

На правах рукописи

Азаренок Борис Николаевич

**Вариационные методы построения
структурированных сеток и их приложения
к газовой динамике**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2009

Работа выполнена в Вычислительном Центре им. А.А.Дородницына Российской академии наук.

Официальные

оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Николай Георгиевич Бураго,

доктор физико-математических наук,
профессор Владимир Иванович Мажукин,

доктор физико-математических наук,
Геннадий Павлович Прокопов

Ведущая

организация: Институт математики и механики УрО РАН

Защита состоится “ 26 ” ноября 2009 г. в 11 ч. 00 мин.
на заседании Диссертационного совета Д002.058.01 в Институте
математического моделирования РАН по адресу: 125047 г. Москва,
Миусская пл., д. 4А.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИММ РАН.

Автореферат разослан “ _____ ” октября 2009 г.

Ученый секретарь Диссертационного совета

доктор физико-математических наук

Н.В.Змитренко

Общая характеристика работы

Диссертация посвящена разработке вариационного метода построения структурированных трехмерных сеток, вариационного метода построения структурированных подвижных адаптивных сеток, подстраивающихся к особенностям решения, разработке консервативной схемы расчета нестационарных двумерных течений газа с выделением химической энергии на подвижных сетках и разработке алгоритма консервативной интерполяции на гексаэдральных сетках.

Актуальность темы. Методы построения счетных сеток интенсивно развивались в течение последних пятидесяти лет. Это обусловлено большим числом приложений, связанных с моделированием физических процессов. Сеточные методы активно используются при численном решении задач гидродинамики, электродинамики, микроэлектроники, магнитной гидродинамики, при численном моделировании климата и океанических течений, а также в других областях.

Построение сетки состоит в разбиении физической области на ячейки. Это разбиение следует осуществлять таким образом, чтобы получить как можно точнее численное решение физической задачи. Существующие алгоритмы построения гексаэдральных сеток, реализованные в виде промышленных программных продуктов, не являются надежными. В областях сложной формы, с меняющейся в процессе моделирования геометрией, они генерируют вырожденные сетки, на которых не представляется возможным проводить моделирование физических задач. Поэтому существует необходимость в разработке надежных и универсальных сеточных алгоритмов построения сеток с заданной формой гексаэдральных ячеек.

Как правило, при моделировании физического процесса существенное и резкое изменение параметров происходит на небольших участках рассматриваемой области. В этих зонах необходимо сильно измельчать сетку, для того чтобы получить численное

решение с требуемой точностью. С другой стороны, использование очень подробной равномерной сетки (квазиравномерной сетки в областях сложной формы) во всей области привело бы к неоправданно большим затратам ресурсов ЭВМ, времени счета и оперативной памяти. Поэтому актуальным и важным разделом сеточных методов является построение адаптивных сеток, сгущающихся в зонах больших градиентов решения физической задачи. Адаптивные сетки должны быть подвижными, если моделируется эволюционный процесс, для которого структура решения меняется со временем.

При численном моделировании газодинамических течений на подвижных сетках необходимо использовать консервативные численные схемы расчета. Существует потребность разработки численных схем повышенного порядка аппроксимации на гладких решениях.

При моделировании реальных пространственных задач часто возникает потребность в некоторый момент времени перейти от расчета на одной сетке к расчету на другой. Для этого необходимо применять специальные алгоритмы консервативной интерполяции.

Целью работы является:

- разработка вариационного метода построения гексаэдральных сеток в областях со сложной геометрией с возможностью управления формой ячеек для использования в реальных физических и инженерных приложениях;
- разработка вариационного метода построения подвижных адаптивных гексаэдральных сеток, подстраивающихся к особенностям решения моделируемой задачи;
- разработка численного метода решения задач двумерного нестационарного течения невязкого газа при наличии химической реакции на подвижных сетках;
- разработка метода консервативной интерполяции с одной гексаэдральной сетки на другую.

Достоверность результатов диссертации: результаты оформ-

лены в виде строгих, при необходимости доказанных, математических утверждений и реализованных численных алгоритмов. Надежность алгоритмов продемонстрирована на многих примерах.

Научная новизна работы. В диссертации разработан и реализован новый вариационный метод построения гексаэдральных разностных сеток для численного моделирования физических процессов. Для этого используется функционал, предложенный С.А.Иваненко¹. Показано, что этот функционал является универсальным, т.е. с его помощью посредством выбора компонентов управляющего метрического тензора можно воспроизвести любое заданное невырожденное отображение, а, следовательно, и сетку. Свойство универсальности функционала позволяет получать ячейки сетки произвольной заданной формы. При построении сетки предложено вместо невырожденности гексаэдральной ячейки с линейчатыми гранями потребовать невырожденность двух 12-гранных ячеек с треугольными гранями, что сводится к требованию положительности объемов 10 тетраэдров. С помощью вычислительного эксперимента показана очень низкая вероятность появления вырожденных ячеек гексаэдральной сетки при выполнении этих условий. В практических примерах построения сеток предлагаемым вариационным методом выполнение этого условия обеспечивало невырожденность гексаэдральных сеток. Построена конечномерная функция, аппроксимирующая функционал и имеющая бесконечный барьер на границе множества невырожденных 12-гранных ячеек. По сравнению с предложенной ранее С.А.Иваненко процедурой аппроксимации функционала на 24 тетраэдрах² минимизация рассмотренного в диссертации дискретного функционала значительно более экономична (число слагаемых у дискретного функционала меньше в 2.4 раза) и эффективна (процент охвата невырожденных гексаэдральных ячеек возрос почти в 9 раз). Предложено необходимое условие невырожден-

¹Иваненко С.А. Вариационные методы построения сеток // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. № 6. С. 830–844.

²Иваненко С.А. Адаптивно-гармонические сетки. М. ВЦ РАН. 1997. 181 С.

ности гексаэдральной ячейки, используемое при проверке сетки на невырожденность совместно с достаточными условиями невырожденности О.В.Ушаковой³. Предложен алгоритм перераспределения узлов сетки по граничным поверхностям и ребрам области. С использованием свойств универсальности и инвариантности функционала предложен алгоритм ортогонализации координатных линий и сгущения координатных поверхностей сетки к границе области, а также гладкого сопряжения приграничных слоев ячеек сетки к ячейкам, расположенным внутри области. Созданный комплекс программ обеспечивает построение сеток с управлением формы гексаэдральных ячеек в областях со сложной геометрией.

Разработан и реализован новый вариационный метод построения подвижных адаптивных гексаэдральных сеток для численного моделирования физических процессов. Для этого используется функционал, предложенный С.А.Иваненко¹. С помощью теоретического анализа, проведенного для одномерного, двумерного и трехмерного случаев, показано, что при адаптации сетки к разрывной мониторинной функции необходимо использовать функционал с "замороженными" производными от мониторинной функции для предотвращения схлопывания ячеек. На основе анализа свойств дискретных функционалов в одномерном и двумерном случаях показано, что они являются несогласованными между собой, т.е. осуществляемое с их помощью сгущение сетки к разрыву мониторинной функции происходит по разному внутри области и на ее границе. При минимизации дискретного функционала эта несогласованность приводит к вырождению приграничных ячеек сетки. Аналогичная ситуация возникает в пространственном случае при использовании соответственно трехмерного функционала внутри области и двумерного на границе. Предложен алгоритм согласованной расстановки узлов адаптивной сетки внутри области

³Ушакова О.В. Условия невырожденности трехмерных ячеек. Формула для объема ячеек//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2001. Т. 41. № 6. С. 881–894.

и на ее границе. Алгоритм реализован в виде комплекса программ, позволяющего строить адаптивные подвижные сетки в областях сложной формы, в том числе с изменяющейся во времени границей.

Разработан численный метод расчета двумерных нестационарных газодинамических течений с выделением химической энергии на подвижных сетках. Численный метод включает в себя элементы схемы С.К.Годунова^{4,5}: аппроксимацию уравнений газовой динамики, записанных в виде интегральных законов сохранения, и решение задачи о распаде разрыва для определения потоков через границы подвижной ячейки. Для повышения порядка аппроксимации уравнений по пространственным координатам, параметры на сторонах ячейки сетки, служащие для вычисления потоков, находятся с помощью линейной интерполяции величин из центра ячеек и сглаживающего алгоритма. Рассмотрена задача о распаде разрыва для уравнения химической кинетики на подвижной сетке. Алгоритм реализован в виде комплекса программ, с помощью которых были проведены расчеты течений газа на адаптивных сетках, включая случаи течений с детонационными волнами.

Разработан новый алгоритм консервативной интерполяции с одной гексаэдральной сетки на другую. Центральной идеей алгоритма является замена построения области пересечения в пространстве гексаэдральных ячеек, у которых грани суть линейчатые поверхности второго порядка, на построение области пересечения 12-гранных ячеек с треугольными плоскими гранями. Предложен оптимальный алгоритм перебора ячеек сетки, позволяющий значительно сократить число операций и время счета. Проведен теоретический анализ ошибки интерполяции. Алгоритм реализован в виде комплекса программ и внедрен в заинтересованную организацию, что позволило провести численное моделирование ряда

⁴Годунов С.К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики//Матем. сб. 1959. Т. 47. Вып. 3. С. 271–306.

⁵Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.М., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука. 1976.

задач многокомпонентной гидродинамики.

Практическая значимость результатов диссертации состоит в следующем:

1) Метод построения гексаэдральных сеток может использоваться в реальных инженерных задачах со сложной геометрией области. Он является надежным и обеспечивает построение невырожденных сеток. Особый интерес представляет его использование в задачах, где априорно требуется управлять формой ячеек. Например, в задачах аэрогидродинамики, когда необходимо сильно сгущать координатные поверхности и ортогонализировать координатные линии сетки к границам области для разрешения пограничных слоев. Метод может быть использован в задачах с сильно меняющейся и неустойчивой границей раздела двух сред, когда форма границы сильно изгибается, для разрешения зон неустойчивости с помощью сетки.

2) Метод построения подвижных адаптивных четырехугольных сеток в двумерном случае и гексаэдральных сеток в трехмерном случае может применяться в эволюционных задачах для разрешения зон резкого изменения решения с помощью сгущения узлов сетки при сохранении регулярной структуры сетки. Регулярная структура сетки упрощает реализацию численных алгоритмов решения дифференциальных уравнений. Метод позволяет строить адаптивные сетки в реальных областях, в которых решаются инженерные и физические задачи.

3) Численный метод расчета двумерных нестационарных течений газа на подвижных сетках может быть использован для решения задач газовой динамики при наличии горения и детонации.

4) Алгоритм консервативной интерполяции может использоваться в трехмерных задачах, где необходимо перейти от расчета на одной гексаэдральной сетке к расчету на другой.

