

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР ИМ. А.А.ДОРОДНИЦЫНА

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

Диссертация  
на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Москва – 2009

# ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	5
ГЛАВА 1. Построение гексаэдральных сеток	33
1.1 Построение сеток с помощью отображений . . . . .	33
1.2 Постановка задачи и вывод функционала . . . . .	35
1.3 Свойство универсальности трехмерного функционала и уравнения Эйлера . . . . .	39
1.4 Условия невырожденности сетки . . . . .	42
1.5 Условия невырожденности шестигранной ячейки . . . . .	44
1.6 Аппроксимация функционала . . . . .	54
1.7 Минимизация функционала . . . . .	55
1.8 Расчетные формулы . . . . .	56
1.9 Барьерное свойство $\mathcal{D}^h$ . . . . .	62
1.10 Расстановка узлов на границе . . . . .	64
1.11 Сгущение и ортогонализация сетки вблизи границы . . . . .	68
1.12 Построение начальной невырожденной сетки . . . . .	72
1.13 Примеры построения сеток . . . . .	73
1.13.1 Область в форме всплеска. . . . .	73
1.13.2 Межлопаточный канал турбины. . . . .	79
1.14 Другие функционалы . . . . .	85
ГЛАВА 2. Построение адаптивных подвижных сеток	86
2.1 Постановка задачи и функционал . . . . .	86
2.2 Функционалы в одномерном и двумерном случаях . . . . .	90
2.3 Аппроксимация функционалов . . . . .	92

2.4	Трехточечная модель адаптации . . . . .	93
2.5	Свойства дискретного функционала . . . . .	96
2.6	Адаптация с помощью решения уравнения Эйлера . . . . .	104
2.7	Расстановка узлов на границе . . . . .	104
2.8	Адаптация к аналитически заданной мониторинг функции . .	108
2.9	Функционал в трехмерном случае . . . . .	111
2.10	Аппроксимация и минимизация функционала . . . . .	112
2.11	Расчетные формулы . . . . .	113
2.12	Расстановка узлов на границе . . . . .	119
2.13	Примеры построения сеток . . . . .	119
2.13.1	Подковообразная область. . . . .	119
2.13.2	Область “матрешка”. . . . .	123
2.13.3	Межлопаточный канал турбины. . . . .	125
2.14	Особенности при адаптации к разрывным функциям . . . . .	125

### ГЛАВА 3. Численный метод расчета одномерного и двумерного течений газа и приложения

134

3.1	Постановка задачи для одномерного случая . . . . .	134
3.2	Разностная схема . . . . .	138
3.3	Задача о распаде разрыва на подвижной сетке . . . . .	142
3.4	Устойчивость схемы . . . . .	144
3.5	Система уравнений для двумерного случая . . . . .	145
3.6	Разностная схема . . . . .	145
3.7	Расчеты течения газа без химической кинетики . . . . .	148
3.7.1	Задача о распаде разрыва I. . . . .	149
3.7.2	Задача о распаде разрыва II. . . . .	150
3.7.3	Сверхзвуковое течение в канале. . . . .	153
3.7.4	Расчет обтекания крылового профиля. . . . .	157
3.7.5	Течение в плоском канале. . . . .	160

3.7.6	Расчет задачи о взрыве. . . . .	164
3.8	Расчеты течения газа с химической кинетикой . . . . .	168
3.8.1	Одномерная детонация в режиме Чепмена-Жуге. . . . .	168
3.8.2	Неустойчивая пересжатая волна в одномерном течении. . .	172
3.8.3	Неустойчивая пересжатая волна в плоском канале. . . . .	175

## ГЛАВА 4. Алгоритм консервативной интерполяции на гексаэдраль- ных сетках 187

4.1	Постановка задачи . . . . .	187
4.2	Общее описание метода . . . . .	193
4.3	Этап I. Построение линии пересечения $\mathcal{L}_{on}$ . . . . .	194
4.3.1	Шаг 1. Определение вершин ломаной $\mathcal{L}_{on}$ . . . . .	195
4.3.2	Шаг 2. Определение звеньев ломаной $\mathcal{L}_{on}$ . . . . .	207
4.4	Этап II. Построение фигуры пересечения ячеек . . . . .	208
4.5	Этап III. Вычисление объема и массы $\Omega_{on}$ . . . . .	219
4.6	Этап IV. Алгоритм перебора ячеек сетки . . . . .	220
4.7	Этап V. Расчет массы, заключенной в новой ячейке, и значе- ния плотности в ней . . . . .	225
4.8	Построение слоев фиктивных ячеек . . . . .	225
4.9	Ошибка интерполяции . . . . .	232
4.10	Численные примеры . . . . .	235
4.10.1	Прямоугольная область. . . . .	235
4.10.2	Оболочка. . . . .	239

Заключение	243
------------	-----

Литература	246
------------	-----



## ВВЕДЕНИЕ

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

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.

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. Чарахчяна, 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. Eiseman, P.L. George, P. Knupp, G. Liao, и др.

Построение сетки состоит в разбиении физической области, где необходимо проводить моделирование физического процесса, на подобласти, называемые ячейками (элементами) сетки. Ячейки сетки не должны налегать друг на друга и должны заполнять всю физическую область без зазоров. Структурированная сетка в двумерной области создается разрезанием ее двумя семействами линий, называемыми сеточными или координатными линиями, на четырехугольные ячейки, подобно разбиению прямоугольной области на прямоугольники. Структурированная сетка

в трехмерной области создается разрезанием ее тремя семействами поверхностей, называемыми сеточными или координатными поверхностями, на шестигранные (гексаэдральные) ячейки, подобно разбиению прямоугольной области на прямоугольные параллелепипеды. Вершины ячеек называются узлами сетки. Нумерация ячеек и узлов структурированной сетки задается простейшим образом, подобно нумерации элементов матрицы с двумя индексами в двумерном случае и элементов матрицы с тремя индексами в трехмерном случае. Для неструктурированных сеток связь каждого узла сетки с соседними узлами организуется специальным образом, и число соседних узлов (следовательно, и форма ячеек) может быть разным.

Разбиение области на ячейки следует осуществлять таким образом, чтобы получить как можно точнее численное решение физической задачи. Классификация работ по различным способам построения сеток приведена, например, в [193](Thompson, Warsi, 1982). Методы построения сеток могут быть разделены на три основных вида: 1) построение с помощью алгебраических преобразований, с использованием различных видов интерполяции или специальных функций преобразований, 2) посредством решения дифференциальных уравнений (при этом дифференциальные уравнения могут быть различных типов: эллиптические, гиперболические, параболические, смешанного типа и др.), 3) посредством решения вариационных задач, основанные на минимизации функционалов.

Алгебраические методы просты, обеспечивают быстрое построение сетки и контроль густоты и наклона координатных линий с помощью коэффициентов в интерполяционных формулах. Однако, они обладают рядом существенных недостатков. В областях сложной формы координатные линии (поверхности) могут перекрещиваться и выходить за границу области, что приводит к вырождению ячеек сетки. Они переносят особенности границы (например, изломы) вглубь области. Для устранения этих недостатков были развиты методы построения нерегулярных

сеток, состоящих из треугольных ячеек в двумерном случае и тетраэдральных в трехмерном. Подробные описания некоторых алгебраических методов приведены в [193](Thompson, Warsi, 1982), [194](Thompson и др., 1985), [133](Eiseman, 1985), [157](Knupp, Steinberg, 1993), [169](Liseikin, 1999), [143](Handbook of Grid Generation, 1999), [138](Frey, George, 2000). Построение квазиравномерных сеток с помощью специальных преобразований рассматривалось в [49](Калиткин и др., 2005). В [24, 25](Вабищевич, 1989, 1991) сетка строилась посредством декомпозиции двумерной области на подобласти с использованием в приграничной подобласти гранично-адаптивной сетки.

При построении сеток в областях со сложной геометрией границ, как правило, используются методы, основанные на решении эллиптических и параболических дифференциальных уравнений [201](Winslow, 1966), [30, 32](Годунов, Прокопов и др., 1972, 1976), [58](Прокопов, 1988), [44](Иваненко, 1997), [174](Nakamura, 1982), [56](Михалин, 1995), [194](Thompson и др., 1985), [157](Knupp, Steinberg, 1993), [74, 169](Liseikin и др., 1999, 2005), [143](Handbook of Grid Generation, 1999). Достоинством этих методов является гладкость координатных линий сетки. Принцип максимума, который выполняется для этих систем, обеспечивает корректность постановки задачи и невырожденность сетки для достаточно широкого класса двумерных областей с не слишком сложной формой границы (не сильно изогнутой и без острых углов, направленных внутрь области).

Гиперболические дифференциальные уравнения более просты при реализации, т.к. используют при построении сеток маршевые методы, позволяют получать ортогональные сетки [188](Steger, Chaussee, 1980), [189](Tai и др., 1995), [143, Chapt. 5](Chan, 1999). Они удобны для построения сеток, когда внутренняя граница области (например, обтекаемый профиль) задана, а внешняя находится на “бесконечности”. Но если вся граница области задана жестко, то эти методы не применимы из-за некорректной постановки задачи. К тому же гиперболические уравнения обладают свойством переносить особенности решения (например,

изломы на границе) вдоль характеристик. В случае использования квазилинейных гиперболических уравнений негладкости и даже разрывы решения могут возникать и при гладких исходных данных [58](Прокопов, 1988).

Отметим также методы, где сетка строится с помощью конформного отображения единичного квадрата на физическую область. Здесь решаются уравнения Лапласа с граничными условиями Неймана, см. [116](Chakravarty, Anderson, 1979), [172](Mastin, Thompson, 1984), [194](Thompson и др., 1985), [204] (Zhang и др., 2008). Но класс конформных отображений достаточно узок (согласно теореме Римана конформное отображение задается отображением трех точек на границе) и, как правило, эти сетки мало пригодны для расчетов.

Важными для приложений являются ортогональные сетки, когда координатные линии (поверхности) пересекаются под углом  $90^\circ$ , поскольку аппроксимация дифференциальных уравнений на таких сетках существенно проще. Методы построения двумерных ортогональных сеток рассматривались, например, в [66](Сидоров, Шабашова, 1981), [57, 60](Прокопов, 1974, 1998), [82](Ascoli и др., 1987), [182] (Ryskin, Leal, 1983), [194](Thompson и др., 1985), [152](Kang, Leal, 1992), [128](Duraishwami, Prosperetti, 1992), [143, Chapt.6,7](Khamayseh и др., Еҫа, 1999), [131](Еҫа, 1996), [76](Akcelik и др., 2001), [203] (Zhang и др., 2006). В [66](Сидоров, Шабашова, 1981), [60](Прокопов, 1998) было показано, что для ортогональных сеток соответствующая система дифференциальных уравнений имеет смешанный тип и ее применение для построения сеток может приводить к неустойчивым задачам. Поэтому на практике используется регуляризация уравнений, когда к ним добавляются эллиптические уравнения с малым весом [66](Сидоров, Шабашова, 1981), [60](Прокопов, 1998).

С помощью бигармонических уравнений двумерные сетки строились в [104, 185](Bell и др., 1982) и трехмерные сетки в [83](Altas и др., 2002).

Вариационные методы используются при построении сеток, удовлетворяющих ряду требований. Среди них невырожденность, гладкость,

квазиравномерность, квазиортогональность и др. Первый вариационный подход в одномерном случае построения квазиравномерных сеток рассматривался в [65](Сидоров, 1966), а двумерном случае конструирование сеток с помощью конформных отображений проводилось в [29](Годунов, Прокопов, 1967) и с помощью обратного гамонического отображения в [201](Winslow, 1966).

В [60](Прокопов, 1988) рассматривались различные способы задания функционалов при построении квазиортогональных сеток, когда функционал ортогональности регуляризуется посредством добавки эллиптических функционалов. В [21, 67](Сидоров, Ушакова и др., 1997, 2003) использовалась сумма функционала равномерности, ортогональности и адаптивности с весовыми добавками для получения оптимальных сеток. В [34](Годунов и др., 1995) рассматривались квазиизометрические отображения, при которых отношение расстояния между любыми достаточно близкими точками к расстоянию между их образами ограничено сверху и снизу равномерно, а в [119](Chumakov, Chumakov, 1998,), [140](Godunov и др., 2007) были предложены алгоритмы построения квазиизометрических сеток. В [111](Brackbill, Saltzman, 1982) рассматривался функционал гладкости (для него следствием уравнений Эйлера есть обращенные уравнения Лапласа), а так же его комбинация с функционалами ортогональности и адаптивности. В [127](Dulikravich, Kennon, 1986) при конструировании двумерного целевого функционала использовалась локальная мера гладкости, определяемая как сумма квадратов разности площадей соседних по обоим направлениям ячеек, и мера локальной ортогональности. В [123](De Almeida, 1999) рассматривался функционал энергии деформации тела, взятый из теории упругости. Из пространственных функционалов для построения сеток следует также отметить функционалы длины и объема (площади в двумерном случае), см. монографии [115](Castillo и др., 1991), [157](Knupp, Steinberg, 1993), [143](Handbook of Grid Generation, 1999), [169](Liseikin, 1999), в которых имеются ссылки на статьи. Во многих работах рассматривается линей-

ная комбинация этих функционалов вместе с функционалами гладкости и ортогональности. В [117](Chen, Jiang, 2008) сетка строилась с помощью минимизации целевой функции, включающей контроль за углами и длинами сторон ячеек сетки. Для перераспределения узлов сетки на границе области при использовании дифференциальных уравнений, как правило, решается задача Неймана, см., например, [194](Thompson и др., 1985), [157](Knupp, Steinberg, 1993) или осуществляется условная минимизация функционала [123](De Almeida, 1999), [5, 9, 15, 89, 96](Азаренок, 2002, 2003, 2006, 2008).

Одна из важнейших задач при построении сетки заключается в обеспечении ее невырожденности. Это обусловлено необходимостью корректной аппроксимации дифференциальных уравнений, описывающих физическое явление. Невырожденная сетка не содержит самопересекающихся ячеек, координатных линий или поверхностей, слипшихся ячеек или узлов, и в большинстве случаев ячеек с разной ориентацией ребер и граней [198](Ushakova, 2004). В вариационном методе 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 квадрат или прямоугольник, а в трехмерном – куб или прямоугольный параллелепипед) с заданной квадратной (кубической) сеткой на физическую область  $\Omega$  из пространства переменных  $\mathbf{x}=(x^1, \dots, x^n)$ . Если отображение  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \overline{\mathcal{P}} \rightarrow \overline{\Omega}$  ( $\overline{\mathcal{P}}, \overline{\Omega}$  – замыкания областей  $\mathcal{P}, \Omega$ ) сохраняет ориентацию, т.е. оно гладкое, класса  $\mathbb{C}^1$ , и якобиан отображения  $J = \det \mathbf{x}'(\boldsymbol{\xi})$  везде сохраняет знак, то оно может использоваться также и для построения криволинейной системы координат. Соответственно изначально ставилась задача поиска таких функционалов (или соответствующих им уравнений Эйлера), чтобы функции, доставляющие им минимум (являющиеся решением уравнений Эйлера), обеспечивали гладкое гомеоморфное отображение параметрической области на физическую.

Для двумерного случая согласно теореме Радó (сформулирована в [180](Radó, 1926) и доказана в [155](Kneser, 1926)) гармоническое отоб-

ражение односвязной ограниченной области  $\Omega_1$  на односвязную ограниченную выпуклую область  $\Omega_2$  является диффеоморфизмом при условии заданного гомеоморфизма границы области  $\partial\Omega_1$  на  $\partial\Omega_2$ . Поскольку в общем случае физическая область  $\Omega$  невыпуклая, то на практике рассматривают гармоническое отображение  $\xi(\mathbf{x}) : \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\mathcal{P}}$ , где  $\mathcal{P}$  – параметрический квадрат (прямоугольник) с заданной квадратной сеткой. Для этого отображения условия теоремы Радó выполнены. Для построения сетки в физической области  $\Omega$  проводится замена переменных, уравнения Лапласа обращаются и решается задача Дирихле для квазилинейной системы дифференциальных уравнений с целью нахождения обратного гармонического отображения  $\mathbf{x}(\xi) : \bar{\mathcal{P}} \rightarrow \bar{\Omega}$ . В [201](Winslow, 1966) обращенные уравнения Лапласа применялись для построения неструктурированных треугольных сеток, а в [192](Thompson и др., 1974) для получения структурированных четырехугольных сеток. В литературе использование этой системы уравнений для построения сеток принято называть методом Winslow, а задаваемое ими отображение обратным гармоническим, см. [194](Thompson и др., 1985), [157](Knupp, Steinberg, 1993), [44](Иваненко, 1997), [169](Liseikin, 1999). 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 сильно изогнутыми границами, см. [158](Knupp, Luczak), [16](Азаренок, 2009), 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. Причина вырождения сеток состоит в ошибках аппроксимации квазилинейных дифференциальных уравнений, которые существенно возрастают в случае сильно изогнутых границ области [16](Азаренок, 2009). Если граница содержит направленные внутрь области изломы (острые

углы), то при любой степени измельчения сетки четырехугольные ячейки вырождаются в окрестности направленных внутрь углов [157](Knupp, Steinberg, 1993), [44](Иваненко, 1997). В этом случае причина вырождения состоит в неустойчивости непрерывного отображения в окрестности особенностей границы области.

Для построения невырожденных структурированных сеток в двумерных областях в [42](Иваненко, Чарахчян, 1988) был предложен вариационный барьерный метод. В нем аппроксимация функционала гладкости проводится таким образом, что при вырождении одного из четырех треугольников, на которые разбивается четырехугольная ячейка двумя диагоналями, площадь треугольника и, следовательно, якобиан линейного отображения, стоящий в знаменателе разностного функционала, стремятся к нулю, а сам функционал к бесконечности. Это является препятствием на пути вырождения четырехугольных ячеек в процессе минимизации дискретного функционала. Эта идея использовалась в [160](Knupp и др., 2002) при построении лагранжевых сеток с регулированием формы ячеек.

Другой важной задачей является дополнительный контроль за координатными линиями сетки, иными словами, за формой ячеек. Для этого в [29, 30](Годунов, Прокопов, 1967, 1972) вводилась замена координат в параметрической области. 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 отображение ее на  $\Omega$  [194](Thompson и др., 1985). Эллиптические уравнения со второй пораматеризацией из [194], задаваемой локальным отображением, использовались, например, в [145](Hansen и др., 2004) для выглаживания сеток и в [153](Kaul, 2003), [199](Villamizar и др., 2007) для управления сеточными линиями около границы области. Для управления сеточными линиями в [140](Годунов и др., 2007) использовалась суперпозиция двух отображений, квазиизометрического и конформного, а в [186](Spekreijse, 1999) композиция алгебраического и обратного гармонического отобра-



жений.

В [72](Чарахчян, 1999) с целью усиления контроля за формой ячеек в одном координатном направлении в качестве целевой разностной функции использовалась сумма разностного функционала гладкости из [42](Иваненко, Чарахчян, 1988) и функция, зависящая от расстановки узлов по выделенному направлению. Использование управляющего метрического тензора вместе со свойством барьерности дискретного функционала позволило воспроизводить произвольно заданные невырожденные сетки в двумерных областях [46](Иваненко, 2000).

Трехмерный случай оказался значительно сложнее двумерного. Непростым является вопрос о нахождении условий, при которых исследуемое гладкое отображение является гомеоморфизмом. Например, для гармонического отображения теорема Радó не обобщается на трехмерный случай, см. [166](Liao, Liu, 1995), [162](Laugesen, 1996), [120](Clément и др., 1996). До настоящего времени не получено (и, по-видимому, не существует) условия, которое является одновременно необходимым и достаточным, обеспечивающего невырожденность гексаэдральной ячейки (называемой также линейчатой), грани которой есть линейчатые поверхности второго порядка [69, 198](Ушакова, 2001, 2004). Тем не менее, важность проблемы построения структурированных трехмерных сеток в реальных сложных областях обусловила существенный прогресс вариационных методов, см. [143](Handbook of Grid Generation, 1999), [64](Сахабутдинов и др., 1989), [195](Thompson, 1987), [161](Knupp, 2003), [21, 70](Ушакова, 2003, 2007), [9, 15, 96](Азаренок, 2006, 2008). В [195](Thompson, 1987) использовалась система эллиптических уравнений для получения блочных структурированных сеток с ортогонализацией около границы. В [161](Knupp, 2003) рассматривался дискретный функционал, характеризующий качество метрики сетки, а в [21, 70](Ушакова, 2003, 2007) функционал, полученный суммированием функционалов равномерности и ортогональности с весовыми коэффициентами. В [146](Hansen и др., 2005) для выглаживания неструктурированных гек-

сгэдральных сеток использовались уравнения Бельтрами, которые являются уравнениями Эйлера функционала энергии для гармонических отображений между Римановыми многообразиями (теория гармонических отображений представлена, например, в [132], Eells, Lemaire, 1988, [184], Schoen, Yau, 1978). В [165](Lee, Soni, 2004) для этих целей использовались уравнения с управляющими коэффициентами, задаваемыми с помощью компонент метрического тензора дополнительного отображения из [194](Thompson и др., 1985). В [9, 15, 96](Азаренок, 2006, 2008) был разработан вариационный барьерный метод построения гексаэдральных сеток с использованием функционала из [47](Иваненко, 2003).

Как правило, при моделировании физического процесса существенное и резкое изменение физических 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 расчет на очень мелкой равномерной (или квазиравномерной) сетке для всей физической области привел 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. В настоящей работе рассматриваются только сетки с подвижными узлами. Такие методы позволяют сохранять регулярную структуру сетки, что, в свою очередь, существенно облегчает задачу аппроксимации дифференциальных уравнений, описывающих физический процесс. Описание некоторых методов построения адаптивных подвижных сеток и их приложения можно найти в монографиях [194](Thompson и др., 1985), [101](Baines, 1994), [44](Иваненко, 1997), [143](Handbook of Grid Generation, 1999), [169](Liseikin и др. 1999, 2005), [27](Гильманов, 2000), [49](Калиткин и др., 2005), [77](Advances in Grid Generation, 2007), обзорах [193](Thompson, Warsi, 1982), [134](Eiseman, 1987), [144](Hawken и др., 1991), [54](Liseikin, 1996), [45](Иваненко, Прокопов, 1997), [191](Tang,

2005) и др.

В одномерном случае подход построения подвижных адаптивных сеток, основанный на оценке для ошибки (т.е. разности приближенного и точного решений) развивался, например, в [17](Бахвалов, 1969), [41](Емельянов, 1994), [68](Тихонов, Горбунов, 1964), [108](De Boor, 1973), [183](Russel, Christiansen, 1978), [168](Lipnikov, Shashkov, 2006).

Был предложен принцип равномерного распределения узлов, основанный на создании такого распределения узлов, чтобы некоторая положительная весовая функция, умноженная на шаг сетки, была равна коэффициенту (в частном случае константе), в свою очередь зависящему от решения физической задачи, см. [200](White, 1979), [130](Dwyer и др., 1980), [111](Brackbill, Saltzman, 1982), [134](Eiseman, 1987), [101](Baines, 1994).

Методы построения сеток, основанные на оценке ошибки аппроксимации, рассматривались, например, в [173](Miller, Miller, 1981), [38](Дегтярев, Иванова, 1993), [49](Калиткин и др., 2005).

В [36, 37, 55](Самарский, Мажукин, и др. 1988, 1989, 1993), [51] (Мажукин, Королева, 2007) был предложен и использовался метод динамической адаптации сеток для нестационарных задач. Этот подход основан на преобразовании координат, в результате которого решается система дифференциальных уравнений, где неизвестными являются как сеточные функции, так и координаты узлов подвижной сетки.

В двумерном случае развивался подход связанный с получением априорных оценок. Для линейных эллиптических задач это было сделано в работе [100](Babuska, Rheinbold, 1978). Но его применение для нелинейных задач затруднено тем что ошибка решения не ограничивается ошибкой невязки уравнения. Другой подход основан на оценках ошибки интерполяции [176](Oden и др., 1986). В одномерном случае находится ошибка, которая есть разность между линейной и квадратичной аппроксимациями решения на интервале сетки, при том что решение задано в узлах сетки. Шаг “оптимальной” сетки находится из условия постоян-

ства ошибки интерполяции решения на каждом интервале. Это требует вычисления вторых производных от искомого решения задачи и такая процедура была предложена в [205](Zienkiewicz, Morgan, 1983). Данный метод обобщается на многомерный случай, см., например, [78](Ait-Ali-Yahia и др., 1996), [143, Chapt. 35](Handbook of Grid Generation, 1999).

Принцип равномерного распределения узлов сетки вдоль каждой из координат для уравнений Пуассона из [192](Thompson и др., 1974) с весовыми коэффициентами был предложен в двумерном случае для построения адаптивных сеток в [79, 80](Anderson, 1987, 1990). На трехмерные адаптивные сетки эта идея была обобщена в [81](Anderson, Munipalli, 1996) с использованием функции Грина.

В [75](Яненко и др., 1977) для построения адаптивных сеток в задачах газовой динамики был предложен функционал, сочетающий меру близости сетки к лагранжевой, меру деформации и меру концентрации сетки. В [129](Dvinsky, 1991) было предложено использовать теорию гармонических отображений многообразий для построения двумерных адаптивных сеток. Эта идея с использованием различных функций при конструировании мониторной метрики применялась в [190](Tang, Tang, 2003). В [112](Brackbill, 1993) построение адаптивных сеток выводилось из вариационной формулировки диффузионного метода [202](Winslow, 1981) и функционала с управлением по направлениям. Принцип равномерного распределения ошибки применялся, например, в [102](Baines, 1998), [113](Russel и др., 1999) и др. В [20](Дегтярев и др., 2001) использовался функционал в виде комбинации функционалов ортогональности и адаптации сетки. В [114](Russel и др., 2002), [103] (Baines и др., 2004) рассматривался закон сохранения площади области для получения скорости движения узлов сетки. В [23](Бураго, 2004) для адаптации сетки к решению было предложено использовать уравнения нелинейной термоупругости. В [53, 169](Liseikin, 1991, 1999) для построения адаптивных сеток было предложено записывать функционал, зависящий от отношения инвариантов метрического тензора, на графике поверхности мониторной

функции или мониторинг многообразия. В [43, 44](Иваненко, 1993, 1997) рассматривался алгоритм минимизации дискретного аналога для этого функционала в двумерном и трехмерном случаях. В [46, 47](Иваненко, 2000, 2003, 2004) было предложено в функционале, записанном на мониторинг многообразия из [53](Liseikin, 1991), использовать дополнительное отображение для управления формой ячеек. В [5, 89](Азаренок, 2002, 2003) рассматривался способ движения узлов по граничному контуру физической области, использующий процедуру условной минимизации дискретного функционала из [53](Liseikin, 1991) в двумерном случае. В [197](Tu, Thompson, 1991) использовались уравнения Пуассона из [194](Thompson и др., 1985) с управляющей функцией для построения блочно-структурированных гексаэдральных адаптивных сеток. В [142](Hagmeijer, 1994) было предложено адаптировать сетку в параметрической области. Деформационный метод для расчета двумерных сеток был предложен в [106](Voshev и др., 1996), а его модификация с использованием линий уровня была рассматривалась и применялась для двумерных и трехмерных сеток в [167](Liao и др., 2000). В [175](Nakahashi, Deiwert, 1986) трехмерные адаптивные сетки строились на основе принципа равномерного распределения, когда наряду с контролем положения узлов в пространстве посредством весовых функций использовался контроль за скошенностью сетки с помощью механической модели, в которой узлы сетки связаны пружинами, работающими на растяжение и изгиб. В [12, 14, 99](Азаренок, 2007, 2008) был разработан метод построения трехмерных адаптивных сеток с использованием функционала из [47, 149](Иваненко, 2003, Ivanenko 2004).

