широкого спектра задач механики жидкости и газа, включающих моделирование дозвуковых, трансзвуковых и сверхзвуковых, инертных и химически реагирующих, ламинарных, переходных и турбулентных течений.

Целью данной диссертации является разработка новых классов эффективных многомасштабных адаптивных вычислительных методов для решения задач математической физики в сложной геометрии, позволяющих задавать произвольные граничные условия и динамически адаптировать сетку к локальным структурам решения и геометрии задачи с априорной аналитической оценкой и активным контролем ошибки решения, и демонстрация возможностей применения разработанных методов для решения широкого спектра задач механики жидкости и газа, включающих течения несжимаемого/сжимаемого, вязкого/невязкого, инертного/химически реагирующего газа/жидкости во всех скоростных режимах.

Для достижения поставленной цели в диссертации решены следующие **задачи**:

- разработан класс адаптивных вейвлетных коллокационных методов (AWCM) для решения эллиптических [41], параболических [37; 38]

и гиперболических [32] систем уравнений, состоящий из следующих ключевых компонент:

- процедуры проверки восстановления функции, обеспечивающей принудительное включение узлов-предков нижних уровней разрешения, необходимых для рекурсивного вычисления вейвлетных коэффициентов на адаптивной сетке,
 - быстрого $O(N)$ вейвлетного преобразования второго поколения на адаптивной сетке,
 - алгоритма быстрого $O(N)$ вычисления производных на адаптивной сетке, использующего интерполяционные свойства вейвлетов и многоуровневую конечно-разностную аппроксимацию производных на фиксированных шаблонах с фантомными узлами,
 - многоуровневого итерационного вейвлетного коллокационного метода для решения эллиптических задач на адаптивной сетке;
- разработан параллельный адаптивный вейвлетный коллокационный метод (P-AWCM) [28], включающий следующие ключевые компоненты:
- асинхронное параллельное адаптивное вейвлетное преобразование второго поколения,
 - алгоритм динамической балансировки загрузки процессов с сохранением локальности соседних узлов адаптивной сетки;
- разработан пространственно-временной адаптивный вейвлетный коллокационный метод (ST-AWCM) [1], обладающий способностью активного контроля глобальной ошибки интегрирования во времени;
- разработан итерационный вейвлетный метод полной аппроксимации (W-FAS) [1] для решения нелинейных систем уравнений;
- метод штрафных функций Бринкмана обобщён для течений сжимаемого газа [23; 24];
- разработан метод характеристических штрафных функций (МХШФ) [2; 3], позволяющий задавать общие однородные и неоднородные граничные условия Неймана и Робена с контролируемой ошибкой решения;
- для расширения области применения адаптивных вейвлетных коллокационных методов для решения задач со сложной геометрией AWCM объединён с разработанными методами штрафных функций [2; 3; 19–24; 40];
- продемонстрированы возможности применения разработанных методов для численного решения широкого спектра задач механики жидкости и газа, включающих моделирование вязкой несжимаемой жидкости [5–7; 9; 11; 12; 16; 18; 25; 26; 39], вязкого [2; 10; 13; 14; 23; 24; 29; 37] и невязкого [3; 32–35] сжимаемого газа, а также дозвуковых [2; 8; 13; 14; 23; 24; 29; 30], трансзвуковых [13] и сверхзвуковых [3; 10; 13; 14; 32; 34], инертных [2; 10; 13; 14; 23; 24; 29; 30] и химически реагирующих [17;

31; 33; 34; 37; 38], ламинарных [1; 2; 19], переходных [7] и турбулентных [8; 10; 11; 13; 14; 18; 26] течений.

Научная новизна. В диссертации представлен разработанный автором принципиально новый класс коллокационных методов на основе вейвлетов второго поколения, обеспечивающий системный подход к численному решению параболических, эллиптических и гиперболических систем уравнений и способный выделять, разрешать и отслеживать локальные структуры решения на адаптивных вычислительных сетках с активным контролем ошибки решения.

В диссертации также представлены разработанные автором метод штрафных функций Бринкмана для численного моделирования течений сжимаемого вязкого газа и принципиально новый метод характеристических штрафных функций с уникальными свойствами, отличающими его от всех известных методов погруженных границ общностью формулировки и возможностью накладывать произвольные граничные условия с контролируемой ошибкой решения, по функциональности, гибкости и простоте применения близкой к определению аналитических граничных условий.

Новаторскими результатами автора также являются обобщение адаптивного вейвлетного коллокационного метода для параллельных вычислений, разработка принципиально нового пространственно-временного адаптивного вейвлетного коллокационного метода, позволяющего получить численное решение на адаптивной пространственно-временной сетке и обладающего способностью активного контроля глобальной ошибки во времени, и объединение адаптивного вейвлетного коллокационного метода с разработанными методами штрафных функций, расширяющее возможности применения комбинированного метода и позволяющее локальное разрешение геометрии и структур решения с систематическим контролем ошибки решения и аппроксимации граничных условий.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты диссертации имеют как теоретическую, так и практическую значимость. Адаптивный вейвлетный коллокационный метод является новым перспективным направлением вычислительной математики, развитие которого будет способствовать прогрессу в области адаптивных вычислительных технологий, потребность в которых с увеличением применения компьютерных вычислений для проектирования сложных инженерных систем постоянно возрастает.

Разработанные в диссертации методы штрафных функций применимы для совместного использования практически со всеми известными адаптивными и неадаптивными методами, включая методы конечных объёмов и конечных элементов, спектральные и конечно-разностные методы.

Способность разработанных в диссертации методов получать решение с автоматическим контролем ошибки на адаптивной сетке, отслеживающей и разрешающей с заданной точностью все структуры решения и границы области, общность формулировки, возможность задавать произвольные граничные

условия и применимость методов для решения широкого спектра задач математической физики, включая численное моделирование течений вязкого/невязкого, сжимаемого/несжимаемого, химически инертного/реагирующего газа во всех скоростных режимах, существенно упрощает применение разработанных методов в инженерных и научных задачах.

Разработанный адаптивный вейвлетный коллокационный метод с возможностью систематического контроля ошибки и сеточного разрешения открывает перспективы принципиально новой философии численного моделирования, основанной на осознании необходимости тесной интеграции математического моделирования, адаптивных численных методов и алгоритмов генерации сетки для более гибкого учёта физики задачи, минимизации вычислительных ресурсов, улучшения качества и эффективности численного моделирования и повышения степени прогнозирования физических свойств моделируемых систем. Одним из таких перспективных направлений исследований является иерархическое адаптивное вихререзающее моделирование турбулентных течений, ключевым звеном которого служит адаптивный вейвлетный коллокационный метод.

Методология и методы исследования. В основе адаптивного вейвлетного коллокационного метода лежит многомасштабный вейвлетный анализ второго поколения, позволяющий разложение решения по многоуровневым базисным функциям, локализованным как в физическом пространстве, так и в пространстве волновых чисел, и обеспечивающий эффективное сжатое представление решения с одновременным контролем ошибки аппроксимации. Полиномиальная сходимость вейвлетного разложения и локальность вейвлетных базисных функций даёт возможность использовать метод коллокаций с однозначным соответствием между узлами сетки и базисными функциями, что, в свою очередь, открывает возможность сеточной адаптации и контроля ошибки аппроксимации на основе анализа коэффициентов вейвлетного разложения и порогового вейвлетного сжатия решения. Процедура проверки восстановления функции и обобщение вейвлетного преобразования второго поколения для адаптивной многоуровневой сетки основаны на уникальных свойствах двухстадийного рекурсивного вейвлетного преобразования второго поколения. Процедура численного дифференцирования на адаптивной сетке использует быстрое $O(N)$ вейвлетное преобразование на адаптивной сетке и многоуровневую конечно-разностную аппроксимацию.

Многоуровневый итерационный алгоритм адаптивного вейвлетного коллокационного метода для решения эллиптических задач аналогичен многосеточному методу³⁰, но отличается структурой встроенных сеток и применением вейвлетной интерполяции для операторов расширения и сжатия. Способность вейвлетного анализа определять месторасположение разрывов решения и динамически сгущать вычислительную сетку используется для определения

³⁰Федоренко, Р. П. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений / Р. П. Федоренко // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1961. Т. 1, № 5. С. 922–927.

локализованной искусственной вязкости в AWCМ для сглаживания разрывных решений и по своему духу напоминает метод ограничения потока³¹.

Обобщение адаптивного вейвлетного коллокационного метода для параллельных вычислений основано на разработанном автором диссертации асинхронном параллельном вейвлетном преобразовании второго поколения, использующим динамически распределённую между процессами структуру деревьев произвольной размерности с динамической балансировкой загрузки процессов.

Для расширения области применения AWCМ для задач со сложной геометрией использован метод погруженных границ на основе ряда методов штрафных функций, разработанных автором диссертации, позволяющих накладывать произвольные граничные условия на поверхности встроенных областей с заранее предписанной и контролируемой точностью.

Все разработанные методы и алгоритмы подтверждены численными экспериментами и проверкой теоретически полученных оценок асимптотической сходимости на примере тестовых задач с известными аналитическими или численными решениями. Разработанные методы продемонстрированы для численного решения уравнений Эйлера и Навье—Стокса для несжимаемой жидкости и сжимаемого реагирующего и инертного газа как в простой, так и в сложной геометрии с применением методов штрафных функций.

Перечислим **основные научные результаты, выносимые на защиту**:

1. Для эффективного численного решения параболических, эллиптических и гиперболических систем уравнений разработан класс коллокационных методов на основе вейвлетов второго поколения, способных выделять, разрешать и отслеживать локальные структуры решения на адаптивных вычислительных сетках с активным контролем ошибки решения. Теоретически полученные аналитические оценки асимптотической сходимости разработанных методов подтверждены результатами численных экспериментов по решению тестовых задач с известными аналитическими решениями.
2. Адаптивный вейвлетный коллокационный метод обобщён для параллельных вычислений.
3. Для параболических задач с высокой перемежаемостью разработан пространственно-временной адаптивный вейвлетный коллокационный метод, позволяющий получить решение с одновременной адаптацией сетки в пространстве и времени.

³¹van Leer, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second order sequel to godunov's method / B. van Leer // Journal of Computational Physics. 1979. Vol. 32, no. 1. P. 101—136.