Апробация работы. Результаты диссертации были доложены на: VIII, IX Всероссийских совещаниях "Проблемы построения сеток для решения задач математической физики", 2000, 2002г.; XII, XV, XVI, XVII Всероссийских конференциях "Теорети-

ческие основы и конструирование численных алгоритмов решения задач математической физики" памяти К.И.Бабенко, 1998, 2004, 2006, 2008г.; 7th Russian–Japanese Intern. Sympos. on CFD, Moscow Lomonosov Univ., 2000; Intern. Confer. "OFEA'2001. Optimization of finite-element approximations, splines and wavelets", St.-Petersburg, 2001; Confer. on Numerical Methods for Fluid Dynamics, University of Oxford, UK, 1998; 8th International Symposium on CFD, Bremen, Germany, 1999; 2d Intern. Sympos. on Finite Volumes for Complex Applications – Problems and Perspectives, Duisburg, Germany, 1999; 7th,9th,10th,11th Intern. Conferences on Numerical Grid Generation, Whilster, Canada, 2000, San Jose, California, USA, 2005, Forth, Crete, Greece, 2007, Montreal, Canada, 2009; 1st Intern. Conference on CFD, Kyoto, Japan, 2000; 2nd Intern. Confer. Applied Mathematics for Industrial Flows, Ciocco, Italy, 2000; 9th Intern. Confer. on Hyperbolic Problems, Theory, Numerics, Applications, California Institute of Technology, Pasadena, California, USA, 2002; Intern. Confer. on Scientific Computing and Partial Differential Equations, Hong Kong, 2002; Workshop "Grid Generation: Theory and Applications"М.: ВЦ РАН, 2002г., X Всероссийском семинаре "Современные проблемы численного моделирования", Новороссийск, 2003; III Intern. Workshop on Scientif. Comput. and Applications, City Univ. of Hong Kong, 2003; VII,VIII Международных конференциях "Забабахинские Научные Чтения", РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск, 2003 и 2005; Всероссийских конференциях "Прикладная геометрия, построение расчетных сеток и высокопроизводительные вычисления", ВЦ РАН, Москва, 2004 и 2006; 4-й Международной школе-семинаре "Внутрикамерные процессы, горение и газовая динамика дисперсных систем", Балтийский гос. университет Военмех, С.-Петербург, 2004г.; V,VII Международных конференциях по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ-2004 и NPNJ-2008), Самара, 2004, и Алушта, 2008; XIV,XV Международных конференциях по Вычислительной Механике и Современным Прикладным Программным Системам (ВМСППС-2001, ВМСППС-2005 и ВМСППС-2007), Москва, 2001г., Алуш-

та, 2005г. и 2007г.; International conference "Numerical geometry, grid generation and scientific computing", ВЦ РАН, Москва, 2008; на семинарах ВЦ РАН им. А.А.Дородницына, ИПМ РАН им. М.В.Келдыша, Институте Математики им. С.Л.Соболева СО РАН, Институте Математики и Механики УрО РАН, Институте Математического Моделирования РАН, Институте Вычислительной Математики РАН, Karlsruhe University, Germany; Hong Kong Baptist University; Hong Kong University of Science and Technology.

Работа над диссертацией проводилась в рамках проектов РФФИ: "Конструирование алгоритмов построения адаптивных сеток на основе теории гармонических отображений"(1999–2001г., код проекта 99-01-00264), "Разработка алгоритмов построения многомерных сеток и их приложения в задачах математической физики"(2002–2004г., код проекта 02-01-00236), "Теоретические основы и алгоритмы построения многомерных сеток"(2009–2011, код проекта 09-01-00173); в рамках проекта Отделения Математических Наук РАН "Современные вычислительные и информационные технологии решения больших задач"(2005–2009г.).

Результаты диссертации использовались в совместных с зарубежными учеными исследованиях в Department of Mathematics of Hong Kong Baptist University (Hong Kong Research Grant Council, Project code НКВУ 2045/02Р and НКВУ 201/03Р), International Research Team on Complex System, Chinese Academy of Sciences.

Публикации. Основные результаты опубликованы в 14 рецензируемых журнальных статьях, рекомендованных ВАК, 2 рецензируемых журнальных статьях, 2 монографиях (3 работы), 4 препринтах ВЦ РАН, 9 статьях в трудах всероссийских и зарубежных конференций, 25 публикациях тезисов докладов на всероссийских и зарубежных конференциях.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и списка цитируемой литературы. Диссертация содержит 265 страниц, в общей сложности 102 рисунка и 8 таблиц. Список цитируемой литературы содержит 206 наименований.

Содержание работы

Введение содержит краткий обзор результатов по вариационным методам построения структурированных сеток, подвижных адаптивных сеток, методам расчета течений газа с выделением химической энергии и методам консервативной интерполяции.

Алгоритмы построения сеток разрабатывались в работах российских ученых С.К. Годунова, Г.П. Прокопова, Н.Н. Яненко, А.Ф. Сидорова, А.А. Самарского, С.А. Иваненко, В.Д. Лисейкина, Н.Н. Калиткина, Л.М. Дегтярева, А.А. Чарахчьяна, О.В. Ушаковой, В.И. Мажукина, В.Ф. Тишкина и др., иностранными исследователями – A. Winslow, J.F. Thompson, Z.U.A. Warsi, C.W. Mastin, P.R. Eisman, P.L. George, P. Knupp, G. Liao, и др.

В диссертации рассматриваются структурированные сетки. Для них упорядочивание узлов задается простейшим образом, посредством матрицы с двумя индексами в двумерном случае и матрицы с тремя индексами в трехмерном. Ячейками структурированной сетки являются четырехугольники в двумерном случае и шестигранники (гексаэдры) в трехмерном.

За рубежом создано большое число промышленных коммерческих программных пакетов для построения сеток. Следует отметить, что существующие алгоритмы построения структурированных трехмерных сеток, на которых аппроксимация дифференциальных уравнений осуществляется наиболее естественным образом, не являются надежными и в сложных областях генерируют вырожденные ячейки. Существует также потребность в сеточных алгоритмах с возможностью управления координатными линиями и поверхностями сеток. Таким образом, для проведения математического моделирования существует необходимость дальнейшего развития алгоритмов построения структурированных сеток.

Во введении показана актуальность и практическая значимость работы, сформулированы цели диссертации.

В диссертации рассматриваются вариационные методы построения сеток. Эти методы используются при построении сеток, удо-

влетворяющих ряду требований. Среди них невырожденность, гладкость, квазиравномерность, квазиортогональность и др. Развитие вариационных методов ведет свое начало в одномерном случае с работы А.Ф.Сидорова⁶ и в двумерном случае с работ С.К.Годунова, Г.П.Прокопова⁷ и А. Winslow⁸.

В вариационных методах невырожденная сетка строится с помощью гомеоморфного отображения параметрической области \mathcal{P} из пространства переменных $\boldsymbol{\xi}=(\xi^1, \dots, \xi^n)$ (в двумерном случае это прямоугольник, а в трехмерном – прямоугольный параллелепипед) с заданной квадратной (кубической) сеткой на физическую область Ω из пространства переменных $\mathbf{x}=(x^1, \dots, x^n)$. Если отображение $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \mathcal{P} \rightarrow \Omega$ сохраняет ориентацию, т.е. оно гладкое и якобиан отображения $J = \det \mathbf{x}'(\boldsymbol{\xi})$ сохраняет знак всюду в \mathcal{P} , то оно может использоваться также и для построения криволинейной системы координат. Соответственно изначально ставилась задача поиска таких функционалов (или соответствующих им дифференциальных уравнений), чтобы функции доставляющие им минимум (являющиеся решением дифференциальных уравнений) обеспечивали гомеоморфное гладкое отображение параметрической области \mathcal{P} на физическую область Ω .

Для двумерного случая согласно теореме Радó (сформулированной Radó⁹ и доказанной Kneser¹⁰) гармоническое отображение односвязной ограниченной области Ω_1 на односвязную ограниченную выпуклую область Ω_2 является диффеоморфизмом при условии заданного гомеоморфизма границы $\partial\Omega_1$ на $\partial\Omega_2$. Поскольку в общем случае физическая область Ω невыпуклая, то рассматри-

⁶Сидоров А.Ф. Об одном алгоритме расчета оптимальных разностных сеток // Тр. Матем. ин-та АН СССР. М. 1966. Т. 74. С. 147–151.

⁷Годунов С.К., Прокопов Г.П. О расчетах конформных отображений и построении разностных сеток // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1967. Т. 7. № 5. С. 1031–1059.

⁸Winslow A.M. Numerical solution of the quasi-linear Poisson equation in a nonuniform triangle mesh // J. Comput. Phys. 1966. V. 1. P. 149–172.

⁹Radó T. Aufgabe 41, Jahresber // Deutsche Math.-Verein. 1926. V. 35. P. 49.

¹⁰Kneser H., Lösung der Aufgabe 41, Jahresber // Deutsche Math.-Verein. 1926. V. 35. P. 123–124.

вают гармоническое отображение $\xi(\mathbf{x}) : \Omega \rightarrow \mathcal{P}$, где \mathcal{P} – параметрический прямоугольник с заданной квадратной сеткой. Для этого отображения условия теоремы Радó выполнены. Для построения сетки в физической области Ω проводится замена переменных, уравнения Лапласа обращаются и решается краевая задача для квазилинейной системы дифференциальных уравнений с соответствующими граничными условиями для нахождения обратного отображения $\mathbf{x}(\xi) : \mathcal{P} \rightarrow \Omega$. В литературе использование этой системы уравнений для построения сеток принято называть методом Winslow⁸. Этот подход обеспечивает получение невырожденных сеток для довольно широкого класса областей. В силу известных свойств уравнений Лапласа координатные линии криволинейной сетки получаются гладкими, а сама сетка квазиравномерной.

Однако, практика построения сеток показала, что для областей с гладкими, но изогнутыми границами (см. Knupp¹¹ и [1]) использование обращенных уравнений Лапласа не обеспечивает получение невырожденных структурированных сеток при разумно приемлемом для практических вычислений количестве ячеек сетки, а качество невырожденных сеток является неудовлетворительным [1]. Причина вырождения сеток состоит в ошибках аппроксимации квазилинейных дифференциальных уравнений, которые существенно возрастают в случае сильно изогнутых границ области [1]. Если же граница содержит направленные внутрь области изломы, то при любой степени измельчения сетки четырехугольные ячейки вырождаются в окрестности направленных внутрь углов². Для построения невырожденных сеток в двумерных областях, состоящих из четырехугольных ячеек, был предложен вариационный барьерный метод¹².

Другой важной задачей является дополнительный контроль за координатными линиями сетки, иными словами, за формой ячеек.

¹¹Knupp P., Luczak R. Truncation error in grid generation: a case study, Numerical Methods for Partial Differential Equations. 1995. V. 11. P. 561–571.