Адаптивные сетки необходимо использовать для увеличения точности расчетов в зонах больших градиентов решения физической задачи. Например, численное моделирование распространения детонационных волн в газе имеет свои трудности, поскольку ширина зоны реакции значительно меньше характерного размера счетной области. Для разрешения зоны горения потребовалось бы использовать квазиравно-

мерную разностную сетку с десятками и даже сотнями тысяч узлов в направлении движения волны. В [73](Черкашин, 1974) при расчете без выделения фронта детонации на грубых сетках энергосодержание, имитирующее процесс детонации, производилось в точках области по критерию равенства внутренней энергии продуктов взрыва энергии в точке Жуге. При этом правильная скорость "размазанной" детонационной волны автоматически не формируется. При выделении фронта волны ее скорость определялась точно, но при этом необходимо было проводить расчеты в области с изменяющимися границами, т.е. на подвижных сетках. Здесь использовалась схема С.К.Годунова первого порядка аппроксимации, см. [32](Годунов и др., 1976). В [118](Chorin, 1976) выделение химической энергии учитывалось при решении задачи о распаде разрыва. В [39](Дерюгин и др., 1990) моделирование одномерного движения волны проводилось на лагранжевой сетке методом С.К.Годунова. Одним из распространенных алгоритмов расчета является метод дробных шагов, когда на первом шаге вычисления проводятся на основе уравнений движения идеального газа, а на втором решается обыкновенное дифференциальное уравнение для уравнения химической кинетики, см., например, [39](Дерюгин и др., 1990), [109](Bourlioux и др., 1990), [122](Colella и др., 1986), [105](Ben-Artzi, 1989), [147](Hwang и др., 2000), [178](Pember R.B., 1993), [179](Quirk, 1994), [196](Ton, 1996). Во всех указанных работах расчет проводился на основе схем типа Годунова, т.е. с использованием решения задачи о распаде разрыва. Некоторые другие алгоритмы приведены в монографии [177](Oran, Boris, 1987).

Для более точного расчета детонационных волн следует измельчать разностную сетку. В целях экономии времени счета можно проводить измельчение сетки локально в областях больших градиентов параметров течения. Для этого требуется, во-первых, уметь считать на подвижной сетке, поскольку расчет на фиксированной сетке с последующей переинтерполяцией параметров течения на подвижную сетку на каждом временном шаге приводит только к ухудшению точности решения да-

же по сравнению с расчетами на фиксированной сетке. Во-вторых, нужно уметь конструировать адаптивную сетку, узлы которой сгущаются к особенностям решения: ударным волнам, контактными разрывам, зонам горения и т.д. При моделировании газодинамических течений на подвижных сетках, включая адаптивные, необходимо использовать консервативные численные схемы расчета. В диссертации рассматривается консервативная численная схема расчета двумерного нестационарного течения газа с выделением тепла на подвижных сетках.

При расчете реальных задач, в частности гидродинамических течений, часто возникает потребность в некоторый момент времени перейти от вычислений на одной сетке к расчету на другой. Для этого разрабатываются специальные алгоритмы консервативной интерполяции. В двумерном случае такие работы осуществлялись, например, в [124](Dukowicz, 1984), [181](Ramshaw, 1985). В трехмерном случае для интерполяции с одной гексаэдральной сетки на другую в [126](Dukowicz, Radial, 1991) был предложен метод второго порядка точности. Интерполяционная задача сводилась к построению фигуры пересечения гексаэдральных ячеек старой и новой сеток. Линии пересечения линейчатых поверхностей в пространстве находились при решении дифференциальных уравнений. Эти уравнения могут иметь особенности в областях, где грани ячеек старой и новой сеток пересекаются и почти параллельны, в местах соприкосновения граней и т.д. В [141](Grandy, 1999) гексаэдральная ячейка заменялась 24-гранником с треугольными гранями, имеющим такой же объем. 24-гранник делился на 48 тетраэдров и определялись объемы фигур пересечения каждого из 48 тетраэдров новой ячейки с каждым из 48 тетраэдров старой ячейки. Этот интерполяционный метод имеет первый порядок точности. В диссертации рассматривается алгоритм консервативной интерполяции при замене гексаэдральной ячейки на два 12-гранника с треугольными гранями. [10, 13, 94, 98](Азаренок, 2005–2008).

**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, в том числе при наличии химической реакции, на подвижных сетках и его применение;

— разработка метода консервативной интерполяции с одной гексаэдральной сетки на другую.

Глава 1 посвящена описанию вариационного метода построения гексаэдральных сеток. Основные результаты опубликованы в [96] (J. Comput. Phys., 2006), [9] (Препринт ВЦ РАН, 2006), [15] (Математ. Моделирование, 2008).

В разделе 1.1 говорится о том, что в вариационных методах сетка строится посредством отображения параметрической области  $\overline{\mathcal{P}}$  (куба или прямоугольного параллелепипеда) на физическую область  $\overline{\Omega}$ . При этом в области  $\mathcal{P}$  задается кубическая сетка  $\omega_{\mathcal{P}}$ . Если задано гомеоморфное отображение  $\overline{\mathcal{P}} \rightarrow \overline{\Omega}$ , то образом  $\omega_{\mathcal{P}}$  будет невырожденная сетка  $\omega_{\Omega}$  в физической области  $\Omega$ . Следовательно, задача состоит в нахождении гомеоморфного отображения  $\overline{\mathcal{P}} \rightarrow \overline{\Omega}$  при заданном гомеоморфизме границ  $\partial\mathcal{P} \rightarrow \partial\Omega$ .

В разделе 1.2 приведена вариационная постановка задачи построения сетки и функционал  $\mathcal{D}$  в  $n$ -мерном случае, предложенный С.А.Иваненко [47] (Иваненко, 2003), который используется в работе для построения сеток.

В разделе 1.3 приведен функционал  $\mathcal{D}$  для трехмерного случая. Показывается, что  $\mathcal{D}$  является универсальным функционалом, поскольку специальным заданием управляющего метрического тензора с его по-



мощью можно воспроизвести любую заданную невырожденную сетку. Выписаны уравнения Эйлера для функционала  $\mathcal{D}$ .

Достаточное условие невырожденности сетки приведено в разделе 1.4.

В разделе 1.5 описаны условия невырожденности гексаэдральной ячейки, применяемые в предложенном методе построения сеток.

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 описана 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 приведены в разделе 1.8.

В разделе 1.9 показано, что  $\mathcal{D}^h$  имеет бесконечный барьер на границе множества невырожденных сеток, состоящих из 12-гранных ячеек первого или второго типа.

В разделе 1.10 рассматривается алгоритм расстановки узлов на границе области  $\partial\Omega$ . Для этого решается задача условной минимизации  $\mathcal{D}^h$  при наличии ограничений типа равенств, задающих границу  $\partial\Omega$ . Если  $\partial\Omega$  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 описан способ сгущения и ортогонолизации сетки к границе области  $\partial\Omega$  с помощью задания управляющего метрического тензора. Для этого используется свойство универсальности функционала  $\mathcal{D}$ , т.е. способность воспроизводить заданную сетку.

Важным вопросом является получение первоначальной невырожденной сетки, которая в дальнейшем сглаживается посредством минимизации  $\mathcal{D}^h$ . В областях со сложной геометрией построение начальной невырожденной сетки представляет собой отдельную задачу. Для того что-

бы попасть в допустимое множество невырожденных сеток, используется метод штрафа дискретного функционала в вырожденных ячейках, представленный в разделе 1.12.

Примеры построения сеток приведены в разделе 1.13: в области в форме всплеска (раздел 1.13.1) и в межлопаточном канале турбины (раздел 1.13.2).

В разделе 1.14 обсуждается вопрос о том, что функционал  $\mathcal{D}$  не является единственно возможным.

Глава 2 посвящена описанию вариационного метода построения подвижных адаптивных гексаэдральных сеток и некоторых вопросов построения одномерных и двумерных адаптивных сеток. Основные результаты опубликованы в [2, 6, 14] (ЖВМ и МФ, 2000, 2003, 2008), [148] (Int. J. Numer. Meth. Fluids, 2002), [89] (SIAM J. Numer. Anal., 2002), [99] (J. Comput. Phys., 2007), [12] (Препринт ВЦ РАН, 2007), [98] (Advances in Grid Generation, Chapt. 4, 1999).

В разделе 2.1 приведены вариационная постановка задачи и функционал  $\mathcal{D}$  в  $n$ -мерном случае, предложенный в [149] (Ivanenko, 2004), который используется для построения адаптивных подвижных сеток.

В разделе 2.2 приведены одномерный и двумерный функционалы, получаемые непосредственно из функционала общего вида, если управляющий метрический тензор является единичным. Эти функционалы были предложены в [53] (Liseikin, 1991).

В разделе 2.3 проводится аппроксимация одномерного и двумерного функционалов.

Трехточечная модель адаптации представлена в разделе 2.4.

В разделе 2.5 рассматриваются свойства дискретного функционала  $\mathcal{D}^h$  в одномерном и частном двумерном случае с использованием трехточечной модели адаптации. Показано, что при наличии разрывов у мониторинговой функции необходимо замораживать производные от мониторинговой функции для обеспечения невырожденности ячеек сетки.

В разделе 2.6 на одномерном примере показано, что при использовании уравнений Эйлера для 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. Для согласованной расстановки узлов сетки внутри  $\Omega$  и на ее границе  $\partial\Omega$  решается задача условной минимизации дискретного функционала  $\mathcal{D}^h$  при наличии ограничений типа равенств, задающих границу  $\partial\Omega$ .

Примеры использования различных методов расстановки граничных узлов для аналитически заданных мониторинговых функций приведены в разделе 2.8. Они иллюстрируют несогласованное и согласованное сгущение узлов сетки внутри области  $\Omega$  и вдоль ее границы  $\partial\Omega$  при использовании различных способов расстановки узлов на  $\partial\Omega$ .

В разделе 2.9 приведен трехмерный функционал  $\mathcal{D}$ , записанный на многообразии  $\mathcal{M}$  в пространстве  $\mathbb{R}^{3+m}$ , где  $m$  – число компонент мониторинговой вектор-функции.

В разделе 2.10 описан способ дискретизации  $\mathcal{D}$ , осуществляемый усреднением аппроксимаций функционала на 10 базисных тетраэдрах для каждой гексаэдральной ячейки. Там же приведена процедура минимизации дискретного функционала  $\mathcal{D}^h$ .

Расчетные формулы рассматриваются в разделе 2.11.

В разделе 2.12 описан алгоритм расстановки граничных узлов, условная и параметрическая минимизация  $\mathcal{D}^h$ .

В разделе 2.13 приведены примеры построения адаптивных сеток в подковообразной области (раздел 2.13.1), оболочке в форме "матрешки" (раздел 2.13.2) и межлопаточном канале турбины (раздел 2.13.3).

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

В главе 3 представлен метод расчета двумерных нестационарных течений невязкого газа, включая случаи с выделением химической энергии, на подвижных сетках. Основные результаты опубликованы в [1] (Препринт ВЦ РАН, 1997), [2, 5, 6, 8] (ЖВМ и МФ, 2000, 2003, 2005), [86] (Comput. Methods in Applied Mech. and Engin., 2000), [148] (Intern. J. for Numer. Meth. in Fluids, 2002), [92] (Comm. Math. Sci., 2003), [95] (J. Comput. Phys., 2005), [87] (Comput. Fluid Dynamics J., 2001). Численный метод включает в себя элементы схемы С.К.Годунова [31, 32]: аппроксимацию уравнений газовой динамики, записанных в виде интегральных законов сохранения, и решение задачи о распаде разрыва для определения потоков 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. Обсуждается постановка граничных условий для различных режимов горения газа.

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.

В разделе 3.4 приведено 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 (разделы 3.7.1, 3.7.2), сверхзвукового течения в плоском канале (раздел 3.7.3), обтекания крылового

профиля (раздел 3.7.4), нестационарного течения в плоском канале со ступенькой (раздел 3.7.5), двумерной задачи о распространении взрыва (раздел 3.7.6). На примере расчета задачи о сверхзвуковом течении газа в плоском канале (раздел 3.7.2) показано, что использование адаптивных сеток позволяет сэкономить память компьютера в 25 раз и уменьшает время расчета 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 (раздел 3.8.1), одномерного течения неустойчивой пересжатой волны (раздел 3.8.2), неустойчивой пересжатой волны в плоском канале (раздел 3.8.3).

В главе 4 описан алгоритм консервативной интерполяции с одной гексаэдральной сетки на другую. Основные результаты опубликованы в [10] (Препринт ВЦ РАН, 2006), [98] (Advances in Grid Generation, Chapt. 12, 2007), [13] (Матем. Моделирование, 2008).

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  $\omega_o$  и новой сетки  $\omega_n$ . Для определенности рассматривается интерполяция плотности. Гексаэдральная ячейка с линейчатыми гранями заменяется на две 12-гранные с плоскими треугольными гранями. Построение фигуры пересечения двух линейчатых ячеек заменяется построением фигуры пересечения четырех пар 12-гранников.

В разделе 4.2 дается общее описание метода. Алгоритм интерполяции состоит из 5 этапов.

В разделе 4.3 описывается этап I, построение  $\mathcal{L}_{on}$ , линии пересечения поверхностей 12-гранной ячейки  $\Omega_n$  новой сетки  $\omega_n$  и 12-гранной ячейки  $\Omega_o$  старой сетки  $\omega_o$ .

В разделе 4.4 описывается этап II, построение  $\Omega_{on}$ , фигуры пересечения ячеек  $\Omega_o$  и  $\Omega_n$ .

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

В разделе 4.6 описывается этап IV, алгоритм перебора ячеек сетки  $\omega_o$ .

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.

В разделе 4.9 проводится анализ ошибки интерполяции.

В разделе 4.10 приведены численные примеры интерполяции.

В заключении перечисляются основные результаты диссертации и обсуждается возможность применения разработанных алгоритмов построения сеток и интерполяции для моделирования физических процессов, эффективность применения адаптивных сеток в газодинамических задачах.

**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. Или в задачах с сильно меняющейся и неустойчивой границей раздела областей, 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 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.

**Достоверность** результатов диссертации: результаты оформлены в виде строгих, при необходимости доказанных, математических утверждений, и реализованных численных алгоритмов. Надежность алгоритмов продемонстрирована на многих примерах.

**Актуальность работы.** 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 острая необходимость в разработке надежных и универсальных сеточных алгоритмов для построения сеток с заданной формой гексаэдральных ячеек. Этим требованиям отвечают предложенные в диссертации методы построения сеток на основе вариационного подхода.

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) для всей физической 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, включая адаптивные, необходимо использовать консервативные численные схемы расчета. Существует потребность разработки такого рода алгоритмов повышенного порядка аппроксимации на гладких решениях.

При расчете 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.

**Научная новизна работы.** В диссертации разработан новый вариационный метод построения гексаэдральных сеток для численного моделирования физических процессов. Для этого используется функционал, рассмотренный С.А.Иваненко [47](Иваненко, 2003). Показано, что этот функционал является универсальным, т.е. с его помощью посредством выбора компонент 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 конечномер-



ная функция, аппроксимирующая функционал и имеющая бесконечный барьер на границе множества невырожденных 12-гранных ячеек, минимизация которой значительно более экономична и эффективна по сравнению с предложенной ранее С.А.Иваненко процедурой аппроксимации функционала на 24 тетраэдрах [44](Иваненко, 1997). Предложено необходимое условие невырожденности гексаэдральной ячейки, используемое при проверке сетки на невырожденность совместно с достаточными условиями невырожденности О.В.Ушаковой [69](Ушакова, 2001). 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 новый вариационный метод построения подвижных адаптивных гексаэдральных сеток для численного моделирования физических процессов. С помощью теоретического анализа, проведенного для одномерного, двумерного и трехмерного случаев, показано, что при адаптации сетки к разрывной мониторинг функции необходимо использовать функционал с "замороженными" производными от мониторинг функции для предотвращения схлопывания ячеек. Предложен алгоритм согласованной расстановки узлов адаптивной сетки внутри области 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 геометрией.

Разработан численный метод расчета двумерных нестационарных газодинамических течений с выделением химической энергии на подвижных сетках. Решена 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 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 плоскими треугольными гранями. Предложен оптимальный алгоритм перебора ячеек сетки, позволяющий значительно сократить число операций и время счета. Проведен теоретический анализ ошибки интерполяции. Разработанный алгоритм реализован в виде комплекса программ.

**Апробация работы.** Результаты диссертации были доложены на: VIII,IX Всероссийских совещаниях "Проблемы построения сеток для решения задач математической физики", 2000, 2002г.; XII,XV,XVI Всероссийских конференциях "Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов решения задач математической физики" памяти К.И.Бабенко, 1998, 2004, 2006г.; 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 Intern. Conference on Numerical Grid Generation, Whilster, Canada, 2000, San Jose, California, USA, 2005, Forth, Crete, Greece, 2007; 1st Intern. Conference on CFD, Kioto, 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; XI,XIV,XV Международных конференциях по Вычислительной Механике и Современным Прикладным Программным Системам (ВМСППС-2001, ВМСППС-2005 и ВМСППС-2007), Москва, 2001г., Алушта, 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 HKBU 2045/02P and HKBU 201/03P), 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, монографии (2 работы), 4 препринтах ВЦ РАН, 9 статьях в трудах всероссийских и зарубежных конференций, 24 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 205 наименований.

# ГЛАВА 1

## ПОСТРОЕНИЕ ГЕКСАЭДРАЛЬНЫХ СЕТОК

В настоящей главе описывается метод построения гексаэдральных сеток [9, 15, 96] (Азаренок, 2006, 2008). Дана вариационная постановка задачи построения сетки. Целевой функционал конструируется в общем  $n$ -мерном случае. Показано, что трехмерный функционал является универсальным. Приведены условия невырожденности для линейчатой ячейки, используемые в настоящем алгоритме. Даны расчетные формулы. Описан алгоритм расстановки граничных узлов и построения начального приближения для невырожденной сетки. Описан способ ортогонализации сеточных линий и сгущения сетки к границе области. Приведены примеры сеток.

### 1.1 Построение сеток с помощью отображений

В вариационных методах структурированная трехмерная сетка строится посредством отображения параметрической области  $\overline{\mathcal{P}}$  (куб или прямоугольный параллелепипед) на физическую область  $\overline{\Omega}$ , которая представляется в виде криволинейного шестигранника. Например, в [198] (Ushakova, 2004) в области  $\mathcal{P}$  определяется кубическая сетка  $\omega_{\mathcal{P}}$ , задаваемая координатами узлов по трем направлениям,

$$\boldsymbol{\xi}_{ijk} = (\xi^1, \xi^2, \xi^3)_{ijk},$$

$$\xi_{ijk}^1 = i, \quad \xi_{ijk}^2 = j, \quad \xi_{ijk}^3 = k, \quad 1 \leq i \leq N_1, \quad 1 \leq j \leq N_2, \quad 1 \leq k \leq N_3,$$

где  $N_1, N_2, N_3$  – число узлов по направлениям. Здесь также возможно использовать одномерную нумерацию узлов  $\boldsymbol{\xi}_l$ , что является удобным для неструктурированных сеток. Если известны функции

$$\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) = (x^1(\xi^1, \xi^2, \xi^3), x^2(\xi^1, \xi^2, \xi^3), x^3(\xi^1, \xi^2, \xi^3)),$$

осуществляющие гомеоморфное отображение  $\overline{\mathcal{P}} \rightarrow \overline{\Omega}$ , то образом  $\omega_{\mathcal{P}}$  будет сетка  $\omega_{\Omega}$  в области  $\Omega$  с координатами узлов  $\mathbf{x}_{ijk}$ . Образами координатных

линий  $\xi^l = \text{const}$ ,  $\xi^m = \text{const}$ ,  $l, m = 1, 2, 3$ ,  $l \neq m$  и координатных поверхностей  $\xi^l = \text{const}$  сетки  $\omega_{\mathcal{P}}$  будут координатные линии и поверхности сетки  $\omega_{\Omega}$ . Как правило, от отображения также требуется, чтобы оно было гладким, класса  $\mathbb{C}^1$  (или  $\mathbb{C}^2$ ), т.е. функции  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  имели непрерывные первые (вторые) производные.

При численной реализации строится дискретное отображение, т.е. в области  $\Omega$  находятся координаты узлов  $\mathbf{x}_{ijk}$ , которые являются образами узлов из области  $\mathcal{P}$ . Затем по найденным координатам 8 узлов ячейки восполняются ребра и стороны шестигранной ячейки из области  $\Omega$ . Ребра и стороны ячеек формируют координатные линии и поверхности сетки  $\omega_{\Omega}$ . Для восполнения, как правило, используют трилинейное (изопараметрическое) отображение единичного куба из области  $\mathcal{P}$  на шестигранную ячейку из области  $\Omega$  (см. раздел 1.5).

При построении сетки  $\omega_{\Omega}$  основная задача состоит в обеспечении ее невырожденности. Будем использовать определение невырожденности сетки [12, 14](Азаренок, 2007, 2008), близкое к рассмотренному в [198](Ushakova, 2004).

**Определение 1.1.1** *Сетка называется невырожденной, если она не содержит самопересекающихся ячеек, координатных линий или поверхностей, слившихся ячеек или узлов, и якобиан отображения  $J = \det \mathbf{x}'(\boldsymbol{\xi}) > 0$  всюду в  $\mathcal{P}$ , за исключением быть может подмножества  $\mathcal{P}$  меньшей размерности.*

Требование  $J > 0$  необходимо для построения невырожденной криволинейной системы координат в области  $\Omega$ . Якобиан  $J$  может быть равен нулю на подмножестве  $\mathcal{P}$  меньшей размерности (например, в изолированных точках, кривых или поверхностях). Гомеоморфизм отображения при этом сохраняется, и полученные с помощью этого отображения ячейки можно также называть невырожденными, если они допустимы для расчета основной задачи.

Следовательно, задача построения сетки состоит в нахождении го-

меоморфного отображения  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \overline{\mathcal{P}} \rightarrow \overline{\Omega}$  при заданном отображении границ областей  $\partial\mathcal{P} \rightarrow \partial\Omega$ .

## 1.2 Постановка задачи и вывод функционала

Вывод функционала в  $n$ -мерном случае проводится следуя [47](Иваненко, 2003), [9, 15, 96](Азаренок, 2006, 2008). Рассмотрим гомеоморфное, класса  $\mathbb{C}^1$ , отображение  $\mathbf{x}(\mathbf{X}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  канонической области  $\overline{\mathcal{C}}$  из пространства переменных  $\mathbf{X} = (X^1, \dots, X^n)$  на физическую область  $\overline{\Omega}$  из пространства переменных  $\mathbf{x} = (x^1, \dots, x^n)$  с матрицей Якоби  $a_j^i = \partial x^i / \partial X^j$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, n$ . Рассмотрим также два гомеоморфных, класса  $\mathbb{C}^1$ , отображения  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}), \mathbf{X}(\boldsymbol{\xi}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  параметрической области  $\overline{\mathcal{P}}$  из пространства переменных  $\boldsymbol{\xi} = (\xi^1, \dots, \xi^n)$  (куб или прямоугольный параллелепипед) на области  $\overline{\Omega}$  и  $\overline{\mathcal{C}}$  соответственно с матрицами Якоби  $b_j^i = \partial x^i / \partial \xi^j$  и  $c_j^i = \partial X^i / \partial \xi^j$ . Области  $\mathcal{C}, \mathcal{P}, \Omega$  предполагаются односвязными и ограниченными. Для вывода функционала отображение  $\mathbf{x}(\mathbf{X})$  задается через композицию двух отображений: обратного  $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{X})$  и прямого  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$ . На рис. 1.1 показан случай  $n=3$ . Если в области  $\mathcal{C}$  определена криволинейная невырожденная сетка  $\omega_{\mathcal{C}}$ , то ее образом в области  $\Omega$  будет невырожденная сетка  $\omega_{\Omega}$ . В двумерном случае использование дополнительного отображения на каноническую область, которую также называют логической или условной (reference domain), рассматривалось в [194](Thompson и др., 1985).

Соответствующие фундаментальные метрические тензоры задаются в виде

$$h = a^{\top} a, \quad g = b^{\top} b, \quad G = c^{\top} c,$$

где, символы  $a^{\top}, b^{\top}, c^{\top}$  обозначают транспонированные матрицы. Поскольку  $b = ac$  и  $a = bc^{-1}$ , то имеем для матрицы  $h$

$$h = a^{\top} a = (c^{-1})^{\top} b^{\top} b c^{-1}.$$

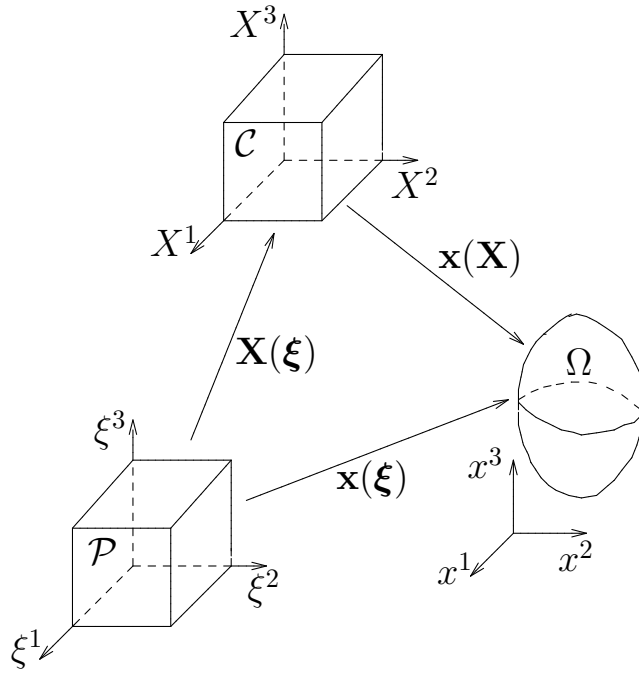


Рис. 1.1. Трехмерный случай.  $\mathcal{P}$  – параметрическая область с кубической сеткой,  $\mathcal{C}$  – каноническая область с криволинейной сеткой,  $\Omega$  – физическая область.

Запишем характеристическое уравнение для матрицы  $h$

$$\det(h - \lambda \mathcal{I}) = 0 ,$$

где  $\mathcal{I}$  – единичная матрица. Подставив в него выражение для  $h$  через матрицы  $b$  и  $c$ , получим

$$\det(c^\top c)^{-1} \det(b^\top b - \lambda c^\top c) = 0$$

или в терминах матриц  $g, G$

$$\det G^{-1} \det(g - \lambda G) = \det G^{-1} \det G \det(G^{-1}g - \lambda \mathcal{I}) = 0 .$$

Таким образом, уравнение относительно собственных чисел  $\lambda_i, i=1, 2, \dots, n$  примет вид

$$\det(G^{-1}g - \lambda \mathcal{I}) = 0 .$$

Последнее уравнение можно переписать в форме

$$(-1)^n \lambda^n + (-1)^{n-1} I_1 \lambda^{n-1} + \dots + I_n = 0 . \quad (1.1)$$



Матрица  $h$  симметричная и положительно определенная, поэтому алгебраическое уравнение (1.1) имеет  $n$  действительных корней  $\lambda_i > 0$ . Коэффициенты  $I_1, I_2, \dots, I_n$  называются инвариантами тензора  $G^{-1}g$ , т.к. они не меняются при невырожденных преобразованиях координат. В частности

$$I_1 = \text{tr}(G^{-1}g) = \sum_{i=1}^n \lambda_i, \quad I_n = \det(G^{-1}g) = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n. \quad (1.2)$$

Отметим, что функция от инвариантов  $I_i$  также является инвариантом.

Будем использовать следующую вариационную постановку задачи построения сетки.

**Постановка 1.2.1.** *Ставится задача построения гомеоморфного, класса  $\mathbb{C}^1$ , отображения  $\mathbf{x}(\mathbf{X}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  канонической области  $\bar{\mathcal{C}}$  на физическую область  $\bar{\Omega}$  при условии, что отображение границ областей задано. Осуществляющие отображение функции  $\mathbf{x}(\mathbf{X})$  находятся с помощью минимизации функционала, который есть интеграл от функции, зависящей от инвариантов тензора  $G^{-1}g$ .*

Рассмотрим отношение инвариантов  $I_1$  к  $I_n$  в соответствующих степенях, для того чтобы получить безразмерную величину

$$E = \frac{1}{n^{n/2}} \frac{I_1^{n/2}}{I_n^{1/2}} = \frac{1}{n^{n/2}} \frac{[\text{tr}(G^{-1}g)]^{n/2}}{\sqrt{\det(G^{-1}g)}} = \frac{1}{n^{n/2}} \frac{[\text{tr}(G^{-1}g)]^{n/2} \sqrt{\det G}}{\sqrt{\det g}}. \quad (1.3)$$

Функция  $E$  также является инвариантом относительно невырожденных преобразований координат  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{X}$ . Смысл нормировочного коэффициента  $n^{-n/2}$  разъясняется в разделе 1.3. Отметим, что в задачах построения сеток использование отношения инвариантов метрического тензора в подынтегральном выражении функционалов было предложено в [53, 169] (Лисейкин, 1991, 1999).