4. Для расширения области применения адаптивного вейвлетного коллокационного метода при решении задач со сложной геометрией, включая подвижные и деформируемые границы, разработан класс методов штрафных функций, позволяющих задавать однородные и неоднородные граничные условия Дирихле, Неймана и Робена на границе областей сложной геометрии с возможностью оценки и активного контроля ошибки решения через изменение параметров штрафных функций. Получены теоретические оценки асимптотической сходимости разработанных методов.
5. Продемонстрированы возможности применения и эффективность адаптивного вейвлетного коллокационного метода для численного моделирования широкого спектра задач механики жидкости и газа как в простой, так и в сложной геометрии с применением разработанных методов штрафных функций.

Личный вклад автора. Автор диссертации является основателем класса коллокационных методов на основе вейвлетов второго поколения [28; 32; 37; 38; 41]. Вклад автора в совместные работы заключался: в формулировке разрабатываемых методов [1—4; 23; 24; 28; 32; 38; 41], постановке задач [1—16; 23—30; 32; 38—41], получении ключевых теоретических и практических результатов [2—5; 8—11; 15—17; 23—35; 38—45], технической реализации [1—19; 21—35; 38—46], постановке численных экспериментов [1—19; 21—35; 38—45] и анализе полученных результатов [1—45]. Автор диссертации является основным разработчиком адаптивной среды для универсального численного многомасштабного моделирования (AWESUMM) [46], которая использовалась для получения результатов диссертации и всех вышеупомянутых работ. Вклад автора является определяющим при получении всех научных результатов, выносимых на защиту.

Степень достоверности результатов исследований, изложенных в диссертации. Апробация. Достоверность результатов диссертации подтверждается следующим:

1. Все разработанные методы детально описаны и реализованы в адаптивной среде для универсального численного многомасштабного моделирования (AWESUMM) [46].
2. Все теоретически полученные оценки асимптотической сходимости разработанных методов подтверждены результатами численных экспериментов по решению тестовых задач с известными аналитическими или численными решениями.
3. Результаты численного моделирования течений подтверждены соответствием с опубликованными экспериментальными и вычислительными результатами, полученными другими авторами с использованием альтернативных методов.

4. Основные результаты по теме диссертации опубликованы в **46** печатных изданиях, **42** из которых – в периодических научных журналах или изданиях, индексируемых **Web of Science** или **Scopus** [1; 2; 4–16; 18; 19; 24–30; 32–45], [3; 17; 23; 31], **3** – в тезисах докладов [20–22].
5. Результаты диссертации представлены автором в приглашённых докладах на **43** международных конференциях и на семинарах университетов и научных центров (полный список приведён в диссертации).
6. Результаты диссертации докладывались на **66** международных конференциях (полный список приведён в диссертации).

Соответствие паспорту специальности. Диссертация посвящена разработке новых классов адаптивных многомасштабных вычислительных методов для решения широкого спектра задач математической физики в простой и сложной геометрии с возможностью задавать произвольные граничные условия, с аналитической априорной оценкой и активным контролем ошибки решения, с автоматической динамической адаптацией сетки и приложениями разработанных методов для численного моделирования задач механики жидкости и газа и соответствует следующим направлениям, указанным в специальности **01.01.07** — **Вычислительная математика**:

- Создание алгоритмов численного решения задач алгебры, анализа, дифференциальных и интегральных уравнений, математической физики, теории вероятностей и статистики, типичных для приложений математики к различным областям науки и техники.
- Разработка теории численных методов, анализ и обоснование алгоритмов, вопросы повышения их эффективности.
- Реализация численных методов в решении прикладных задач, возникающих при математическом моделировании естественнонаучных и научно-технических проблем, соответствие выбранных алгоритмов специфике рассматриваемых задач.

Благодарности. Автор выражает глубокую признательность Н.-К. Р. Кевлахану, Г. Де Стефано и М. Ю. Хуссаини за многолетнее плодотворное сотрудничество и ученикам Д. Голдштейну, К. Лиу, Дж. Регелу, А. Везолайнену, С. Рекинджер, С. Дж. Рекинджеру, А. Неджамалайери, Э. Браун—Димкоски и Н. Касимову за неоценимую помощь в воплощении и развитии адаптивного вейвлетного коллокационного метода, методов штрафных функций и применении разработанных методов для численного решения задач механики жидкости и газа.

Содержание диссертации

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, шести глав, и заключения. Полный объём диссертации составляет 395 страниц, включая

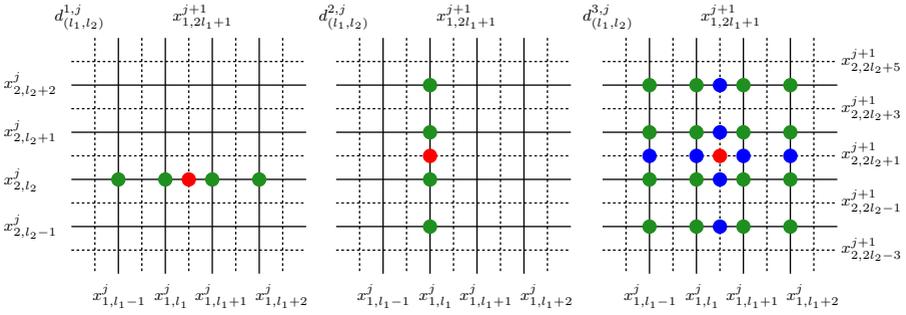


Рис. 1 — Иллюстрация процедуры проверки восстановления функции для двумерного вейвлетного преобразования четвертого порядка: узлы-предки на более грубом уровне разрешения j (●) и более высоком уровне разрешения $j+1$ (●), необходимые для вычисления вейвлетного коэффициента $d_1^{\mu, j}$, $\mu = 1, \dots, 3$ (●).

161 рисунок, 12 алгоритмов и 6 таблиц. Список литературы содержит 337 наименований.

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации, обсуждается степень её разработанности, представлены основные цели и задачи, научная новизна, значимость работы, а также основные положения, выносимые на защиту.

В **главе 1** после краткого описания основных свойств вейвлетного многомасштабного анализа первого и второго поколений соответственно в разделах 1.1 и 1.2, в разделе 1.3 представлены ключевые компоненты разработанного автором диссертации адаптивного вейвлетного коллокационного метода (AWCM). В подразделе 1.3.1 рассмотрено вейвлетное пороговое сжатие функции $u(\mathbf{x})$, определённое как

$$u_{\geq}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\phi}^0} c_{\mathbf{k}}^0 \phi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{x}) + \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{\mu=1}^{2^n-1} \sum_{\mathbf{l} \in \mathcal{I}_{\psi}^{\mu, j}} d_1^{\mu, j} \psi_1^{\mu, j}(\mathbf{x}) \quad (1)$$

$$|d_1^{\mu, j}| \geq \epsilon \|u\|$$

и позволяющее активный контроль ошибки аппроксимации через пороговый параметр ϵ . В разложении (1) $\phi_{\mathbf{k}}^j(\mathbf{x})$ ($\mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\phi}^j$) и $\psi_1^{\mu, j}(\mathbf{x})$ ($\mathbf{l} \in \mathcal{I}_{\psi}^{\mu, j}$) обозначают соответственно n -мерные тензорные скалярные функции и вейвлеты разных семейств, \mathcal{I}_{ϕ}^j и $\mathcal{I}_{\psi}^{\mu, j}$ — соответственно множества индексов скалярных функций и вейвлетов семейства μ на уровне j , а $\|u\|$ — абсолютный (размерный) масштаб вейвлетного порога. В подразделе также приведены асимптотические оценки локального разрешения, количества *значимых* (больше $\epsilon \|u\|$) коэффициентов вейвлетного разложения $\mathcal{N}_{\mathcal{S}}$ в зависимости от величины вейвлетного порога и полиномиального порядка вейвлета, а также следующая асимптотическая оценка ошибки вейвлетной аппроксимации как функции от $\mathcal{N}_{\mathcal{S}}$:

$$\|u(\mathbf{x}) - u_{\geq}(\mathbf{x})\|_{\infty} \leq C \|u\| \mathcal{N}_{\mathcal{S}}^{-p/n}, \quad (2)$$

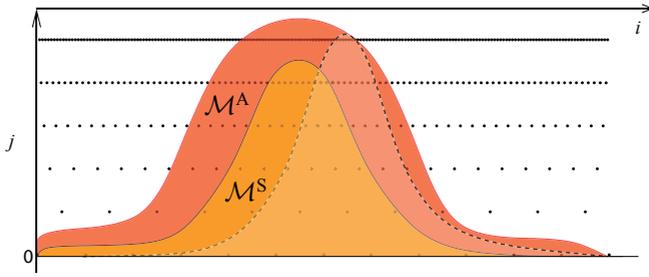


Рис. 2 — Иллюстрация смежной области и сеточной адаптации на основе вейвлетного анализа в пространстве вейвлетных коэффициентов с уровнем разрешения j и индексом координаты i .

где n — размерность задачи, p — порядок вейвлета, а $C = O(1)$. В этом же подразделе представлены результаты сходимости вейвлетного интерполянта с пороговым сжатием для тестовых одномерных и двумерных функций для однородных и неоднородных сеток, подтверждающие соответствие численных результатов с асимптотическими оценками.

Быстрое $O(\mathcal{N}_S)$ адаптивное вейвлетное преобразование второго поколения произвольной размерности обсуждено в подразделе 1.3.2, где также описана процедура проверки восстановления функции, обеспечивающая принудительное включение узлов-предков, необходимых для рекурсивного вычисления вейвлетных коэффициентов на адаптивной сетке.

Псевдокод процедуры проверки восстановления функции для произвольной маски \mathcal{M} представлен в алгоритме 1, где j_{\min} соответствует минимальному уровню разрешения, на котором все узлы (вейвлеты) принудительно включены. Применение этой процедуры к маске *значимых* узлов сетки

$$\mathcal{M}^S(u) = \left\{ |d_1^{\mu,j}| \geq \epsilon \|u\| : j \in \mathcal{J}, \mu \in [1, 2^n - 1], \mathbf{l} \in \mathcal{I}_\psi^{\mu,j} \right\} \quad (3)$$

расширяет маску \mathcal{M}^S и обеспечивает возможность её использования в адаптивном вейвлетном преобразовании. Процедура проверки восстановления функции проиллюстрирована на Рис. 1, где показано минимальное множество узлов сетки в двумерном случае, необходимых для вычисления вейвлетного коэффициента $d_1^{\mu,j}$, принадлежащего разным семействам вейвлетов.