¹²Иваненко С.А., Чарахчян А.А. Криволинейные сетки из выпуклых четырехугольников // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1988. Т 28. № 4. С. 503–514.

Для этого вводилась замена координат в параметрической области $\mathcal{P}^{7,13}$. Замену координат в параметрической области \mathcal{P} иногда удобно представлять в виде использования криволинейной сетки в канонической области \mathcal{C} (вместо квадратной в \mathcal{P}) и отображать ее на область Ω (см. Thompson¹⁴).

Трехмерный случай оказался значительно сложнее двумерного. Непростым является вопрос о нахождении условий, при которых исследуемое гладкое отображение является гомеоморфизмом. Например, для гармонических отображений теорема Радó не обобщается на трехмерный случай^{15,16}.

Поэтому для построения гомеоморфного отображения области \mathcal{P} на область Ω в диссертации используется следующий подход. Глобальное гомеоморфное отображение $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \mathcal{P} \rightarrow \Omega$ ищется в виде склейки гладких гомеоморфных отображений $\mathbf{x}_i(\boldsymbol{\xi})$ каждой кубической ячейки \mathcal{P}_i из области \mathcal{P} на гексаэдральную ячейку Ω_i из области Ω .

Глава 1 диссертации посвящена описанию вариационного метода построения гексаэдральных сеток. Основные результаты опубликованы в [6] (J. Comput. Phys., 2006), [29] (Препринт ВЦ РАН, 2006), [2] (Математ. Моделирование, 2008), [17] (Энциклопедия низкотемпературной плазмы, 2008).

В **разделе 1.1** дается определение невырожденной сетки, конструируемой с помощью отображения $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \mathcal{P} \rightarrow \Omega$ параметрической области \mathcal{P} на физическую область Ω .

В **разделе 1.2** приведены вариационная постановка задачи построения сетки и функционал \mathcal{D} в n -мерном случае, предложен-

¹³Годунов С.К., Прокопов Г.П. Об использовании подвижных сеток в газодинамических расчетах // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1972. Т. 12 № 2. С. 429–440.

¹⁴Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Mastin, W. Numerical Grid Generation. North-Holland, N.Y. etc. 1985.

¹⁵Liu H., Liao G. A note on harmonic maps // Appl. Math. Lett. 1996. V. 9. № 4. P. 95–97.

¹⁶Laugesen R.S. Injectivity can fail for higher-dimensional harmonic extensions // Complex Variables. 1996. V. 28. P. 357–369.

ный С.А.Иваненко¹.

Рассматривается гомеоморфное, класса \mathbb{C}^1 , отображение $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ параметрической области \mathcal{P} из пространства переменных $\boldsymbol{\xi}=(\xi^1, \dots, \xi^n)$ (куб или прямоугольный параллелепипед) на физическую область Ω из пространства переменных $\mathbf{x}=(x^1, \dots, x^n)$. В области \mathcal{P} задана кубическая сетка. Рассматривается дополнительное гомеоморфное, класса \mathbb{C}^1 , отображение $\mathbf{X}(\boldsymbol{\xi}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ области \mathcal{P} на каноническую область \mathcal{C} из пространства переменных $\mathbf{X}=(X^1, \dots, X^n)$. На рис. 1 показан случай $n=3$.

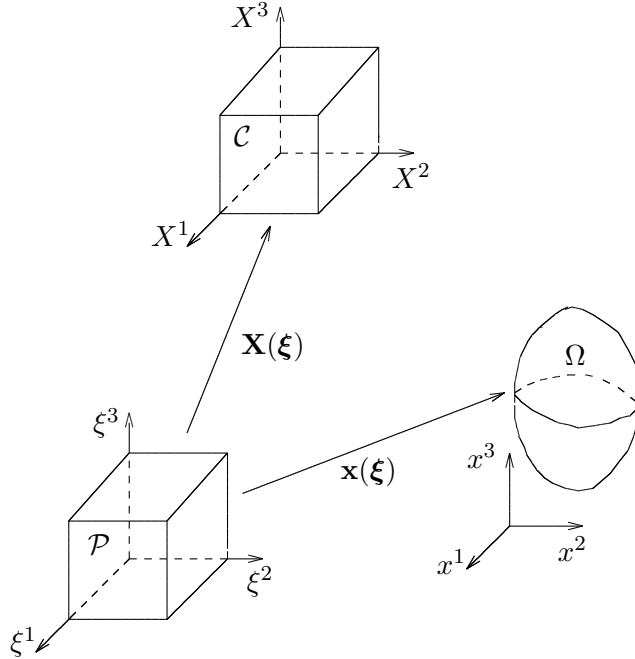


Рис. 1. Случай $n=3$. \mathcal{P} – параметрическая область с кубической сеткой, \mathcal{C} – каноническая область, Ω – физическая область.

Для отображений $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$ и $\mathbf{X}(\boldsymbol{\xi})$ метрические тензоры задаются

следующим образом

$$g_{ij} = \sum_{l=1}^n \frac{\partial x^l}{\partial \xi^i} \frac{\partial x^l}{\partial \xi^j}, \quad G_{ij} = \sum_{l=1}^n \frac{\partial X^l}{\partial \xi^i} \frac{\partial X^l}{\partial \xi^j}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n.$$

G_{ij} называется управляющим метрическим тензором, поскольку отображение $\mathbf{X}(\boldsymbol{\xi})$ задается с целью дополнительного управления формой ячеек сетки.

Для конструирования отображения используются инварианты тензора $G^{-1}g$ (G^{-1} – контрвариантный тензор)

$$I_1 = \text{tr}(G^{-1}g), \quad I_n = \det(G^{-1}g).$$

В функционале берется нормированное безразмерное отношение инвариантов I_1 к I_n , которое интегрируется по n -мерной области \mathcal{P} (см. С.А.Иваненко¹)

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})) &= \int_{\mathcal{P}} \dots \int \frac{I_1^{n/2}}{I_n^{1/2}} d\xi^1 \dots d\xi^n = \\ &= \frac{1}{n^{n/2}} \int_{\mathcal{P}} \dots \int \frac{(\text{tr}(G^{-1}g))^{n/2} \sqrt{\det G}}{\sqrt{\det g}} d\xi^1 \dots d\xi^n. \end{aligned} \quad (1)$$

Рассматривается следующая вариационная постановка задачи построения сетки.

Ставится задача построения гомеоморфного, класса \mathbb{C}^1 , отображения $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ параметрической области \mathcal{P} на физическую область Ω при заданном отображении границ областей. Осуществляющие отображение функции $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$ находятся в результате минимизации функционала (1), где $G_{ij}(\boldsymbol{\xi})$ – элементы симметричной положительно определенной матрицы, заданной в каждой точке \mathcal{P} .

Метрический тензор G_{ij} задается локальным отображением подобласти из \mathcal{P} на область из пространства переменных X^1, X^2, \dots, X^n . В частном случае отображением области \mathcal{P} на область \mathcal{C} .

Функционал (1) инвариантен относительно невырожденных координат \mathbf{x} и \mathbf{X} .

Следует отметить, что идея использовать отношение инвариантов метрического тензора в подынтегральном выражении принадлежит В.Д.Лисейкину^{17,18}.

В разделе 1.3 приведен функционал \mathcal{D} для трехмерного случая. Показывается, что \mathcal{D} является универсальным функционалом, поскольку специальным заданием управляющего метрического тензора G_{ij} , минимизируя \mathcal{D} , можно воспроизвести любую заданную невырожденную сетку. Свойство универсальности \mathcal{D} может быть использовано, например, в случае построения блочно-структурированных сеток. Координатные линии сеток соседних блоков, задаваемых разными отображениями, можно гладко сопрягать постепенным изменением управляющего метрического тензора G_{ij} в окрестности границы раздела блоков. Выписаны уравнения Эйлера для функционала \mathcal{D} .

Достаточное условие невырожденности разностной сетки приведено в разделе 1.4 и состоит в следующем¹⁹. При заданном отображении границы области $\partial\mathcal{P}$ на $\partial\Omega$, если граница каждого элемента сетки $\partial\mathcal{P}_i$ (\mathcal{P}_i – куб в области \mathcal{P}), гомеоморфно отображается на границу элемента $\partial\Omega_i$ (Ω_i – гексаэдр в области Ω) и для всех элементов якобиан J_i отображения $\mathbf{x}_i(\boldsymbol{\xi}) : \mathcal{P}_i \rightarrow \Omega_i$ положителен, тогда глобальное кусочно-гладкое отображение $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \mathcal{P} \rightarrow \Omega$ является гомеоморфизмом. Следовательно, необходимо иметь условия невырожденности гексаэдральной ячейки.

В разделе 1.5 приведены условия невырожденности гексаэдральной ячейки, задаваемой с помощью трилинейного отображения единичного куба $0 \leq \xi^1, \xi^2, \xi^3 \leq 1$ из параметрического про-

¹⁷Лисейкин В.Д. О построении структурированных сеток на n -мерных поверхностях // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1991. Т. 31. № 11. С. 1670–1683.

¹⁸Liseikin V.D. Grid Generation Methods. Springer-Verlag. New York. 1999.

¹⁹Бобылев Н.А., Иваненко С.А., Казунин А.В. О кусочно-гладких гомеоморфных отображениях ограниченных областей и их приложениях к теории сеток // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. № 6. С. 808–817.

странства

$$\mathbf{r}=(1-\xi^3)\{\xi^1[(1-\xi^2)\mathbf{r}_2+\xi^2\mathbf{r}_3]+(1-\xi^1)[\xi^2\mathbf{r}_4+(1-\xi^2)\mathbf{r}_1]\}+ \\ +\xi^3\{\xi^1[(1-\xi^2)\mathbf{r}_6+\xi^2\mathbf{r}_7]+(1-\xi^1)[\xi^2\mathbf{r}_8+(1-\xi^2)\mathbf{r}_5]\}, \quad (2)$$

где $\mathbf{r}_i=(x_i, y_i, z_i)$ – координаты вершин ячейки (см. рис. 2а). Невырожденность ячейки означает положительность якобиана отображения (2)

$$J=\mathbf{r}_{\xi^1}\cdot(\mathbf{r}_{\xi^2}\times\mathbf{r}_{\xi^3})>0 \quad (3)$$

всюду в параметрическом кубе. До настоящего времени не получено (и, по-видимому, не существует) условия, которое является одновременно необходимым и достаточным, обеспечивающее невырожденность гексаэдральной ячейки³.