Составим следующий функционал для инварианта  $E$ , интегрируя по  $n$ -мерной области  $\mathcal{P}$  [47] (Иваненко, 2003):

$$\mathcal{D}(\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})) = \int_{\mathcal{P}} \dots \int_{\mathcal{P}} E d\xi^1 \dots d\xi^n = \frac{1}{n^{n/2}} \int_{\mathcal{P}} \dots \int_{\mathcal{P}} \frac{[\text{tr}(G^{-1}g)]^{n/2} \sqrt{\det G}}{\sqrt{\det g}} d\xi^1 \dots d\xi^n. \quad (1.4)$$

Функционал (1.4) является инвариантом относительно отмеченных выше преобразований координат  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{X}$ . Но он не инвариантен относительно растяжения координат  $\boldsymbol{\xi}$  из-за появляющегося при этом якобиана преобразования  $(\det \tilde{g})^{1/2}$ . Отметим, что в [169](Liseikin, 1999) рассматривался такого же вида функционал в качестве меры отклонения сетки от конформной (функционал конформности), когда используются инварианты только метрического тензора  $g_{ij}$ :  $I_1 = \text{tr } g$ ,  $I_n = \det g$ .

В случае  $n=2$  и  $\mathbf{x}=(x, y)$ ,  $\boldsymbol{\xi}=(\xi, \eta)$ ,  $G_{ij}$  – единичный тензор (т.е.  $G_{ii}=1$ ,  $G_{ij}=0$  при  $i \neq j$ ), (1.4) является функционалом гладкости [111](Brackbill, Saltzman, 1982)

$$\mathcal{D} = \frac{1}{2} \iint_{\mathcal{P}} \frac{x_{\xi}^2 + y_{\xi}^2 + x_{\eta}^2 + y_{\eta}^2}{x_{\xi}y_{\eta} - x_{\eta}y_{\xi}} d\xi d\eta. \quad (1.5)$$

В общем случае задания управляющего тензора  $G_{ij}$  (1.4) есть функционал, рассматривавшийся в [46](Иваненко, 2000),

$$\mathcal{D} = \frac{1}{2} \iint_{\mathcal{P}} \frac{x_{\xi}^2 G_{22} - 2x_{\xi}x_{\eta}G_{12} + x_{\eta}^2 G_{11} + y_{\xi}^2 G_{22} - 2y_{\xi}y_{\eta}G_{12} + y_{\eta}^2 G_{11}}{(x_{\xi}y_{\eta} - x_{\eta}y_{\xi}) \sqrt{G_{11}G_{22} - G_{12}^2}} d\xi d\eta. \quad (1.6)$$

Если в (1.6) исключить из знаменателя якобиан отображения  $x_{\xi}y_{\eta} - x_{\eta}y_{\xi}$ , то получим функционал предложенный в [29](Годунов, Прокопов, 1967).

Постановка 1.2.1 применяется для конструирования функционала (1.4). В реальных приложениях, как правило, удобнее рассматривать другую вариационную постановку задачи построения сетки.

**Постановка 1.2.2.** Ставится задача построения гомеоморфного, класса  $\mathbb{C}^1$ , отображения  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  параметрической области  $\bar{\mathcal{P}}$  на физическую область  $\bar{\Omega}$  при заданном отображении границ областей. Осуществляющие отображение функции  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  находятся в результате минимизации функционала (1.4), где  $G_{ij}(\boldsymbol{\xi})$  – элементы симметричной положительно определенной матрицы, заданной в каждой точке области  $\mathcal{P}$ .

Здесь для задания зависимости  $\mathbf{X}(\boldsymbol{\xi})$  не рассматривается отображение области  $\bar{\mathcal{P}}$  на область  $\bar{\mathcal{C}}$ . Эта зависимость задается локальным отображением подобласти из области  $\mathcal{P}$  на подобласть из пространства переменных  $\mathbf{X}$ . Например, метрический тензор  $G_{ij}$  можно задавать отображением кубической ячейки из области  $\mathcal{P}$  на гексаэдральную ячейку из пространства  $\mathbf{X}$ . При этом не имеет значения, что из себя представляет объединение всех ячеек из пространства  $\mathbf{X}$ . Другой способ состоит в целенаправленном изменении метрического тензора  $G_{ij}$  при наложении некоторых дополнительных условий на сетку, см. [18](Белинский и др., 1975), [61, 62](Прокопов, 2001, 2005).

### 1.3 Свойство универсальности трехмерного функционала и уравнения Эйлера

Универсальность функционала в трехмерном случае исследовалась в [9, 96](Азаренок, 2006). В случае  $n=3$  функционал (1.4) примет вид

$$\mathcal{D} = \frac{1}{3^{3/2}} \iiint_{\mathcal{P}} \frac{[\text{tr}(G^{-1}g)]^{3/2} \sqrt{\det G}}{\sqrt{\det g}} d\xi^1 d\xi^2 d\xi^3. \quad (1.7)$$

Здесь

$$\text{tr}(G^{-1}g) = G^{ij}g_{ji} = G^{11}g_{11} + G^{22}g_{22} + G^{33}g_{33} + 2G^{12}g_{12} + 2G^{13}g_{13} + 2G^{23}g_{23},$$

$G^{ij}$  – элементы матрицы, обратной матрице  $G$  (контравариантного тензора), и по повторяющимся индексам проводится суммирование. В точке области  $\Omega$  с координатами  $\mathbf{r}=(x^1, x^2, x^3)$  компоненты метрического тензора  $g_{ij}$  задаются соотношениями

$$g_{ij} = \mathbf{r}_{\xi^i} \cdot \mathbf{r}_{\xi^j}, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (1.8)$$

и таким же образом задаются компоненты метрического тензора  $G_{ij}$  в пространстве переменных  $X^1, X^2, X^3$ .

С учетом (1.2) можем переписать (1.3) в терминах собственных чисел

матрицы  $G^{-1}g$

$$E(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = \frac{1}{3^{3/2}} \frac{(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)^{3/2}}{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}}.$$

Применяя неравенство для среднего арифметического и среднего геометрического  $n$  произвольных положительных чисел  $q_i$

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n q_i \geq \left( \prod_{i=1}^n q_i \right)^{1/n},$$

прямой подстановкой в него  $\lambda_i$  (поскольку отображение предполагается невырожденным, то все  $\lambda_i > 0$ ) получаем, что  $E \geq 1$ . Необходимые условия достижения минимума имеют вид

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda_i} = 0, \quad i = 1, 2, 3.$$

Дифференцируя  $E$ , имеем три уравнения связи для  $\lambda_i$

$$2\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 = 0, \quad 2\lambda_2 - \lambda_1 - \lambda_3 = 0, \quad 2\lambda_3 - \lambda_1 - \lambda_2 = 0.$$

Комбинируя попарно эти уравнения, можно сделать вывод, что минимум  $E$  достигается при условии  $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$  и его значение  $E_{min} = 1$ . Теперь понятно почему нормировочный коэффициент в (1.3) задается равным  $n^{-n/2}$ . В двумерном случае аналогичный анализ для функционала (1.6) проводился в [46] (Иваненко, 2000).

Пусть задано  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$ , некоторое гладкое невырожденное отображение с метрическим тензором  $g_{ij}$ . Положив в каждой точке параметрической области  $G_{ij} = g_{ij}$ , получим в функционале (1.7) подынтегральную функцию  $E \equiv 1$ . Следовательно, функционал  $\mathcal{D}$  достигает абсолютного минимального значения, равного 1. Отсюда следует, что произвольное гладкое невырожденное отображение  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  может быть реализовано посредством решения задачи минимизации функционала (1.7) с некоторым метрическим тензором  $G_{ij}$ . Таким образом, задавая метрический тензор  $G_{ij}$ , можно управлять метрическим тензором  $g_{ij}$ , иными словами, координатными поверхностями сетки в физической области  $\Omega$ . Поэтому функционал (1.7) будем называть универсальным по аналогии с термином,

введенным в [60](Прокопов, 1998) и использовавшимся в [61](Прокопов, 2001) для функционала из [29](Годунов, Прокопов, 1967) и (1.6). Так как компоненты  $G_{ij}(\boldsymbol{\xi})$  (или зависимость  $\mathbf{X}(\boldsymbol{\xi})$ ) задаются с целью дополнительного управления сеткой, то и метрический тензор  $G_{ij}$  назовем управляющим.

Может возникнуть вопрос. Какой смысл искать отображение посредством минимизации функционала, если оно уже задано? Для ответа на него рассмотрим следующий случай. Пусть параметрическая  $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^3$  и физическая  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  области разбиты на две подобласти  $\mathcal{P} = \mathcal{P}_1 \cup \mathcal{P}_2$ ,  $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ , и задано отображение  $\mathbf{x}_1(\boldsymbol{\xi}) : \overline{\mathcal{P}}_1 \rightarrow \overline{\Omega}_1$ . Необходимо построить отображение  $\mathbf{x}_2(\boldsymbol{\xi}) : \overline{\mathcal{P}}_2 \rightarrow \overline{\Omega}_2$  так, чтобы оно было гладким продолжением  $\mathbf{x}_1(\boldsymbol{\xi})$ . При переходе к дискретному отображению, т.е. построению сетки, это подразумевает, что в подобласти  $\Omega_1$  сетка уже задана и стоит задача гладкого продолжения этой сетки на подобласть  $\Omega_2$ . Если для этого применить какой-то известный метод построения отображения (использовать функционал, систему дифференциальных уравнений и т.п.), то возникнет проблема гладкого сопряжения двух разных отображений, поскольку они описываются разными функциями. На дискретном уровне это подразумевает, что сетка состоит из двух блоков и возникает непростая задача гладкого сопряжения координатных линий сетки на границе раздела блоков. В данном подходе оба отображения  $\mathbf{x}_1(\boldsymbol{\xi})$  и  $\mathbf{x}_2(\boldsymbol{\xi})$  задаются в рамках единого подхода, т.е. с помощью одного функционала, посредством постепенного изменения компонент метрического тензора  $G_{ij}$  в окрестности границы раздела подобластей и, следовательно,  $\mathbf{x}_1(\boldsymbol{\xi})$  может быть гладко продолжено в  $\mathbf{x}_2(\boldsymbol{\xi})$ . Это рассуждение применимо и для вариационной постановки 1.2.1. Один подобный пример рассматривается в разделе 1.13. Другие примеры, когда это свойство функционала может оказаться полезным, рассмотрены в [61, 62](Прокопов, 2001, 2005), [8](Азаренок, 2005) при построении сеток в двумерных нестационарных задачах газовой динамики с быстро меняющейся со временем границей физической области (см. раздел 3.8.3).

Уравнения Эйлера для функционала (1.7) суть система нелинейных уравнений

$$\frac{\partial}{\partial \xi^l} \frac{\partial E}{\partial x_{\xi^l}^n} = 0, \quad n, l = 1, 2, 3, \quad (1.9)$$

где по  $l$  проводится суммирование. Выпишем выражение для производной от  $E$  по  $x_{\xi^l}^n$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial x_{\xi^l}^n} &= \frac{\partial}{\partial x_{\xi^l}^n} \frac{[\text{tr}(G^{-1}g)]^{3/2} \sqrt{\det G}}{3^{3/2} \sqrt{\det g}} = \\ &= \frac{1}{2 \cdot 3^{3/2}} \frac{\sqrt{\text{tr}(G^{-1}g)}}{\sqrt{\det(G^{-1}g)}} \left[ 3 \frac{\partial \text{tr}(G^{-1}g)}{\partial x_{\xi^l}^n} - \frac{\text{tr}(G^{-1}g)}{\det g} \frac{\partial \det g}{\partial x_{\xi^l}^n} \right]. \end{aligned}$$

Производные от следа матрицы  $\text{tr}(G^{-1}g)$  и определителя  $\det g$  имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \text{tr}(G^{-1}g)}{\partial x_{\xi^l}^n} &= \frac{\partial (G^{ji} g_{ij})}{\partial x_{\xi^l}^n} = 2G^{il} \frac{\partial x^n}{\partial \xi^i}, \quad i = 1, 2, 3, \\ \frac{\partial \det g}{\partial x_{\xi^l}^n} &= \sum_{\alpha_i, \alpha_j} (-1)^{N(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)} \frac{\partial x^{\alpha_i}}{\partial \xi^i} \frac{\partial x^{\alpha_j}}{\partial \xi^j}, \quad i, j \neq l, \quad \alpha_i, \alpha_j \neq n, \quad \alpha_l = n. \end{aligned}$$

Здесь для чисел  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ , принимающих значения 1, 2, 3, причем не совпадающих друг с другом,  $N(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  обозначает число беспорядков, образованных всеми парами, составленными из этой тройки чисел. Пара  $\alpha_i, \alpha_j$  образует беспорядок, если  $\alpha_i > \alpha_j$  при  $i < j$ . В (1.9) при дифференцировании по  $\xi^l$  метрические компоненты  $G_{ij}$  являются функциями от переменных  $\xi$ .

#### 1.4 Условия невырожденности сетки

Остается открытым вопрос об условиях, при которых гладкое отображение  $\mathbf{x}(\xi) : \bar{\mathcal{P}} \rightarrow \bar{\Omega}$ , задаваемое посредством минимизации функционала (1.7), является гомеоморфизмом. Между тем, в [19] (Бобылев и др., 2003) были получены достаточные условия того, что исследуемое отображение является глобальным гомеоморфизмом, используя лишь информацию локального характера об отображении и его свойствах на границах

образа и прообраза. Эти условия могут быть использованы для обеспечения невырожденности сеток, поскольку сетка строится посредством реализации гомеоморфного кусочно-гладкого отображения, т.е. склеенного из гладких отображений каждой ячейки сетки  $\omega_P$  из параметрической области  $\mathcal{P}$  на соответствующую ячейку сетки  $\omega_\Omega$  в физической области  $\Omega$ .

Пусть  $\mathcal{P}$  и  $\Omega$  – ограниченные односвязные области в  $\mathbb{R}^n$ , замыкания которых  $\overline{\mathcal{P}}$  и  $\overline{\Omega}$  диффеоморфны. Пусть  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \overline{\mathcal{P}} \rightarrow \overline{\Omega}$  отображение класса  $\mathbb{C}^1$ . Справедливо следующее утверждение (теорема 4 из [19](Бобылев и др., 2003)).

**Теорема 1.4.1.** *Пусть  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  гомеоморфно отображает границу области  $\partial\mathcal{P}$  на  $\partial\Omega$  и якобиан отображения*

$$J = \det \mathbf{x}'(\boldsymbol{\xi}) > 0, \quad \boldsymbol{\xi} \in \overline{\mathcal{P}}.$$

*Тогда  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  – гомеоморфизм из  $\overline{\mathcal{P}}$  на  $\overline{\Omega}$ .*

**Примечание.** Утверждение эквивалентное формулировке теоремы 1.4.1 для случая  $n=2, 3$  было доказано в [187](Sritharan, 1991) при дополнительном условии, что отображение  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  сюръективное. В методе деформаций [106](Bochev и др., 1996), [167](Liao и др., 2000) эти леммы использовались для обеспечения невырожденности отображения и получаемых с его помощью сеток.

Условия гомеоморфности непрерывного отображения имеют следующий вид (теорема 6 из [19](Бобылев и др., 2003)).

**Теорема 1.4.2.** *Пусть  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  гомеоморфно отображает  $\partial\mathcal{P}$  на  $\partial\Omega$  и является локальным гомеоморфизмом из  $\overline{\mathcal{P}}$  в  $\overline{\Omega}$  (гомеоморфизмом в окрестности любой точки из  $\overline{\mathcal{P}}$ ). Тогда  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  – гомеоморфизм из  $\overline{\mathcal{P}}$  на  $\overline{\Omega}$ .*

Предположим, что область  $\mathcal{P}$  разбита на непересекающиеся подобласти  $\mathcal{P}_i$  ( $i=1, 2, \dots, m$ ) так, что

$$\overline{\mathcal{P}} = \bigcup_{i=1}^m \overline{\mathcal{P}_i},$$

и  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \overline{\mathcal{P}} \rightarrow \overline{\Omega}$  – непрерывное отображение, являющееся гладким, класса  $\mathbb{C}^1$ , на замыканиях  $\overline{\mathcal{P}_i}$ . Сужение отображения  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  на  $\overline{\mathcal{P}_i}$  обозначим  $\mathbf{x}_i(\boldsymbol{\xi})$ . Из теорем 1,2 вытекает следующее утверждение (теорема 9 из [19] (Бобылев и др., 2003)).

**Теорема 1.4.3.** Пусть  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  гомеоморфно отображает  $\partial\mathcal{P}$  на  $\partial\Omega$ , и для любого  $i=1, 2, \dots, m$  ее сужение  $\mathbf{x}_i(\boldsymbol{\xi})$  гомеоморфно отображает  $\partial\mathcal{P}_i$  на  $\mathbf{x}_i(\partial\mathcal{P}_i)$  и, кроме того,

$$J_i = \det \mathbf{x}'_i(\boldsymbol{\xi}) > 0, \quad \boldsymbol{\xi} \in \overline{\mathcal{P}_i}, \quad i=1, 2, \dots, m.$$

Тогда  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  является гомеоморфизмом из  $\overline{\mathcal{P}}$  на  $\overline{\Omega}$ .

Теорему 1.4.3 можно использовать для получения достаточных условий невырожденности гексаэдральной сетки. 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 параметрической области  $\mathcal{P}$ ) гомеоморфно отображается на границу элемента  $\partial\Omega_i$  ( $\Omega_i$  – гексаэдр в физической области  $\Omega$ ) и для всех элементов  $J_i = \det \mathbf{x}'_i(\boldsymbol{\xi}) > 0$ ,  $\boldsymbol{\xi} \in \overline{\mathcal{P}_i}$ , то по теореме 1.4.3 глобальное кусочно-гладкое отображение  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}) : \overline{\mathcal{P}} \rightarrow \overline{\Omega}$  является гомеоморфизмом. Следовательно, нужно иметь условия положительности якобиана отображения  $J_i$  куба  $\overline{\mathcal{P}_i}$  в гексаэдр  $\overline{\Omega}_i$ , поскольку гомеоморфизм из  $\partial\mathcal{P}_i$  на  $\partial\Omega_i$  подразумевается заданным. Этот вопрос обсуждается в следующем разделе.

## 1.5 Условия невырожденности шестигранной ячейки

Рассмотрим шестигранную (другое название гексаэдральная или линейчатая) ячейку в пространстве  $x^1, x^2, x^3$  (см. рис. 1.2а), задаваемую посредством трилинейного отображения единичного куба  $0 \leq \xi^1, \xi^2, \xi^3 \leq 1$  из параметрического пространства  $\xi^1, \xi^2, \xi^3$

$$\mathbf{r} = \mathbf{w}_1 + \mathbf{w}_2 \xi^1 + \mathbf{w}_4 \xi^2 + \mathbf{w}_5 \xi^3 + \mathbf{w}_3 \xi^1 \xi^2 + \mathbf{w}_6 \xi^1 \xi^3 + \mathbf{w}_8 \xi^2 \xi^3 + \mathbf{w}_7 \xi^1 \xi^2 \xi^3, \quad (1.10)$$



где векторы  $\mathbf{w}_k$  имеют вид

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{w}_2 = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{w}_3 = \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4 + \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{w}_4 = \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_1,$$

$$\mathbf{w}_5 = \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{w}_6 = \mathbf{r}_6 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_5 + \mathbf{r}_1,$$

$$\mathbf{w}_7 = \mathbf{r}_7 - \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_6 - \mathbf{r}_8 + \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_4 + \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{w}_8 = \mathbf{r}_8 - \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_1$$

и  $\mathbf{r}_i = (x_i^1, x_i^2, x_i^3)$  – координаты вершин ячейки. Каждая из ее шести граней в общем случае является линейчатой поверхностью второго порядка. Согласно теореме 1.4.3 для невырожденности сетки достаточно, чтобы для каждой ячейки якобиан отображения (1.10) был всюду положительным при условии, что соответствие границ задано.

Линейчатая ячейка представляет из себя довольно сложный объект в отличие от ее аналога в двумерном случае – четырехугольной ячейки. В двумерном случае для проверки невырожденности ячейки достаточно знать значение якобиана  $J$  билинейного отображения, переводящего единичный квадрат из параметрической области в четырехугольную ячейку из физической области, в четырех вершинах ячейки. Здесь  $J$  есть линейная функция координат. Поэтому из положительности  $J$  в четырех вершинах следует его положительность в любой точке ячейки. В пространственном случае невырожденность гексаэдральной ячейки означает положительность якобиана отображения (1.10)

$$J = \mathbf{r}_{\xi^1} \cdot (\mathbf{r}_{\xi^2} \times \mathbf{r}_{\xi^3}) > 0 \quad (1.11)$$

всюду в параметрическом кубе. Здесь производные имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{\xi^1} &= \mathbf{w}_2 + \mathbf{w}_3 \xi^2 + \mathbf{w}_6 \xi^3 + \mathbf{w}_7 \xi^2 \xi^3, & \mathbf{r}_{\xi^2} &= \mathbf{w}_4 + \mathbf{w}_3 \xi^1 + \mathbf{w}_8 \xi^3 + \mathbf{w}_7 \xi^1 \xi^3, \\ \mathbf{r}_{\xi^3} &= \mathbf{w}_5 + \mathbf{w}_6 \xi^1 + \mathbf{w}_8 \xi^2 + \mathbf{w}_7 \xi^1 \xi^2. \end{aligned}$$

Якобиан  $J$  суть полином четвертой степени от переменных  $\xi^1, \xi^2, \xi^3$ , по каждой не выше второй [69](Ушакова, 2001). До настоящего времени не получено условия, являющегося одновременно необходимым и достаточным, которое обеспечивает невырожденность линейчатой ячейки. В [156](Кнурр, 1990) для проверки невырожденности отображения (1.10)

использовалась проверка положительности  $J$  на 12 ребрах ячейки. Там же отмечалось, что это условие не гарантирует невырожденности линейчатой ячейки. В [154](Knabner и др., 1990) был предложен численный метод проверки невырожденности ячейки, когда выделяется линейная и нелинейная части трилинейного отображения. Наиболее полно данный вопрос исследован в [69, 198](Ушакова, 2001, 2004), где предложен ряд необходимых и достаточных условий невырожденности и используется численная процедура проверки ячеек, которые не подпадают под эти условия.

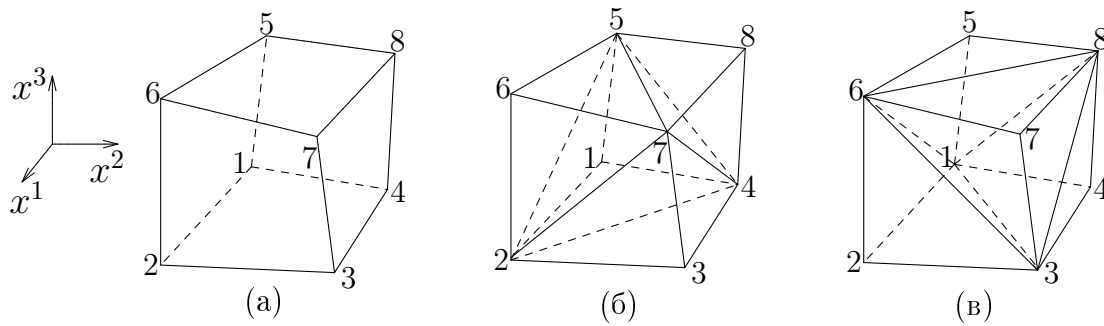


Рис. 1.2. Линейчатая ячейка (а) заменяется на два 12-гранника первого (б) и второго (в) типа с теми же вершинами.

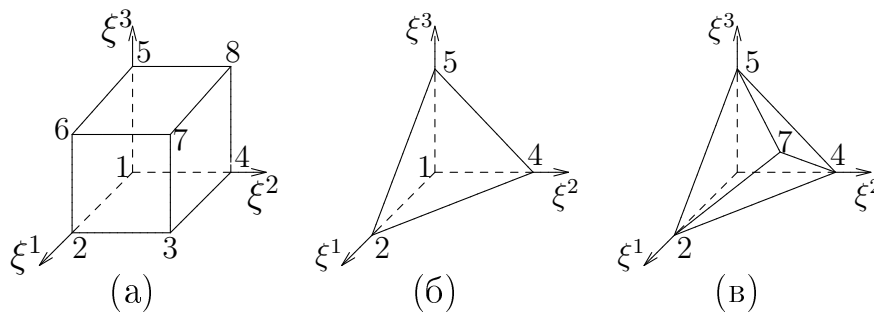


Рис. 1.3. Единичный куб (а) разбивается на базисные тетраэдры: 4 угловых подобно  $T_{1245}$ (б) и внутренний  $T_{2457}$  (в). Используется два вида разбиений (см. рис. 1.2б,в).

В [9, 96](Азаренок, 2006) было предложено вместо линейчатой ячейки использовать два 12-гранника первого и второго типа (см. рис. 1.2б,в) с теми же вершинами. Первый 12-гранник состоит из 4 угловых тетраэдров при вершинах ячейки  $T_{1245}$ ,  $T_{3427}$ ,  $T_{6572}$ ,  $T_{8754}$  и внутреннего  $T_{2457}$ . Вторым 12-гранник состоит из угловых тетраэдров  $T_{2316}$ ,  $T_{4138}$ ,  $T_{5861}$ ,  $T_{7683}$ , и

внутреннего  $T_{1386}$ . Проводится замена трилинейного отображения (1.10) на набор линейных отображений  $\mathbf{r}^h(\boldsymbol{\xi})$  базисных тетраэдров, на которые разбивается единичный куб из параметрического пространства (см. рис. 1.3), в соответствующие тетраэдры, из которых составлены два 12-гранника. Базисные тетраэдры – это 8 угловых при вершинах единичного куба (см., например, тетраэдр  $T_{1245}$  на рис. 1.3б) и два внутренних (см., например, тетраэдр  $T_{2457}$  на рис. 1.3в). При построении сетки условие невырожденности ячейки (1.11) заменяется на условие невырожденности двух 12-гранников, иными словами, на условие положительности объемов 10 тетраэдров, на которые разбиваются эти 12-гранники. Условие невырожденности сетки, состоящей из 12-гранных ячеек первого или второго типа, может быть записано в виде

$$[V_m]_n > 0, \quad m = 1, 2, \dots, 10, \quad n = 1, 2, \dots, N_c, \quad (1.12)$$

где  $[V_m]_n$  – объем  $m$ -го тетраэдра в  $n$ -й ячейке ( $m=1, 2, \dots, 8$  соответствует угловым тетраэдрам, а  $m=9, 10$  внутренним),  $N_c$  – число линейчатых ячеек сетки. Это условие может быть переписано в терминах якобиана  $J_m$  линейного отображения базисного тетраэдра, поскольку  $J_m=6V_m$ . Отметим, что для углового тетраэдра  $J_m$  равен якобиану трилинейного отображения в соответствующей вершине. Например, для  $T_{1245}$  это вершина 1.

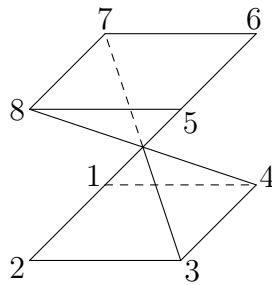


Рис. 1.4. Перекрученная ячейка.

Использование условия невырожденности только для 8 угловых тетраэдров не может гарантировать невырожденности как линейчатой, так и 12-гранной ячейки. Можно привести контрпример, предложенный в

[44](Иваненко, 1997). Если верхнюю грань куба повернуть на  $180^\circ$  вокруг центра этой грани, то в результате получится перекрученная вырожденная ячейка, изображенная на рис. 1.4, но при этом все 8 угловых тетраэдров сохраняют положительный знак объема. Таким образом, это условие не препятствует перекручиванию ячеек. Если использовать в условии невырожденности все 10 тетраэдров, то поворот верхней грани куба возможен только на угол меньший чем  $90^\circ$ . При  $90^\circ$  оба внутренних тетраэдра вырождаются, т.к. в каждом из них все 4 вершины лежат в одной плоскости.

Таблица 1.1. ( $l$  – номер вершины.)