Алгоритм 1: Процедура проверки восстановления функции (RCP) для адаптивного вейвлетного преобразования: $\mathcal{M} \xrightarrow{\text{RCP}} \mathcal{M}$.

определить маску \mathcal{M}

for $j = j_{\max} : -1 : j_{\min}$ **do**

 | **расширить** маску \mathcal{M} , включив в неё узлы-предки на уровне j

end

включить в маску \mathcal{M} все узлы на уровне $j = j_{\min}$

Алгоритм 2: Сеточная адаптация на основе вейвлетного анализа.

оценить функцию $u(\mathbf{x})$ в узлах сетки $\mathcal{G}^{j_{\max}}$ или \mathcal{G}_{\geq}
выполнить прямое вейвлетное преобразование
for $j = j_{\min} : 1 : j_{\max}$ **do**
 создать маску:
 $\mathcal{M}^S = \mathcal{M}^S(u) = \left\{ |d_1^{\mu,j}| \geq \epsilon \|u\| : \mu \in [1, 2^n - 1], \mathbf{l} \in \mathcal{I}_{\psi}^{\mu,j} \right\}$
end
расширить маску: $\mathcal{M}^S \xrightarrow{A} \mathcal{M}^{S+A}$
выполнить процедуру проверки восстановления функции (алгоритм 1):
 $\mathcal{M}^{S+A} \xrightarrow{\text{RCP}} \mathcal{M}^{S+A}$

Концепция *смежной* области, используемой в вейвлетной сеточной адаптации, расширяющей множество значимых вейвлетных коэффициентов \mathcal{M}^S и включающей в себя узлы сетки, в которых вейвлетные коэффициенты могут стать *значимыми* во время интегрирования по времени или во время следующей итерации, описана в подразделе 1.3.3. Процедура адаптации сетки на основе анализа коэффициентов вейвлетного разложения рассмотрена в подразделе 1.3.4.

Принцип сеточной адаптации проиллюстрирован на рис. 2, на котором показаны коллокационные точки, соответствующие местоположениям вейвлетов в физическом (индекс i) и волновом (уровень разрешения j) пространствах. Область значимых вейвлетов \mathcal{M}^S схематически обозначена оранжевым цветом под колоколообразной кривой. Более светлая колоколообразная область справа, окрашенная в розовый цвет, схематически обозначает область значимых вейвлетов в конце шага интегрирования или следующей итерации и, как правило, заранее не известна. Смежная область или область безопасности \mathcal{M}^A схематически обозначена терракотовым цветом. Наконец, объединение значимой и смежной областей задается маской \mathcal{M}^{S+A} . Псевдокод сеточной адаптации на основе вейвлетного анализа приведён в алгоритме 2. По завершении адаптации сетки формируется маска \mathcal{M}^{S+A} , на основе которой строится множество вложенных адаптивных вычислительных сеток $\mathcal{G}_{\geq}^j = \{ \mathbf{x}_{\mathbf{k}}^j \in \Omega_s : \mathbf{k} \in \mathcal{I}_{\phi}^j, \mathbf{x}_{\mathbf{k}}^j \in \mathcal{M}^{S+A} \}$, для которых автоматически выполняется условие вложенности $\mathcal{G}_{\geq}^j \subset \mathcal{G}_{\geq}^{j+1}$ для любого уровня разрешения $j < j_{\max}$, где j_{\max} — это самый высокий уровень разрешения, присутствующий в вейвлетном разложении (1).

Алгоритм быстрого $O(\mathcal{N}_{\mathcal{S}})$ вычисления пространственных производных на адаптивной сетке, использующий интерполяционные свойства вейвлетного разложения и многоуровневую конечно-разностную аппроксимацию на фиксированных шаблонах с фантомными узлами, представлен в подразделе 1.3.5. Разработанная процедура численного дифференцирования использует интерполяционные свойства вейвлетов второго поколения, позволяющие определить ортогональные подмножества $\mathcal{D}^j \subset \mathcal{M}^{S+A}$ узлов адаптивной сетки, в окрестности которых функция $u(\mathbf{x})$ хорошо аппроксимируется вейвлетным интерполянтом так, что выполняется следующее неравенство:

Алгоритм 3: Вычисление производных на адаптивной сетке.

оценить функцию $u(\mathbf{x})$ в узлах сетки $\mathcal{G}^{j_{\max}}$ или \mathcal{G}_{\geq}
 выполнить прямое вейвлетное преобразование для $u_{\mathbf{k}}$ на маске \mathcal{M}^{S+A}
for $j = j_{\min} : 1 : j_{\max}$ **do**
 выполнить один шаг обратного вейвлетного преобразования на
 уровне j на маске \mathcal{M}^{S+A+G}
 вычислить производные в узлах, принадлежащих множеству D^j
end

$$\left| u(\mathbf{x}) - \sum_{\mathbf{m} \in \mathcal{I}_{\phi}^j} c_{\mathbf{m}}^j \phi_{\mathbf{m}}^j(\mathbf{x}) \right| \leq \tilde{C} \epsilon \|u\|. \quad (4)$$

Результатом дифференцирования интерполянта (4) является конечно-разностный оператор, использующий значения вейвлетного интерполянта в узлах сетки расширенной маски \mathcal{M}^{S+A+G} , включающей в себя *вспомогательные (фантомные)* узлы, не включённые в маску \mathcal{M}^{S+A} . Псевдокод для процедуры вычисления производных на адаптивной сетке приведен в алгоритме 3. В подразделе 1.3.5 также приведена следующая асимптотическая оценка сходимости процедуры дифференцирования:

$$\|D_{x_i}^k u(\mathbf{x}) - D_{x_i}^k u_{\geq}(\mathbf{x})\|_{\infty} \leq C_5 \|D_{x_i}^k u(\mathbf{x})\|_{\infty} \mathcal{N}_S^{-(p-k)/n}, \quad (5)$$

где символ $D_{x_i}^k$ представляет оператор дифференцирования k -го порядка в направлении x_i . Здесь же обсуждены результаты проверки сходимости, подтверждающие соответствие численных результатов асимптотическим оценкам.

Три класса адаптивных вейвлетных коллокационных методов, разработанных для решения эллиптических, параболических и гиперболических систем уравнений, описаны соответственно в разделах 1.4, 1.5 и 1.6.

В подразделе 1.4.1 приведён глобальный итерационный метод для решения линейных эллиптических уравнений в прямоугольной области Ω_s

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\mathbf{u} &= \mathbf{f} && \text{on } \Omega_s \subset \mathbb{R}^d, \\ \mathcal{B}\mathbf{u} &= \mathbf{g} && \text{on } \partial\Omega_s, \end{aligned} \quad (6)$$

где $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ — это векторная функция решения, \mathcal{L} — линейный эллиптический оператор, \mathcal{B} — оператор граничных условий, \mathbf{f} и \mathbf{g} — источники членy. В подразделе 1.4.2 рассмотрен многоуровневый итерационный вейвлетный коллокационный метод для решения как эллиптических уравнений одной из стадий итеративной сеточной адаптации, так и для решения дифференциальных ограничительных условий в эволюционных задачах, например, уравнения неразрывности в уравнениях Навье—Стокса для несжимаемой жидкости. Эффективность сеточной адаптации, асимптотическая сходимость глобального эллиптического алгоритма и многоуровневого итерационного вейвлетного коллокационного метода продемонстрированы в подразделе 1.4.3 на примере двумерной и трёхмерной тестовых эллиптических задач с аналитическими

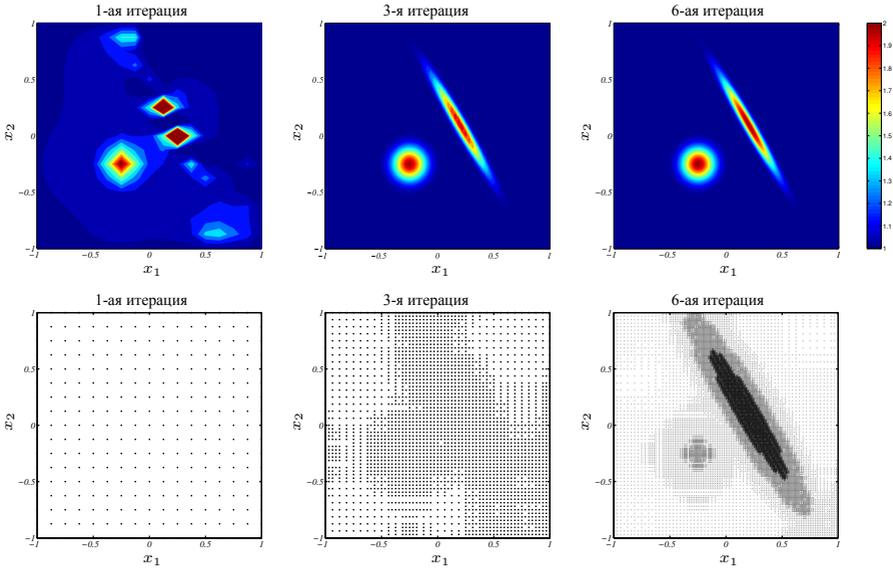


Рис. 3 — Решения эллиптической задачи и соответствующие адаптивные сетки \mathcal{G}_{\geq}^m ($m = 1, 3, 6$) для последовательности глобальных итераций.

решениями. Иллюстрация процесса глобальной сеточной адаптации приведена на рис. 3. Основной материал раздела 1.4 опубликован в работе [41].

В разделе 1.5 рассмотрен AWCM для решения системы параболических уравнений в прямоугольной области Ω_s

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} &= \mathbf{F}(\mathbf{u}) & \text{на } \Omega_s \times (t_0, t_{\text{end}}], & \quad \Omega_s \subset \mathbb{R}^n, \\
 \mathcal{B}\mathbf{u} &= \mathbf{G} & \text{на } \partial\Omega_s \times (t_0, t_{\text{end}}], & \\
 \mathbf{u}|_{t_0} &= \mathbf{u}_0 & \text{на } \Omega_s, &
 \end{aligned} \tag{7}$$

где $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ — это векторная функция решения, \mathbf{F} — правая часть системы уравнений, содержащая диффузионные члены, \mathcal{B} — оператор граничных условий, \mathbf{G} — источник член неоднородных граничных условий, а $\mathbf{u}_0(\mathbf{x})$ — начальные условия. Способность AWCM разрешать локализованные структуры решения на динамически адаптивных однородных и неоднородных сетках, эффективность сеточной адаптации, измеряемая коэффициентом сжатия, асимптотическая сходимость адаптивного вейвлетного коллокационного метода представлены в подразделе 1.5.1 на примере одномерных и двумерных тестовых параболических задач с аналитическими решениями. Основной материал раздела 1.5 опубликован в работах [37; 38].