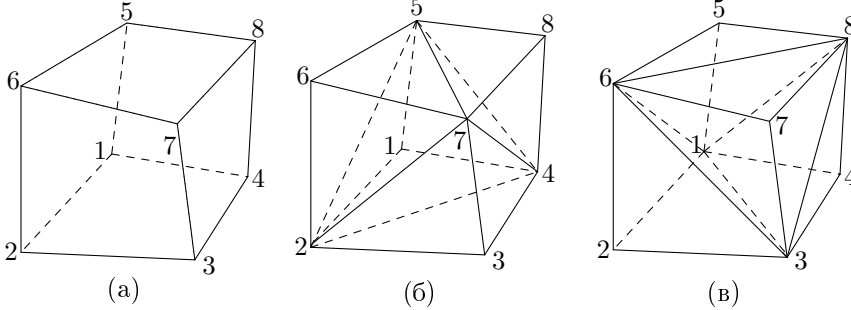


Рис. 2. Гексаэдральная ячейка (а) заменяется на два 12-гранника первого (б) и второго (в) типа с теми же вершинами.

Предлагаются следующие условия невырожденности гексаэдральной ячейки. Гексаэдральная ячейка заменяется на два 12-гранника первого и второго типа с треугольными гранями (см. рис. 2). Каждый 12-гранник состоит из 5 тетраэдров. Единичный параметрический куб разбивается на 10 базисных тетраэдров подобно разбиению двух 12-гранников (см. рис. 2б,в): 8 угловых тетраэдров при вершинах куба и 2 внутренних. Трилинейное отображение (2) заменяется на набор линейных отображений $\mathbf{r}^h(\xi)$ 10 базисных тетраэдров, на которые разбивается параметрический

куб, на соответствующие тетраэдры, из которых составлены два 12-гранника. Условие невырожденности ячейки (3) заменяется на условие невырожденности 10 линейных отображений $\mathbf{r}^h(\boldsymbol{\xi})$, т.е. невырожденности двух 12-гранников. Это равносильно условию положительности объемов 10 тетраэдров, на которые разбиваются 12-гранники. Несмотря на то, что для отдельно взятой ячейки множество невырожденных гексаэдральных ячеек не совпадает с множеством невырожденных 12-гранников, практика построения сеток предложенным в диссертации методом показала, что это условие обеспечивает невырожденность гексаэдральной сетки.

Приводится ряд необходимых условий невырожденности гексаэдральной ячейки. Часть из них рассматривалась О.В.Ушаковой³. Предложено необходимое условие НУ4, которое состоит в проверке знака якобиана отображения (2) на отрезках, соединяющих соответствующие точки противоположных граней гексаэдральной ячейки, разбитых на 10×10 четырехугольников, при том что каждая грань параметрического куба разбивается на 10×10 квадратов. Поскольку вдоль каждого отрезка J есть квадратичная функция одного параметра ξ^i , то зная значения J на концах и посередине отрезка, легко определить принимает ли он отрицательные значения на всем отрезке. Это необходимое условие вместе достаточным условием 2 из работы О.В.Ушаковой³ применяется для проверки невырожденности построенной гексаэдральной сетки.

В **разделе 1.6** дискретизация функционала \mathcal{D} в каждой гексаэдральной ячейке осуществляется усреднением его аппроксимаций на 10 базисных тетраэдрах. В результате получается дискретный аналог функционала, разностная функция \mathcal{D}^h .

В **разделе 1.7** описывается квазиньютоновская процедура минимизации дискретного функционала \mathcal{D}^h . В матрице вторых производных удерживаются только диагональные элементы, что значительно сокращает время вычислений. Необходимые для этого расчетные формулы приводятся в **разделе 1.8**. Минимизация функции \mathcal{D}^h является значительно более экономичной и

эффективной процедурой по сравнению с предложенной ранее С.А.Иваненко процедурой, использующей аппроксимацию функционала на другом множестве 24 базисных тетраэдров².

В **разделе 1.9** показывается, что \mathcal{D}^h имеет бесконечный барьер на границе множества невырожденных сеток, состоящих из 12-гранных ячеек первого или второго типа. Барьерное свойство дискретного функционала впервые в двумерном случае было использовано С.А.Иваненко и А.А.Чарахьяном¹², а в трехмерном случае С.А.Иваненко².

В некоторых случаях, например когда во время моделирования основной задачи граница области $\partial\Omega$ движется и ее форма существенно изменяется, необходимо осуществлять перераспределение узлов на границе $\partial\Omega$. В **разделе 1.10** рассматривается алгоритм расстановки узлов на границе $\partial\Omega$. Для этого решается задача условной минимизации \mathcal{D}^h при наличии ограничений типа равенств, задающих границу $\partial\Omega$. Если граница $\partial\Omega$ задана параметрически, то для перераспределения граничных узлов можно использовать процедуру безусловной минимизации \mathcal{D}^h в параметрической форме, рассматриваемую там же.

В **разделе 1.11** описывается способ сгущения и ортогонолизации сетки к границе $\partial\Omega$ с помощью задания управляющего метрического тензора G_{ij} . Для этого используется свойство универсальности функционала \mathcal{D} , т.е. способность воспроизводить заданную сетку.

В областях со сложной геометрией построение начальной невырожденной сетки представляет собой отдельную задачу. Для того чтобы попасть в допустимое множество невырожденных сеток, используется метод штрафа дискретного функционала в вырожденных ячейках^{2,20,21}, описанный в **разделе 1.12** Примеры по-

²⁰Jaquotte O.-P. A mechanical model for a new grid generation method in computational fluid dynamics//Comp. Meth. Appl. Mech. and Engng. 1987. V. 66. P. 323–338.

²¹Гаранжа В.А., Капорин И.Е. Регуляризация барьерного вариационного метода построения разностных сеток//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1999. Т. 39. № 9. С. 1489–1503.

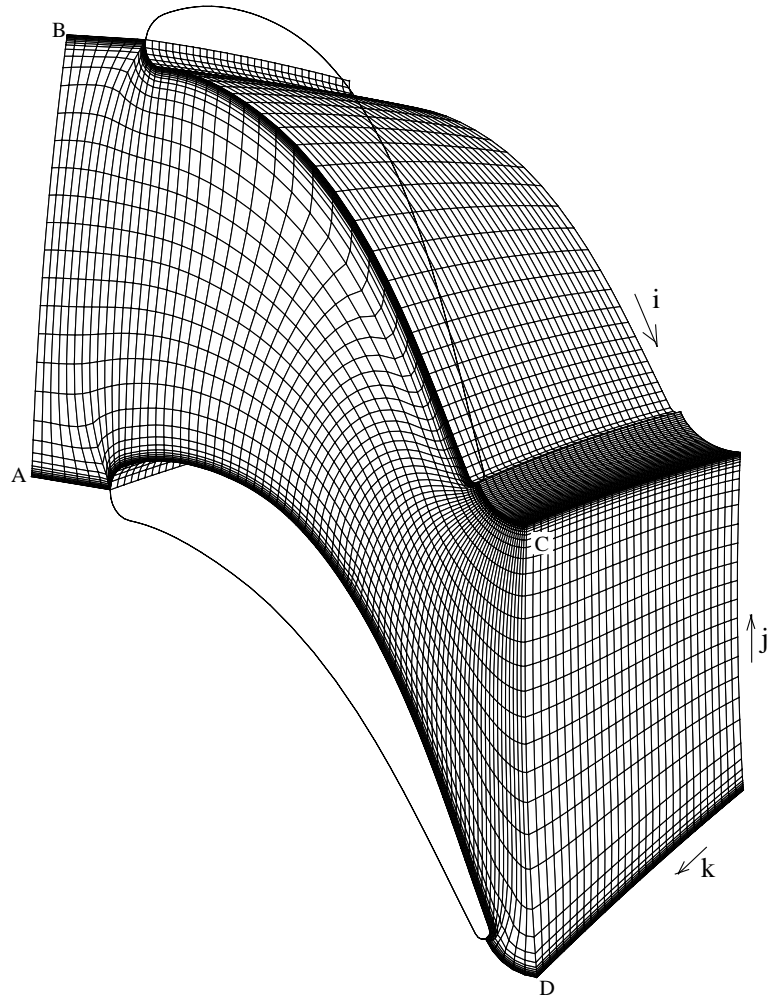


Рис. 3. Сетка с числом узлов $81 \times 41 \times 31$ в межлопаточном канале турбины.

строения сеток приведены в **разделе 1.13**. На рис. 3 представлена сетка в межлопаточном канале турбины. Сетка строится со сгущением координатных поверхностей к лопаткам и ортогонализацией координатных линий к поверхности лопаток.

В **разделе 1.14** обсуждается вопрос о том, что функционал \mathcal{D} не является единственно возможным. Любая функция $\varphi(E)$ (E – подынтегральное выражение в \mathcal{D}), монотонно возрастающая при $E \geq 1$, также обладает свойством воспроизведения произвольной заданной невырожденной сетки при соответствующем назначении управляющего метрического тензора.

Глава 2 посвящена описанию вариационного метода построения подвижных адаптивных гексаэдральных сеток и некоторым вопросам построения одномерных и двумерных адаптивных сеток. Основные результаты опубликованы в [3, 10, 14] (ЖВМ и МФ, 2000, 2003, 2008), [12] (Int. J. Numer. Meth. Fluids, 2002), [11] (SIAM J. Numer. Anal., 2002), [5] (J. Comput. Phys., 2007), [26] (Препринт ВЦ РАН, 2007), [19] (Advances in Grid Generation, Chapt. 4, 2007).

В **разделе 2.1** приводится постановка задачи и функционал \mathcal{D} в n -мерном случае, предложенный С.А.Иваненко¹, используемый для построения адаптивных подвижных сеток. Пусть задано многообразие \mathcal{M} в пространстве \mathbb{R}^{n+m} переменных $\tilde{\mathbf{x}}=(x^1, \dots, x^n, f^1, \dots, f^m)=(x^1, \dots, x^{n+m})$. Здесь n – размерность евклидова пространства \mathbb{R}^n переменных $\mathbf{x}=(x^1, \dots, x^n)$, m – число компонент мониторной вектор-функции $\mathbf{f}=(f^1, \dots, f^m)$, по которой проводится адаптация сетки. Каждая компонента мониторной функции зависит от \mathbf{x} : $f^p=f^p(x^1, \dots, x^n)$.

Рассматривается гомеоморфное, класса \mathbb{C}^1 , отображение $\tilde{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\xi}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n+m}$ параметрической области \mathcal{P} (куб или прямоугольный параллелепипед) из пространства переменных $\boldsymbol{\xi}=(\xi^1, \dots, \xi^n)$ на многообразие \mathcal{M} . Используется также вспомогательное гомеоморфное, класса \mathbb{C}^1 , отображение $\mathbf{X}(\boldsymbol{\xi}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ области \mathcal{P} на область \mathcal{C} из пространства переменных $\mathbf{X}=(X^1, \dots, X^n)$. Если в области \mathcal{P} определена кубическая сетка, то ее образом в \mathcal{M} будет

невыврожденная сетка, а проекция последней на физическую область Ω в пространстве \mathbb{R}^n переменных \mathbf{x} является адаптивной сеткой.