$l$		1	2	3	4	5	6	7	8
$I$	$x^1$	0.000	0.141	0.106	-0.037	0.293	0.446	0.072	-0.073
	$x^2$	0.000	-0.063	-0.144	-0.081	-0.208	-0.263	-0.225	-0.160
	$x^3$	0.000	0.000	0.252	0.252	0.038	0.038	0.288	0.288
$II$	$x^1$	0.994	0.353	0.915	0.899	0.387	0.521	0.215	0.113
	$x^2$	0.686	0.878	0.341	0.235	0.309	0.403	0.695	0.291
	$x^3$	0.970	0.657	0.117	0.399	0.567	0.844	0.514	0.365

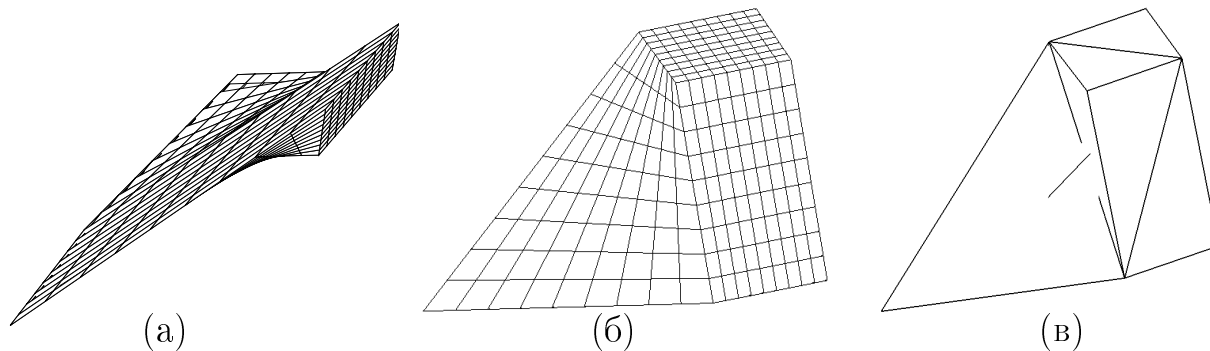


Рис. 1.5. Невырожденная линейчатая ячейка  $I$ , два вида (а) и (б), и вырожденный 12-гранник (в) с теми же вершинами.

Следующие примеры из [9, 96](Азаренок, 2006) демонстрируют различие между множествами невырожденных линейчатых и 12-гранных ячеек. В табл. 1.1 приведены координаты вершин двух линейчатых невырожденных ячеек. Ячейка  $I$ , изображенная на рис. 1.5а,б, сплюснута и

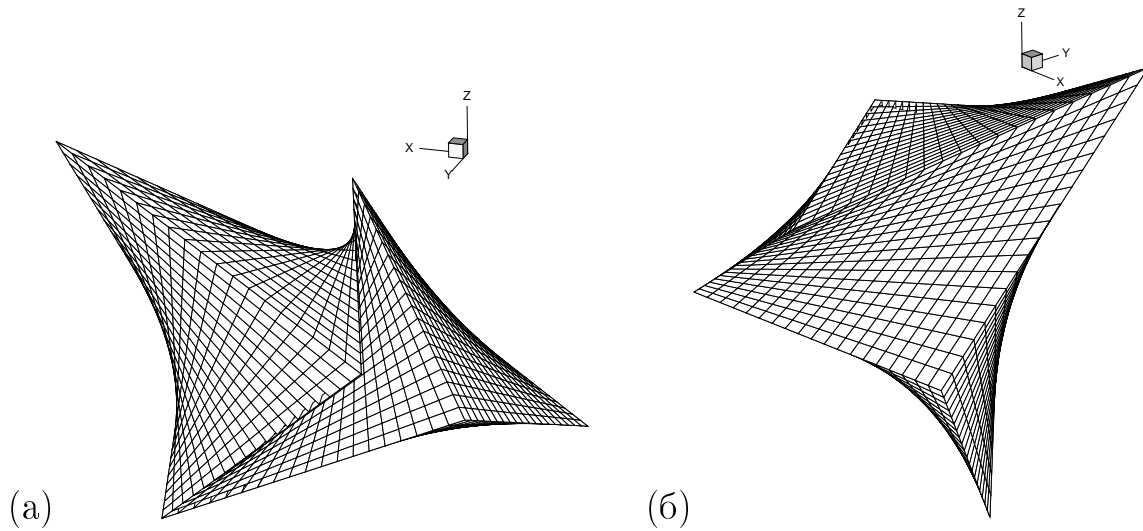


Рис. 1.6. Невырожденная линейчатая ячейка  $II$ , два вида (а) и (б), для которой оба 12-гранника вырождены

перекручена. Для нее первый 12-гранник имеет самопересечение граней, поскольку внутренний тетраэдр  $T_{2457}$  вывернут и для него якобиан  $J_{T_{2457}} = -0.00155$  (см. рис. 1.5в). Ячейка  $II$  изображена на рис. 1.6. У нее оба 12-гранника вырождены, т.к. для внутренних тетраэдров  $J_{T_{2457}} = -0.4736$  и  $J_{T_{1368}} = -0.1045$ . Из рис. 1.6 видно, что ячейка  $II$  имеет довольно вычурную форму. Заметим, что необходимое условие невырожденности линейчатой ячейки включает следующее неравенство [70](Ушакова, 2007)

$$V_9 + V_{10} > - \sum_{m=1}^8 V_m.$$

Оно может быть легко получено из формулы для объема гексаэдральной ячейки  $V_\Gamma$  [69](Ушакова, 2001)

$$V_\Gamma = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{10} V_m.$$

Это условие позволяет невырожденной линейчатой ячейке иметь вырожденный внутренний тетраэдр у одного или двух 12-гранников.

Чтобы получить представление о широте (или наоборот узости) условия невырожденности, основанного на проверке положительности объемов тетраэдров, в [9, 96](Азаренок, 2006) были проведены численные

эксперименты, следуя в основном идеям из [69, 198](Ушакова, 2001, 2004). Вершины шестигранника задавались случайным образом на интервале  $(0, 1)$  по каждой пространственной переменной. Выборка состоит из  $10^7$  ячеек. В первом эксперименте сначала проверяется знак объема для восьми угловых тетраэдров (см. число ячеек удовлетворяющих этому условию во втором столбце с заголовком У0 в табл. 1.2, где строкой ниже приведены данные из [69, 198](Ушакова, 2001, 2004)). Это условие является необходимым, поэтому не удовлетворяющие ему ячейки отбрасываются. Это условие применялось в численном эксперименте в [156](Кнурр, 1990). Далее проверяется знак  $J$  трилинейного отображения посередине каждого из двенадцати ребер, в центре шести граней и самой ячейки. Это условие также является необходимым, назовем его НУ1. После этого проверяется знак  $J$  на ребрах. Поскольку вдоль ребра  $J$  есть квадратичная функция одного параметра  $\xi^1, \xi^2$  или  $\xi^3$ , то зная его значения на концах и посередине ребра, легко определить принимает ли он отрицательные значения на всем отрезке. Опишем эту проверку. Пусть заданы значения  $J(\xi^1)$  в точках единичного отрезка  $\xi^1=0, \frac{1}{2}, 1$ , обозначенные как  $J_0, J_{1/2}, J_1$  соответственно. Если одно из них отрицательно, то ячейка отбрасывается как вырожденная. Для квадратичной функции

$$J = \alpha(\xi^1)^2 + \beta\xi^1 + \gamma$$

коэффициенты определяются следующим образом:

$$\alpha = 2(J_0 + J_1) - 4J_{1/2}, \quad \beta = 4J_{1/2} - J_1 - 3J_0, \quad \gamma = J_0.$$

Производится следующая проверка:

1. если  $\alpha < 0$ , тогда  $J > 0$  на отрезке  $\xi^1 \in [0, 1]$ ;
2. если  $\alpha > 0$ , тогда минимальное значение определяется из уравнения

$$J_{\xi^1} = 2\alpha\xi^1 + \beta = 0,$$

откуда получаем абсциссу минимума  $\xi_{min}^1 = -\beta/2\alpha$ ;

3. если  $\xi_{min}^1 \in [0, 1]$ , тогда  $J_{min} = -0.25\beta^2/\alpha + \gamma$  и проверяется знак  $J_{min}$ ;
4. если  $\xi_{min}^1 \notin [0, 1]$ , тогда  $J > 0$  на отрезке  $\xi \in [0, 1]$ .

Таблица 1.2.

	У0	НУ1	НУ2	НУ3	НУ4	НУ5
1-й эксперимент	36230	14066	11675	11546	11487	11484
Данные из [69, 198]	36251	14004	11660	11533		11481 <sup>1</sup>
2-й эксперимент	9915	7405	6881	6874	6870	6868

<sup>1)</sup> В [198](Ushakova, 2004) используется численная процедура поиска минимума  $J$  после проверки условия НУ3.

Это необходимое условие назовем НУ2. Следующее условие НУ3 состоит в проверке знака  $J$  на отрезках, соединяющих середины противоположных ребер на каждой грани и центры противоположных граней (всего 15). Эта проверка реализуется аналогично условию НУ2. Еще одно условие НУ4 заключается в проверке знака  $J$  на отрезках, соединяющих соответствующие точки противоположных граней ячейки, разбитых на  $10 \times 10$  четырехугольников, при том что каждая грань параметрического куба разбивается на  $10 \times 10$  квадратов. Всего получается  $121 \cdot 3 = 363$  проверок за вычетом 27 уже рассмотренных в условиях НУ2 и НУ3. Для большей надежности была осуществлена такая же проверка при разбиении грани куба на  $100 \times 100$  квадратов, названная НУ5. Из табл. 1.2 видно, что она позволяет отбросить еще только три ячейки. Можно сказать, что результаты эксперимента практически повторяют данные из [69, 198](Ушакова, 2001, 2004). Во втором эксперименте под У0 подразумевается проверка всех десяти тетраэдров, и далее применяются необходимые условия из первого эксперимента.

Хотя цифра в последнем столбце табл. 1.2, по-видимому, не является точным числом ячеек где  $J > 0$ , тем не менее будем ее использовать в качестве таковой. Проведенные исследования показывают, что из всех ячеек, удовлетворяющих необходимому условию  $V_1, \dots, V_8 > 0$ , только 31.7% являются невырожденными, и эта цифра практически совпадает с данными из [198](Ushakova, 2004). Проверка 10 тетраэдров повышает их долю до 69.1%, но с другой стороны сужает множество невырожден-

ных шестигранных ячеек на 40.2%. Цифра 69.1% свидетельствует о том, что для отдельно взятой ячейки можно подобрать координаты вершин так, чтобы оба 12-гранника были невырожденными, а сама линейчатая ячейка вырожденной. Вместе с тем опыт построения сеток этим методом в реальных областях показывает, что выполнение условия (1.12) обеспечивает невырожденность гексаэдральной сетки. Это позволяет использовать условие (1.12) при расчете сеток.

Поскольку необходимые условия первого эксперимента довольно близки к достаточным, их можно использовать при проверке на невырожденность гексаэдральных сеток. Здесь, по-видимому, можно ограничиться условием НУ4, опустив НУ5, поскольку его реализация требует гораздо большего времени. Для проверки невырожденности гексаэдральных ячеек сконструированной сетки сначала используются достаточные условия 2 из [69, 71] (Ушакова, 2001, 2008). Для каждой ячейки они состоят в проверке 27 неравенств, связывающих объемы 32 тетраэдров. Затем ячейки, в которых эти условия не выполняются, проверяются с помощью необходимого условия НУ4. Проверка сетки, состоящей из  $10^6$  ячеек, занимает несколько секунд на персональном компьютере.

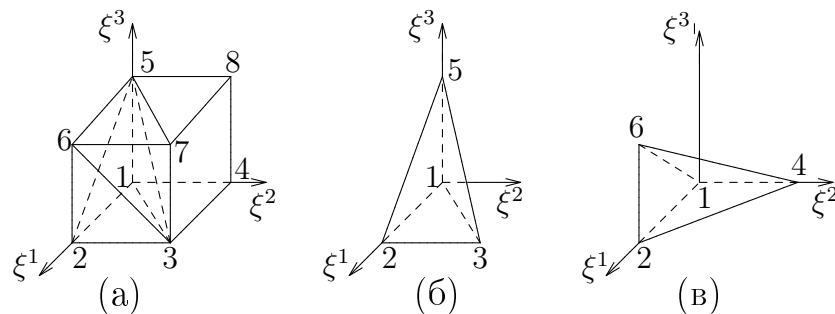


Рис. 1.7. Условия положительности объемов 24 тетраэдров, использовавшиеся в [44] (Иваненко, 1997). Каждому из 12 ребер куба, например ребру 12 (а), ставится в соответствие 2 тетраэдра (б) и (в).

Отметим, что в [44] (Иваненко, 1997) в качестве условия невырожденности использовался набор из 24 линейных отображений других базисных тетраэдров. Разбиение параметрического куба показано на рис. 1.7. Но как было показано в [71] (Ушакова, 2008), во-первых, они не являются



достаточными условиями невырожденности линейчатой ячейки (т.е. их выполнение не гарантирует невырожденности линейчатой ячейки). Во-вторых, эти условия не охватывают большой процент невырожденных линейчатых ячеек. В таком же численном эксперименте со случайной выборкой из  $10^7$  ячеек, проведенном в [71](Ушакова, 2008), только 7.9% невырожденных линейчатых ячеек удовлетворяли условиям невырожденности 24 тетраэдров. В [71](Ушакова, 2008) рассматривались условия невырожденности для нескольких наборов базисных тетраэдров и их соотношение со множеством невырожденных линейчатых ячеек. Исследование показало, что используемые в настоящей диссертации условия невырожденности двух 12-гранников (или 10 тетраэдров) являются наиболее эффективными и экономичными.

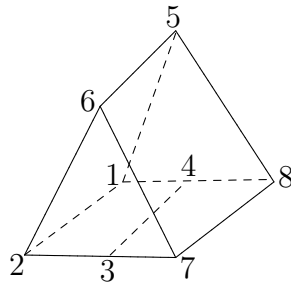


Рис. 1.8. Призматическая линейчатая ячейка.

Следует отметить, что в практических приложениях на границе области  $\partial\Omega$  встречаются ячейки в форме линейчатой треугольной призмы. На рис. 1.8 это шестигранник, у которого две соседние грани 1234 и 4378 лежат в одной плоскости. Это происходит, когда ребро 34 лежит на граничном ребре области, а грани 1234 и 4378 на граничных поверхностях различных семейств. Такого рода ячейки при построении гексаэдральных сеток рассматривались, например, в [198](Ushakova, 2004). У шестигранной ячейки, изображенной на рис. 1.8,  $J=0$  на ребре 34. В каждой из двух 12-гранных ячеек один угловой тетраэдр,  $T_{2347}$  и  $T_{1348}$ , вырожден, поскольку все вершины расположены в одной плоскости. Тем не менее призматическая ячейка может оказаться приемлемой для расчетов. Несложно проверить, что отображение (1.10) является гомеоморфизмом. Призматическая ячейка является невырожденной в смысле опре-

деления 1.1.1. Призматическую ячейку можно назвать несамопересекающейся (без самопересечения граней). В двумерном случае аналогичная ситуация возникает, когда на границе области (например, полукруга) выпуклые четырехугольные ячейки вырождаются в треугольные, см., например, [59](Прокопов, 1989). При построении гексаэдральных сеток призматические ячейки должны рассматриваться специальным образом. Для этих ячеек не проводится аппроксимация функционала на заведомо вырожденных тетраэдрах (об аппроксимации см. раздел 1.6). Поэтому контроль за управлением формой призматических линейчатых ячеек становится слабее. Призматическая ячейка может рассматриваться и при другом способе ее построения, например, непосредственно в форме призмы с двумя плоскими треугольными гранями и тремя линейчатыми четырехугольными гранями. Но в этом случае сетка будет неструктурированной.

## 1.6 Аппроксимация функционала

Предположим, что в физической области  $\Omega$  необходимо построить структурированную сетку с числом узлов  $N_1, N_2, N_3$  по трем координатным направлениям  $i, j, k$  соответственно. В качестве параметрической области  $\mathcal{P}$  рассматриваем прямоугольный параллелепипед с ребрами  $N_1-1, N_2-1, N_3-1$ . Для каждой линейчатой ячейки, число которых равно  $N_c = (N_1-1)(N_2-1)(N_3-1)$ , дискретизируем функционал (1.7) усреднением его аппроксимаций на 10 базисных тетраэдрах. В результате получим дискретный аналог функционала, разностную функцию

$$\mathcal{D}^h = \sum_{n=1}^{N_c} \sum_{m=1}^{10} \frac{1}{10} [E_m]_n, \quad (1.13)$$

где  $[E_m]_n$  – подынтегральное выражение в (1.7), вычисленное для  $m$ -го тетраэдра  $n$ -й ячейки. В разделе 1.9 показывается, что функция  $\mathcal{D}^h$  обладает бесконечным барьером на границе множества невырожденных сеток.

Если множество невырожденных сеток, состоящих из 12-гранных ячеек, не пусто, то система алгебраических уравнений, записанных для внутренних узлов сетки,

$$R_{x^i} = \frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial x_n^i} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (1.14)$$

имеет по крайней мере одно решение, являющееся невырожденной сеткой. Здесь  $n$  – глобальный номер узла сетки. Для нахождения этого решения следует применять метод безусловной минимизации функции  $\mathcal{D}^h$ , взяв в качестве начального приближения невырожденную сетку.

## 1.7 Минимизация функционала

Для нахождения минимума  $\mathcal{D}^h$  будем использовать метод безусловной минимизации, применявшийся в [44] (Иваненко, 1997). Имея невырожденную сетку на  $l$ -м шаге итераций, координаты  $n$ -го узла сетки на  $l+1$ -м шаге вычисляются с использованием квазиньютоновской процедуры (в матрице вторых производных удерживаются только диагональные элементы, что значительно сокращает время вычислений)

$$\tau R_{x^i} + \sum_{j=1}^3 R_{x^i x^j} ((x_n^j)^{l+1} - (x_n^j)^l) = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (1.15)$$

Здесь

$$R_{x^i x^j} = \frac{\partial^2 \mathcal{D}^h}{\partial x_n^i \partial x_n^j},$$

$\tau < 1$  – итерационный параметр. Итерации проводятся до выполнения условия

$$\max_n |\mathbf{r}_n^{l+1} - \mathbf{r}_n^l| < \varepsilon,$$

где  $\varepsilon > 0$  – малая величина. Для осуществления итерационной процедуры (1.15) необходимо уметь вычислять первые и вторые производные в узле сетки от разностной функции  $\mathcal{D}^h$ . Они были получены в [9, 96] (Азаренок, 2006) и приводятся в следующем разделе.

## 1.8 Расчетные формулы

Заметив, что якобиан отображения  $\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$  есть  $\sqrt{\det g} = \mathbf{r}_{\xi^1} \cdot (\mathbf{r}_{\xi^2} \times \mathbf{r}_{\xi^3})$ , подынтегральное выражение в (1.7) можно представить в виде  $E = U/V$ , где

$$U = \gamma (G^{ij} g_{ji})^{3/2}, \quad V = \mathbf{r}_{\xi^1} \cdot (\mathbf{r}_{\xi^2} \times \mathbf{r}_{\xi^3}), \quad \gamma = 3^{-3/2} \sqrt{\det G}.$$

Для получения производных воспользуемся правилом дифференцирования отношения функций

$$E_{x^i} = \frac{U_{x^i} - EV_{x^i}}{V}, \quad E_{x^i x^j} = \frac{U_{x^i x^j} - 2E_{x^i} V_{x^j} - EV_{x^i x^j}}{V}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Рассмотрим дифференцирование числителя  $U$

$$\begin{aligned} U_{x^m} &= \frac{3}{2} \gamma (G^{ij} g_{ji})^{1/2} G^{kl} \frac{\partial g_{lk}}{\partial x^m}, \\ U_{x^m x^n} &= \frac{3}{2} \gamma (G^{ij} g_{ji})^{-1/2} \left[ \frac{1}{2} G^{ij} \frac{\partial g_{ji}}{\partial x^m} G^{kl} \frac{\partial g_{lk}}{\partial x^n} + G^{ij} g_{ji} G^{kl} \frac{\partial^2 g_{lk}}{\partial x^m \partial x^n} \right], \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$i, j, k, l, m, n = 1, 2, 3.$$

Выведем формулы для определения компонент метрического тензора  $g_{ij}$  при аппроксимации  $E$  на базисном тетраэдре  $T_{1245}$  (см. рис. 1.3б). Рассмотрим линейное отображение  $\mathbf{r}^h(\boldsymbol{\xi})$ , переводящее этот базисный тетраэдр в угловой тетраэдр  $T_{1245}$  из пространства  $x^1, x^2, x^3$  (см. рис. 1.2б),

$$\mathbf{r}^h = (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)\xi^1 + (\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_1)\xi^2 + (\mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_1)\xi^3 + \mathbf{r}_1, \quad 0 \leq \xi^1, \xi^2, \xi^3; \quad \xi^1 + \xi^2 + \xi^3 \leq 1.$$

Производные от вектор-функции  $\mathbf{r}^h(\boldsymbol{\xi})$  равны

$$\mathbf{r}_{\xi^1}^h = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{r}_{\xi^2}^h = \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{r}_{\xi^3}^h = \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_1.$$

С учетом (1.8) получаем формулы для определения компонент метрического тензора  $g_{ij}$

$$\begin{aligned}
g_{11} &= \sum_{k=1}^3 (x_2^k - x_1^k)^2, & g_{12} &= \sum_{k=1}^3 (x_2^k - x_1^k)(x_4^k - x_1^k), \\
g_{13} &= \sum_{k=1}^3 (x_2^k - x_1^k)(x_5^k - x_1^k), & g_{22} &= \sum_{k=1}^3 (x_4^k - x_1^k)^2, \\
g_{23} &= \sum_{k=1}^3 (x_4^k - x_1^k)(x_5^k - x_1^k), & g_{33} &= \sum_{k=1}^3 (x_5^k - x_1^k)^2.
\end{aligned}$$

При вычислении производных от  $U$  необходимо в (1.16) вместо  $x^k$  подставить  $x_i^k$ , где  $i$  – номер вершины тетраэдра  $T_{1245}$ . Для вершины 1 получаем

$$\begin{aligned}
\frac{\partial g_{11}}{\partial x_1^k} &= 2(x_1^k - x_2^k), & \frac{\partial g_{12}}{\partial x_1^k} &= 2x_1^k - x_2^k - x_4^k, & \frac{\partial g_{13}}{\partial x_1^k} &= 2x_1^k - x_2^k - x_5^k, \\
\frac{\partial g_{22}}{\partial x_1^k} &= 2(x_1^k - x_4^k), & \frac{\partial g_{23}}{\partial x_1^k} &= 2x_1^k - x_4^k - x_5^k, & \frac{\partial g_{33}}{\partial x_1^k} &= 2(x_1^k - x_5^k), & \frac{\partial^2 g_{ij}}{\partial (x_1^k)^2} &= 2.
\end{aligned}$$

Все смешанные производные от  $g_{ij}$  равны 0.

Для вершины 2 выпишем только производные неравные 0

$$\frac{\partial g_{11}}{\partial x_2^k} = 2(x_2^k - x_1^k), \quad \frac{\partial^2 g_{11}}{\partial (x_2^k)^2} = 2, \quad \frac{\partial g_{12}}{\partial x_2^k} = x_4^k - x_1^k, \quad \frac{\partial g_{13}}{\partial x_2^k} = x_5^k - x_1^k.$$

Для вершины 4 получаем

$$\frac{\partial g_{12}}{\partial x_4^k} = x_2^k - x_1^k, \quad \frac{\partial g_{22}}{\partial x_4^k} = 2(x_4^k - x_1^k), \quad \frac{\partial^2 g_{22}}{\partial (x_4^k)^2} = 2, \quad \frac{\partial g_{23}}{\partial x_4^k} = x_5^k - x_1^k.$$

Для вершины 5 получаем

$$\frac{\partial g_{13}}{\partial x_5^k} = x_2^k - x_1^k, \quad \frac{\partial g_{23}}{\partial x_5^k} = x_4^k - x_1^k, \quad \frac{\partial g_{33}}{\partial x_5^k} = 2(x_5^k - x_1^k), \quad \frac{\partial^2 g_{33}}{\partial (x_5^k)^2} = 2.$$

При дифференцировании знаменателя  $V$  применяем правило дифференцирования определителей. Для вершины 1 получаем

$$\begin{aligned}
\frac{\partial V}{\partial x_1^1} &= x_2^2(x_5^3 - x_4^3) + x_4^2(x_2^3 - x_5^3) + x_5^2(x_4^3 - x_2^3), \\
\frac{\partial V}{\partial x_1^2} &= x_2^3(x_5^1 - x_4^1) + x_4^3(x_2^1 - x_5^1) + x_5^3(x_4^1 - x_2^1), \\
\frac{\partial V}{\partial x_1^3} &= x_2^1(x_5^2 - x_4^2) + x_4^1(x_2^2 - x_5^2) + x_5^1(x_4^2 - x_2^2).
\end{aligned}$$

Легко видеть, что все вторые и смешанные производные от  $V$  равны нулю.

Для вершины 2 получаем

$$\begin{aligned}
\frac{\partial V}{\partial x_2^1} &= (x_4^2 - x_1^2)(x_5^3 - x_1^3) - (x_5^2 - x_1^2)(x_4^3 - x_1^3), \\
\frac{\partial V}{\partial x_2^2} &= (x_4^3 - x_1^3)(x_5^1 - x_1^1) - (x_5^3 - x_1^3)(x_4^1 - x_1^1), \\
\frac{\partial V}{\partial x_2^3} &= (x_4^1 - x_1^1)(x_5^2 - x_1^2) - (x_5^1 - x_1^1)(x_4^2 - x_1^2).
\end{aligned}$$

Для вершины 4 получаем

$$\begin{aligned}
\frac{\partial V}{\partial x_4^1} &= (x_5^2 - x_1^2)(x_2^3 - x_1^3) - (x_2^2 - x_1^2)(x_5^3 - x_1^3), \\
\frac{\partial V}{\partial x_4^2} &= (x_5^3 - x_1^3)(x_2^1 - x_1^1) - (x_2^3 - x_1^3)(x_5^1 - x_1^1), \\
\frac{\partial V}{\partial x_4^3} &= (x_5^1 - x_1^1)(x_2^2 - x_1^2) - (x_2^1 - x_1^1)(x_5^2 - x_1^2).
\end{aligned}$$

Для вершины 5 получаем

$$\begin{aligned}
\frac{\partial V}{\partial x_5^1} &= (x_2^2 - x_1^2)(x_4^3 - x_1^3) - (x_4^2 - x_1^2)(x_2^3 - x_1^3), \\
\frac{\partial V}{\partial x_5^2} &= (x_2^3 - x_1^3)(x_4^1 - x_1^1) - (x_4^3 - x_1^3)(x_2^1 - x_1^1), \\
\frac{\partial V}{\partial x_5^3} &= (x_2^1 - x_1^1)(x_4^2 - x_1^2) - (x_4^1 - x_1^1)(x_2^2 - x_1^2).
\end{aligned}$$

Поскольку подынтегральное выражение  $E$  инвариантно относительно поворота системы координат  $\mathbf{\xi}$ , для остальных семи угловых тетраэдров формулы дифференцирования  $U$  и  $V$  останутся неизменными. Нужно только произвести соответствующую замену индексов.

Далее выведем формулы для определения компонент метрического тензора  $g_{ij}$  и производных от них при аппроксимации  $E$  на базисном тетраэдре  $T_{2457}$  (см. рис. 1.3в). Для этого рассмотрим линейное отображение  $\mathbf{r}^h(\boldsymbol{\xi})$ , переводящее этот базисный тетраэдр во внутренний тетраэдр  $T_{2457}$  из пространства  $x^1, x^2, x^3$  (см. рис. 1.2в),

$$\mathbf{r}^h = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_5)\xi^1 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_5)\xi^2 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4)\xi^3 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_4 + \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_7).$$

Производные от вектор-функции  $\mathbf{r}^h(\boldsymbol{\xi})$  равны

$$\mathbf{r}_{\xi^1}^h = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_4), \quad \mathbf{r}_{\xi^2}^h = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{r}_{\xi^3}^h = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4).$$

С учетом (1.8) получаем формулы для определения компонент метрического тензора  $g_{ij}$

$$\begin{aligned} g_{11} &= \frac{1}{4} \sum_{k=1}^3 (x_7^k + x_2^k - x_5^k - x_4^k)^2, & g_{12} &= \frac{1}{4} \sum_{k=1}^3 (x_7^k + x_2^k - x_5^k - x_4^k)(x_7^k + x_4^k - x_5^k - x_2^k), \\ g_{22} &= \frac{1}{4} \sum_{k=1}^3 (x_7^k + x_4^k - x_5^k - x_2^k)^2, & g_{13} &= \frac{1}{4} \sum_{k=1}^3 (x_7^k + x_2^k - x_5^k - x_4^k)(x_7^k + x_5^k - x_2^k - x_4^k), \\ g_{33} &= \frac{1}{4} \sum_{k=1}^3 (x_7^k + x_5^k - x_2^k - x_4^k)^2, & g_{23} &= \frac{1}{4} \sum_{k=1}^3 (x_7^k + x_4^k - x_5^k - x_2^k)(x_7^k + x_5^k - x_2^k - x_4^k). \end{aligned}$$

Найдем производные от  $g_{ij}$ . Для вершины 2 получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_{11}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}(x_7^k + x_2^k - x_5^k - x_4^k), & \frac{\partial g_{12}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}(x_4^k - x_2^k), \\ \frac{\partial g_{22}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}(x_5^k + x_2^k - x_7^k - x_4^k), & \frac{\partial g_{13}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}(x_5^k - x_2^k), \\ \frac{\partial g_{33}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}(x_4^k + x_2^k - x_7^k - x_5^k), & \frac{\partial g_{23}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}(x_2^k - x_7^k), \\ \frac{\partial^2 g_{ii}}{\partial (x_2^k)^2} &= \frac{\partial^2 g_{23}}{\partial (x_2^k)^2} = \frac{1}{2}, & \frac{\partial^2 g_{12}}{\partial (x_2^k)^2} &= \frac{\partial^2 g_{13}}{\partial (x_2^k)^2} = -\frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Все смешанные производные от  $g_{ij}$  равны 0.