В разделе 1.6 рассмотрен AWCM для решения систем гиперболических уравнений, использующий локализованную искусственную вязкость, основанную на вычислении маркировочной функции разрыва решения Φ , определяемой значениями вейвлетных коэффициентов на самом высоком уровне разрешения и

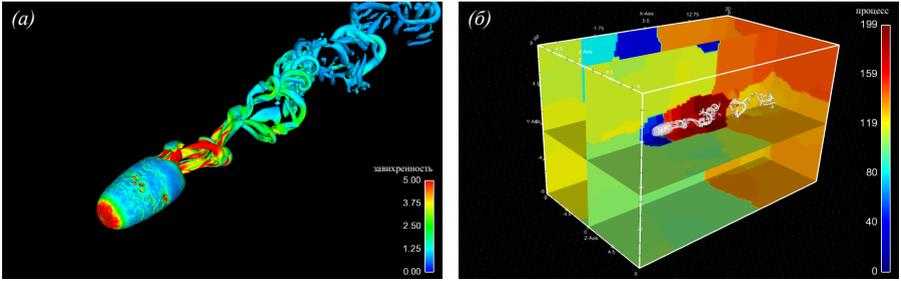


Рис. 4 — Вейвлетное адаптивное прямое численное моделирование обтекания сферы сжимаемым вязким газом при $Re = 1000$ и $Ma = 0.7$, используя P-AWCM совместно с методом характеристических штрафных функций с эффективным разрешением $3713 \times 2305 \times 2305$: а) основные вихревые структуры, окрашенные согласно величине завихренности, б) разбиение области при динамической балансировке загрузки 200 процессов на основе разбиения гиперграфа.

описанной в подразделе 1.6.1. В многомерном случае система гиперболических уравнений с локализованной искусственной вязкостью может быть записана в консервативном виде как

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \sum_{k=1}^n \frac{\partial \mathbf{F}_k(\mathbf{U})}{\partial x_k} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\nu_k(\Phi) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_k} \right), \quad (8)$$

где \mathbf{U} — вектор решения, а $\mathbf{F}_k(\mathbf{U})$ — вектор потоков в направлении x_k . Детали AWCM для численного моделирования гиперболических задач приведены в подразделе 1.6.2. Применение адаптивного вейвлетного коллокационного метода для решения гиперболических систем уравнений показано в подразделе 1.6.3 на примере тестовых одномерных и двумерных задач Римана с известными аналитическими решениями. Основной материал раздела 1.6 опубликован в работе [32].

Глава 2 посвящена описанию обобщения адаптивного вейвлетного коллокационного метода для параллельных вычислений. Параллельное асинхронное вейвлетное преобразование второго поколения представлено в разделе 2.2. Структура данных типа дерева произвольной размерности, использованная в параллельном адаптивном вейвлетном коллокационном методе (P-AWCM), описана в разделе 2.3. Расширение алгоритма сеточной адаптации на основе вейвлетов для параллельных вычислений, а также параллельное обобщение процедуры восстановления функции рассмотрены в разделе 2.4. Параллельное обобщение алгоритма вычисления производных обсуждено в разделе 2.5. В разделе 2.6 рассмотрены квантование и межпроцессное перемещение (миграция) данных, используемых в P-AWCM при динамической балансировке загрузки процессов. Динамическое межпроцессное разбиение адаптивной сетки (динамическое распараллеливание задачи) представлено в разделе 2.7. Динамическая

Алгоритм 4: Параллельный адаптивный вейвлетный коллокационный метод (P-AWCM).

начальное приближение/условие ($m = 0$): \mathbf{u}_k^m и \mathcal{G}_\geq^m

выполнить параллельную RCP процедуру: $\mathcal{M}^S \xrightarrow{\text{RCP}} \mathcal{M}^S$

while $m = 0$ или $\left\{ m > 0 \text{ и } \left\{ \underbrace{[\mathcal{G}_\geq^m \neq \mathcal{G}_\geq^{m-1} \text{ или } \|\mathbf{u}_k^m - \mathbf{u}_k^{m-1}\|_\infty > \delta_\epsilon]}_{\text{только для эллиптических задач}} \text{ или } \underbrace{[t_m < t_{\text{end}}]}_{\text{только для эволюционных задач}} \right\} \right\}$ **do**

запросить маски $\mathcal{M}_{p,r \neq p}^{S+A}$, $p, r \in \{0, \dots, n_p - 1\}$ для передачи данных

выполнить параллельное прямое вейвлетное преобразование для каждой из компонент решения \mathbf{u}_k^m

for $j = j_{\text{max}} : -1 : j_{\text{min}}$ **do**

создать маску $\mathcal{M}^S = \bigcup_{r=1}^{M_c} \mathcal{M}^S(v_r(\mathbf{x}, t))$

end

расширить маску: $\mathcal{M}^S \xrightarrow{A} \mathcal{M}^{S+A}$

for $p = 0 : 1 : n_p - 1$ **do**

синхронизировать маски $\mathcal{M}_{p,r}^{S+A} \cdot \mathcal{M}_{r,r}^{S+A} = \bigcup_{p=0}^{n_p-1} \mathcal{M}_{p,r}^{S+A}$

if разбиение не сбалансировано **then**

провести переразбиение области и **переназначение** деревьев

очистить маски: $\mathcal{M}_{p,r \neq p}^{S+A} = \emptyset$ и $\mathcal{M}_{p,r \neq p}^S = \emptyset$,
 $r = 0, \dots, n_p - 1$

end

end

выполнить параллельную RCP процедуру: $\mathcal{M}^{S+A} \xrightarrow{\text{RCP}} \mathcal{M}^{S+A}$

построить \mathcal{G}_\geq^{m+1} на основе маски \mathcal{M}^{S+A}

добавить вспомогательную маску: $\mathcal{M}^{S+A} \xrightarrow{\bigoplus_{j=0}^{j_{\text{max}}} \mathcal{D}^j} \mathcal{D}^j} \mathcal{M}^{S+A+G}$,
 $\mathcal{M}^S \subset \mathcal{M}^{S+A} \subset \mathcal{M}^{S+A+G}$

выполнить параллельную RCP процедуру: $\mathcal{M}^{S+A+G} \xrightarrow{\text{RCP}} \mathcal{M}^{S+A+G}$

if $\mathcal{G}_\geq^{m+1} \neq \mathcal{G}_\geq^m$ **then**

проинтерполировать решение \mathbf{u}_k^m на сетку \mathcal{G}_\geq^{m+1}

end

либо **решить** систему уравнений (6), либо **проинтегрировать** систему уравнений (7) или (8)

$m = m + 1$, для эволюционных задач: $t_{m+1} = t_m + \Delta t$

end

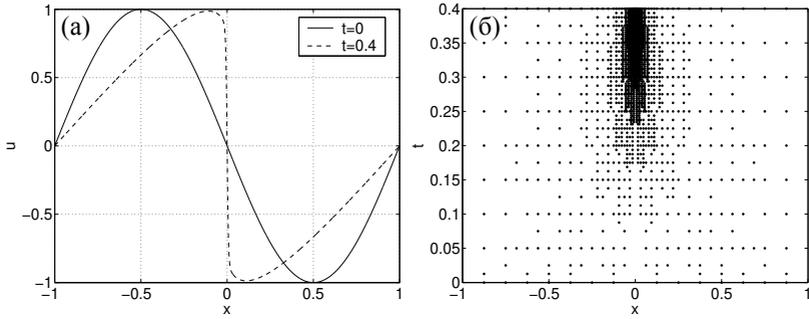


Рис. 5 — Решение уравнения Бюргерса (а) и соответствующая пространственно-временная адаптивная сетка (б) для конечной глобальной итерации.

балансировка загрузки процессов продемонстрирована на рис. 4. P-AWCM, основанный на применении вышеупомянутых компонент, описан в разделе 2.8 и приведён в алгоритме 4, где символ \xrightarrow{A} обозначает оператор включения вейвлетов (узлов) смежной области, расширяющий маску значимых вейвлетов $\mathcal{M}_{p,p}^S$ для каждого процесса p до масок $\mathcal{M}_{p,r}^{S+A}$ узлов буферной области процесса p , хранящихся на процессах $r = 0, \dots, n_p - 1$, а оператор \xrightarrow{RCP} обозначает процедуру проверки восстановления функции на маске $\mathcal{M}_{p,p}^{S+A}$, расширяющий её до масок $\mathcal{M}_{p,r}^{S+A}$ для $r = 0, \dots, n_p - 1$. Эффективность распараллеливания, «вычислительная сложность», параллельная масштабируемость и теоретически возможная эффективность параллелизации P-AWCM обсуждены в разделе 2.9. Основной материал главы 2 опубликован в работе [28].

В **главе 3** представлен пространственно-временной адаптивный вейвлетный коллокационный метод (ST-AWCM), разработанный для решения параболических задач с одновременной адаптацией сетки в пространстве и времени. ST-AWCM устраняет две основные проблемы классических маршевых вычислительных методов: а именно, неэффективность использования общего (не варьирующегося в пространстве) шага интегрирования по времени и отсутствие возможности контроля глобальной ошибки во времени. Пространственно-временной адаптивный вейвлетный коллокационный метод описан в разделе 3.2. Подраздел 3.2.1 посвящен обсуждению основных положений вейвлетного метода полной аппроксимации (W-FAS), разработанного для решения нелинейных алгебраических задач, полученных в результате дискретизации эволюционных уравнений. Расширение алгоритма для задач произвольной продолжительности при ограниченных вычислительных ресурсах описано в подразделе 3.2.2.