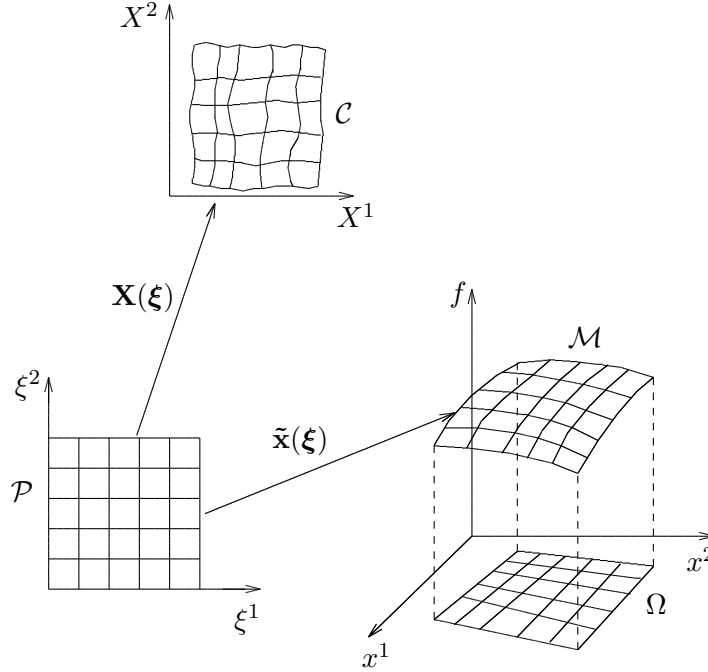


Рис. 4. Случай $n=2$, $m=1$.

На рис. 4 показан пример для случая $n=2$, $m=1$, т.е. скалярной мониторной функции f .

В функционале используется нормированное безразмерное отношение инвариантов I_1 к I_n тензора $G^{-1}g$

$$\mathcal{D}(\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})) = \frac{1}{n^{n/2}} \int_{\mathcal{P}} \dots \int_{\mathcal{P}} \frac{[\text{tr}(G^{-1}\tilde{g})]^{n/2} \sqrt{\det G}}{\sqrt{\det \tilde{g}}} d\xi^1 \dots d\xi^n. \quad (4)$$

Здесь компоненты метрического тензора g_{ij} равны

$$\tilde{g}_{ij} = \alpha_{kl} \frac{\partial x^k}{\partial \xi^i} \frac{\partial x^l}{\partial \xi^j}, \quad \text{где } \alpha_{kl} = \delta_{kl} + \frac{\partial f^p}{\partial x^k} \frac{\partial f^p}{\partial x^l},$$

$k, l = 1, \dots, n$, $p = 1, 2, \dots, m$, δ_{kl} – символ Кронекера. g_{ij} называется мониторным метрическим тензором. Мониторная метрика была введена В.Д. Лисейкиным¹⁷ при записи функционалов на мониторном многообразии.

Используется следующая вариационная постановка задачи построения адаптивной сетки. Рассматривается задача построения гомеоморфного, класса \mathbb{C}^1 , отображения $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n+m}$ параметрической области \mathcal{P} на многообразии \mathcal{M} при заданном гомеоморфизме границ $\partial\mathcal{P} \rightarrow \partial\mathcal{M}$. Осуществляющие отображение функции $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$ находятся в результате минимизации функционала (1), где $G_{ij}(\boldsymbol{\xi})$ – элементы симметричной положительно определенной матрицы, заданной в каждой точке \mathcal{P} .

В **разделе 2.2** приведены одномерный и двумерный функционалы, получаемые непосредственно из функционала общего вида (4), если управляющий метрический тензор G_{ij} является единичным. Эти функционалы были предложены В.Д. Лисейкиным¹⁷. В **разделе 2.3** проводится аппроксимация одномерного и двумерного функционалов.

Трехточечная модель адаптации представлена в **разделе 2.4**. Для нелинейного уравнения переноса показано, что при соблюдении некоторых условий значения сеточной мониторной функции в ячейках подвижной сетки остаются неизменными. Тогда задачу построения адаптивной сетки можно рассматривать отдельно от основной задачи, как если бы использовалась аналитически заданная мониторная функция. Это позволяет исследовать некоторые важные свойства дискретного функционала \mathcal{D}^h , которые сохраняются и в общем случае, например, при расчете газодинамических течений с ударными волнами.

В **разделе 2.5** рассматриваются свойства функционала \mathcal{D}^h в одномерном и частном двумерном случае с использованием трехточечной модели адаптации. Показано, что при наличии разрывов у мониторной функции необходимо "замораживать" производные от этой функции для сохранения бесконечного барьера у одномерного функционала \mathcal{D}^h . В двумерном случае замораживание

производных от мониторной функции приводит к возникновению "барьерного" свойства у итерационной процедуры минимизации функционала \mathcal{D}^h , которое также препятствует вырождению ячеек сетки. Этот прием использовался С.А.Иваненко², а причины возникновения барьерного свойства были изучены в [10, 11]. Проведенный анализ свойств дискретных функционалов в одномерном и двумерном случаях показывает, что они являются несогласованными между собой, т.е. осуществляемое с их помощью сгущение сетки к разрыву мониторной функции происходит по разному внутри области Ω и на ее границе $\partial\Omega$. Следовательно, возникает задача согласованной расстановки узлов сетки в Ω и на $\partial\Omega$. Она решается в **разделе 2.7**.

В **разделе 2.6** на одномерном примере показано, что при использовании уравнений Эйлера для функционала с целью построения сеток бесконечный барьер на границе множества невырожденных сеток отсутствует, что приводит к вырождению ячеек во время адаптации.

В **разделе 2.7** описаны 5 способов перестроения узлов на границе области $\partial\Omega$ при адаптации сетки. Для согласованной расстановки узлов сетки внутри Ω и на ее границе $\partial\Omega$ решается задача условной минимизации дискретного функционала \mathcal{D}^h при наличии ограничений типа равенств, задающих $\partial\Omega$. Примеры использования различных методов расстановки граничных узлов для аналитически заданных мониторных функций приведены в **разделе 2.8**.

В **разделе 2.9** приведен трехмерный функционал \mathcal{D} , записанный на многообразии \mathcal{M} в пространстве \mathbb{R}^{3+m} . Он имеет следую-

щий вид²²:

$$\mathcal{D} = \frac{1}{3^{3/2}} \iiint_{\mathcal{P}} \frac{[\text{tr}(G^{-1}\tilde{g})]^{3/2} \sqrt{\det G}}{\sqrt{\det g} \sqrt{1 + \sum_{i=1}^m (f_{x^1}^i)^2 + (f_{x^2}^i)^2 + (f_{x^3}^i)^2}} d\xi^1 d\xi^2 d\xi^3, \quad (5)$$

где g_{ij} – метрический тензор, порождаемый отображением $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ параметрической области \mathcal{P} на физическую область Ω .

В **разделе 2.10** описаны способ дискретизации функционала (5) и процедура минимизации дискретного функционала \mathcal{D}^h . Расчетные формулы даны в **разделе 2.11**. В **разделе 2.12** рассмотрен алгоритм расстановки граничных узлов, условная и параметрическая минимизация \mathcal{D}^h . В **разделе 2.13** приведены примеры построения адаптивных сеток. На рис. 5 представлена сетка $81 \times 61 \times 41$ в межлопаточном канале турбины. Заданием управляющего тензора G_{ij} обеспечивается сгущение координатных поверхностей сетки к лопаткам турбины. Проводится адаптация сетки по аналитически заданной мониторинной функции f .

В **разделе 2.14** на модельном примере рассматривается особенность, которая возникает при адаптации пространственной сетки, если мониторинная функция терпит разрыв.

В **главе 3** представлен метод расчета двумерных нестационарных течений вязкого газа, включая случаи течений с выделением химической энергии, на подвижных сетках. Основные результаты опубликованы в [57] (Препринт ВЦ РАН, 1997), [7, 9, 10, 14] (ЖВМ и МФ, 2000, 2003, 2005), [13] (Comput. Methods in Applied Mech. and Engin., 2000), [12] (Intern. J. for Numer. Meth. in Fluids, 2002), [15] (Comm. Math. Sci., 2003), [8] (J. Comput. Phys., 2005), [16] (Comput. Fluid Dynamics J., 2001). Метод включает в себя элементы схемы С.К. Годунова^{4,5}: аппроксимацию уравнений газовой динамики, записанных в виде интегральных законов сохранения, и решение задачи о распаде разрыва для определения потоков

²²Ivanenko S.A. Selected Chapters on Grid Generation and Applications. Dorodnicyn Computing Center of RAS. 2004

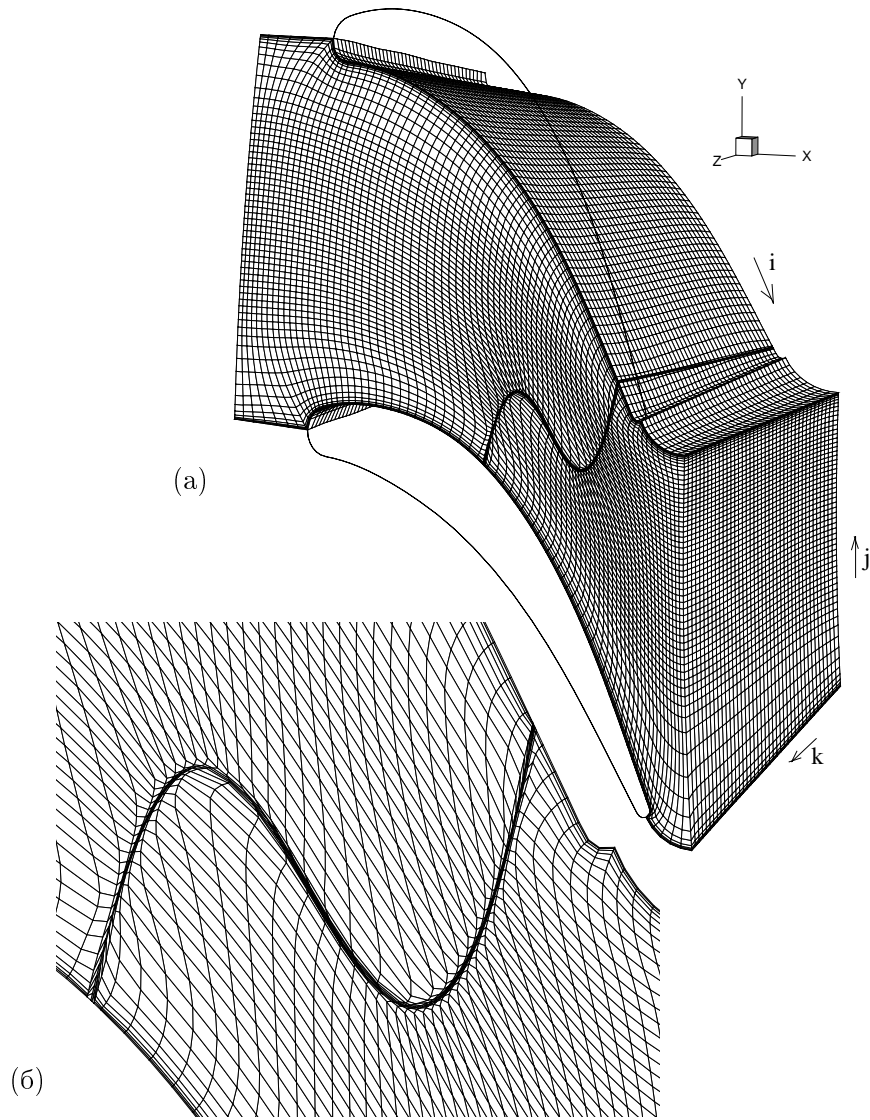


Рис. 5. Адаптивная сетка (а); фрагмент граничной поверхности $k=41$ (б).