Для вершины 4 получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial g_{11}}{\partial x_4^k} &= \frac{1}{2}(x_5^k + x_4^k - x_7^k - x_2^k), & \frac{\partial g_{12}}{\partial x_4^k} &= \frac{1}{2}(x_2^k - x_4^k), \\ \frac{\partial g_{22}}{\partial x_4^k} &= \frac{1}{2}(x_7^k + x_4^k - x_5^k - x_2^k), & \frac{\partial g_{13}}{\partial x_4^k} &= \frac{1}{2}(x_4^k - x_7^k), \\ \frac{\partial g_{33}}{\partial x_4^k} &= \frac{1}{2}(x_4^k + x_2^k - x_7^k - x_5^k), & \frac{\partial g_{23}}{\partial x_4^k} &= \frac{1}{2}(x_5^k - x_4^k), \\ \frac{\partial^2 g_{ii}}{\partial (x_4^k)^2} &= \frac{\partial^2 g_{13}}{\partial (x_4^k)^2} = \frac{1}{2}, & \frac{\partial^2 g_{12}}{\partial (x_4^k)^2} &= \frac{\partial^2 g_{23}}{\partial (x_4^k)^2} = -\frac{1}{2}.\end{aligned}$$

Для вершины 5 получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial g_{11}}{\partial x_5^k} &= \frac{1}{2}(x_5^k + x_4^k - x_7^k - x_2^k), & \frac{\partial g_{12}}{\partial x_5^k} &= \frac{1}{2}(x_5^k - x_7^k), \\ \frac{\partial g_{22}}{\partial x_5^k} &= \frac{1}{2}(x_5^k + x_2^k - x_7^k - x_4^k), & \frac{\partial g_{13}}{\partial x_5^k} &= \frac{1}{2}(x_2^k - x_5^k), \\ \frac{\partial g_{33}}{\partial x_5^k} &= \frac{1}{2}(x_7^k + x_5^k - x_2^k - x_4^k), & \frac{\partial g_{23}}{\partial x_5^k} &= \frac{1}{2}(x_4^k - x_5^k), \\ \frac{\partial^2 g_{ii}}{\partial (x_5^k)^2} &= \frac{\partial^2 g_{12}}{\partial (x_5^k)^2} = \frac{1}{2}, & \frac{\partial^2 g_{13}}{\partial (x_5^k)^2} &= \frac{\partial^2 g_{23}}{\partial (x_5^k)^2} = -\frac{1}{2}.\end{aligned}$$

Для вершины 7 получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial g_{11}}{\partial x_7^k} &= \frac{1}{2}(x_7^k + x_2^k - x_5^k - x_4^k), & \frac{\partial g_{12}}{\partial x_7^k} &= \frac{1}{2}(x_7^k - x_5^k), \\ \frac{\partial g_{22}}{\partial x_7^k} &= \frac{1}{2}(x_7^k + x_4^k - x_5^k - x_2^k), & \frac{\partial g_{13}}{\partial x_7^k} &= \frac{1}{2}(x_7^k - x_4^k), \\ \frac{\partial g_{33}}{\partial x_7^k} &= \frac{1}{2}(x_7^k + x_5^k - x_2^k - x_4^k), & \frac{\partial g_{23}}{\partial x_7^k} &= \frac{1}{2}(x_7^k - x_2^k), & \frac{\partial^2 g_{ij}}{\partial (x_7^k)^2} &= \frac{1}{2}.\end{aligned}$$

При дифференцировании знаменателя  $V$  применяем правило дифференцирования определителей. Для вершины 2 получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial V}{\partial x_2^1} &= \frac{1}{2}[x_4^2(x_7^3 - x_5^3) + x_5^2(x_4^3 - x_7^3) + x_7^2(x_5^3 - x_4^3)], \\ \frac{\partial V}{\partial x_2^2} &= \frac{1}{2}[x_4^3(x_7^1 - x_5^1) + x_5^3(x_4^1 - x_7^1) + x_7^3(x_5^1 - x_4^1)], \\ \frac{\partial V}{\partial x_2^3} &= \frac{1}{2}[x_4^1(x_7^2 - x_5^2) + x_5^1(x_4^2 - x_7^2) + x_7^1(x_5^2 - x_4^2)].\end{aligned}$$



Легко видеть, что все вторые и смешанные производные от  $V$  равны нулю.

Для вершины 4 получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial V}{\partial x_4^1} &= \frac{1}{2}[x_2^2(x_5^3 - x_7^3) + x_5^2(x_7^3 - x_2^3) + x_7^2(x_2^3 - x_5^3)], \\ \frac{\partial V}{\partial x_4^2} &= \frac{1}{2}[x_2^3(x_5^1 - x_7^1) + x_5^3(x_7^1 - x_2^1) + x_7^3(x_2^1 - x_5^1)], \\ \frac{\partial V}{\partial x_4^3} &= \frac{1}{2}[x_2^1(x_5^2 - x_7^2) + x_5^1(x_7^2 - x_2^2) + x_7^1(x_2^2 - x_5^2)].\end{aligned}$$

Для вершины 5 получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial V}{\partial x_5^1} &= \frac{1}{2}[x_2^2(x_7^3 - x_4^3) + x_4^2(x_2^3 - x_7^3) + x_7^2(x_4^3 - x_2^3)], \\ \frac{\partial V}{\partial x_5^2} &= \frac{1}{2}[x_2^3(x_7^1 - x_4^1) + x_4^3(x_2^1 - x_7^1) + x_7^3(x_4^1 - x_2^1)], \\ \frac{\partial V}{\partial x_5^3} &= \frac{1}{2}[x_2^1(x_7^2 - x_4^2) + x_4^1(x_2^2 - x_7^2) + x_7^1(x_4^2 - x_2^2)].\end{aligned}$$

Для вершины 7 получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial V}{\partial x_7^1} &= \frac{1}{2}[x_2^2(x_4^3 - x_5^3) + x_4^2(x_5^3 - x_2^3) + x_5^2(x_2^3 - x_4^3)], \\ \frac{\partial V}{\partial x_7^2} &= \frac{1}{2}[x_2^3(x_4^1 - x_5^1) + x_4^3(x_5^1 - x_2^1) + x_5^3(x_2^1 - x_4^1)], \\ \frac{\partial V}{\partial x_7^3} &= \frac{1}{2}[x_2^1(x_4^2 - x_5^2) + x_4^1(x_5^2 - x_2^2) + x_5^1(x_2^2 - x_4^2)].\end{aligned}$$

Для второго внутреннего базисного тетраэдра, который отображается в тетраэдр  $T_{1368}$  (см. рис. 1.2в), можно применять полученные формулы дифференцирования  $U$  и  $V$  при соответствующей замене номеров узлов.

Теперь, когда вычислена  $E$  и ее производные в вершинах 10 тетраэдров, можно формировать элементы системы уравнений квазиньютоновской процедуры (1.15). Пусть локальным номерам вершин ячейки  $1, 2, \dots, 8$  соответствуют глобальные номера узлов сетки  $n_1, n_2, \dots, n_8$ . Тогда значение  $E$  и ее производных в вершине 1 тетраэдра  $T_{1245}$  добавляются к  $\mathcal{D}^h$  и членам системы (1.15)

$$\mathcal{D}^h = \mathcal{D}^h + E, \quad [R_{x^i}]_{n_1} = [R_{x^i}]_{n_1} + E_{x^i}, \quad [R_{x^i x^j}]_{n_1} = [R_{x^i x^j}]_{n_1} + E_{x^i x^j}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Здесь используется запись, принятая в языках программирования. Она подразумевает, например, что новое значение  $\mathcal{D}^h$  стало равным  $\mathcal{D}^h + E$ . Значения, вычисленные в вершинах 2, 4 и 5 тетраэдра, добавляются к  $\mathcal{D}^h$  и соответствующим членам  $[R_{x^i}]_{n_2}, [R_{x^i x^j}]_{n_2}, [R_{x^i}]_{n_4}, [R_{x^i x^j}]_{n_4}, [R_{x^i}]_{n_5}, [R_{x^i x^j}]_{n_5}$ . Точно также поступаем со значениями  $E$  и ее производных, вычисленными в вершинах остальных 9 тетраэдров.

Метод непосредственно переносится на неструктурированные сетки. Нужно только задать соответствие между локальным номером вершины ячейки и глобальным номером узла сетки.

## 1.9 Барьерное свойство $\mathcal{D}^h$

Прежде чем переходить к рассмотрению барьерного свойства дискретного функционала (1.13), запишем подынтегральную функцию  $E$  в (1.7) в удобной для анализа форме. В силу инвариантности  $E$  относительно преобразований координат  $\mathbf{X}$ , в любой точке параметрической области  $\mathcal{P}$  можно выбрать систему координат, где матрица  $G$  является диагональной, т.е.

$$E = \frac{1}{3^{3/2}} \frac{[\text{tr}(G^{-1}g)]^{3/2}}{\sqrt{\det(G^{-1}g)}} = \frac{1}{3^{3/2}} \frac{(\tilde{\lambda}_i g_{ii})^{3/2}}{\sqrt{\det g} \sqrt{\tilde{\lambda}_1 \tilde{\lambda}_2 \tilde{\lambda}_3}}, \quad (1.17)$$

где  $\tilde{\lambda}_i$  – собственные числа матрицы  $G^{-1}$ .

Справедливо следующее утверждение, оформленное в виде теоремы [9, 96] (Азаренок, 2006):

**Теорема 1.9.1** *Функция  $\mathcal{D}^h$  имеет бесконечный барьер на границе множества невырожденных сеток, состоящих из 12-гранных ячеек первого или второго типа.*

**Доказательство.** Пусть некоторая 12-гранная ячейка, скажем первого типа (см. рис. 1.2б), вырождается. Следовательно, вырождается по крайней мере один из пяти составляющих ее тетраэдров. Это может

быть угловой тетраэдр, скажем  $T_{1245}$ , или внутренний тетраэдр  $T_{2457}$ . Рассмотрим аппроксимацию функции (1.17) на  $T_{1245}$  и  $T_{2457}$ . Пусть при вырождении объем тетраэдра стремится к нулю, оставаясь при этом положительным, т.е. якобиан линейного отображения  $\sqrt{\det g} \rightarrow 0$ . Для того чтобы  $\mathcal{D}^h$  не стремилась к бесконечности, необходимо, чтобы числитель выражения, аппроксимирующего (1.17), также стремился к нулю. Иными словами, для тетраэдра  $T_{1245}$  получаем

$$\tilde{\lambda}_1 g_{11} + \tilde{\lambda}_2 g_{22} + \tilde{\lambda}_3 g_{33} = \tilde{\lambda}_1 (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)^2 + \tilde{\lambda}_2 (\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_1)^2 + \tilde{\lambda}_3 (\mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_1)^2 \rightarrow 0,$$

(в силу инвариантности  $E$  относительно поворота осей координат, аналогичная аппроксимация используется и для любого из оставшихся 3 угловых тетраэдров ячейки), а для тетраэдра  $T_{2457}$  имеем

$$\tilde{\lambda}_1 (\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_4)^2 + \tilde{\lambda}_2 (\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_2)^2 + \tilde{\lambda}_3 (\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4)^2 \rightarrow 0.$$

Поскольку все  $\tilde{\lambda}_i > 0$ , то все вершины тетраэдра должны стягиваться в точку. Каждый из  $T_{1245}$  и  $T_{2457}$  имеет с остальными 4 тетраэдрами либо общее ребро либо грань. Следовательно, оставшиеся тетраэдры также вырождаются, и их объем стремится к 0. Рассуждая аналогичным образом, получаем, что для того чтобы  $\mathcal{D}^h$  не стремилась к бесконечности необходимо, чтобы вершины остальных 4 тетраэдров стягивались в точку. Таким образом, все 8 вершин ячейки должны стягиваться в точку. Перебирая последовательно все ячейки сетки, получим, что все ее узлы будут стягиваться в точку, а это противоречит условию расстановки узлов на границе области  $\partial\Omega$ . Для ячейки второго типа (см. рис. 1.2в) доказательство проводится схожим образом.  $\square$

Благодаря бесконечному барьеру на границе множества невырожденных сеток, можно подобрать такой шаг  $\tau$  в процедуре минимизации (1.15), чтобы сетка всегда оставалась невырожденной.

Барьерное свойство дискретного функционала в трехмерном случае использовалось в [44] (Иваненко, 1997), когда вместо трилинейного отображения куба в шестигранник берется набор из 24 линейных отображе-

ний других базисных тетраэдров в соответствующие тетраэдры из физической области (см. рис. 1.7).

### 1.10 Расстановка узлов на границе

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  $\partial\Omega$ . В [6](Азаренок, 2003) для двумерного случая был предложен метод расстановки узлов вдоль граничной кривой, в котором используется условная минимизация функционала (см. раздел 2.5). Он позволяет строить почти конформное отображение (конформное отображение с дополнительным параметром, так называемым конформным модулем) и соответствующие отображению сетки на плоскости. Следует отметить работу [123], где для построения двумерных сеток с подвижными узлами на границе области рассматривалась условная минимизация функционала энергии деформации "тела", заключенного в области. В [9, 96](Азаренок, 2006) подход из [6](Азаренок, 2003) был обобщен на трехмерный случай.

Для этого решается задача условной минимизации дискретного функционала при наличии ограничений типа равенств, задающих границу  $\partial\Omega$ . Минимизируется следующий дискретный функционал:

$$\mathcal{D}_1^h = \sum_{n=1}^{N_c} \sum_{m=1}^{10} \frac{1}{10} [E_m]_n + \sum_{\mathbf{r}_l \in \partial\Omega} \lambda_l Q(\mathbf{r}_l) = \mathcal{D}^h + \sum_{l \in \mathcal{L}} \lambda_l Q_l .$$

Здесь ограничения  $Q_l = Q(\mathbf{r}_l) = 0$  задают  $\partial\Omega$ ,  $\lambda_l$  – множители Лагранжа,  $\mathcal{L}$  – множество граничных узлов сетки. Поскольку предполагается, что функция  $Q(\mathbf{r})$  является дифференцируемой, очевидно, что  $\mathcal{D}_1^h$  сохраняет бесконечный барьер на границе множества невырожденных сеток, состоящих из 12-гранных ячеек.

Система алгебраических уравнений в  $n$ -м узле сетки, аналогичная

(1.14), теперь дополняется ограничениями типа равенств

$$R_{x^i} = \frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial x_n^i} + \lambda_n \frac{\partial Q_n}{\partial x_n^i} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad Q_n = 0; \quad (1.18)$$

здесь  $\lambda_n=0$  если номер узла  $n \notin \mathcal{L}$  и ограничения заданы только для граничных узлов  $n \in \mathcal{L}$ .

Рассмотрим метод минимизации дискретного функционала в предположении, что невырожденная сетка получена на  $l$ -м шаге итераций. Координаты  $n$ -го узла на  $l+1$ -м шаге получаются с использованием следующей квазиньютоновской процедуры

$$\begin{aligned} \tau R_{x^i} + \sum_{j=1}^3 R_{x^i x^j} ((x_n^j)^{l+1} - (x_n^j)^l) + \frac{\partial R_x^i}{\partial \lambda_n} (\lambda_n^{l+1} - \lambda_n^l) &= 0, \quad i=1, 2, 3, \\ \tau Q_n + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial Q_n}{\partial x_n^j} ((x_n^j)^{l+1} - (x_n^j)^l) &= 0. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Рассмотрим подробнее решение системы (1.19) для некоторых частных случаев задания границы области  $\partial\Omega$ . Для удобства будем использовать переменные  $x=x^1, y=x^2, z=x^3$ . Тогда (1.19) в новых обозначениях примет вид

$$\begin{aligned} \tau R_x + \frac{\partial R_x}{\partial x_n} (x_n^{l+1} - x_n^l) + \frac{\partial R_x}{\partial y_n} (y_n^{l+1} - y_n^l) + \frac{\partial R_x}{\partial z_n} (z_n^{l+1} - z_n^l) + \frac{\partial R_x}{\partial \lambda_n} (\lambda_n^{l+1} - \lambda_n^l) &= 0, \\ \tau R_y + \frac{\partial R_y}{\partial x_n} (x_n^{l+1} - x_n^l) + \frac{\partial R_y}{\partial y_n} (y_n^{l+1} - y_n^l) + \frac{\partial R_y}{\partial z_n} (z_n^{l+1} - z_n^l) + \frac{\partial R_y}{\partial \lambda_n} (\lambda_n^{l+1} - \lambda_n^l) &= 0, \\ \tau R_z + \frac{\partial R_z}{\partial x_n} (x_n^{l+1} - x_n^l) + \frac{\partial R_z}{\partial y_n} (y_n^{l+1} - y_n^l) + \frac{\partial R_z}{\partial z_n} (z_n^{l+1} - z_n^l) + \frac{\partial R_z}{\partial \lambda_n} (\lambda_n^{l+1} - \lambda_n^l) &= 0, \\ \tau Q_n + \frac{\partial Q_n}{\partial x_n} (x_n^{l+1} - x_n^l) + \frac{\partial Q_n}{\partial y_n} (y_n^{l+1} - y_n^l) + \frac{\partial Q_n}{\partial z_n} (z_n^{l+1} - z_n^l) &= 0, \end{aligned} \quad (1.20)$$

где, например,

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_x}{\partial x_n} &= \frac{\partial^2 \mathcal{D}^h}{\partial x_n^2} + \lambda_n \frac{\partial^2 Q_n}{\partial x_n^2}, \quad \frac{\partial R_x}{\partial y_n} = \frac{\partial^2 \mathcal{D}^h}{\partial x_n \partial y_n} + \lambda_n \frac{\partial^2 Q_n}{\partial x_n \partial y_n}, \\ \frac{\partial R_x}{\partial z_n} &= \frac{\partial^2 \mathcal{D}^h}{\partial x_n \partial z_n} + \lambda_n \frac{\partial^2 Q_n}{\partial x_n \partial z_n}, \quad \frac{\partial R_x}{\partial \lambda_n} = \frac{\partial Q_n}{\partial x_n}, \end{aligned}$$

и аналогично находятся производные от  $R_y$ ,  $R_z$ .

Выразив из 4-го уравнения системы (1.20) разность  $z_n^{l+1} - z_n^l$  и подставив ее в оставшиеся три, получим систему из трех уравнений

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_n^{l+1} - x_n^l \\ y_n^{l+1} - y_n^l \\ \lambda_n^{l+1} - \lambda_n^l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{14} \\ a_{24} \\ a_{34} \end{pmatrix}, \quad (1.21)$$

где

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{\partial R_x}{\partial x_n} - \alpha \frac{\partial R_x}{\partial z_n}, & a_{12} &= \frac{\partial R_x}{\partial y_n} - \beta \frac{\partial R_x}{\partial z_n}, & a_{13} &= \frac{\partial R_x}{\partial \lambda_n} = \frac{\partial Q_n}{\partial x_n}, \\ a_{21} &= \frac{\partial R_y}{\partial x_n} - \alpha \frac{\partial R_y}{\partial z_n}, & a_{22} &= \frac{\partial R_y}{\partial y_n} - \beta \frac{\partial R_y}{\partial z_n}, & a_{23} &= \frac{\partial R_y}{\partial \lambda_n} = \frac{\partial Q_n}{\partial y_n}, \\ a_{31} &= \frac{\partial R_z}{\partial x_n} - \alpha \frac{\partial R_z}{\partial z_n}, & a_{32} &= \frac{\partial R_z}{\partial y_n} - \beta \frac{\partial R_z}{\partial z_n}, & a_{33} &= \frac{\partial R_z}{\partial \lambda_n} = \frac{\partial Q_n}{\partial z_n}, \\ a_{14} &= \tau \left[ Q_n \frac{\partial R_x}{\partial z_n} \left( \frac{\partial Q_n}{\partial z_n} \right)^{-1} - R_x \right] = -\tau R_x, & a_{24} &= -\tau R_y, \\ a_{34} &= -\tau R_z, & \alpha &= \frac{\partial Q_n}{\partial x_n} \left( \frac{\partial Q_n}{\partial z_n} \right)^{-1}, & \beta &= \frac{\partial Q_n}{\partial y_n} \left( \frac{\partial Q_n}{\partial z_n} \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Из системы (1.21) определяются значения  $x_n^{l+1}$ ,  $y_n^{l+1}$ ,  $\lambda_n^{l+1}$ . Далее из третьего уравнения (1.20) находим  $z_n^{l+1}$ . Если  $Q$  разрешена относительно  $z$  в виде  $Q(x, y, z) = z - q_1(x, y) = 0$ , тогда

$$\frac{\partial Q_n}{\partial x_n} = -\frac{\partial q_{1n}}{\partial x_n}, \quad \frac{\partial Q_n}{\partial y_n} = -\frac{\partial q_{1n}}{\partial y_n}, \quad \frac{\partial Q_n}{\partial z_n} = 1$$

и расчетные формулы упрощаются. Здесь  $q_{1n} = q_1(x_n, y_n)$ .

Ограничения могут быть разрешены относительно  $y$  в виде  $Q = y - q_2(x, z) = 0$  и тогда

$$\frac{\partial Q_n}{\partial x_n} = -\frac{\partial q_{2n}}{\partial x_n}, \quad \frac{\partial Q_n}{\partial y_n} = 1, \quad \frac{\partial Q_n}{\partial z_n} = -\frac{\partial q_{2n}}{\partial z_n}.$$

В этом случае следует из последнего уравнения системы (1.20) выразить  $y_n^{l+1} - y_n^l$  и подставить в оставшиеся три. Получим систему аналогичную

(1.21) с новыми коэффициентами

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{\partial R_x}{\partial x_n} - \alpha \frac{\partial R_x}{\partial y_n}, & a_{12} &= \frac{\partial R_x}{\partial z_n} - \beta \frac{\partial R_x}{\partial y_n}, \\ a_{21} &= \frac{\partial R_y}{\partial x_n} - \alpha \frac{\partial R_y}{\partial y_n}, & a_{22} &= \frac{\partial R_y}{\partial z_n} - \beta \frac{\partial R_y}{\partial y_n}, \\ a_{31} &= \frac{\partial R_z}{\partial x_n} - \alpha \frac{\partial R_z}{\partial y_n}, & a_{32} &= \frac{\partial R_z}{\partial z_n} - \beta \frac{\partial R_z}{\partial y_n}, \\ \alpha &= -\frac{\partial q_{2n}}{\partial x_n}, & \beta &= -\frac{\partial q_{2n}}{\partial z_n}. \end{aligned}$$

Остальные коэффициенты не меняются. Теперь из системы определяют значения  $x_n^{l+1}$ ,  $z_n^{l+1}$ ,  $\lambda_n^{l+1}$ . Далее из второго уравнения (1.20) определяем  $y_n^{l+1}$ .

Ограничения могут быть разрешены относительно  $x$  в виде  $Q = x - q_3(y, z) = 0$  и тогда

$$\frac{\partial Q_n}{\partial x_n} = 1, \quad \frac{\partial Q_n}{\partial y_n} = -\frac{\partial q_{3n}}{\partial y_n}, \quad \frac{\partial Q_n}{\partial z_n} = -\frac{\partial q_{3n}}{\partial z_n}.$$

В этом случае следует из последнего уравнения системы (1.20) выразить  $x_n^{l+1} - x_n^l$  и подставить в оставшиеся три. Получим систему аналогичную (1.21) с новыми коэффициентами

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{\partial R_x}{\partial y_n} - \alpha \frac{\partial R_x}{\partial x_n}, & a_{12} &= \frac{\partial R_x}{\partial z_n} - \beta \frac{\partial R_x}{\partial x_n}, \\ a_{21} &= \frac{\partial R_y}{\partial y_n} - \alpha \frac{\partial R_y}{\partial x_n}, & a_{22} &= \frac{\partial R_y}{\partial z_n} - \beta \frac{\partial R_y}{\partial x_n}, \\ a_{31} &= \frac{\partial R_z}{\partial y_n} - \alpha \frac{\partial R_z}{\partial x_n}, & a_{32} &= \frac{\partial R_z}{\partial z_n} - \beta \frac{\partial R_z}{\partial x_n}, \\ \alpha &= -\frac{\partial q_{3n}}{\partial y_n}, & \beta &= -\frac{\partial q_{3n}}{\partial z_n}. \end{aligned}$$

Остальные коэффициенты не меняются. Из системы определяются значения  $y_n^{l+1}$ ,  $z_n^{l+1}$ ,  $\lambda_n^{l+1}$ . Далее из первого уравнения (1.20) определяем  $x_n^{l+1}$ .

Представленные выше три явные формы задания поверхности  $Q$  могут заменять одна другую. На участках границы, где касательная плоскость к поверхности области почти параллельна плоскости  $x, y$ , следует использовать представление  $z = q_1(x, y)$ . Там, где касательная плоскость к поверхности области почти параллельна плоскости  $x, z$ , следует

использовать представление  $y=q_2(x, z)$ . И, наконец, в местах, где касательная плоскость к поверхности области почти параллельна плоскости  $y, z$ , следует использовать представление  $x=q_3(y, z)$ . Если необходимо перемещать узлы сетки вдоль ребра области, образованного пересечением граничных поверхностей, скажем  $q_1(x, y)$  и  $q_2(x, z)$ , то после определения  $x_n^{l+1}$  значение  $y_n^{l+1}$  находится из уравнения этой линии  $q_1(x, y)=q_2(x, z)$ .

Если граница  $\partial\Omega$  задана параметрически  $\mathbf{r}(u^1, u^2)$ , то для перераспределения граничных узлов можно использовать процедуру безусловной минимизации в параметрической форме [9, 96](Азаренок, 2006)

$$\tau R_{u^i} + \sum_{j=1}^2 R_{u^i u^j} ((u_n^j)^{l+1} - (u_n^j)^l) = 0, \quad i = 1, 2,$$

где

$$R_{u^i} = \frac{\partial R}{\partial x_n^k} \frac{\partial x_n^k}{\partial u_n^i}, \quad R_{u^i u^j} = \frac{\partial^2 R}{\partial x_n^k \partial x_n^s} \frac{\partial x_n^s}{\partial u_n^j} \frac{\partial x_n^k}{\partial u_n^i} + \frac{\partial R}{\partial x_n^k} \frac{\partial^2 x_n^k}{\partial u_n^j \partial u_n^i}, \quad k, s=1, 2, 3.$$

Эта процедура применяется и в том случае, когда граница области задана множеством опорных точек.

### 1.11 Сгущение и ортогонализация сетки вблизи границы

Иногда необходимо строить сетку таким образом, чтобы координатные линии подходили к границе области ортогонально. Это можно осуществить специальным заданием метрического тензора  $G_{ij}$ , см. [9, 96](Азаренок, 2006). Задача состоит в следующем. Необходимо, отходя от граничной поверхности вглубь области  $\Omega$ , построить несколько слоев ячеек с заданными координатами узлов, исходя из условия ортогональности координатных линий и, если необходимо, сгущения сетки к границе  $\partial\Omega$ . Построенные приграничные слои ячеек сетки задают метрический тензор  $g_{ij}$  и, следовательно, метрический тензор  $G_{ij}=g_{ij}$ . Затем следуют переходные слои ячеек, где метрический тензор  $G_{ij}$  трансформируется от заданного в приграничном слое до единичного тензора в последнем



слое, что отвечает получению квазиравномерной сетки внутри области  $\Omega$ .