При применении ST-AWCM задача решается в пространственно-временной области с одновременной адаптацией сетки в пространстве и времени с целью разрешения структур решения на оптимальной пространственно-временной сетке. Результаты численных экспериментов для решения задач

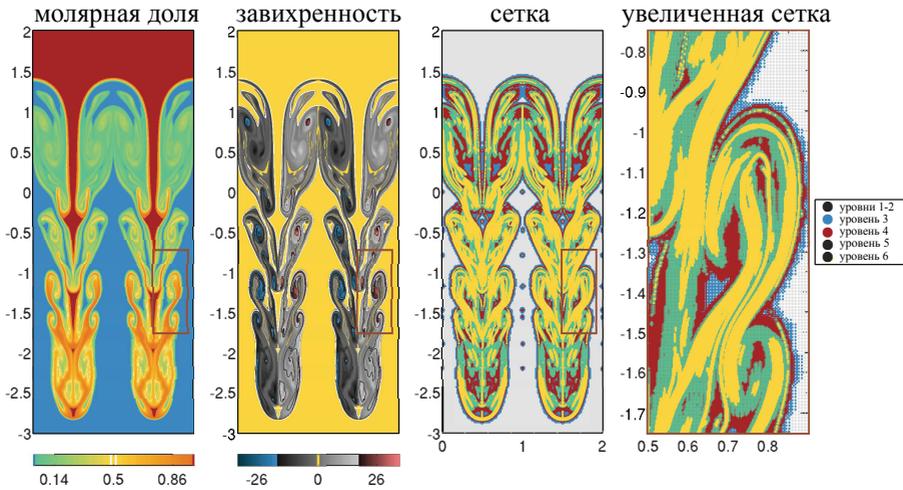


Рис. 6 — Молярная доля, завихренность и соответствующая адаптивная сетка для позднего роста неустойчивости Рэля—Тейлора. Увеличенный вид адаптивной сетки соответствует выделенной на рисунке прямоугольной области.

в двумерном пространстве (x, t) для уравнений Бюргерса представлены в разделе 3.3 и показаны на рис. 5 вместе с соответствующей пространственно-временной адаптивной сеткой. Эффективность пространственно-временной сеточной адаптации, способность ST-AWCM активно контролировать глобальную ошибку интегрирования во времени и сходимость ST-AWCM обсуждены соответственно в подразделах 3.3.2, 3.3.3 и 3.3.4. Основной материал главы 3 опубликован в работе [1].

Приложения вейвлетных адаптивных коллокационных методов для задач механики жидкости и газа в простой геометрии рассмотрены в **главе 4**. В разделе 4.1 описаны результаты применения AWCM для вейвлетного адаптивного прямого численного моделирования (WA-DNS) течения вязкой несжимаемой жидкости на примере двухмерной задачи слияния вихрей. Основной материал раздела 4.1 опубликован в работе [19]. WA-DNS моделирование течений химически инертного и реагирующего вязкого сжимаемого газа с применением AWCM представлено в разделе 4.2 на примерах задачи неустойчивости Рэля—Тейлора (подраздел 4.2.1) и ламинарного взаимодействия диффузионного пламени с парой вихрей (подраздел 4.2.2). Типичный пример AWCM решения на поздней стадии одномодальной неустойчивости Рэля—Тейлора для чисел Маха $Ma = 0.3$ и Атвуда $A = 0.3$ при эффективном сеточном разрешении 32769×2048 приведён на рис. 6. Основной материал подразделов 4.2.1 и 4.2.2 опубликован соответственно в работах [30] и [37]. WA-DNS моделирование течений химически инертного и реагирующего невязкого сжимаемого газа на примерах задач неустойчивости Рихтмайера—Мешкова и прямой инициации

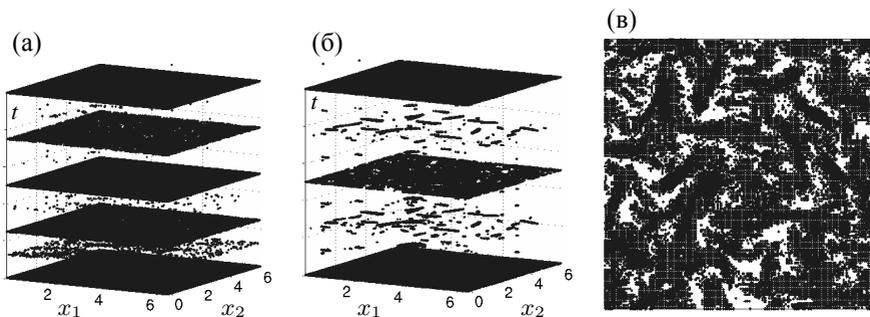


Рис. 7 — Адаптивная пространственно-временная сетка для двумерной затухающей турбулентности при $Re = 40\,400$: (а) в первом временном подпространстве $t \in [0, 2.1]$, (б) в конечном временном подпространстве $t \in [123.8, 126]$, (в) временной срезу сетки, соответствующий моменту времени $t = 126$.

детонации описано соответственно в подразделах 4.3.1 и 4.3.2. Основной материал подразделов 4.3.1 и 4.3.2 опубликован соответственно в работах [32] и [35]. Во всех случаях обсуждены конкретные реализации AWCM, моделируемые уравнения с граничными условиями и параметры задач, а также продемонстрированы возможности AWCM выделять и разрешать локальные структуры течения.

Применение пространственно-временного адаптивного вейвлетного коллокационного метода для численного решения задач механики жидкости и газа проиллюстрировано в подразделах 4.4.1 и 4.4.2 на примерах задач слияния вихрей в несжимаемой вязкой жидкости при $Re = 1\,000$ и двумерной затухающей турбулентности для чисел Рейнольдса в диапазоне $1\,260 \leq Re \leq 40\,400$. Способность ST-AWCM адаптировать сетку как в пространстве, так и во времени, показана на рис. 7. Для демонстрации эффективности пространственно-временной адаптации приведены сравнения результатов вычислений и вычислительной сложности для ST-AWCM и маршевых AWCM. В случае двумерной турбулентности также исследована зависимость количества степеней свободы от числа Рейнольдса для пространственно-временного и маршевых адаптивных вейвлетных коллокационных методов. Основной материал подразделов 4.4.1 и 4.4.2 опубликован соответственно в работах [1] и [18].

В **главе 5** рассмотрены методы штрафных функций (МШФ), расширяющие возможности применения адаптивных вейвлетных коллокационных методов для решения задач математической физики в сложной геометрии, включая задачи механики жидкости и газа со стационарными, подвижными и деформируемыми границами. Раздел 5.1 посвящен краткому обзору методов затопленных границ. В методе штрафных функций Бринкмана (МШФБ), представленном в подразделе 5.2.1, твердое тело, занимающее область $\Omega_p \subset \Omega_s$, моделируется как пористая среда с малой, приближающейся к нулю, проницаемостью и описывается пенализированными уравнениями Навье—Стокса

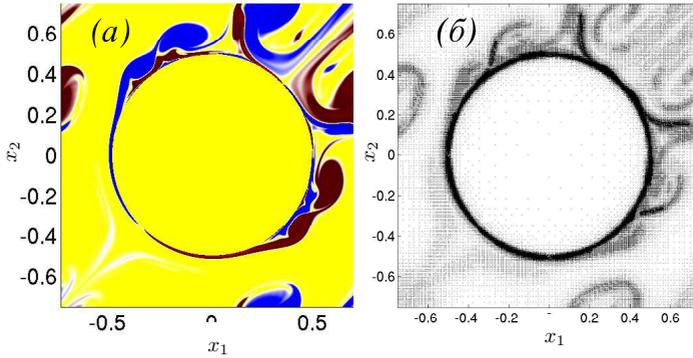


Рис. 8 — Двумерное обтекание массива цилиндров несжимаемой жидкостью при $Re = 10^4$: (а) поле завихренности, (б) адаптивная сетка.

$$\frac{\partial \mathbf{u}_\eta}{\partial t} + \mathbf{u}_\eta \cdot \nabla \mathbf{u}_\eta + \nabla P_\eta = \nu \Delta \mathbf{u}_\eta - \frac{1}{\eta} \chi(\mathbf{x}, t) (\mathbf{u}_\eta - \mathbf{U}_o), \quad (9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_\eta = 0, \quad (10)$$

где \mathbf{U}_o — скорость тела, $0 < \eta \ll 1$ — параметр штрафной функции, χ — маркировочная штрафная функция, определённая как

$$\chi(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in \Omega_p, \\ 0, & \mathbf{x} \notin \Omega_p. \end{cases} \quad (11)$$

Пример, демонстрирующий эффективность вейвлетной адаптации при совместном применении МШФБ и АWCМ, приведён на рис. 8, где показаны поле завихренности и соответствующая адаптивная вычислительная сетка для двумерного обтекания массива цилиндров несжимаемой жидкостью при $Re = 10^4$.

Метод интегрирования во времени и решение уравнения Пуассона при совместном применении АWCМ и МШФБ обсуждены в подразделе 5.2.2. Результаты вейвлетного адаптивного прямого численного моделирования обтекания стационарного и подвижного цилиндров вязкой несжимаемой жидкостью при числе Рейнольдса $Re = 100$ и стационарного цилиндра при $Re = 3000$ с совместным использованием метода штрафных функций Бринкмана и адаптивного вейвлетного коллокационного метода описаны соответственно в подразделах 5.2.3, 5.2.4 и 5.2.5. Основной материал раздела 5.2 опубликован в работах [19–22; 40].

Обобщение метода штрафных функций Бринкмана для численного моделирования дозвуковых течений сжимаемого вязкого газа представлено в подразделе 5.3.2 и может быть записано в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left[1 + \left(\frac{1}{\phi} - 1 \right) \chi \right] \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}), \quad (12)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} = - \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \frac{\chi}{\eta} (\mathbf{u} - \mathbf{U}_o), \quad (13)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla \cdot [(e + p) \mathbf{u}] + \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}) - \nabla \cdot \mathbf{q} - \frac{\chi}{\eta_T} (T - T_o), \quad (14)$$

где e — полная удельная энергия, $\boldsymbol{\tau}$ — тензор вязких напряжений, \mathbf{q} — плотность теплового потока, ϕ — пористость, $\eta = \alpha\phi$ — вязкая проницаемость, $\eta_T = \alpha_T\phi$ — термопроницаемость, а \mathbf{U}_o и T_o — скорость и температура тела. В обобщённой формулировке МШФБ, в дополнение к штрафным функциям в уравнении сохранения импульса, также используются штрафные функции в уравнениях сохранения массы и энергии, при этом уравнение сохранения массы модифицируется с соблюдением физики течений в пористой среде. В обобщённом МШФБ штрафная область ведет себя как среда с большим акустическим импедансом, приводящим к незначительному проникновению акустических волн. Оценка амплитудной ошибки при отражении акустических волн на основе акустической теории приведена в подразделе 5.3.3. Асимптотический анализ амплитудной и фазовой ошибок при отражении акустических волн от поверхности тела, моделируемого обобщённым методом штрафных функций Бринкмана, представлен в подразделе 5.3.5. Асимптотические оценки амплитудной и фазовой ошибок решения пенализированных уравнений в случае разрешённого $O(\eta^{1/2}\phi^{1/2})$ и неразрешённого $O\left((\eta/\eta_T)^{1/4}\phi^{3/4}\right)$ пограничного слоя выведены соответственно в подразделах 5.3.6 и 5.3.7. Применение обобщённого МШФБ совместно с АВСМ для моделирования дозвукового обтекания тел сжимаемым вязким газом продемонстрировано на примерах тестовых задач прямого отражения одномерного акустического импульса от плоской поверхности и рассеяния акустической волны стационарным цилиндром и описано в подразделе 5.3.9. В подразделе также приведены результаты проверки сходимости решения, подтверждающие соответствие численных результатов с асимптотической оценкой ошибки в случаях разрешённого и неразрешённого пограничного слоя. Основной материал раздела 5.3 опубликован в работах [23; 24].