через границы ячейки. Зона горения газа разрешается сгущением узлов подвижной адаптивной сетки.

В **разделе 3.1** приводится система уравнений, описывающая одномерное течение невязкого газа при наличии химической реакции. Численная схема расчета на подвижной сетке рассматривается в **разделе 3.2**. Проводится аппроксимация уравнений движения газа, записанных в виде интегральных законов сохранения. Задача о распаде разрыва на подвижной сетке для течений газа с выделением химической энергии рассмотрена в **разделе 3.3**. Здесь используется метод решения нелинейной системы уравнений для негорючего газа⁵ в момент времени $t^{n+1/2}$, и решается задача о распаде разрыва для уравнения химической кинетики. В **разделе 3.4** приводится условие устойчивости на шаг по времени при расчете на подвижной сетке. Система уравнений для двумерного нестационарного течения газа при наличии химической реакции выписана в **разделе 3.5** в форме законов сохранения в интегральной форме. Разностная схема решения уравнений на подвижной сетке рассматривается в **разделе 3.6**.

В **разделе 3.7** приведены результаты расчетов течения газа без химической кинетики: задачи о распаде разрыва, сверхзвукового течения в плоском канале, обтекания крылового профиля, нестационарного течения в плоском канале со ступенькой, двумерной задачи о распространении взрыва. При расчете задачи о сверхзвуковом течении газа в плоском канале было показано, что использование адаптивных сеток позволило сэкономить память компьютера в 25 раз и уменьшить время счета в 50–60 раз по сравнению с расчетом на квазиравномерной фиксированной сетке. В **разделе 3.8** приведены результаты расчетов течения газа с химической кинетикой: одномерной детонации в режиме Чепмена-Жуге, одномерного течения неустойчивой пересжатой волны, неустойчивой пересжатой волны в плоском канале (см. адаптивную сетку на рис. 6).

В **главе 4** описан алгоритм консервативной интерполяции с одной гексаэдральной сетки на другую. Основные результаты опубли-

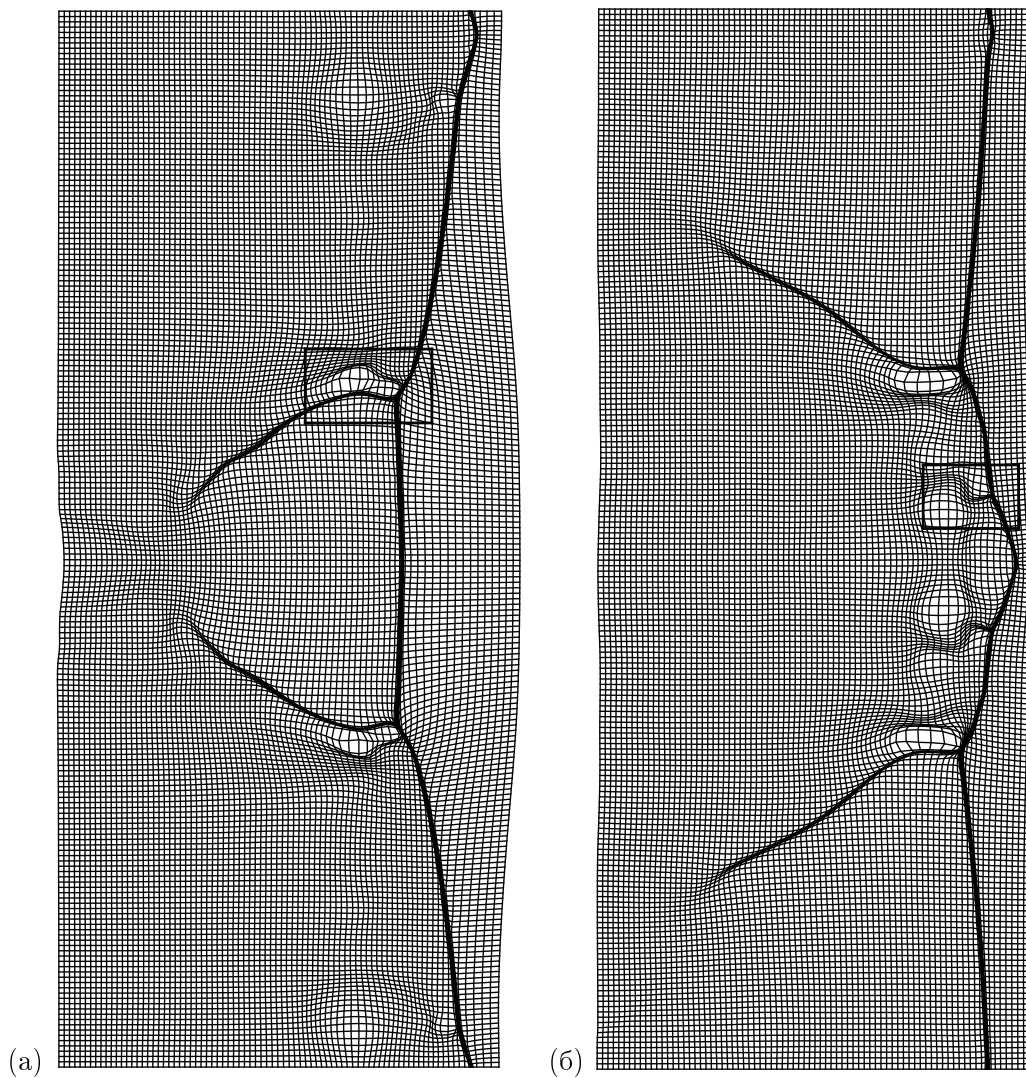


Рис. 6. Адаптивная сетка, полученная при расчете неустойчивой пересжатой волны в плоском канале в момент $t=60.44$ (а) и $t=61.59$ (б).

ликованы в [4] (Матем. Моделирование, 2008), [30] (Препринт ВЦ РАН, 2006), [19] (Advances in Grid Generation, Chapt. 12, 2007).

В **разделе 4.1** приведена постановка задачи интерполяции для кусочно-постоянного распределения консервативной функции в ячейках сетки. Задача интерполяции сводится к определению объема фигуры пересечения ячеек старой сетки ω_o и новой сетки ω_n . Для определенности рассматривается интерполяция плотности. Гексаэдральная ячейка с линейчатыми гранями заменяется на две 12-гранные с треугольными гранями (см. рис. 2). С помощью поверхностного интеграла вычисляется объем 12-гранников и показывается, что полусумма объемов двух 12-гранников равна объему гексаэдральной ячейки. Это равенство между объемами гексаэдральной ячейки и десяти тетраэдров, составляющих два 12-гранника, было получено О.В.Ушаковой³ непосредственным вычислением объемного интеграла. Построение фигуры пересечения двух гексаэдральных ячеек заменяется построением фигуры пересечения четырех пар 12-гранников. В каждой паре участвуют по одному 12-граннику от новой и старой гексаэдральных ячеек. Объем фигуры пересечения гексаэдральных ячеек берется равным среднему от найденных 4 объемов фигур пересечения 12-гранников.

В **разделе 4.2** дается общее описание метода, на примере интерполяции плотности. Алгоритм интерполяции состоит из 5 этапов. В **разделе 4.3** описывается этап I, построение \mathcal{L}_{on} , линии пересечения поверхностей 12-гранной ячейки Ω_n новой сетки ω_n и 12-гранной ячейки Ω_o старой сетки ω_o . На этом этапе находится ломанная линия \mathcal{L}_{on} , каждое звено которой является линией пересечения двух треугольных граней ячеек Ω_n и Ω_o . Предполагается, что линия \mathcal{L}_{on} является контуром, без точек ветвления. Может существовать несколько линий \mathcal{L}_{on}^i .

В **разделе 4.4** описывается этап II, построение фигуры пересечения ячеек Ω_o и Ω_n . Этот этап осуществляется одновременно с этапом I. На каждой из рассматриваемых треугольных граней ячеек Ω_o (или Ω_n) строится многоугольник, высекаемый линией

\mathcal{L}_{on} и лежащий внутри ячейки Ω_n (или Ω_o). Заключенная внутри него плоская поверхность есть часть границы искомой фигуры Ω_{on} . Поскольку может существовать несколько линий \mathcal{L}_{on}^i , то и многоугольников на рассматриваемой грани может быть больше одного (но не более двух). Объединение всех многоугольных поверхностей образует границу Ω_{on} . Фигура Ω_{on} может состоять из двух симплексов.

В разделе 4.5 описывается этап III, вычисление объема и массы фигуры пересечения Ω_{on} .

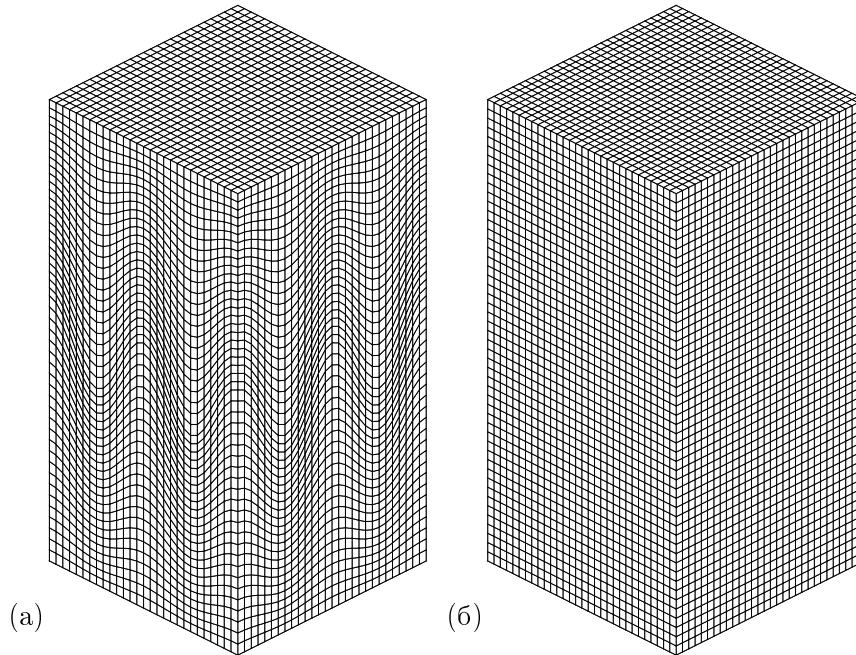


Рис. 7. Криволинейная сетка $\omega_o:29 \times 29 \times 49$ (а), прямоугольная равномерная сетка $\omega_n: 31 \times 31 \times 51$ (б).