Ортогональную сетку вблизи границы  $\partial\Omega$  будем строить маршевым способом. Для определенности считаем, что  $\partial\Omega$  соответствует сеточной поверхности  $k=1$ . Пусть на части  $\partial\Omega$ , заданной в виде  $\mathbf{r}=\mathbf{r}(\xi^1, \xi^2)$ , построена сетка, составленная из четырехугольных ячеек. Для построения сеточной поверхности  $k=2$  необходимо знать направление внутренней нормали в узле  $i, j, 1$  (см. рис.1.9). Единичный нормальный вектор на поверхности  $k=1$  определяется следующим образом:

$$\mathbf{n}_{i,j,1} = \frac{\mathbf{r}_{\xi^1} \times \mathbf{r}_{\xi^2}}{|\mathbf{r}_{\xi^1} \times \mathbf{r}_{\xi^2}|}.$$

Здесь  $\mathbf{r}_{\xi^1}, \mathbf{r}_{\xi^2}$ , касательные векторы к поверхности вдоль линий  $\xi^1$  и  $\xi^2$  соответственно, находятся с использованием разностных соотношений для производных (шаг  $\Delta\xi^i=1, i=1, 2$ )

$$\mathbf{r}_{\xi^1} = 0.5(\mathbf{r}_{i+1,j,1} - \mathbf{r}_{i-1,j,1}) , \quad \mathbf{r}_{\xi^2} = 0.5(\mathbf{r}_{i,j+1,1} - \mathbf{r}_{i,j-1,1}) .$$

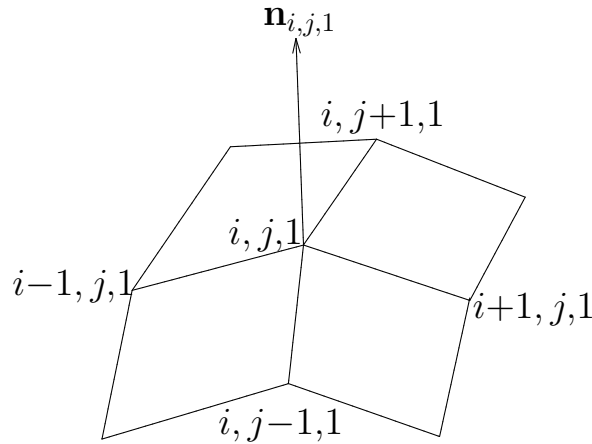


Рис. 1.9. Внутренняя нормаль к  $\partial\Omega$ .

Задав расстояние между узлами  $\Delta l$ , находим координаты узла в следующей координатной поверхности

$$\mathbf{r}_{i,j,2} = \mathbf{r}_{i,j,1} + \mathbf{n}_{i,j,1} \Delta l . \quad (1.22)$$

Определив координаты всех узлов сеточной поверхности  $k=2$ , находим метрический тензор  $G_{ij}$  в приповерхностном слое ячеек. Двигаясь от поверхности слоем за слой, меняем параметр  $\Delta l$  от некоторого начального малого значения у границы до заданного в  $k_o$ -м слое ячеек по полиномиальному закону (как правило, достаточно использовать квадратичную зависимость), для того чтобы получить сгущение сеточных поверхностей к границе.

Далее за несколько переходных слоев, скажем  $k_{\text{пер}}$ , необходимо метрический тензор  $G_{ij}$  привести к единичному, поскольку внутри области  $\Omega$ , вдали от границы, как правило, нужна квазиравномерная сетка, задаваемая кубическими ячейками в пространстве  $X^1, X^2, X^3$ . Для этого следует трансформировать гексаэдральную ячейку из последнего приграничного слоя ячеек  $k_o$  в единичный куб с ребрами, направленными вдоль координатных осей. Совместим вершину 1 куба с вершиной 1 линейчатой ячейки (см. рис. 1.10). Координаты остальных семи вершин ячейки переходят в соответствующие вершины куба с использованием линейной интерполяции за  $k_{\text{пер}}$  слоев

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i^{\Gamma} + \frac{k - k_o}{k_{\text{пер}}}(\mathbf{r}_i^{\text{K}} - \mathbf{r}_i^{\Gamma}), \quad i=2, \dots, \quad k=k_o+1, \dots, k_o+k_{\text{пер}} \quad (1.23)$$

где  $\mathbf{r}_i^{\Gamma}, \mathbf{r}_i^{\text{K}}$  – координаты  $i$ -й вершины гексаэдра и куба соответственно. Отметим, что благодаря инвариантности функционала (1.7) нет необходимости вращать куб относительно исходной линейчатой ячейки и растягивать его ребра.

Если при переходе от  $k_o$ -й ячейки приграничного слоя к первой ячейке переходного слоя координатные линии резко меняют угол, то можно сделать этот переход плавным. В приграничных слоях ячеек направление координатной линии (т.е. компоненты задающего направление единичного вектора) следует плавно (линейно) менять от ортогонального к границе в примыкающей к границе ячейке до заданного направления в  $k_o$ -й ячейке. Иногда это может быть направление соответствующего ребра в первой ячейке переходного слоя. Такой прием следует применять

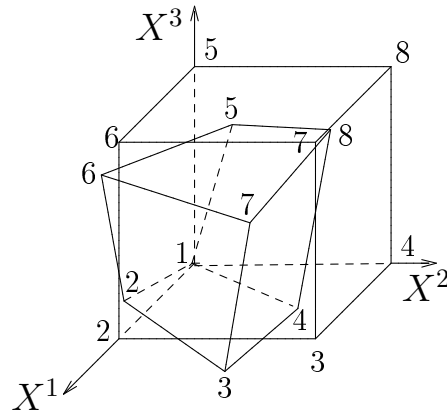


Рис. 1.10. Гексаэдральная ячейка из последнего приграничного слоя ячеек  $k_o$  трансформируется в единичный куб за  $k_{\text{пер}}$  слоев.

и в областях негладкости границы (резких изломов, углов и т.п.), где ортогональная сетка в принципе не может быть построена.

Очевидно, что здесь используется вариационная постановка 1.2.2, поскольку, начиная с переходного слоя ячеек, для задания метрического тензора  $G_{ij}$  применяется отображение только кубической ячейки из области  $\mathcal{P}$  в шестигранную ячейку из пространства  $X^1, X^2, X^3$  безотносительно расположения ячеек в пространстве  $X^1, X^2, X^3$  относительно друг друга.

Заметим, что здесь могут возникнуть трудности не встречавшиеся в двумерном случае [46] (Иваненко, 2000). 12-гранные ячейки в приграничном слое в пространстве  $X^1, X^2, X^3$ , задающие метрический тензор  $G_{ij}$ , могут оказаться вырожденными. Иными словами, матрица  $G$  уже не является положительно определенной. Это, в свою очередь, приведет к вырождению соответствующих ячеек в физической области. В разделе 1.13 приведен пример построения ортогональной у границы сетки, для которой в некоторых приграничных 12-гранных ячейках один из внутренних тетраэдров  $T_{2457}$  или  $T_{1368}$  вырожден. Чтобы избежать вырождения ячеек, функционал (1.7) аппроксимируется только на восьми угловых тетраэдрах, что, как указывалось в разделе 1.5 (см. пример перекрученной ячейки на рис. 1.4), не гарантирует невырожденности ячейки. Один из выходов состоит в отказе от ортогонализации сетки вблизи границы с

сохранением только сгущения. В этом случае в пространстве  $X^1, X^2, X^3$  строится прямоугольная сетка с малым размером ребра приграничных ячеек вдоль нормального направления к границе. Другой путь – аппроксимация функционала на восьми базисных тетраэдрах около сильно искривленной границы и на десяти тетраэдрах в остальной области. И наконец, можно увеличить число граничных узлов в окрестности сильного изгиба границы, и тогда ячейки не будут сильно перекашиваться и вырождаться.

### 1.12 Построение начальной невырожденной сетки

В разделе 1.7 отмечалось, что итерационная процедура (1.15) минимизации разностной функции  $\mathcal{D}^h$  используется в предположении, что начальная сетка является невырожденной. В областях со сложной геометрией построение начальной невырожденной сетки представляет отдельную задачу. Существует несколько способов построения невырожденной начальной сетки, см., например, [150](Jaquotte, 1987)), [44](Иваненко, 1997), [159](Knupp, 2001), [139](Garimella и др., 2004). Идея заключается в том, что в вырожденных или невыпуклых четырехугольных ячейках в двумерном случае и в вырожденных ячейках в трехмерном случае функционал штрафует. Например, в [44](Иваненко, 1997) для вырожденной или невыпуклой четырехугольной ячейки, где для одного или нескольких треугольников, на которые разбивается четырехугольник, якобиан отображения  $J$  отрицателен, значение  $J$  заменяется на достаточно малую положительную величину. И поскольку  $J$  стоит в знаменателе подынтегрального выражения, значение функционала в таких ячейках резко возрастает. В двумерном случае этот подход работает эффективно. Однако, трехмерный аналог метода из [44](Иваненко, 1997) не позволяет получать невырожденную сетку даже в кубической области с первоначально “испорченной” (т.е. вырожденной) сеткой. В [26](Гаранжа, Капорин, 1999) для двумерного случая было предложено использовать регуляризованный функционал вместо (1.5) с целью гладкого прохожде-

ния через бесконечный барьер при исправлении формы ячеек в ситуации, если начальное приближение не принадлежит допустимому множеству невырожденных сеток. Регуляризованный функционал для трехмерного случая рассматривался, например, в [9, 15, 96](Азаренок, 2006, 2008). Он обеспечивает довольно быстрое достижение допустимого множества сеток. В нем вместо якобиана  $J$  в знаменателе подынтегрального выражения в функционале (1.7) используется выражение

$$J_\varepsilon = 0.5J + 0.5\sqrt{J^2 + \varepsilon^2}, \quad (1.24)$$

где  $\varepsilon > 0$  – малая величина. При дискретизации, в качестве  $\varepsilon$  можно взять

$$\varepsilon = \max(\max |V_{neg}|, \delta),$$

где  $V_{neg}$  – отрицательный объем тетраэдра, и проверяется все множество вырожденных тетраэдров,  $\delta = 10^{-10} - 10^{-9}$  задает нижнюю границу для  $\varepsilon$ , чтобы избежать появления очень больших чисел в расчетах. Дискретный регуляризованный функционал в допустимой области близок к (1.13), является бесконечно дифференцируемой функцией своих аргументов и по мере удаления от допустимого множества стремится к  $+\infty$ . Добавим, что получение невырожденной сетки необходимо проводить задавая единичный метрический тензор  $G_{ij}$ . И только после достижения допустимого множества можно использовать метрический тензор  $G_{ij}$  общего вида.

### 1.13 Примеры построения сеток

**1.13.1 Область в форме всплеска.** В пространстве  $x, y, z$  строится сетка, состоящая из  $21 \times 21 \times 21$  узлов, в области, которая определяется следующим образом:  $-1 \leq x, y \leq 1$ , снизу ограничена плоскостью  $z = -0.5$ , сверху поверхностью

$$z(x, y) = \begin{cases} 0, & \text{если } f \leq 0 \text{ или } \gamma > \pi \\ f, & \text{иначе} \end{cases},$$

где  $f = 1 + \cos \gamma$ ,  $\gamma = \alpha^{3/2} \sqrt{0.5x^2 + y^2}$ ,  $\alpha = 3$ .

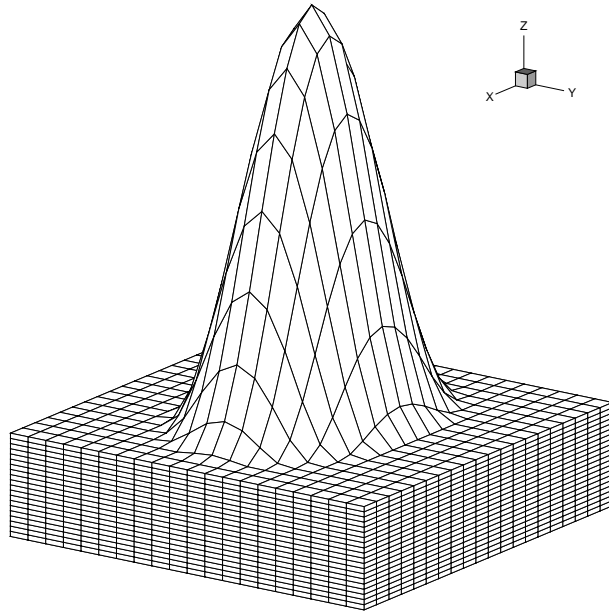


Рис. 1.11. Область в форме всплеска.

Начальная сетка генерируется с использованием трансфинитной интерполяции, см., например, [157](Knupp, Steinberg, 1993) с равномерным распределением узлов по границе области (см. рис. 1.11). Поверхность сетки  $i=11$  в плоскости симметрии  $x=0$  показана на рис. 1.12. На следующих рисунках представлена эта же поверхность сетки. Квазиравномерная сетка, построенная с использованием единичного метрического тензора  $G_{ij}$ , показана на рис. 1.13. Здесь значение  $\mathcal{D}_{min}^h = 2.25$ . Если посчитать метрический тензор  $g_{ij}$  и задать  $G_{ij} = g_{ij}$ , минимизация  $\mathcal{D}^h$  даст точно такую сетку, но в этом случае дискретный функционал достигает своего абсолютного минимума,  $\mathcal{D}_{min}^h = 1$ . Следующий расчет проводился при сгущении сетки к верхней границе области (см. сетку и ее фрагмент на рис. 1.14). В канонической области задавалась прямоугольная сетка со сгущением к верхней границе по квадратичному закону. За десять слоев размер ячейки в направлении  $X^3$  менялся от 0.01 у границы до 1 в глубине области, где ячейки сетки в пространстве  $X^1, X^2, X^3$  единичные кубы, т.е.  $G_{ij}$  – единичный метрический тензор. Минимум функционала  $\mathcal{D}_{min}^h = 2.83$ . Далее использовалась процедура условной минимизации функционала (1.19) с целью движения узлов по граничным

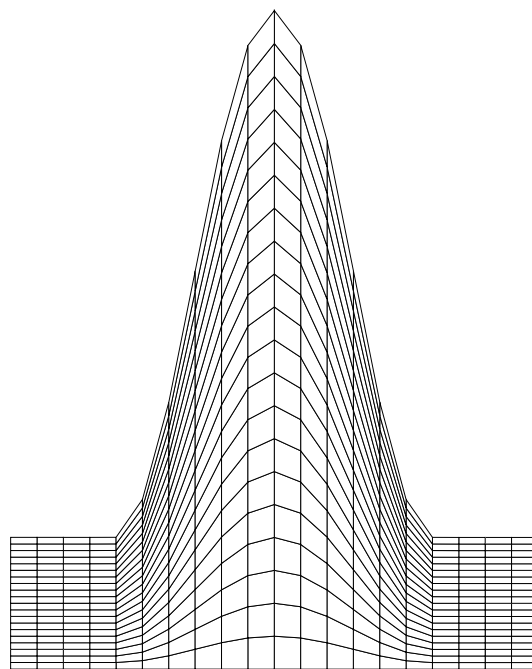


Рис. 1.12. Начальная сетка, полученная с помощью трансфинитной интерполяции. Поверхность  $i=11$ .

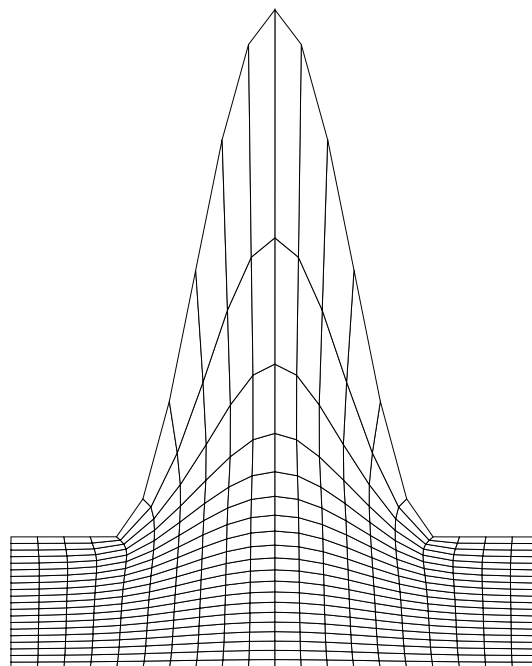


Рис. 1.13. Квазиравномерная сетка, построенная с помощью минимизации функционала  $\mathcal{D}$ , когда  $G_{ij}$  единичный тензор.

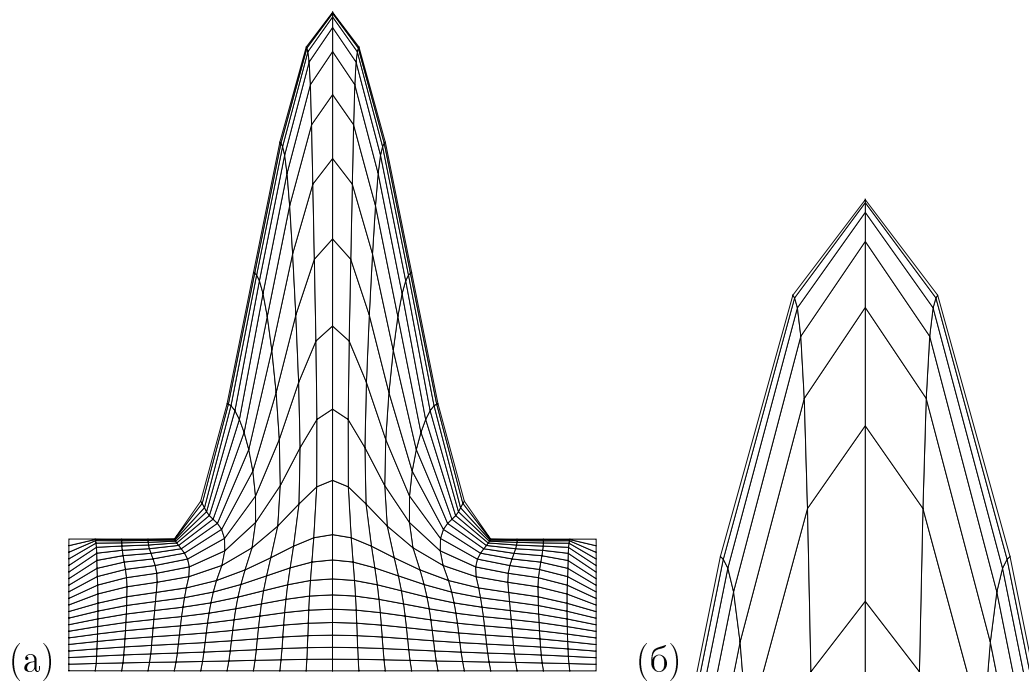


Рис. 1.14. Сгущение сетки к верхней границе области; сетка (а) и ее фрагмент (б).

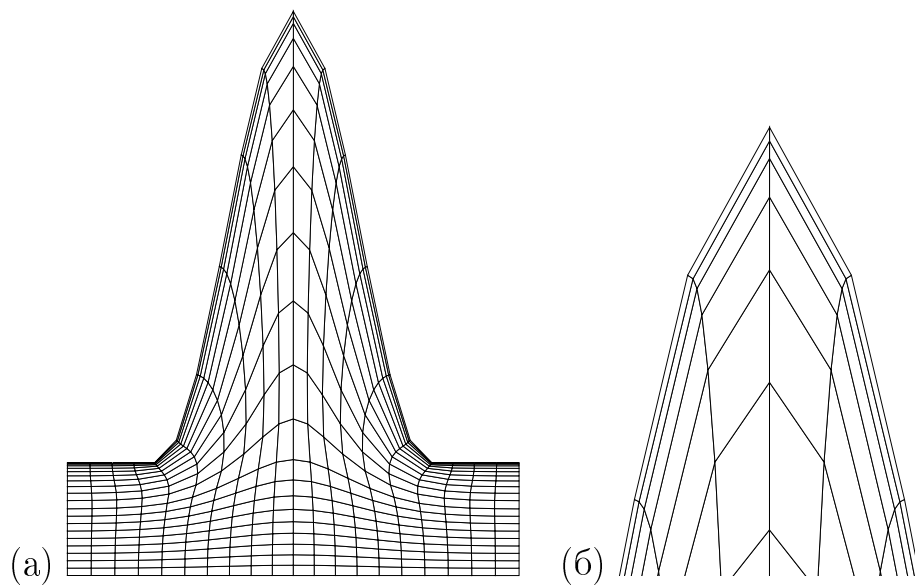


Рис. 1.15. Движение узлов по граничным поверхностям и ребрам.

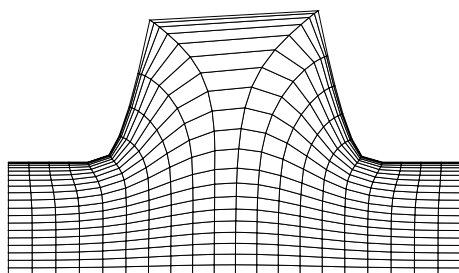


Рис. 1.16. Сетка после большого числа итераций.



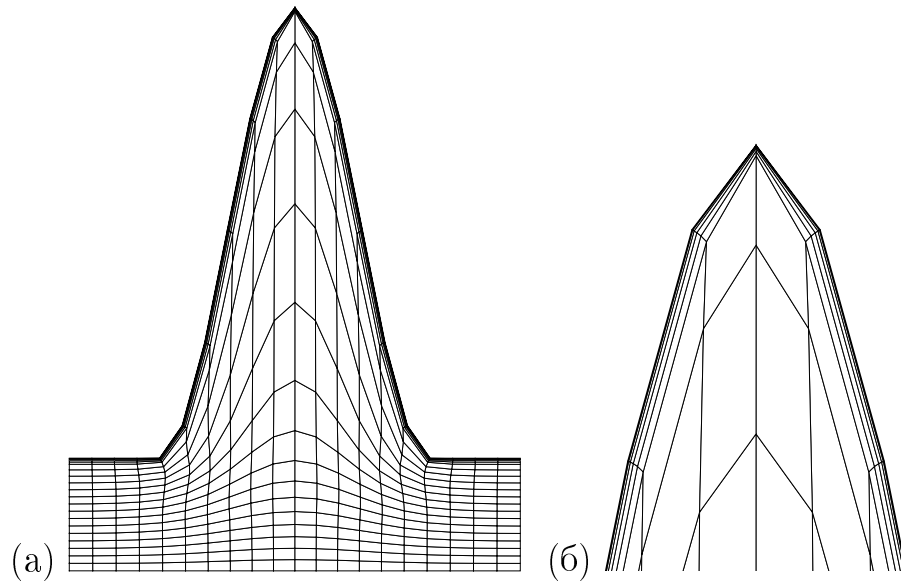


Рис. 1.17. Сгущение и ортогонализация сетки.

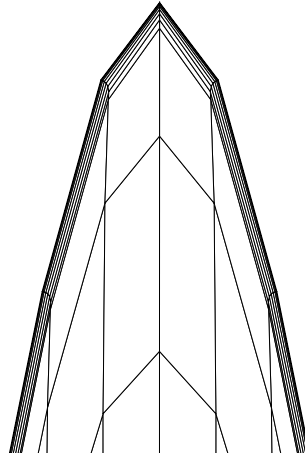


Рис. 1.18. Сглаживание изгиба координатных линий.

поверхностям и ребрам (см. рис. 1.15) при задании такого же метрического тензора  $G_{ij}$  как и в предыдущем расчете. Здесь значение функционала  $\mathcal{D}^h=2.17$  меньше чем в предыдущем случае. Отметим, что если проводить достаточно долго итерационный процесс (1.19), то в некоторый момент из-за ошибок округления симметрия задачи нарушается и узлы на верхней границе начинают разбегаться в стороны от вершины синусоиды  $z(0,0)=2$ , поскольку это гораздо “выгоднее” функционалу, значение которого для сетки, изображенной на рис. 1.16, равно  $\mathcal{D}^h=1.67$ . Здесь проявляется такое же поведение координатных поверх-

ностей в окрестности угла (пики синусоиды) как и в двумерном случае при построении конформных отображений. В [60](Прокопов, 1998), на модельном примере конформного отображения, было показано, что в окрестности вогнутых участков границы линии сетки притягиваются к ней, а в окрестности выпуклых участков линии сетки отталкиваются от границы. Как отмечалось в разделе 1.10, в двумерном случае использование условной минимизации обеспечивает построение конформного отображения [6](Азаренок, 2003). Итак, процедуру перемещения граничных узлов следует использовать весьма осторожно. Не всегда следует доводить процесс минимизации до сходимости. Для изменения положения граничных узлов иногда достаточно осуществить лишь несколько десятков итераций минимизационной процедуры, а затем положение этих узлов фиксировать. Нежелательное разбегание узлов, изображенное на рис. 1.16, можно устранить назначением метрического тензора  $G_{ij}$ . Как отмечалось в разделе 1.3, если положить  $G_{ij} \equiv g_{ij}$ , где тензор  $g_{ij}$  взят с предыдущей стадии расчетов, то сетка не меняется. Затем следует подправлять  $G_{ij}$  с целью корректировки формы ячеек сетки. Например, для двумерных расчетов в [61,62](Прокопов, 2001,2005) предлагается использовать корректирующие функционалы. Однако, следует отметить, что корректирующие функционалы могут утратить свойство инвариантности относительно указанных в разделе 1.2 преобразований координат.

И наконец в случае, представленном на рис. 1.17а,б, строится сетка со сгущением координатных поверхностей и ортогонализацией координатных линий  $\xi^3$  к верхней границе. Область, где линии сетки ортогональны границе, состоит из пяти слоев ячеек. Отношение параметров  $\Delta l$  в (1.22) для ячеек первого слоя у верхней границы области и пятого слоя равно 0.1 и для ячеек пятого слоя  $\Delta l = 0.01$ . Далее за десять переходных слоев вглубь области проводится трансформация метрического тензора  $G_{ij}$  к единичному согласно (1.23). Здесь включено движение узлов по всем границам и ребрам области за исключением верхней границы, поверхности  $k=21$ . Важно отметить следующее. У некоторых 12-гранных ячеек пяти

приграничных слоев сетки один из двух внутренних тетраэдров  $T_{2457}$  или  $T_{1368}$  (см. рис. 1.2б,в) вырожден. Поэтому аппроксимация функционала проводится только на восьми угловых тетраэдрах. Чтобы избежать вырождения внутренних тетраэдров, можно увеличить число узлов сетки на верхней границе в окрестности ее сильного изгиба, и тогда ячейки не будут слишком перекрученными. Минимум функционала для построенной сетки равен  $\mathcal{D}_{min}^h = 1.58$ . На ее фрагменте (см. рис. 1.17б) видно, что координатные линии резко меняют угол при переходе из последнего приграничного слоя ячеек в переходный слой. Можно сделать этот переход плавным (см. рис. 1.18). Здесь в первых трех слоях координатные линии ортогональны границе (более точно координатным поверхностям), затем с четвертого по седьмой слою направление координатных линий линейно меняется до направления соответствующих ребер ячеек в первом переходном слое. Всего 8 переходных слоев ячеек. Для этой сетки  $\mathcal{D}_{min}^h = 1.44$ .

Значение  $\mathcal{D}_{min}^h$  для квазиравномерной сетки (рис. 1.13) больше чем для сетки с ортогонализацией у границы. Во втором случае в приграничных слоях ячеек значение подынтегральной функции близко к минимуму, т.е. единице, между тем, в случае единичного метрического тензора  $G_{ij}$  форма ячеек сетки около верхней границы области далека от кубической, на которой  $\mathcal{D}_{min}^h$  достигает абсолютного минимума.

Во всех случаях проверка гексаэдральных ячеек построенной сетки показала, что они являются невырожденными. Для этого используется описанный в разделе 1.5 алгоритм проверки.