Для устранения ограничений метода штрафных функций Бринкмана, связанных с отсутствием возможности накладывать общие граничные условия и неправильным отражением ударных волн от поверхности твердого тела, аппроксимированного штрафными функциями Бринкмана, разработан метод характеристических штрафных функций (МХШФ), снимающий вышеупомянутые ограничения и основанный на гиперболических дифференциальных штрафных функциях, обеспечивающих возможность задавать общие однородные и неоднородные граничные условия Неймана и Робена. Метод характеристических штрафных функций, представленный в разделе 5.4, довольно гибок и применим для решения как параболических, так и гиперболических систем уравнений, при этом, как и в методе штрафных функций Бринкмана, МХШФ даёт возможность контролировать ошибку численного решения пенализированных уравнений через значения параметров штрафных функций. В методе характеристических штрафных функций, сформулированном и описанном в подразделе 5.4.1, граничные условия Дирихле, Неймана и Робена, записанные в операторной форме

$$\mathcal{L}u|_{\partial\Omega_m} = \text{Target}, \quad (15)$$

могут быть заданы в общей форме пенализированных уравнений

$$\frac{\partial u}{\partial t} = (1 - \chi) \text{RHS} - \frac{\chi}{\eta} (\mathcal{L}u - \text{Target}). \quad (16)$$

В отличие от метода штрафных функций Бринкмана в МХШФ члены правой части уравнений полностью удаляются для устранения влияния на точность определения желаемых граничных условий, что позволяет осуществлять согласованный контроль ошибки в независимости от физики задачи и формы эволюционных уравнений. При решении задач сложной геометрии с применением метода характеристических штрафных функций могут возникнуть сложности, связанные с неоднозначностью вектора нормали в области пересечения характеристик и в узлах экстремума функции расстояния, а также из-за дополнительной вычислительной стоимости и снижения устойчивости/точности решения вдали от границ. В подразделе 5.4.2 описано двухслойное обобщение МХШФ, использующее характеристические штрафные функции только в тонком внутреннем гиперболическом слое в непосредственной близости с границей тела и уравнение диффузии во внутренней области вдали от границ, что позволяет устранить вышеупомянутые сложности. Обобщение МХШФ для численного моделирования обтекания тел сложной геометрии сжимаемым вязким газом сформулировано в подразделе 5.4.3 и принимает следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (1 - \chi) \text{RHS}_\rho - \frac{\chi}{\eta_c} (\mathbf{n} \cdot \nabla \rho - \Phi_\rho), \quad (17)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} = (1 - \chi) \text{RHS}_{\rho \mathbf{u}} - \chi \left[\frac{\mathbf{u}}{\eta_c} (\mathbf{n} \cdot \nabla \rho - \Phi_\rho) + \frac{\rho (\mathbf{u} - \mathbf{U}_0)}{\eta_b} - \rho \nu_n \Delta \mathbf{u} \right], \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial t} = (1 - \chi) \text{RHS}_E - \frac{\chi}{\eta_c} \left[\mathbf{n} \cdot \nabla E - \mathbf{u} \cdot (\mathbf{n} \cdot \nabla)(\rho \mathbf{u}) + \rho q - \frac{E \Phi_\rho}{\rho} \right] \\ - \chi \rho \mathbf{u} \cdot \left[\frac{(\mathbf{u} - \mathbf{U}_0)}{\eta_b} - \nu_n \Delta \mathbf{u} \right], \end{aligned} \quad (19)$$

$$\frac{\partial \Phi_\rho}{\partial t} = - \frac{\chi}{\eta_c} \mathbf{n} \cdot \nabla \Phi_\rho, \quad (20)$$

где переменная Φ_ρ , используемая для экстраполяции производной плотности по направлению нормали \mathbf{n} внутрь штрафной области, определена как

$$\Phi_\rho = (1 - \chi) \mathbf{n} \cdot \nabla \rho + \chi \Phi_\rho. \quad (21)$$

Асимптотический анализ сходимости метода характеристических штрафных функций применительно к уравнениям Навье—Стокса для задачи прямого отражения одномерного акустического импульса малой амплитуды, приведенный в подразделе 5.4.4, показал, что суммарная ошибка решения пенализированных

уравнений может быть оценена как $O(\eta_c, \eta_b^{1/2})$. Применение метода характеристических штрафных функций совместно с адаптивным вейвлетным коллокационным методом для решения задач математической физики рассмотрено в подразделе 5.4.5 на примерах уравнения теплопроводности с тремя видами граничных условий, задачи прямого отражения одномерного акустического импульса от плоской поверхности и задачи дозвукового обтекания стационарного цилиндра вязким сжимаемым газом. В подразделе также представлены численные результаты проверки сходимости решения, подтверждающие соответствие результатов вычислений асимптотической оценке ошибки в случае однородных и неоднородных граничных условий Дирихле, Неймана и Робена. В случае задачи ламинарного обтекания стационарного цилиндра при числах Рейнольдса $Re = 40$ и Маха $Ma = 0.03$ решение хорошо согласуется с ранее опубликованными экспериментальными и численными результатами, полученными с применением альтернативных подходов. Основной материал раздела 5.4 опубликован в работе [2].

Расширение МХШФ для численного решения уравнений Эйлера для сжимаемого невязкого газа обсуждено в разделе 5.5. Расширение метода характеристических штрафных функций для задач с подвижными/деформируемыми границами описано в подразделе 5.5.1. Для выполнения условия инвариантности Галилея пенализированные уравнения определены в системе отсчёта движущегося тела, после чего переписаны в неподвижной системе отсчёта, что может быть достигнуто добавлением конвективного члена Лагранжа

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{U}_0 \cdot \nabla. \quad (22)$$

Совместное применение МХШФ и АВСМ для численного моделирования сверхзвукового обтекания тел сложной геометрии сжимаемым газом рассмотрено в подразделе 5.5.2 на примерах задачи прямого отражения одномерной ударной волны от плоской поверхности и задачи сверхзвукового обтекания клина с формированием прямого и косого скачков уплотнения. В подразделе также приведены численные результаты проверки сходимости решения, подтверждающие соответствие результатов вычислений асимптотической оценке ошибки решения. Основной материал раздела 5.5 опубликован в работе [3].

Приложение разработанных методов штрафных функций совместно с адаптивным вейвлетным коллокационным методом для численного моделирования более сложных течений со сложной геометрией рассмотрено в **главе 6**. Применение объединённых АВСМ/МШФБ для численного моделирования обтекания массива цилиндров несжимаемой вязкой жидкостью (рис. 8) и масштабирование вычислительной сложности задачи от числа Рейнольдса обсуждено в разделе 6.1. Применение метода штрафных функций Бринкмана для моделирования обтекания квадратного цилиндра несжимаемой вязкой жидкостью в контексте вейвлетного адаптивного прямого численного моделирования (WA-DNS) и вейвлетного адаптивного метода крупных вихрей (WA-LES)

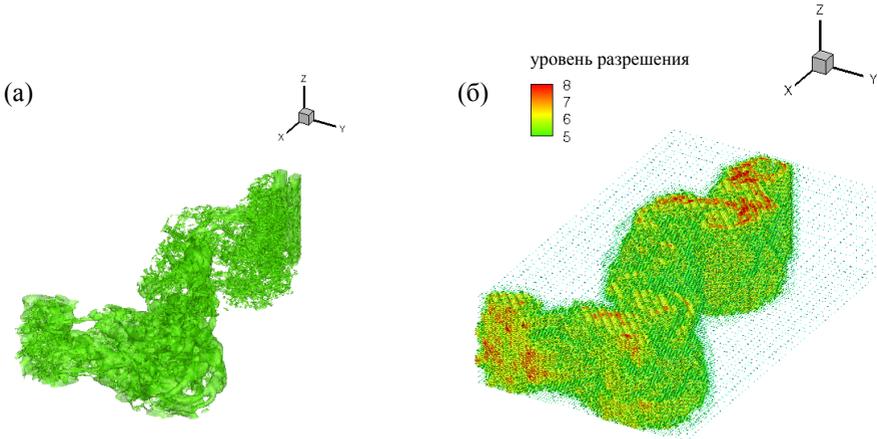


Рис. 9 — AWCM с варьирующимся в пространстве и времени вейвлетным порогом $\epsilon(\mathbf{x}, t)$: WA-LES моделирование обтекания квадратного цилиндра при сверхкритическом числе Рейнольдса $Re = 2\,000$ — (а) изоповерхность порогового поля $\epsilon = 0.12$ и (б) узлы адаптивной сетки на уровнях разрешения $5 \leq j \leq 8$.

рассмотрено соответственно в разделах 6.2 и 6.3. Следует отметить, что подход иерархического адаптивного вихреразрешающего моделирования турбулентных течений, включающий в себя подклассы WA-DNS и WA-LES, не является предметом обсуждения диссертации и приведен для демонстрации широкого спектра применения методов штрафных функций. Кроме этого, в разделе 6.3 вкратце описано использование AWCM с варьирующимся в пространстве и времени вейвлетным порогом, расширяющим возможность AWCM регулировать локальное сеточное разрешение не только для контроля ошибки численного решения, но также из соображений физического моделирования, что продемонстрировано на рис. 9 для WA-LES моделирования обтекания квадратного цилиндра при сверхкритическом числе Рейнольдса $Re = 2\,000$. Основной материал разделов 6.1, 6.2 и 6.3 опубликован соответственно в работах [19], [7] и [11].