В разделе 4.6 описывается этап IV, перебор ячеек сетки ω_o . Необходимо найти окружение рассматриваемой новой ячейки Ω_n , которое состоит из старых ячеек Ω_o^q , $q=1, 2, \dots, q_{max}$, имеющих в пересечении с ячейкой Ω_n непустое множество. Для текущей

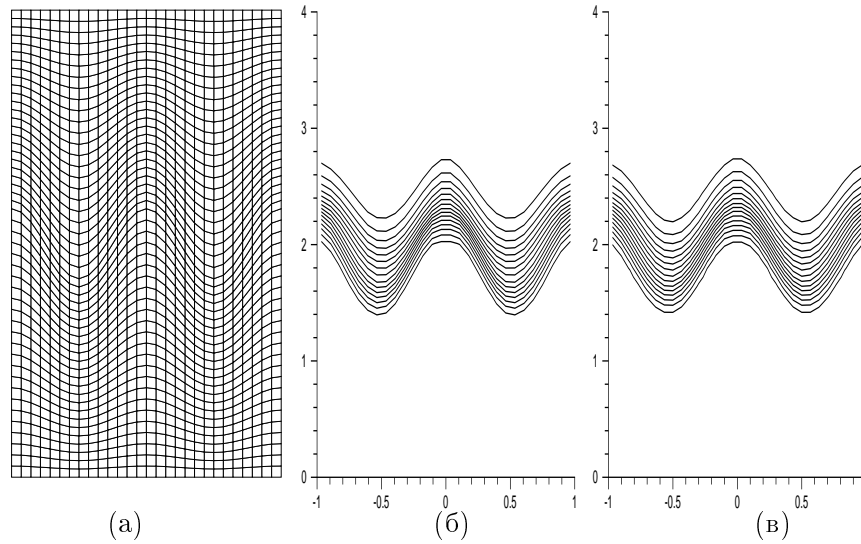


Рис. 8. Проекция координатной поверхности $j=1$ сетки ω_o на плоскость x, z (а); изолинии ρ в слое $j=1$ сетки ω_o (б) и сетки ω_n (в).

ячейки Ω_n предлагается оптимальный алгоритм перебора ячеек сетки ω_o с тем, чтобы проверять только ячейки окружения Ω_o^q . В **разделе 4.7** описывается этап V, расчет массы m_n , заключенной в ячейке новой сетки, и значения плотности в ней.

В **разделе 4.8** рассмотрен вопрос построения слоев фиктивных ячеек. Ячейки и грани старой ω_o и новой ω_n сеток не должны совпадать. Иначе задача определения линии пересечения совпадающих граней ячеек является неоднозначно определенной, что при вычислениях приводит к делению на ноль. Поэтому невозможно интерполировать величины с сетки на саму себя. Чтобы избежать ситуаций прерывания следует слегка сдвинуть одну сетку (например, новую ω_n) относительно другой (ω_o). Поскольку при сдвиге некоторые граничные ячейки сетки ω_n выйдут за расчетную область, вводится дополнительный внешний слой фиктивных ячеек для старой сетки ω_o по всей границе области с экстраполяцией

в них значений плотности²³. Такая расширенная сетка обозначается ω_o^{ext} . Теперь ячейки сетки ω_n будут целиком лежать внутри области, занимаемой ячейками ω_o^{ext} , и потери массы после интерполяции не произойдет.

В разделе 4.9 проводится анализ ошибки интерполяции. Она складывается из ошибок двух типов. Первая связана с ошибками округлений при вычислениях. При увеличении разрядной сетки компьютера эта ошибка будет стремиться к нулю. Вторая, систематическая ошибка, связана с тем, что сетка ω_n сдвинута относительно ω_o . Чтобы понять причину возникновения систематической ошибки рассматривается пример интерполяции с прямоугольной равномерной сетки ω_o на эту же сетку ω_n , сдвинутую относительно старой. Проводится оценка систематической ошибки.

В разделе 4.10 приведены численные примеры интерполяции. На рис. 7а представлена старая сетка ω_o с числом узлов $29 \times 29 \times 49$ в прямоугольной области $0 \leq x, y \leq 1, 0 \leq z \leq 4$ (сетка была построена О.В.Ушаковой) с распределением плотности

$$\rho_o(x, y, z) = \begin{cases} \rho_b, & \text{если } z < z_b - 0.43 \\ \rho_b + (\rho_t - \rho_b)\{1 - \exp[-\alpha(z - z_b + 0.43)^2]\}, & \text{иначе,} \end{cases}$$

где $\rho_b=1, \rho_t=100, \alpha=4$. На рис. 7б показана новая прямоугольная сетка $\omega_n : 31 \times 31 \times 51$, на которую осуществляется интерполяция массы.

Проекция координатной поверхности $j=1$ на плоскость x, z показана на рис.8а. На рис. 8б,в представлены изолинии плотности в слое $j=1$ сеток ω_o и ω_n соответственно.

Основные результаты

1) Разработан новый вариационный метод построения структурированных сеток в пространственных областях со сложной геомет-

²³Dukowicz J.K., Padiar N.T. REMAP3D: A conservative three-dimensional remapping code. Los Alamos report. 1991.

рией.

2) Показано, что используемый функционал является универсальным. При минимизации этого функционала можно воспроизвести любое заданное невырожденное отображение, а на дискретном уровне любую заданную невырожденную сетку.

3) Предложен новый способ аппроксимации функционала на 10 тетраэдрах для каждой гексаэдральной ячейки. Предложены новые приближенные условия невырожденности гексаэдральной ячейки, которые в практических расчетах обеспечивают невырожденность гексаэдральных ячеек сетки.

4) Показано, что дискретный функционал обладает бесконечным барьером на границе множества невырожденных сеток, что препятствует вырождению сетки в процессе минимизации функционала.

5) Предложен метод расстановки узлов на границе области, заключающийся в условной минимизации функционала.

6) Предложены метод ортогонализации и заданного сгущения сетки около границы области, а также способ сглаживания сеточных линий соседних блоков сетки, основанные на использовании свойства универсальности функционала.

7) Разработан новый вариационный метод построения подвижных адаптивных гексаэдральных сеток для численного моделирования физических процессов.

8) На основе предложенной трехточечной модели адаптации проведен теоретический анализ свойств дискретных функционалов в одномерном, двумерном и трехмерном случае при наличии разрывов у мониторинговой функции. Анализ показал необходимость замораживания производных от мониторинговой функции при минимизации функционала.

9) Показана несогласованность двумерного и одномерного функционала при построении двумерных адаптивных сеток, а также трехмерного и двумерного функционала при построении трехмерных адаптивных сеток. Для осуществления согласованной расстановки узлов адаптивной сетки внутри области и на ее границе,

предложено использовать метод условной минимизации функционала.

10) Разработан численный метод расчета двумерных нестационарных газодинамических течений с выделением химической энергии на подвижных сетках.

11) Разработан новый алгоритм консервативной интерполяции на гексаэдральных сетках.

12) Предложен оптимальный алгоритм перебора ячеек сетки, позволяющий значительно сократить число операций и время счета.

Публикации по теме диссертации

Статьи в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК.

1. Азаренок Б.Н. О построении структурированных сеток в двумерных невыпуклых областях с помощью отображений//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2009. Т.48. № 5. С. 1–13.
2. Азаренок Б.Н. Вариационный метод построения гексаэдральных сеток с управляющей метрикой//Матем. моделирование. 2008. Т.20. № 9. С. 3–22.
3. Азаренок Б.Н. Вариационный метод построения пространственных адаптивных сеток//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2008. Т.48. № 5. С. 100–119.
4. Азаренок Б.Н. Об одном методе консервативной интерполяции на гексаэдральных сетках//Матем. моделирование. 2008. Т.20. № 2. С. 59–75.
5. Azarenok B.N. A method of constructing adaptive hexahedral moving grids//J. Comp. Phys. V. 226. Issue 1. 2007. P. 1102–1121.
6. Azarenok B.N. A variational hexahedral grid generator with control metric//J. Comp. Phys. V. 218. Issue 2. 2006. P. 720–747.

7. Азаренок Б.Н. Об одной схеме расчета детонационных волн на подвижных сетках//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2005. Т.45. № 12. С. 2260–2282.
8. Azarenok B.N., Tang T. Second-order Godunov-type scheme for reactive flow calculations on moving meshes//J. Comp. Phys. V.206. Issue 1. 2005. P. 48–80.
9. Азаренок Б.Н. Расчет задачи о взрыве на подвижной адаптивной сетке//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. № 6. С. 856–865.
10. Азаренок Б.Н. О применении вариационного барьерного метода в гиперболических задачах газовой динамики//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. № 7. С. 1072–1096.
11. Azarenok B.N. Variational barrier method of adaptive grid generation in hyperbolic problems of gas dynamics//SIAM J. Numer. Anal. 2002. V. 40. № 2. P. 651–682.
12. Ivanenko S.A., Azarenok B.N. Application of moving adaptive grids for numerical solution of nonstationary problems in gas dynamics//Int. J. Numer. Meth. Fluids. 2002. V. 39. P. 1–22.
13. Azarenok B.N. Realization of a second-order Godunov's method //Comput. Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2000. V. 189. № 3. P. 1031–1052.
14. Азаренок Б.Н., Иваненко С.А. О применении адаптивных сеток для численного решения нестационарных задач газовой динамики//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2000. Т. 40. № 9. С. 1386–1407.

Статьи в рецензируемых журналах.

15. Azarenok B.N., Ivanenko S.A., Tang T. Adaptive mesh redistribution method based on Godunov's scheme//Comm. Math. Sci. 2003. V. 1. № 1. P. 152–179.

16. Azarenok B.N., Ivanenko S.A. Application of moving adaptive grids for simulation of supersonic gas flow//Comput. Fluid Dynamics Journ. Japan. 2001. V. 10. № 3. P. 400–404.