**1.13.2 Межлопаточный канал турбины.** Строится сетка  $81 \times 41 \times 31$  в межлопаточном канале турбины [11](Азаренок, 2006) (см. подробное описание области в [52](Котеров, 2005)). Координаты граничных узлов были любезно предоставлены В.Н. Котеровым. Первоначально генерируется квазиравномерная сетка, когда  $G_{ij}$  суть единичный тензор (см. рис. 1.19а). В дальнейшем узлы этой сетки на поверхности области

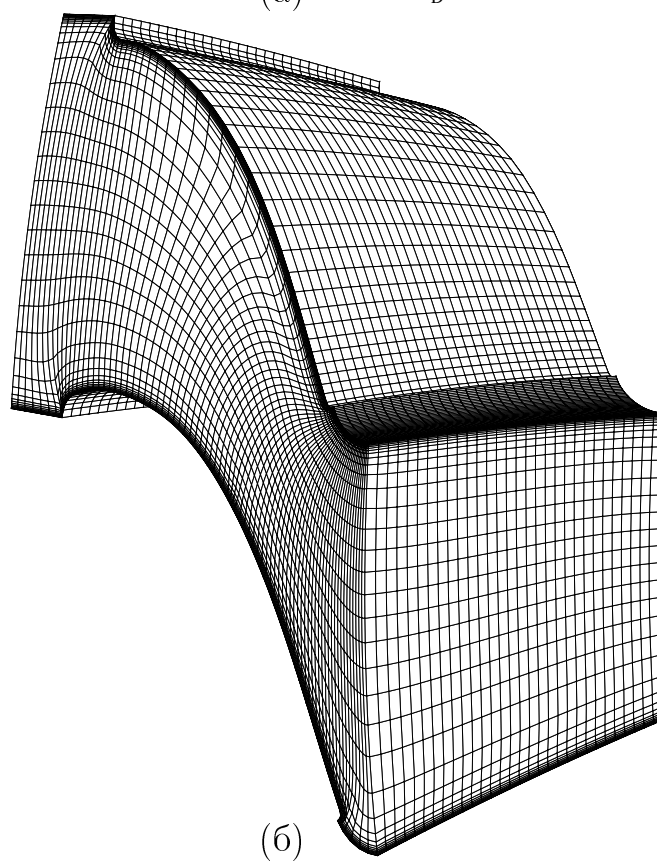
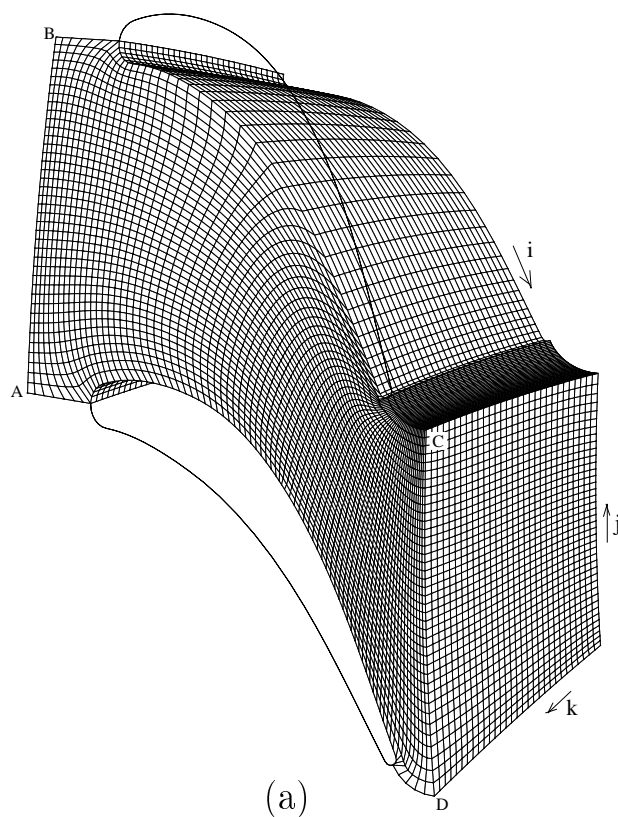


Рис. 1.19. Квазиравномерная сетка  $81 \times 41 \times 31$  (а); ортогонализация и сгущение сетки к лопаткам турбины (б).

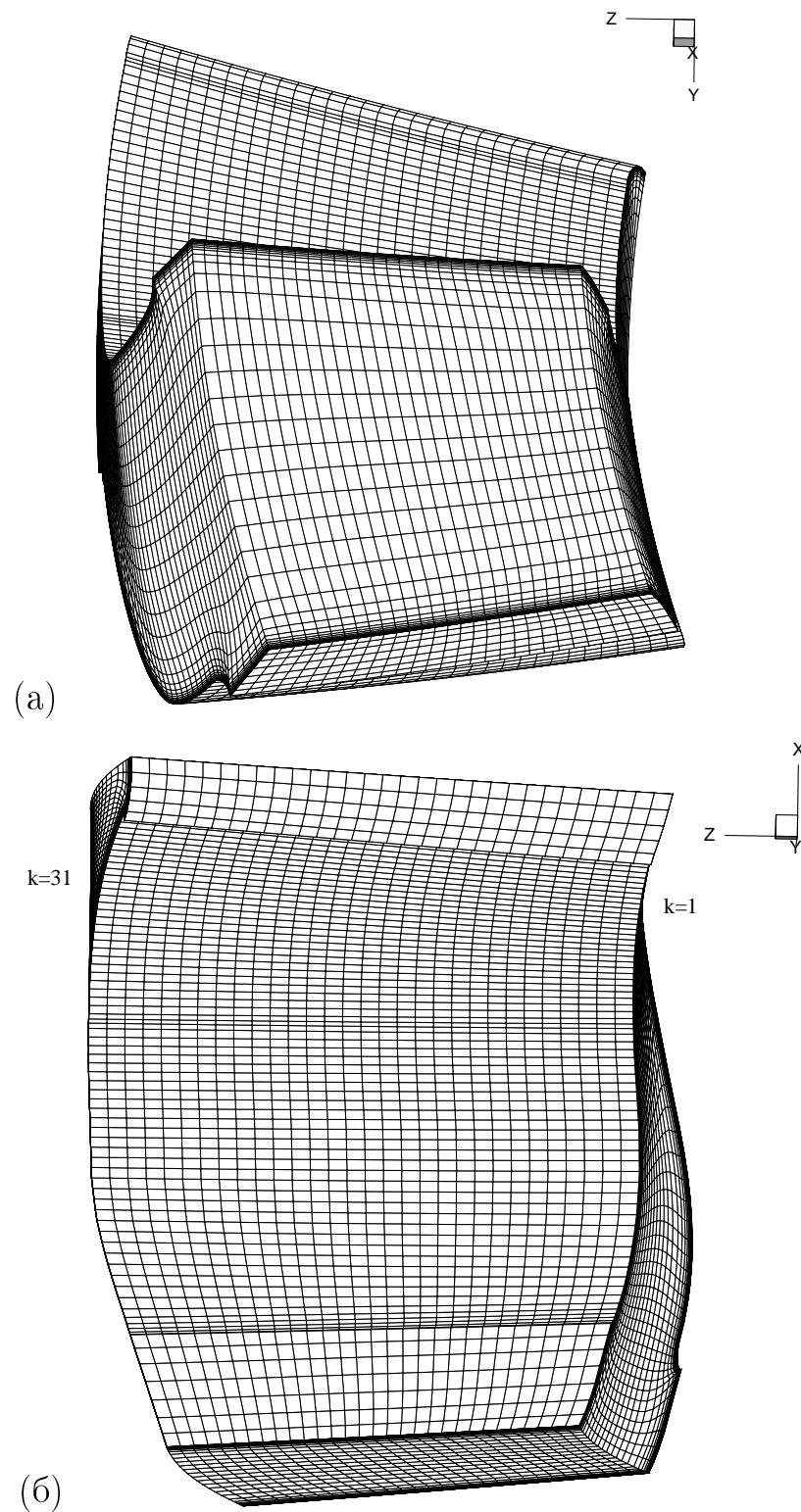


Рис. 1.20. Два вида сетки (а) и (б).

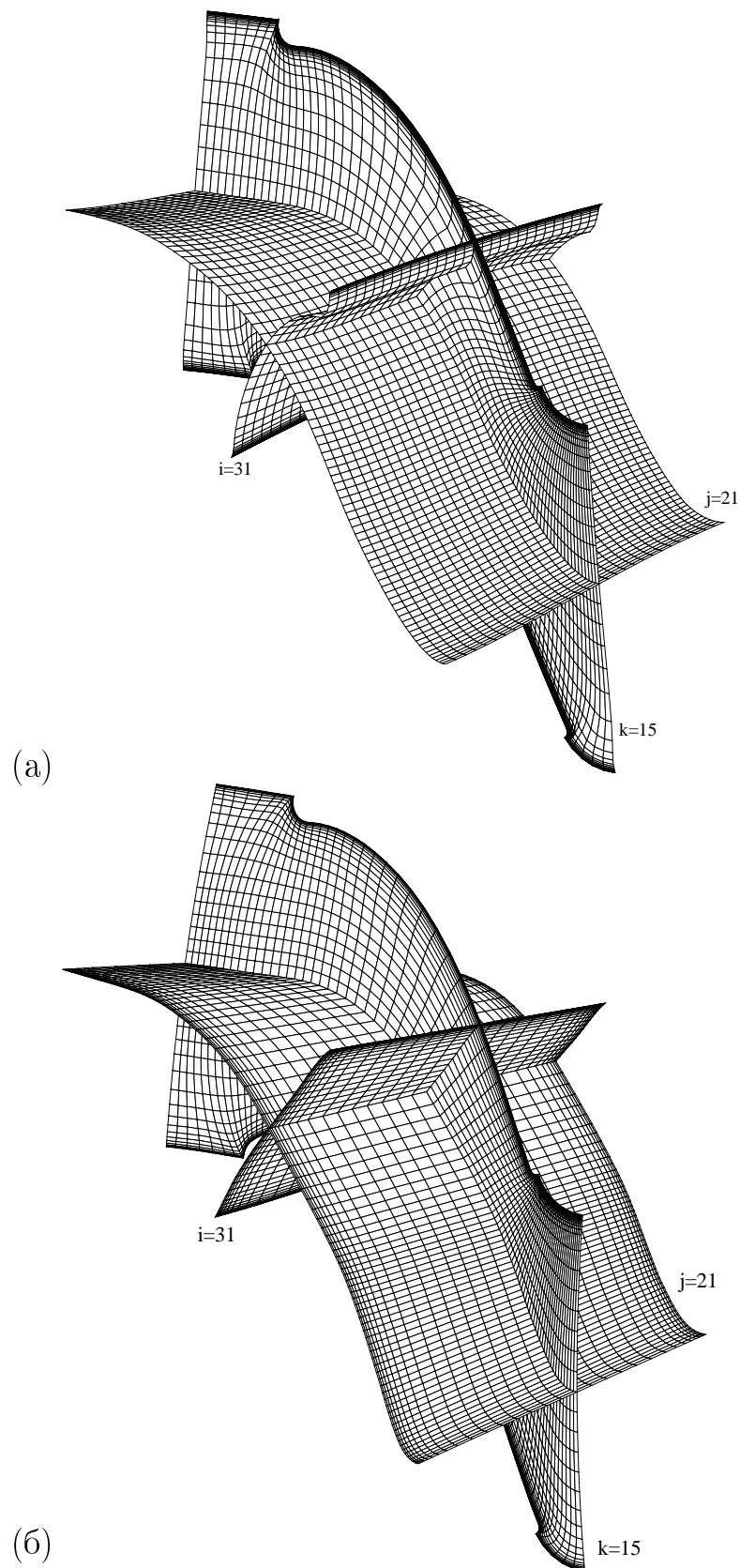


Рис. 1.21. Координатные поверхности внутри области для сетки, построенной предложенным методом (а) и с помощью минимизации двумерного функционала (б) из [52](Котеров, 2005).

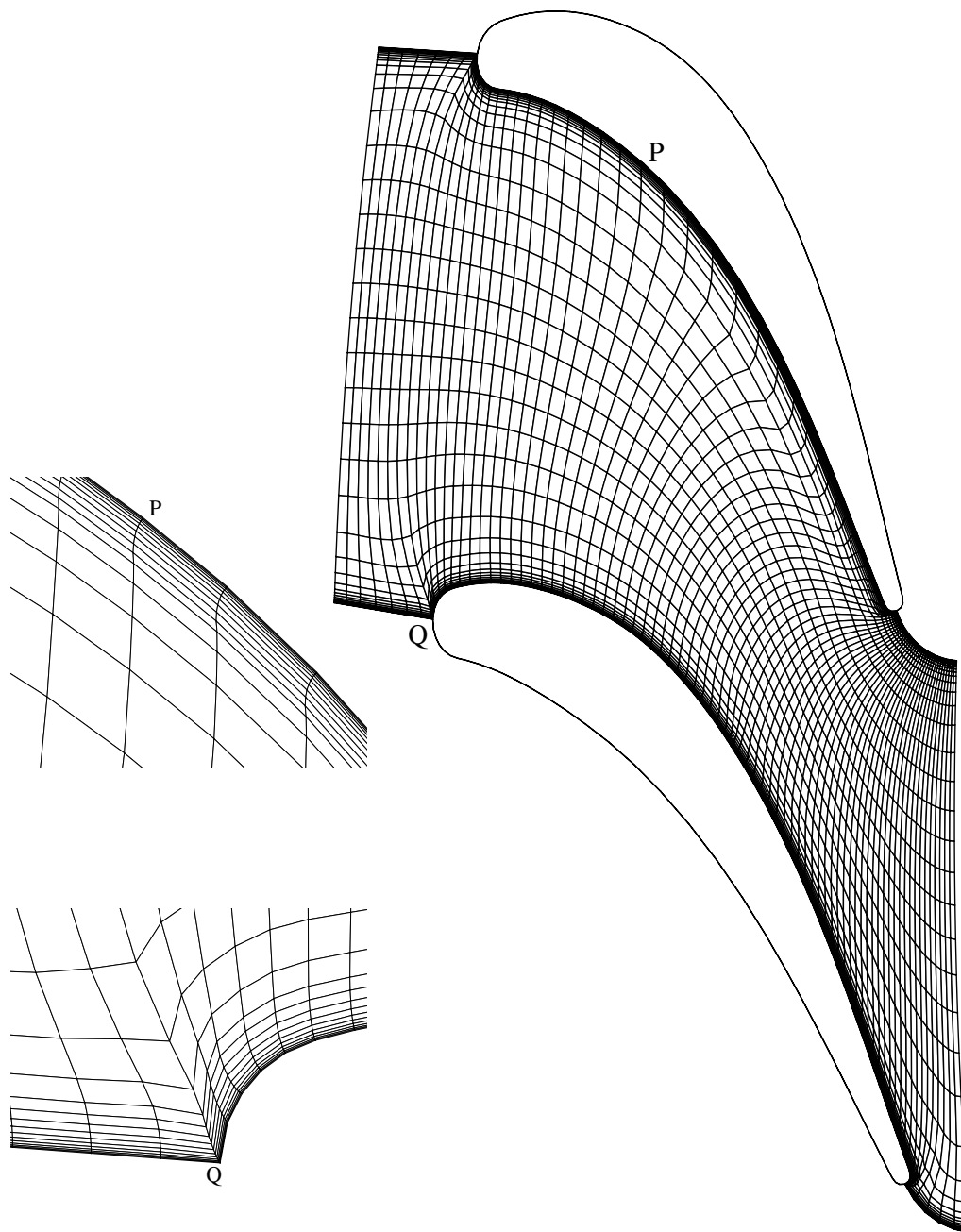


Рис. 1.22. Координатная поверхность  $k=31$  и два фрагмента сетки в окрестности точек  $P$  и  $Q$ .

используются в качестве опорных точек. Сетка со сгущением координатных поверхностей к лопаткам и ортогонализацией координатных линий в окрестности поверхности лопаток представлена на рис. 1.19б, 1.21а. Два вида сетки, представленные на рис. 1.20, позволяют увидеть, что область имеет довольно сложные искривленные границы, задаваемые координатными поверхностями сетки  $k=1, 31$ . Используется движение узлов по четырем граничным поверхностям  $i=1, 81$ ,  $k=1, 31$  и четырем ребрам области. Граница физической области суть объединение линейчатых поверхностей, задаваемых множеством опорных точек. Каждая линейчатая поверхность определена четырьмя точками в пространстве. По этим поверхностям осуществляется движение граничных узлов. Узлы, лежащие на поверхностях  $j=1, 41$  (они содержат поверхности лопаток), фиксированы. Функционал аппроксимируется на всех десяти базисных тетраэдрах. По координатному направлению  $j$  сверху и снизу задано десять приграничных слоев ячеек с изменением “высоты” ячейки по квадратичному закону и пять переходных слоев ячеек. Отношение параметров  $\Delta l$  для ячеек первого и десятого приграничных слоев равно 0.1. Этого достаточно для получения приблизительно такого же сгущения сетки как и в [52](Котеров, 2005) (см. рис. 1.21б), но при необходимости это отношение можно уменьшить. В [52](Котеров, 2005) сетка строилась с использованием двумерного функционала из [46](Иваненко, 2000) в каждой радиальной плоскости при условии сильного сгущения сеточных линий к поверхностям лопатки.

На рис. 1.21б в радиальной плоскости расположена поверхность  $k=15$ . Из сравнения двух сеток на рис. 1.21 можно увидеть, что в трехмерном случае (см. рис. 1.21а) условие ортогональности сеточных линий к поверхности лопаток турбин обуславливает выгибание  $i$ -поверхностей сетки. При использовании двумерного функционала (см. рис. 1.21б)  $i$ -поверхности сетки плоские. На рис. 1.22 представлена поверхность  $k=31$  (на рис. 1.19а она отмечена точками  $A, B, C, D$ ). Минимум функционала равен 1.29, а для квазиравномерной сетки 2.09. Проверка гексаэдральных



ячеек построенной сетки показала, что они являются невырожденными.

### 1.14 Другие функционалы

Рассмотренный функционал (1.7) не является единственно возможным. Любая функция  $\varphi(E)$ , монотонно возрастающая при  $E \geq 1$  (например, степенная функция  $\varphi(E) = E^\alpha$ ,  $\alpha > 0$ ), также обладает свойством воспроизведения произвольной заданной невырожденной сетки при соответствующем назначении управляющего метрического тензора  $G_{ij}$ . И если достигнут абсолютный минимум функционала (1.7), то любой другой функционал, составленный с использованием  $\varphi(E)$ , также достигает абсолютного минимума на такой же сетке. Если же абсолютный минимум функционала (1.7) не достигается, минимизация других функционалов будет порождать другие сетки. Для двумерных функционалов аналогичная идея обсуждалась в [61] (Прокопов, 2001).

## ГЛАВА 2

### ПОСТРОЕНИЕ АДАПТИВНЫХ ПОДВИЖНЫХ СЕТОК

В настоящей главе описывается метод построения адаптивных подвижных гексаэдральных сеток [2, 148](Азаренок, Иваненко, 2000, 2002), [6, 12, 14, 89, 99](Азаренок, 2002, 2003, 2007, 2008). Целевой функционал рассматривается в общем  $n$ -мерном случае, откуда получаются функционалы в одномерном, двумерном и трехмерном случаях. Для того чтобы понять особенности построения адаптивных сеток в ситуации, когда мониторинговая функция имеет разрывы, рассматриваются модельные примеры для одномерного, двумерного и трехмерного случаев. Описан алгоритм минимизации трехмерного функционала с необходимыми формулами и приведены примеры адаптации.

#### 2.1 Постановка задачи и функционал

Вариационная постановка задачи построения адаптивных сеток в  $n$ -мерном случае рассматривалась в [53, 169](Лисейкин, 1991, 1999), [47](Иваненко, 2003), [14, 99](Азаренок, 2007, 2008). 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 мониторинговой вектор-функции  $\mathbf{f} = (f^1, \dots, f^m)$ , по которой проводится адаптация сетки. Каждая компонента мониторинговой функции зависит от  $\mathbf{x}$ :  $f^p = f^p(x^1, \dots, x^n)$ ,  $p = 1, 2, \dots, m$ .

Рассмотрим гомеоморфное, класса  $\mathbb{C}^1$ , отображение  $\tilde{\mathbf{x}}(\mathbf{X}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n+m}$  канонической области  $\bar{\mathcal{C}}$  из пространства переменных  $\mathbf{X} = (X^1, \dots, X^n)$  на многообразие  $\bar{\mathcal{M}}$  с матрицей Якоби  $\tilde{a}_j^i = \partial x^i / \partial X^j$ ,  $i = 1, 2, \dots, n+m$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$ . Рассмотрим также гомеоморфное, класса  $\mathbb{C}^1$ , отображение  $\tilde{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\xi}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n+m}$  параметрической области  $\bar{\mathcal{P}}$  (куб или прямоугольный параллелепипед) из пространства переменных  $\boldsymbol{\xi} = (\xi^1, \dots, \xi^n)$  на многооб-

разие  $\overline{\mathcal{M}}$  с матрицей Якоби  $\tilde{b}_j^i = \partial x^i / \partial \xi^j$ ,  $i=1, 2, \dots, n+m$ ,  $j=1, 2, \dots, n$ , и отображение  $\mathbf{X}(\xi) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  области  $\overline{\mathcal{P}}$  на  $\overline{\mathcal{C}}$  с матрицей Якоби  $c_j^i = \partial X^i / \partial \xi^j$ ,  $i, j=1, 2, \dots, n$ . Области  $\mathcal{C}$ ,  $\mathcal{P}$  и многообразие  $\mathcal{M}$  полагаются односвязными и ограниченными. Для вывода функционала отображение  $\tilde{\mathbf{x}}(\mathbf{X})$  задается через композицию двух отображений: обратного  $\xi(\mathbf{X})$  и прямого  $\tilde{\mathbf{x}}(\xi)$ . Если в области  $\mathcal{C}$  определена криволинейная невырожденная сетка, задаваемая координатами узлов  $\mathbf{X}_l$  (здесь  $l$  – номер узла), то ее образом в  $\mathcal{M}$  будет также невырожденная сетка, а проекция последней на физическую область  $\Omega$  в пространстве  $\mathbb{R}^n$  переменных  $\mathbf{x}$  является адаптивной сеткой.

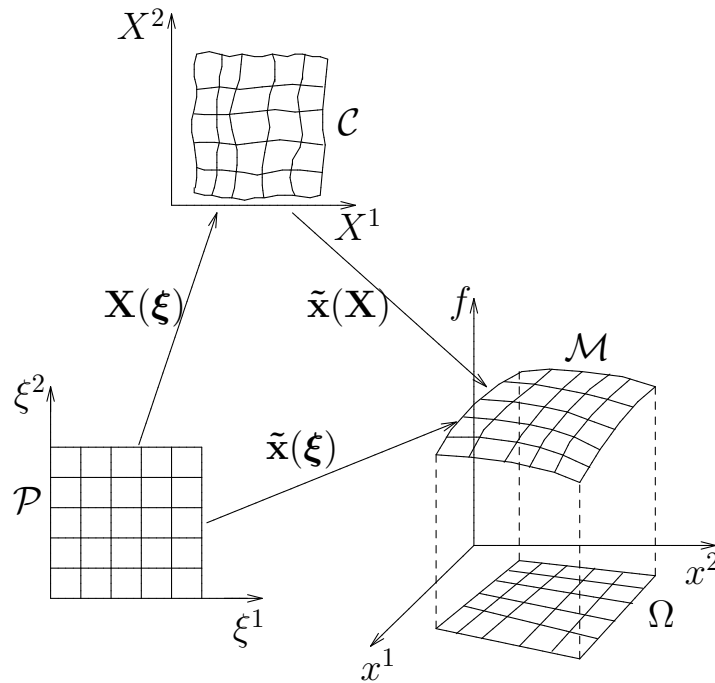


Рис. 2.1. Случай  $n=2$ ,  $m=1$ .

На рис. 2.1 показан пример для случая  $n=2$ ,  $m=1$ , т.е. скалярной мониторинговой функции  $f$ . Здесь единичный параметрический квадрат  $\overline{\mathcal{P}}$  в плоскости  $\xi^1, \xi^2$  отображается на каноническую область  $\overline{\mathcal{C}}$  в плоскости  $X^1, X^2$ , и каждая из этих областей отображается на многообразие  $\overline{\mathcal{M}}$ , которое суть поверхность в трехмерном пространстве  $x^1, x^2, f$ . Заданная криволинейная сетка в области  $\mathcal{C}$  с помощью отображения  $\tilde{\mathbf{x}}(\mathbf{X})$  трансформируется в сетку в  $\mathcal{M}$ , а проекция последней на плоскость  $x^1, x^2$

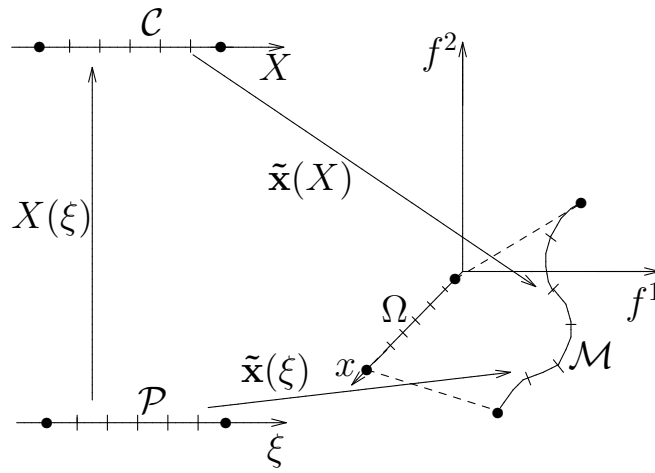


Рис. 2.2. Случай  $n=1$ ,  $m=2$ .

является адаптивной сеткой в физической области  $\Omega$ . На рис. 2.2 представлен случай  $n=1$ ,  $m=2$ , когда мониторинная вектор-функция имеет две компоненты  $\mathbf{f}=(f^1, f^2)$ . Здесь единичный отрезок  $\overline{\mathcal{P}}$  на оси  $\xi$  отображается на отрезок  $\overline{\mathcal{C}}$  на оси  $X$ , и каждый из них отображается на линию  $\overline{\mathcal{M}}$  в трехмерном пространстве  $x, f^1, f^2$ . Проекция сетки, построенной на линии  $\mathcal{M}$  с помощью отображения  $\tilde{\mathbf{x}}(X)$ , на ось  $x$  является адаптивной сеткой в одномерной области  $\Omega$ .

Построение адаптивной сетки осуществляется с помощью гомеоморфного, класса  $\mathbb{C}^1$ , отображения  $\tilde{\mathbf{x}}(\mathbf{X}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n+m}$  области  $\overline{\mathcal{C}}$  на многообразие  $\overline{\mathcal{M}}$  при заданном гомеоморфизме границ  $\partial\mathcal{C} \rightarrow \partial\mathcal{M}$ . Осуществляющие отображение функции  $\tilde{\mathbf{x}}(\mathbf{X})$  находятся с помощью минимизации функционала. Функционал есть интеграл от функции, зависящей от инвариантов метрического тензора  $\tilde{h}_{ij}$ , порождаемого этим отображением. Компоненты метрического тензора  $\tilde{h}_{ij}$  определяются с помощью матрицы Якоби  $\tilde{h} = \tilde{a}^\top \tilde{a}$ . Инварианты метрического тензора  $\tilde{h}_{ij}$  являются инвариантами тензора  $(G^{-1}\tilde{g})_{ij}$ , где метрические тензоры  $\tilde{g} = \tilde{b}^\top \tilde{b}$  и  $G = c^\top c$  задаются отображениями  $\tilde{\mathbf{x}}(\xi)$  и  $\mathbf{X}(\xi)$  соответственно. Многообразие  $\mathcal{M}$  является мониторинным, и поэтому  $\tilde{g}_{ij}$  называется мониторинным метрическим тензором.

В многообразии  $\mathcal{M}$  в точке с координатами  $\tilde{\mathbf{r}}=(x^1, \dots, x^n, f^1, \dots, f^m)$

компоненты метрического тензора  $\tilde{g}_{ij}$  задаются соотношениями

$$\tilde{g}_{ij} = \tilde{\mathbf{r}}_{\xi^i} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{\xi^j}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n,$$

где  $\tilde{\mathbf{r}}_{\xi^i} = (x_{\xi^i}^1, \dots, x_{\xi^i}^n, f_{\xi^i}^1, \dots, f_{\xi^i}^m)$ . Поскольку каждая компонента мониторинговой функции  $f^p = f^p(x^1, \dots, x^n)$  и, следовательно,

$$f_{\xi^i}^p = f_{x^j}^p x_{\xi^i}^j, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad p = 1, \dots, m,$$

то имеем для компонент метрического тензора

$$\tilde{g}_{ij} = \alpha_{kl} \frac{\partial x^k}{\partial \xi^i} \frac{\partial x^l}{\partial \xi^j},$$

где

$$\alpha_{kl} = \delta_{kl} + \frac{\partial f^p}{\partial x^k} \frac{\partial f^p}{\partial x^l}, \quad k, l = 1, \dots, n, \quad p = 1, 2, \dots, m,$$

$\delta_{kl}$  – символ Кронекера. Компоненты метрического тензора  $G_{ij}$  в точке пространства  $X^1, \dots, X^n$  задаются по аналогичным формулам.