Применение метода характеристических штрафных функций совместно с адаптивным вейвлетным коллокационным методом для численного моделирования дозвукового обтекания стационарного и подвижного цилиндров сжимаемым вязким газом обсуждено соответственно в разделах 6.4 и 6.5. Основной материал разделов 6.4 и 6.5 опубликован в работе [2]. Сверхзвуковое обтекание одного и нескольких тел невязким сжимаемым газом описано в разделе 6.6. Выполнение условия инвариантности Галилея при моделировании обтекания стационарных и движущихся тел представлено в разделе 6.7 и продемонстрировано на рис. 10. Основной материал разделов 6.6 и 6.7 опубликован в работе [3].

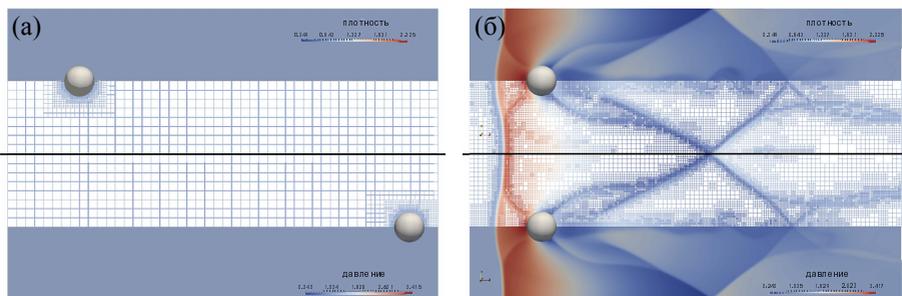


Рис. 10 — Поле плотности и адаптивная сетка, окрашенная в соответствии с полем давления, для задачи сверхзвукового обтекания стационарного (верхняя половина рисунка) и движущегося (нижняя половина рисунка) цилиндров в (а) начальный и (б) конечный моменты времени.

В **заключении** перечислены основные результаты диссертации, их научная новизна, теоретическая и практическая значимость, а также обсуждены направления дальнейшего развития темы диссертации.

Заключение

Диссертация посвящена разработке новых классов эффективных много-масштабных адаптивных вычислительных методов на основе вейвлетов второго поколения для численного моделирования задач математической физики в простой и сложной геометрии со способностью задавать произвольные граничные условия, с теоретической априорной оценкой и активным контролем ошибки решения, с автоматической динамической адаптацией вычислительной сетки и демонстрацией возможностей разработанных методов для решения широкого спектра задач механики жидкости и газа, включающих течения несжимаемой/сжимаемой, вязкой/невязкой, химически инертной/реагирующей жидкости/газа во всех скоростных режимах.

Перечислим основные результаты диссертации:

1. Для эффективного численного решения параболических, эллиптических и гиперболических систем уравнений разработан класс коллокационных методов на основе вейвлетов второго поколения, способных выделять, разрешать и отслеживать локальные структуры решения на адаптивных вычислительных сетках с активным контролем ошибки решения. При этом разработаны следующие ключевые компоненты:

- адаптивное быстрое $O(N)$ вейвлетное преобразование второго поколения, включающее процедуру проверки восстановления функции, обеспечивающую принудительное включение узлов-предков,

необходимых для рекурсивного вейвлетного преобразования на адаптивной сетке;

- алгоритм быстрого $O(N)$ вычисления производных на адаптивной сетке, использующий интерполяционные свойства вейвлетов и многоуровневую конечно-разностную аппроксимацию производных на фиксированных шаблонах с фантомными узлами.

Теоретически полученные аналитические оценки асимптотической сходимости разработанных методов подтверждены результатами численных экспериментов по решению тестовых задач с известными аналитическими решениями.

2. Адаптивный вейвлетный коллокационный метод обобщён для параллельных вычислений. Для обобщённого метода продемонстрированы «вычислительная сложность», параллельная масштабируемость и эффективность распараллеливания по сравнению с теоретически возможной эффективностью параллелизации.
3. Для параболических задач с высокой перемежаемостью разработан пространственно-временной адаптивный вейвлетный коллокационный метод, позволяющий получить решение с одновременной адаптацией сетки в пространстве и времени. Эффективность пространственно-временной адаптации и способность активного контроля глобальной ошибки интегрирования во времени продемонстрированы на примере тестовых задач с известными аналитическими решениями.
4. Для расширения области применения адаптивного вейвлетного коллокационного метода при решении задач со сложной геометрией, включая подвижные и деформируемые границы, разработан класс методов штрафных функций, позволяющих задавать однородные и неоднородные граничные условия Дирихле, Неймана и Робена на границе областей сложной геометрии с возможностью оценки и активного контроля ошибки решения через изменение параметров штрафных функций. Получены теоретические оценки асимптотической сходимости разработанных методов. Теоретически предсказанные оценки асимптотической сходимости подтверждены численными экспериментами по решению тестовых задач с известными аналитическими или численными решениями. Продемонстрирована эффективность методов штрафных функций при совместном использовании с сеточной адаптацией, позволяющей локальное разрешение сложной геометрии с заданной точностью без чрезмерного разрешения вдали от границ. Общность формулировки и возможность накладывать произвольные граничные условия на стационарных и подвижных границах, по функциональности, гибкости и простоте применения близкая к определению аналитических граничных условий, проиллюстрированы на примере

ряда задач механики жидкости и газа, включающих течения вязкой несжимаемой жидкости, вязкого и невязкого газа в дозвуковых и сверхзвуковых режимах.

5. Продемонстрированы возможности применения и эффективность адаптивного вейвлетного коллокационного метода для численного моделирования широкого спектра задач механики жидкости и газа, включающих течения вязкой несжимаемой жидкости, вязкого и невязкого сжимаемого газа, а также дозвуковые и сверхзвуковые, инертные и химически реагирующие, ламинарные, переходные и турбулентные течения. Метод продемонстрирован для численного решения уравнений Эйлера и Навье—Стокса для несжимаемой жидкости и сжимаемого реагирующего и инертного газа как в простой, так и в сложной геометрии с применением разработанных методов штрафных функций. Результаты вычислений подтверждены сравнением с опубликованными результатами экспериментальных и вычислительных исследований.

Результаты диссертации имеют как теоретическую, так и практическую значимость. Адаптивный вейвлетный коллокационный метод является новым перспективным направлением вычислительной математики, дальнейшее развитие которого будет способствовать прогрессу в области адаптивных вычислительных технологий, потребность в которых с увеличением применения компьютерных вычислений для проектирования сложных инженерных систем постоянно возрастает.

Публикации автора по теме диссертации

1. *Alam, J.* Simultaneous space–time adaptive wavelet solution of nonlinear partial differential equations / J. Alam, N. K. R. Kevlahan, O. V. Vasilyev // *Journal of Computational Physics*. — 2006. — Vol. 214, no. 2. — P. 829–857. — (Scopus, WoS, Q1).
2. *Brown-Dymkoski, E.* A characteristic based volume penalization method for general evolution problems applied to compressible viscous flows / E. Brown-Dymkoski, N. Kasimov, O. V. Vasilyev // *Journal of Computational Physics*. — 2014. — Vol. 262. — P. 344–357. — (Scopus, WoS, Q1).
3. *Brown-Dymkoski, E.* Characteristic-based volume penalization method for arbitrary Mach flows around solid obstacles / E. Brown-Dymkoski, N. Kasimov, O. V. Vasilyev // *Direct and Large-Eddy Simulation IX* / ed. by J. Frohlich, H. Kuerten, B. Geurts, V. Armenio. — Springer, 2015. — P. 109–115. — (ERCOFTAC Series).

4. *Brown-Dymkoski, E.* Adaptive-anisotropic wavelet collocation method on general curvilinear coordinate systems / E. Brown-Dymkoski, O. V. Vasilyev // *Journal of Computational Physics*. — 2017. — Vol. 333. — P. 414—426. — (Scopus, WoS, Q1).
5. *De Stefano, G.* Stochastic coherent adaptive large eddy simulation of forced isotropic turbulence / G. De Stefano, O. V. Vasilyev // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2010. — Mar. — Vol. 646. — P. 453—470. — (Scopus, WoS, Q1).
6. *De Stefano, G.* A fully adaptive wavelet-based approach to homogeneous turbulence simulation / G. De Stefano, O. V. Vasilyev // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2012. — Vol. 695. — P. 149—172. — (Scopus, WoS, Q1).
7. *De Stefano, G.* Wavelet-based adaptive simulations of three-dimensional flow past a square cylinder / G. De Stefano, O. V. Vasilyev // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2014. — Vol. 748. — P. 433—456. — (Scopus, WoS, Q1).
8. *De Stefano, G.* Wavelet-based adaptive unsteady RANS modeling of external flows / G. De Stefano, O. V. Vasilyev, E. Brown-Dymkoski // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2018. — Vol. 837. — P. 765—787. — (Scopus, WoS, Q1).
9. *De Stefano, G.* Localized dynamic kinetic energy-based models for stochastic coherent adaptive large eddy simulation / G. De Stefano, O. V. Vasilyev, D. E. Goldstein // *Physics of Fluids*. — 2008. — Vol. 20, no. 4. — P. 045102.1—045102.14. — (Scopus, WoS, Q1).
10. *De Stefano, G.* Wavelet-based adaptive large-eddy simulation of supersonic channel flow / G. De Stefano, E. Brown-Dymkoski, O. V. Vasilyev // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2020. — Vol. 901. — A13. — (Scopus, WoS, Q1).
11. *De Stefano, G.* Wall-resolved wavelet-based adaptive large-eddy simulation of bluff-body flows with variable thresholding / G. De Stefano, A. Nejadmalayeri, O. V. Vasilyev // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2016. — Feb. — Vol. 788. — P. 303—336. — (Scopus, WoS, Q1).
12. *De Stefano, G.* Wavelet-based adaptive large-eddy simulation with explicit filtering / G. De Stefano, O. V. Vasilyev // *Journal of Computational Physics*. — 2013. — Vol. 238. — P. 240—254. — (Scopus, WoS, Q1).
13. *Ge, X.* Wavelet-based adaptive unsteady Reynolds-averaged Navier-Stokes simulations of wall-bounded compressible turbulent flows / X. Ge, O. V. Vasilyev, G. De Stefano, M. Hussaini // *AIAA Journal*. — 2020. — Apr. — Vol. 58, no. 4. — P. 529—1549. — (Scopus, WoS, Q2).
14. *Ge, X.* Wavelet-based adaptive delayed detached eddy simulations for wall-bounded compressible turbulent flows / X. Ge, O. V. Vasilyev, M. Y. Hussaini // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2019. — Vol. 873. — P. 1116—1157. — (Scopus, WoS, Q1).