Главы в коллективных монографиях.

17. Азаренок Б.Н. Вариационный метод построения пространственных сеток//Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Математическое моделирование в низкотемпературной плазме. Янус-К. Москва. 2008. Часть I. Раздел III. Глава 5. С. 265–284.
18. Azarenok B.N., Ivanenko S.A. Grid optimization and adaptation. In: Advances in Grid Generation. (Ushakova O.V. ed.). Nova Science Publishers, New York, 2007. Chapt. 4. P. 85–125.
19. Azarenok B.N. Conservative remapping on hexahedral meshes. In: Advances in Grid Generation. (Ushakova O.V. ed.). Nova Science, New York, 2007. Chapt. 12. P. 337–379.

Прочие публикации.

20. Azarenok B.N. A method of generating 2D structured grids. In: Soni B., Hauser J., Eisman P., and Thompson J., eds. Proceedings of the 11th International Conference on Numerical Grid Generation, Montreal, Canada, May 25-28, 2009. Birmingham, Alabama: International Society of Grid Generation.
21. Азаренок Б.Н., О вариационном методе построения гексаэдральных адаптивных сеток//Тезисы доклада на XVII Всероссийской конференции "Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики с приложением к многопроцессорным системам" посвященная памяти К.И.Бабенко, 15–21 сентября 2008, Дюрсо, С. 3.

22. Азаренок Б.Н. К вопросу о построении пространственных адаптивных сеток//Proc. of International conference "Numerical geometry, grid generation and scientific computing", A.A. Dorodnicyn Computing Center RAS, Moscow, June 10-13, 2008, P. 67–74.
23. Азаренок Б.Н. Об одном вариационном методе построения структурированных сеток в двумерных областях//Тезисы. VII Международная Конференция по Неравновесным Процессам в Соплах и Струях (NPNJ 2008). 25–31 мая 2008 г. Алушта. М.: Вузовская книга. 2008. С. 36–37.
24. Azarenok B.N. A variational approach to hexahedral mesh generation. In: Soni B., Hauser J., Eisman P., and Thompson J., eds. Proceedings of the 10th International Conference on Numerical Grid Generation, Forth, Crete, Greece, 16-20 September, 2007. Birmingham. Alabama: International Society of Grid Generation. P. 3–12.
25. Азаренок Б.Н. О построении адаптивных подвижных гексаэдральных сеток//Тезисы. Материалы XV Международной Конференции по Вычислительной Механике и Современным Прикладным Программным Системам (ВМСППС–2007). 25–31 мая 2007 г. Алушта. М.: Вузовская книга. 2007. С. 38–39.
26. Азаренок Б.Н. О построении подвижных адаптивных пространственных сеток. М.: ВЦ РАН. 2007. 50 С.
27. Азаренок Б.Н. О построении пространственных сеток//Тезисы доклада на XVI Всероссийской конференции "Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики с применением к многопроцессорным системам" посвященная памяти К.И.Бабенко. 4–10 сентября 2006. Дюрсо. С. 3.
28. Азаренок Б.Н. К вопросу о построении гексаэдральных сеток//Труды Всероссийской Конференции "Численная геомет-

рия, построение расчетных сеток и высокопроизводительные вычисления". М.: ВЦ РАН. 4–7 июля 2006. С. 100–107.

29. Азаренок Б.Н. Об одном вариационном методе построения пространственных сеток. М.: ВЦ РАН. 2006. 51 С.
30. Азаренок Б.Н. Алгоритм консервативной интерполяции на гексаэдральных сетках. М.: ВЦ РАН. 2006. 58 С.
31. Azarenok B.N. First-Order Algorithm of Conservative Interpolation on Hexahedral Meshes//In: Papadopolous P., Soni B., Hauser J., Eisman P., Thompson J. (eds.) Proceedings of the 9th International Conference on Numerical Grid Generation, San Jose, California, 12–15 June 2005. Birmingham, Alabama: International Society of Grid Generation. pp. 3–12.
32. Азаренок Б.Н. Об одном алгоритме построения регулярных гексаэдральных сеток//Тезисы. Материалы XIV Международной Конференции по Вычислительной Механике и Современным Прикладным Программным Системам (ВМСППС–2005). 25–31 мая 2005. Алушта. М.: Вузовская книга. 2005. С. 31–32.
33. Азаренок Б.Н. Вариационный метод конструирования регулярных гексаэдральных сеток с управлением формы ячеек//Тезисы. VIII Международная Конференция "Забабахинские Научные Чтения". 5–10 сентября 2005. Снежинск. С. 216–217.
34. Азаренок Б.Н. О расчете течений газа с детонационными волнами на подвижных адаптивных сетках//Труды Всероссийской конференции "Прикладная геометрия, построение расчетных сеток и высокопроизводительные вычисления", ВЦ РАН. Москва. 28 июня – 1 июля 2004. Т. 1. С. 87–96.
35. Азаренок Б.Н. О расчете детонационных волн на адаптивных сетках//Тезисы. 4-я Международная Школа–Семинар "Внут-

рикамерные процессы, горение и газовая динамика дисперсных систем", Балтийский гос. университет Военмех.
С.-Петербург. 27 июня – 3 июля 2004. Т. 2. С. 150–152.

36. Азаренок Б.Н. Моделирование распространения детонационных волн с использованием адаптивных подвижных сеток//Тезисы. Материалы V Международной Конференции по Неравновесным Процессам в Соплах и Струях (NPNJ-2004). 5–10 июля 2004. Самара. С. 17–18.
37. Азаренок Б.Н. Консервативная интерполяция гидродинамических параметров при расчетах на гексаэдральных сетках//Тезисы. Материалы V Международной Конференции по Неравновесным Процессам в Соплах и Струях (NPNJ-2004). 5–10 июля 2004. Самара. С. 18–19.
38. Азаренок Б.Н. О консервативной интерполяции газодинамических параметров на гексаэдральных сетках//Тезисы доклада на XV Всероссийской Конференции "Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики с приложением к многопроцессорным системам" посвященная памяти К.И.Бабенко. 8–11 сентября 2004. Дюрсо. С. 4–5.
39. Азаренок Б.Н. Расчет течений с детонационными волнами на подвижных адаптивных сетках//Тезисы. VII Международная Конференция "Забабахинские Научные Чтения". 8–12 сентября 2003. Снежинск. С. 115–116.
40. Азаренок Б.Н. Алгоритм консервативной интерполяции газодинамических полей на гексаэдральных сетках//Тезисы. VII Международная Конференция "Забабахинские Научные Чтения", 8–12 сентября 2003. Снежинск. С. 114–115.
41. Azarenok B.N. Moving adaptive meshes and their application in hyperbolic problems of gas dynamics//Abstract of III Intern.

Workshop on Scientif. Comput. and Applications. City University of Hong Kong. Jan. 6–9. 2003.

42. Azarenok B.N. Application of Moving Adaptive Meshes in Hyperbolic Problems of Gas Dynamics//Proceedings of the workshop "Grid Generation: Theory and Applications". Moscow, June 24–28, 2002. Computing Center Russian Academy of Sciences, P. 135–144.
43. Azarenok B.N., Ivanenko S.A. Moving Adaptive Meshes and Godunov's Scheme//Abstracts of 9th International Conference on Hyperbolic Problems, Theory, Numerics, Applications. California Institute of Technology. Pasadena. California. March 25–29. 2002. P. 153–154.
44. Azarenok B.N., Tang T. Adaptive mesh redistribution method in hyperbolic problems of gas dynamics//International Conference on Scientific Computing and Partial Differential Equations. Book of Abstracts. Hong Kong Baptist University. December 12–15. 2002. P. 9–10.
45. Азаренок Б.Н. К расчету двумерных течений газа на адаптивных подвижных сетках//Тезисы доклада на IX Всероссийском совещании по проблемам построения сеток для решения задач математической физики. 8–11 сентября 2002. Дюрсо. С. 4–5.
46. Azarenok B.N. Adaptive moving grids in problems of gas dynamics, Grid Generation: New Trends and Applications in Real-World Simulations, S.A.Ivanenko et al. (Eds.)//Proceedings of the minisymposium in Intern. Confer. "Optimization of finite-element approximations, splines and wavelets", St.-Petersburg, June 25–29, 2001. P. 30–44.
47. Azarenok B.N., Ivanenko S.A. Moving grid technology for shock waves simulation//Abstracts of 7th Russian-Japanese Intern.

Sympos. on CFD, July 31–Aug. 6, 2000, Russ. Acad. of Science, Mosc. Lomonosov University.

48. Azarenok B.N. Adaptive Moving Grids in Supersonic Flow Simulation/Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations, Proceedings of the 7th International Conference, September 25-28, 2000, Whistler, British Columbia. Edited by B.K. Soni, J. Hauser, J.F. Thompson, P. Eiseman. P. 629–638.
49. Azarenok B.N. Application of adaptive moving grids for simulation of supersonic gas flow in channel//Abstracts of the 2nd Intern. Confer. Applied Mathematics for Industrial Flows, 12–14 Oct., 2000, Ciocco, Italy. P. 25.
50. Azarenok B.N., Ivanenko S.A. Hypersonic flow simulation based on moving grid technology//Abstracts of the 1st Intern. Conference on CFD, 10–14 July, 2000. Kioto. Japan.
51. Azarenok B.N. Second-order Godunov's method for supersonic problems//Abstracts of the 1st Intern. Conference on CFD, 10–14 July, 2000. Kioto. Japan.
52. Азаренок Б.Н. О вариационном барьерном методе построения сеток при решении гиперболических задач газовой динамики//Тезисы докл. на VIII Всероссийском совещании по проблемам построения сеток для решения задач математической физики. Пущино. 21–28 июля. 2000.
53. Azarenok B.N., Ivanenko S.A. Moving grid technology for finite volume methods in gas dynamics//In: Finite Volumes for Complex Applications II – Problems and Perspectives, R.Vilsmasier, F.Benkhaloudoum and D.Hanel (Eds.), Hermes, 1999, 795–802.
54. Azarenok B.N., Ivanenko S.A. Moving Grid Technology for Shock Waves Simulation/ 8th International Symposium on

Computational Fluid Dynamics, Bremen, Germany, 5–10 September, 1999.

55. Азаренок Б.Н. О схеме С.К.Годунова второго порядка аппроксимации//Тезисы доклада на XII Всероссийской "Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики" памяти К.И.Бабенко, 9–13 сент. 1998, Новороссийск, Дюрсо.
56. Azarenok B.N. Realization of a Second-Order Godunov's Method//Conference on Numerical Methods for Fluid Dynamics, 31 March – 3 April 1998, University of Oxford, UK.
57. Азаренок Б.Н. Об одной реализации схемы С.К. Годунова высокого порядка аппроксимации. М.: ВЦ РАН. 1997. 22 С.