15. *Goldstein, D. E.* Stochastic coherent adaptive large eddy simulation method / D. E. Goldstein, O. V. Vasilyev // *Physics of Fluids*. — 2004. — Vol. 16, no. 7. — P. 2497—2513. — (Scopus, WoS, Q1).
16. *Goldstein, D. E.* CVS and SCALES simulation of 3D isotropic turbulences / D. E. Goldstein, O. V. Vasilyev, N. K. R. Kevlahan // *Journal of Turbulence*. — 2005. — Vol. 6, no. 37. — P. 1—20. — (Scopus, WoS, Q3).
17. *Kasoy, D.* Detonation initiation on the microsecond time scale: comparative one and two dimensional DDT results obtained from adaptive wavelet collocation numerical methods / D. Kasoy, J. Regele, O. V. Vasilyev // *AIAA Paper No. 2007-986*. — 2007.
18. *Kevlahan, N. K. R.* Scaling of space-time modes with Reynolds number in two-dimensional turbulence / N. K. R. Kevlahan, J. M. Alam, O. V. Vasilyev // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2007. — Vol. 570. — P. 217—226. — (Scopus, WoS, Q1).
19. *Kevlahan, N. K. R.* An adaptive wavelet collocation method for fluid-structure interaction at high Reynolds numbers / N. K. R. Kevlahan, O. V. Vasilyev // *SIAM Journal on Scientific Computing*. — 2005. — Vol. 26, no. 6. — P. 1894—1915. — (Scopus, WoS, Q1).
20. *Kevlahan, N. K. R.* An adaptive wavelet method for turbulence in complex geometries / N. K. R. Kevlahan, O. V. Vasilyev, A. Cherhabili // *16th Imacs World Congress 2000, Proceedings, Lausanne - August 21-25, 2000*. Vol. 411—439 / ed. by M. Deville, R. Owens. — IMACS, 2000.
21. *Kevlahan, N. K. R.* A three-dimensional adaptive wavelet method for fluid-structure interaction / N. K. R. Kevlahan, O. V. Vasilyev, D. E. Goldstein, A. Jay // *Proceedings of Direct and Large-Eddy Simulation Workshop 5*. — Technical University of Munich, Germany, 2003.
22. *Kevlahan, N. K.-R.* An adaptive wavelet method for fluid–structure interaction. / N. K.-R. Kevlahan, O. V. Vasilyev // *Direct and Large-Eddy Simulation Workshop 4: University of Twente* / ed. by B. J. Geurts, R. Friedrich, O. Métais. — Kluwer, 2001. — P. 253—260.
23. *Liu, Q.* Hybrid adaptive wavelet collocation – Brinkman penalization method for unsteady rans simulations of compressible flow around bluff bodies / Q. Liu, O. V. Vasilyev // *AIAA Paper No. 2006-3206*. — 2006.
24. *Liu, Q.* A Brinkman penalization method for compressible flows in complex geometries / Q. Liu, O. V. Vasilyev // *Journal of Computational Physics*. — 2007. — Vol. 227, no. 2. — P. 946—966. — (Scopus, WoS, Q1).
25. *Nejadmalayeri, A.* Fully adaptive turbulence simulations based on Lagrangian spatio-temporally varying wavelet thresholding / A. Nejadmalayeri, A. Vezolainen, G. De Stefano, O. V. Vasilyev // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2014. — Vol. 749. — P. 794—817. — (Scopus, WoS, Q1).

26. *Nejadmalayeri, A.* Reynolds number scaling of coherent vortex simulation and stochastic coherent adaptive large eddy simulation / A. Nejadmalayeri, A. Vezolainen, O. V. Vasilyev // *Physics of Fluids*. — 2013. — Vol. 25. — P. 110823. — (Scopus, WoS, Q1).
27. *Nejadmalayeri, A.* Spatially variable thresholding for stochastic coherent adaptive LES / A. Nejadmalayeri, O. V. Vasilyev, A. Vezolainen, G. De Stefano // *Direct and Large-Eddy Simulation VIII*. Vol. 15 / ed. by H. Kuerten, B. Geurts, V. Armenio, J. Frohlich. — Springer, 2011. — P. 95–100. — (ERCOFTAC Series). — (Scopus, WoS).
28. *Nejadmalayeri, A.* Parallel adaptive wavelet collocation method for PDEs / A. Nejadmalayeri, A. Vezolainen, E. Brown-Dymkoski, O. V. Vasilyev // *Journal of Computational Physics*. — 2015. — Vol. 298. — P. 237–253. — (Scopus, WoS, Q1).
29. *Reckinger, S. J.* Adaptive wavelet collocation method simulations of Rayleigh–Taylor instability / S. J. Reckinger, D. Livescu, O. V. Vasilyev // *Physica Scripta*. — 2010. — Vol. T142, no. 014064. — P. 1–6. — (Scopus, WoS, Q2).
30. *Reckinger, S. J.* Comprehensive numerical methodology for direct numerical simulations of compressible Rayleigh–Taylor instability / S. J. Reckinger, D. Livescu, O. V. Vasilyev // *Journal of Computational Physics*. — 2016. — Vol. 313. — P. 181–208. — (Scopus, WoS, Q1).
31. *Regele, J.* Numerical modeling of acoustic timescale detonation initiation / J. Regele, D. Kassoy, O. V. Vasilyev // *AIAA Paper No. 2008-1037*. — 2008.
32. *Regele, J. D.* An adaptive wavelet-collocation method for shock computations / J. D. Regele, O. V. Vasilyev // *International Journal of Computational Fluid Dynamics*. — 2009. — Vol. 23, no. 7. — P. 503–518. — (Scopus, WoS, Q4).
33. *Regele, J.* Effects of high activation energies on acoustic timescale detonation initiation / J. Regele, D. R. Kassoy, O. V. Vasilyev // *Combustion Theory and Modelling*. — 2012. — Vol. 16, no. 14. — P. 650–678. — (Scopus, WoS, Q2).
34. *Regele, J.* Indirect detonation initiation using acoustic timescale thermal power deposition / J. Regele, D. R. Kassoy, A. Vezolainen, O. V. Vasilyev // *Physics of Fluids*. — 2013. — Vol. 25. — P. 091113. — (Scopus, WoS, Q1).
35. *Regele, J. D.* Evolution of detonation formation initiated by a spatially distributed, transient energy source / J. D. Regele, D. R. Kassoy, M. Aslani, O. V. Vasilyev // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2016. — Sept. — Vol. 802. — P. 305–332. — (Scopus, WoS, Q1).
36. *Schneider, K.* Wavelet methods in computational fluid dynamics / K. Schneider, O. V. Vasilyev // *Annual Review of Fluid Mechanics*. — 2010. — Vol. 42. — P. 473–503. — (Scopus, WoS, Q1).

37. *Vasilyev, O. V.* Solving multi-dimensional evolution problems with localized structures using second generation wavelets / O. V. Vasilyev // International Journal of Computational Fluid Dynamics. — 2003. — Vol. 17, no. 2. — P. 151–168. — (Scopus, WoS, Q4).
38. *Vasilyev, O. V.* Second generation wavelet collocation method for the solution of partial differential equations / O. V. Vasilyev, C. Bowman // Journal of Computational Physics. — 2000. — Vol. 165. — P. 660–693. — (Scopus, WoS, Q1).
39. *Vasilyev, O. V.* Lagrangian dynamic SGS model for stochastic coherent adaptive large eddy simulation / O. V. Vasilyev, G. De Stefano, D. E. Goldstein, N. K. R. Kevlahan // Journal of Turbulence. — 2008. — Vol. 9, no. 11. — P. 1–14. — (Scopus, WoS, Q3).
40. *Vasilyev, O. V.* Hybrid wavelet collocation - Brinkman penalization method for complex geometry flows / O. V. Vasilyev, N. K. R. Kevlahan // International Journal for Numerical Methods in Fluids. — 2002. — Vol. 40. — P. 531–538. — (Scopus, WoS, Q2).
41. *Vasilyev, O. V.* An adaptive multilevel wavelet collocation method for elliptic problems / O. V. Vasilyev, N. K. R. Kevlahan // Journal of Computational Physics. — 2005. — Vol. 206, no. 2. — P. 412–431. — (Scopus, WoS, Q1).
42. *Vasilyev, O. V.* A dynamically adaptive multilevel wavelet collocation method for solving partial differential equations in a finite domain / O. V. Vasilyev, S. Paolucci // Journal of Computational Physics. — 1996. — Vol. 125. — P. 498–512. — (Scopus, WoS, Q1).
43. *Vasilyev, O. V.* A fast adaptive wavelet collocation algorithm for multi-dimensional PDEs / O. V. Vasilyev, S. Paolucci // Journal of Computational Physics. — 1997. — Vol. 125. — P. 16–56. — (Scopus, WoS, Q1).
44. *Vasilyev, O. V.* A multilevel wavelet collocation method for solving partial differential equations in a finite domain / O. V. Vasilyev, S. Paolucci, M. Sen // Journal of Computational Physics. — 1995. — Vol. 120. — P. 33–47. — (Scopus, WoS, Q1).
45. *Vasilyev, O. V.* The solution of PDEs using wavelets / O. V. Vasilyev, D. A. Yuen, S. Paolucci // Computers in Physics. — 1997. — Vol. 11, no. 5. — P. 429–435. — (Scopus, WoS, Q1).
46. *Vasilyev, O. V.* Adaptive wavelet environment for in silico universal multiscale modeling (AWESUMM) / O. V. Vasilyev, N. K.-R. Kevlahan, D. E. Goldstein, A. V. Vezolainen, J. Regele, A. Nejadmalayeri, S. Reckinger, E. Brown-Dymkoski, O. Rogozin. — 2019. — URL: http://gitlab.com/AWESUMM/wlt_git/wikis/home.