Также как и в разделе 1.2, для конструирования функционала используем нормированное безразмерное отношение инварианта  $I_1$  к  $I_n$

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

для функции  $E$

$$E = \frac{1}{n^{n/2}} \frac{I_1^{n/2}}{I_n^{1/2}} = \frac{1}{n^{n/2}} \frac{[\text{tr}(G^{-1}\tilde{g})]^{n/2} \sqrt{\det G}}{\sqrt{\det \tilde{g}}}. \quad (2.1)$$

Интегрируя функцию  $E$  по области  $\mathcal{P}$ , получаем функционал из [47] (Иваненко, 2003)

$$\mathcal{D}(\tilde{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\xi})) = \int_{\mathcal{P}} \dots \int_{\mathcal{P}} E d\xi^1 \dots d\xi^n = \frac{1}{n^{n/2}} \int_{\mathcal{P}} \dots \int_{\mathcal{P}} \frac{[\text{tr}(G^{-1}\tilde{g})]^{n/2} \sqrt{\det G}}{\sqrt{\det \tilde{g}}} d\xi^1 \dots d\xi^n. \quad (2.2)$$

Функционал  $\mathcal{D}$  инвариантен относительно преобразований систем координат  $\mathbf{x}$  и  $\mathbf{X}$ .

Идея конструирования адаптивных сеток с помощью записи функционалов на мониторном многообразии была предложена в [53](Лисейкин, 1991). Если в (2.2) использовать в качестве  $G_{ij}$  единичный тензор, то получим функционал конформности на мониторной поверхности из [169](Лисейкин, 1999).

В практических приложениях иногда удобнее использовать другую вариационную постановку задачи построения адаптивной сетки. Рассматривается задача построения гомеоморфного, класса  $\mathbb{C}^1$ , отображения  $\tilde{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\xi}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n+m}$  параметрической области  $\overline{\mathcal{P}}$  на многообразии  $\overline{\mathcal{M}}$  при заданном гомеоморфизме границ  $\partial\mathcal{C} \rightarrow \partial\mathcal{M}$ . Осуществляющие отображение функции  $\tilde{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\xi})$  находятся в результате минимизации функционала (1.4), где  $G_{ij}(\boldsymbol{\xi})$  – элементы симметричной положительно определенной матрицы, заданной в каждой точке  $\mathcal{P}$ .

## 2.2 Функционалы в одномерном и двумерном случаях

В этом разделе рассматриваются отображения, при условии что  $G_{ij}$  является единичным метрическим тензором. В одномерном случае зададим функцию  $E$  в виде

$$E = \frac{1}{\sqrt{I_1}}.$$

Тогда для скалярной мониторной функции  $f$  отображение единичного отрезка  $\overline{\mathcal{P}}$  на оси  $\xi$  на линию  $\overline{\mathcal{M}}$  в плоскости  $x, f$  строится с помощью минимизации функционала, получаемого из (2.2), (функционал был предложен в [53](Лисейкин, 1991))

$$\mathcal{D} = \int_{\mathcal{P}} \frac{1}{x_{\xi} \sqrt{1 + c_a^2 f_x^2}} d\xi. \quad (2.3)$$

Здесь в целях управления степенью сгущения узлов сетки в областях больших градиентов вместо мониторной функции  $f$  используется  $c_a f$ . Это означает, что точки расставляются равномерно в метрике, задаваемой графиком  $c_a f$ . Введение коэффициента адаптации  $c_a$  в (3) обуслов-

лено тем, что чем больше этот коэффициент, тем большего сгущения узлов сетки можно добиться, см., например, [44](Иваненко, 1997).

Уравнение Эйлера для функционала (2.3) имеет вид

$$x_\xi \sqrt{1 + c_a^2 f_x^2} = \text{const.} \quad (2.4)$$

В двумерном случае с  $\mathbf{x}=(x, y)$ ,  $\boldsymbol{\xi}=(\xi, \eta)$  и скалярной функцией  $f$  из (2.2) получаем обобщенный функционал гладкости, предложенный в [53](Лисейкин, 1991),

$$\mathcal{D} = \frac{1}{2} \iint_{\mathcal{P}} \frac{(x_\xi^2 + x_\eta^2)(1 + f_x^2) + (y_\xi^2 + y_\eta^2)(1 + f_y^2) + 2f_x f_y (x_\xi y_\xi + x_\eta y_\eta)}{(x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi) \sqrt{1 + f_x^2 + f_y^2}} d\xi d\eta. \quad (2.5)$$

Функции  $x(\xi, \eta)$ ,  $y(\xi, \eta)$ , доставляющие минимум  $\mathcal{D}$ , осуществляют отображение параметрического квадрата  $\overline{\mathcal{P}}$  на многообразие  $\overline{\mathcal{M}}$  (см. рис. 2.1), которое является поверхностью мониторной функции  $z=f(x, y)$  в пространстве  $x, y, f$ . Отображение  $\overline{\mathcal{P}} \rightarrow \overline{\mathcal{M}}$  является обратным к гармоническому отображению  $\overline{\mathcal{M}} \rightarrow \overline{\mathcal{P}}$ . Прямое гармоническое отображение  $\overline{\mathcal{M}} \rightarrow \overline{\mathcal{P}}$  существует и является диффеоморфизмом, см., например, [184](Schoen, Yau, 1978).

Если же используется векторная мониторная функция  $\mathbf{f}$ , то из (2.2) получаем обобщенный функционал гладкости, предложенный в [53](Лисейкин, 1991) и рассматривавшийся в [2, 148](Азаренок, Иваненко, 2000, 2002),

$$\mathcal{D} = \frac{1}{2} \iint_{\mathcal{P}} \frac{\alpha_{11}(x_\xi^2 + x_\eta^2) + 2\alpha_{12}(x_\xi y_\xi + x_\eta y_\eta) + \alpha_{22}(y_\xi^2 + y_\eta^2)}{(x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi) \sqrt{1 + \sum_{p=1}^m (f_x^p)^2 + (f_y^p)^2}} d\xi d\eta, \quad (2.6)$$

где

$$\alpha_{11} = 1 + \sum_{p=1}^m (f_x^p)^2, \quad \alpha_{12} = \sum_{i=1}^m f_x^p f_y^p, \quad \alpha_{22} = 1 + \sum_{p=1}^m (f_y^p)^2.$$

В [28](Глассер и др., 2005) для адаптации сетки к векторным полям использовали уравнения Эйлера для функционала (2.6).

## 2.3 Аппроксимация функционалов

В одномерном на оси  $\xi$  рассматривается отрезок прямой линии, состоящий из  $N_1-1$  единичных отрезков  $\Delta\xi=1$ . Функционал (2.3) вычисляется по формуле прямоугольников

$$\mathcal{D}^h = \sum_{i=1}^{N_1-1} \frac{1}{(x_\xi)_{i+1/2} \sqrt{1 + c_a^2 (f_x)_{i+1/2}^2}}, \quad (2.7)$$

где используется разностная аппроксимация производных

$$(x_\xi)_{i+1/2} = \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta\xi} = x_{i+1} - x_i, \quad (f_x)_{i+1/2} = \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i}. \quad (2.8)$$

В двумерном случае рассмотрим кусочно-билинейное отображение единичного квадрата  $i \leq \xi \leq i+1, j \leq \eta \leq j+1$  (здесь  $1 \leq i \leq N_1, 1 \leq j \leq N_2$ ) в параметрической плоскости  $\xi, \eta$  на четырехугольную ячейку разностной сетки в плоскости  $x, y$ , образованную узлами с координатами  $(x, y)_{i,j}, (x, y)_{i,j+1}, (x, y)_{i+1,j+1}, (x, y)_{i+1,j}$ , которые пронумерованы от 1 до 4. В [44](Иваненко, 1997) функционал (2.5) аппроксимируется таким образом, чтобы его минимум достигался на сетке из выпуклых четырехугольных ячеек

$$\mathcal{D}^h = \sum_{n=1}^{N_c} \sum_{m=1}^4 \frac{1}{4} [E_m]_n, \quad (2.9)$$

где  $[E_m]_n$  – значение подинтегрального выражения в (2.5), вычисленное в  $m$ -м углу квадрата  $n$ -й ячейки,  $N_c = (N_1-1)(N_2-1)$  – число ячеек сетки. Если множество выпуклых сеток непусто, то система алгебраических уравнений, записанных для каждого внутреннего узла

$$R_x = \frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial x_n} = 0, \quad R_y = \frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial y_n} = 0, \quad (2.10)$$

( $n$  – номер узла) имеет по крайней мере одно решение, являющееся выпуклой сеткой. Для его нахождения используется итерационная квазиньютоновская процедура, аналогичная (1.15), рассмотренной в разделе 1.7 для трехмерного случая. В [42](Иваненко, Чарахчян, 1988) показано, что в случае построения криволинейной сетки в произвольной



области  $\Omega$  без адаптации (когда  $f_x=f_y=0$ ) дискретный функционал  $\mathcal{D}^h$  имеет бесконечный барьер на границе множества выпуклых сеток. Это обусловлено якобианом отображения  $J=x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi$ , который стоит в знаменателе (2.5). Если у какой-либо ячейки сетки вершины смещаются в такое положение, что ячейка становится почти невыпуклой (невыпуклая четырехугольная ячейка понимается как вырожденная), один из четырех треугольников, на которые ячейка разбивается диагоналями, вырождается, его площадь, равная  $0.5J$ , стремится к нулю и соответственно  $\mathcal{D}^h \rightarrow \infty$ . Бесконечный барьер сохраняется и в случае построения адаптивных сеток, когда мониторная функция гладкая,  $f \in C^1(\Omega)$ , поскольку выражение под знаком корня в (2.5) является ограниченным во всей области  $\Omega$ . Однако, если  $f$  принадлежит классу разрывных функций, что имеет место в случае расчета гиперболических задач газовой динамики, численно определяемые производные  $f_x, f_y$  становятся неограниченными в окрестности разрывов. Вследствие этого у функционала  $\mathcal{D}^h$  исчезает бесконечный барьер, что приводит к свертыванию ячеек и остановке расчетов. Для того чтобы предотвратить вырождение ячеек сетки, используется специальная техника, состоящая в “замораживании” производных от мониторной функции, предложенная в [44](Иваненко, 1997) и проанализированная в [6, 14, 89](Азаренок, 2002, 2003, 2008). Этот вопрос детально разбирается в разделе 2.5.

## 2.4 Трехточечная модель адаптации

В настоящем разделе показывается, что при численном решении задачи Коши для нелинейного уравнения переноса при соблюдении некоторых условий значения сеточной функции в ячейках подвижной сетки остаются неизменными. Тогда задачу построения адаптивной сетки можно рассматривать отдельно от основной задачи физического моделирования, как если бы использовалась аналитически заданная мониторная функция. Это позволяет исследовать некоторые важные свойства дискретного функционала, которые сохраняются и в общем случае при расчете гид-

родинамических течений с разрывами.

Рассмотрим построение адаптивной сетки в случае решения одномерного нелинейного уравнения переноса. Требуется решить задачу Коши с разрывными начальными данными

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad u(x, 0) = \begin{cases} u_l & \text{при } x < 0, \\ u_r & \text{при } x \geq 0, \end{cases} \quad u_l > u_r > 0, \quad (2.11)$$

когда слева направо движется скачок со скоростью  $w = (u_l + u_r)/2$ .

Для расчета используется интегральное соотношение

$$\oint_C u dx - \frac{1}{2} u^2 dt = 0, \quad (2.12)$$

которое на гладких решениях эквивалентно исходному дифференциальному уравнению, и в то же время ему удовлетворяют разрывные решения. Здесь интегрирование проводится по любому контуру  $C$ .

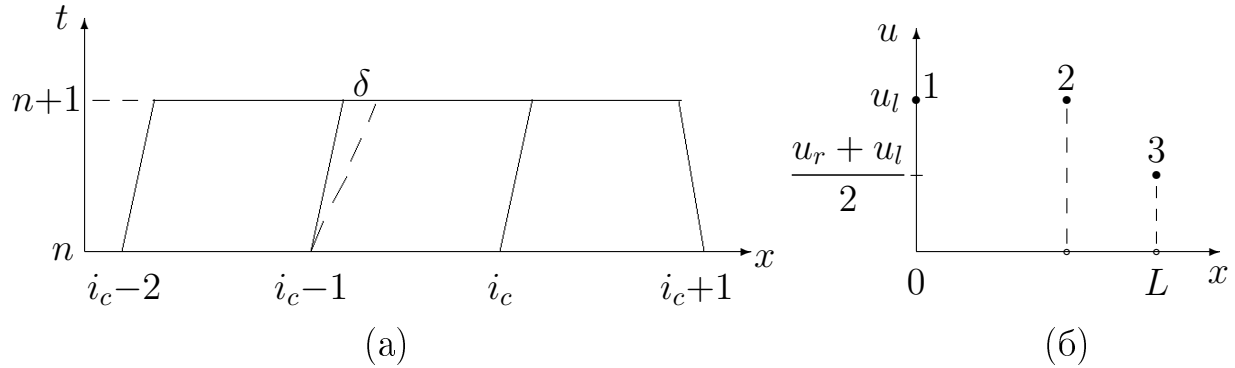


Рис. 2.3. Подвижная сетка (а), трехточечная модель адаптации (б).

На плоскости переменных  $x, t$  введем подвижную разностную сетку (см. рис. 2.3а), с шагом по  $x$  на  $n$ -м временном слое  $h_{i+1/2} = x_{i+1}^n - x_i^n$  и на  $n+1$ -м слое  $h^{i+1/2} = x_{i+1}^{n+1} - x_i^{n+1}$ , и шагом по времени  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ , где  $n, i$  – положительные целочисленные индексы. Для пересчета значения сеточной функции на  $n+1$ -м временном слое  $u^{i+1/2}$ , отнесенного к центру интервала, будем использовать схему С.К. Годунова [33] (Годунов, Рябенкий, 1977), которая получается при аппроксимации интегрального соотношения (2.12), когда интегрирование проводится вдоль границы четырехугольника с вершинами в узлах  $(i, n)$ ,  $(i+1, n)$ ,  $(i+1, n+1)$ ,

$(i, n+1)$

$$u^{i+1/2} = \frac{1}{h^{i+1/2}} \left[ u_{i+1/2} h_{i+1/2} - \frac{\Delta t}{2} (u_{i+1}^2 - u_i^2) - u_i h_i + u_{i+1} h_{i+1} \right], \quad (2.13)$$

где  $u_i, u_{i+1}$  – значения функции на левом и правом концах интервала,  $h_i = x_i^{n+1} - x_i^n$ ,  $h_{i+1} = x_{i+1}^{n+1} - x_{i+1}^n$ .

Верно следующее утверждение, оформленное в виде теоремы [6, 89](Азаренок, 2002, 2003)

**Теорема 2.4.1** Пусть расчет проводится на сетке, узлы которой первоначально расставлены равномерно с шагом  $h$  и при отсутствии адаптации движутся со скоростью перемещения скачка  $w$ . Далее, пусть в момент времени  $t^n$ , когда включается процедура адаптации узлов, в первых  $0.5(N_1 - 1)$  ( $N_1$  – нечетное) интервалах значение сеточной функции равно  $u_l$ , а в остальных  $u_r$ . Тогда при пересчете на адаптивной сетке значения сеточной функции на  $n+1$ -м слое остаются неизменными.

**Доказательство.** Во-первых, заметим что задача симметрична относительно центрального узла  $i_c = 0.5(N_1 - 1) + 1$ , скорость которого сохраняется неизменной и равной  $w$ . Рассмотрим интервал  $(i_c - 1, i_c)$  (см. рис. 2.3а). Пусть на  $n+1$ -м слое узел  $i_c - 1$  сместился на расстояние  $\delta$  от положения  $x_{i_c-1}^{n+1} = x_{i_c-1}^n + w\Delta t$ , где он находился бы при отсутствии адаптации. Поскольку на  $n$ -м слое  $h_{i_c-1/2} = h$ , то на  $n+1$ -м слое  $h^{i_c-1/2} = h - \delta$ . Заметив, что проекции боковых сторон четырехугольной ячейки на ось  $x$  равны  $h_{i_c} = \Delta t w$  и  $h_{i_c-1} = \Delta t w + \delta$  и задав значения функции на концах интервала из решения задачи о распаде разрыва  $u_{i_c-1} = u_l$ ,  $u_{i_c} = u_r$ , получаем из (2.13) значение сеточной функции на  $n+1$ -м слое

$$\begin{aligned} u^{i_c-1/2} &= \frac{1}{h - \delta} \left[ h u_l - \frac{\Delta t}{2} (u_r^2 - u_l^2) - (\Delta t w + \delta) u_l + \Delta t w u_r \right] = \\ &= \frac{1}{h - \delta} \left[ h u_l - \frac{\Delta t}{2} (u_r + u_l) (u_r - u_l) + \Delta t w (u_r - u_l) - \delta u_l \right] = u_l. \end{aligned}$$

Такой же результат получим если возьмем  $u_{i_c} = u_l$ .  $\square$

Следовательно, при построении адаптивной сетки можно не решать основную задачу, а просто полагать значения функции равными  $u_l$  в интервалах левее центрального узла  $i_c$  и  $u_r$  в интервалах правее него.

Адаптирующуюся к решению сетку будем строить на основе решения задачи о минимизации функционала (2.3). В силу симметрии задачи будем рассматривать только левую половину сетки, состоящую из  $0.5(N_1-1)$  ячеек, и для простоты полагаем, что она содержит только три узла, т.е.  $i_c=3$ . Это не изменит структуру решения. Общий случай  $i_c>3$  может быть затем легко получен обобщением этой трехточечной модели адаптации. Перейдем в новую систему координат, движущуюся со скоростью  $w$  (рис. 2.3б). В процессе минимизации функционала граничные узлы 1 и 3 фиксированы. Положив  $x_1=0$ , получим  $x_3=L$ , где  $L=2h$ ,  $h$  – шаг начальной равномерной сетки. Координата  $x$  узла 2 является переменной и определяется в результате решения вариационной задачи. Значения функции  $u$  в этих трех узлах определяются через линейную интерполяцию значений  $u$  в центрах интервалов и, следовательно,  $u_1=u_2=u_l$ ,  $u_3=(u_l+u_r)/2$ .

## 2.5 Свойства дискретного функционала

В настоящем разделе рассматриваются свойства дискретного функционала в одномерном и частном двумерном случае. В одномерном случае показывается, что задача минимизации (точнее поиска экстремума) дискретного функционала 2.7 имеет два решения и при достижении некоторого значения коэффициента адаптации  $c_a$  оба решения сначала сливаются в одно, а затем при увеличении  $c_a$  исчезают, что приводит к схлопыванию ячейки сетки. Для того чтобы получить выпуклый функционал, т.е. обеспечить единственность решения, используется регуляризация функционала. Регуляризованный функционал имеет бесконечный барьер, предотвращающий схлопывание ячеек при любой степени сгущения сетки в окрестности разрыва мониторной функции. В двумерном случае само понятие минимизации дискретного функционала может не

иметь смысла в виду отсутствия решений. Тем не менее, итерационная процедура, применяемая для решения системы алгебраических уравнений, позволяет сильно сгущать линии сетки к разрывам и гарантировать невырожденность ее ячеек. Начнем с рассмотрения более простого одномерного случая.

В рамках трехточечной модели в качестве мониторной функции используется  $u$ . Аппроксимация (2.7) функционала (2.3) осуществляется на левой половине сетки, состоящей из двух ячеек. Дискретный функционал имеет вид

$$\mathcal{D}^h = \frac{1}{x} + \frac{1}{(L-x)\sqrt{1 + c_a^2(\Delta u)^2/(L-x)^2}}, \quad (2.14)$$

где

$$\Delta u = |u_3 - u_2| = \left| \frac{u_r + u_l}{2} - u_l \right| = \frac{1}{2} |u_r - u_l|.$$

Для минимизации (2.14) используется метод Ньютона

$$x^{l+1} = x^l - \tau \frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial x} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{D}^h}{\partial x^2} \right)^{-1}, \quad (2.15)$$

где итерационный параметр  $\tau \leq 1$  и первая производная имеет вид

$$\frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial x} = -\frac{1}{x^2} + \frac{1}{(L-x)^2 [1 + c_a^2(\Delta u)^2/(L-x)^2]^{3/2}}.$$

На рис. 2.4 представлены графики зависимостей  $\mathcal{D}^h$  и  $\partial \mathcal{D}^h / \partial x$  от  $x$  для различных значений коэффициента адаптации  $c_a$  при  $u_l=2$ ,  $u_r=1$  и шаге начальной сетки  $h=0.1$ . Видно, что при  $c_a=0$  функционал  $\mathcal{D}^h$  имеет минимум в точке  $x_{min}=0.1$ , что соответствует равномерной сетке. При  $c_a>0$  функционал теряет выпуклость, правее минимума в окрестности узла 3 появляется максимум, и, таким образом, задача на поиск экстремума не имеет единственного решения. И если с увеличением  $c_a$  минимум функционала  $\mathcal{D}^h$  сдвигается вправо, что соответствует смещению узла 2 к 3, т.е. сгущению сетки на разрыве, то максимум  $\mathcal{D}^h$  сдвигается влево от узла 3, что соответствует разрежению сетки. В многомерных задачах это может приводить к резким смещениям узлов сетки (перескок

с минимума на максимум и наоборот в процессе итераций в зависимости от начального приближения), т.е. к перехлестыванию линий сетки и, как следствие, к неустойчивости решения основной задачи. Более того, при достижении критического значения  $c_a^{\text{кр}}$  оба экстремума на интервале  $(0, L)$  сливаются и далее исчезают (см. кривую  $c_a=0.2$  на рис. 2.4). Для того чтобы найти  $c_a^{\text{кр}}$ , необходимо приравнять к нулю первую и вторую производные от  $\mathcal{D}^h$  и решить систему двух уравнений относительно  $x^{\text{кр}}$  и  $c_a^{\text{кр}}$ . Для указанных выше параметров получим  $x^{\text{кр}} \simeq 0.159$  и  $c_a^{\text{кр}} \simeq 0.185$ . При  $c_a < c_a^{\text{кр}}$  на рис. 2.4а видно, что  $\mathcal{D}^h$  на некотором интервале  $x$  является монотонно возрастающей функцией вплоть до достижения максимума  $\mathcal{D}^h$ . Такое поведение  $\mathcal{D}^h$  является конечным барьером, который препятствует выходу узла 2 за пределы интервала  $0 < x < 2$  при осуществлении итераций. При  $c_a > c_a^{\text{кр}}$  этот барьер слева от узла 3 исчезает и минимизация  $\mathcal{D}^h$  приводит к схлопыванию правой ячейки.

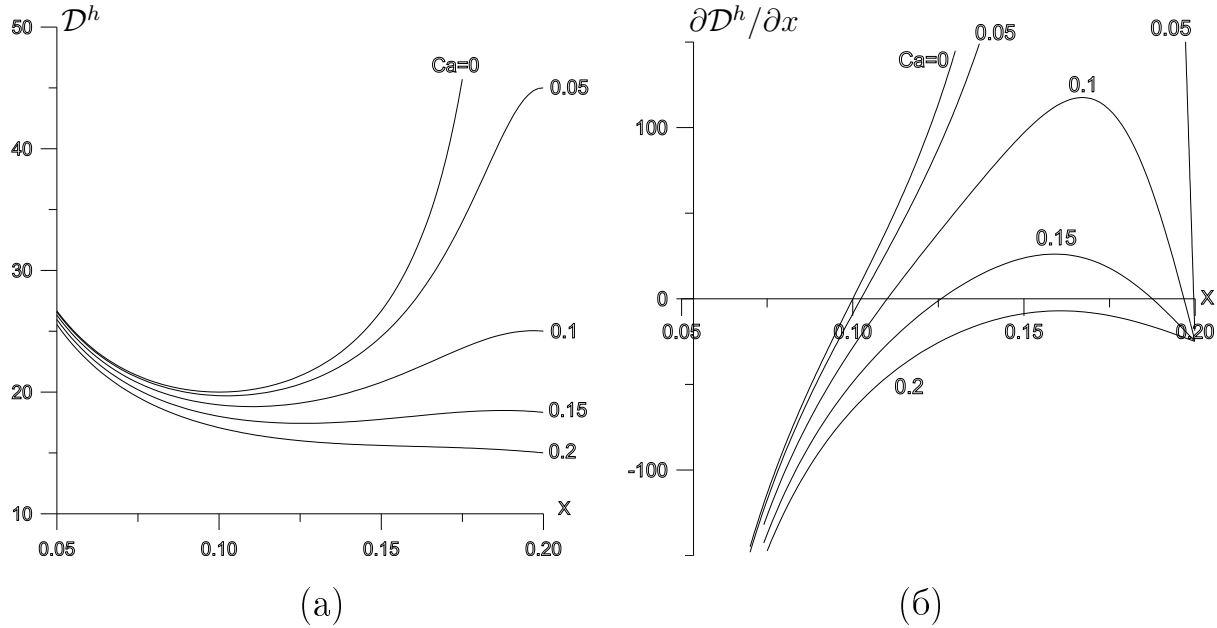


Рис. 2.4. Зависимости  $\mathcal{D}^h$  (а) и  $\partial \mathcal{D}^h / \partial x$  (б) от  $c_a$ .

Выпишем аппроксимацию для функционала в общем случае, когда левая половина сетки состоит из  $0.5(N_1 - 1)$  ячеек

$$\mathcal{D}^h = \frac{[0.5(N_1 - 1)]^2}{x} + \frac{1}{(L - x)\sqrt{1 + c_a^2(\Delta u)^2/(L - x)^2}},$$

где  $L=0.5(N_1-1)h$ . Этот функционал также является однопараметрическим, поскольку все интервалы кроме крайнего справа имеют одинаковую длину.

При увеличении числа узлов  $N_1$  критическое значение коэффициента адаптации  $c_a^{\text{кр}}$  уменьшается, а  $x_{\min}$  смещается от  $i_c$  влево. Например, при  $N_1=101$  величина  $c_a^{\text{кр}} \simeq 0.126$ , что уменьшает возможность сгущения сетки к разрыву.

Для того чтобы сделать функционал выпуклым предположим, что при варьировании  $x$  производная  $u_x$  в (2.3) остается неизменной, т.е. “замораживается” производная от мониторинговой функции. Этот прием был предложен в [44] (Иваненко, 1997), а теоретический анализ для одномерного и двумерного случаев был проведен в [6, 89] (Азаренок, 2002, 2003). Считая  $(u_x)_{i+1/2}$  не зависящей от  $x$ , т.е. полагая в (2.14) выражение под знаком корня не зависящим от  $x$ , находим производную от нового функционала  $\mathcal{D}_1^h$

$$\frac{\partial \mathcal{D}_1^h}{\partial x} = -\frac{1}{x^2} + \frac{1}{(L-x)^2 \sqrt{1 + c_a^2 (\Delta u)^2 / (L-x)^2}}. \quad (2.16)$$

Чтобы получить явный вид  $\mathcal{D}_1^h$  (назовем его регуляризованным дискретным функционалом) проинтегрируем (2.16). Имеем (постоянная интегрирования полагается равной нулю)

$$\mathcal{D}_1^h = \frac{1}{x} + \frac{1}{c_a \Delta u} \ln \left[ \frac{c_a \Delta u}{L-x} + \sqrt{1 + \frac{c_a^2 (\Delta u)^2}{(L-x)^2}} \right]. \quad (2.17)$$

Представленные на рис. 2.5 графики  $\mathcal{D}_1^h$  и  $\partial \mathcal{D}_1^h / \partial x$  демонстрируют три важных свойства нового класса функционалов  $\mathcal{D}_1^h$ :

1. Функционал  $\mathcal{D}_1^h$  является выпуклым на интервале  $(0, L)$  при любых значениях  $c_a$ .
2. При  $c_a \rightarrow \infty$  положение  $x_{\min}$  для  $\mathcal{D}_1^h$  стремится слева к  $L$ .
3. Функционал  $\mathcal{D}_1^h$  имеет бесконечный барьер при любых  $c_a$ , предотвращающий схлопывание правой ячейки.

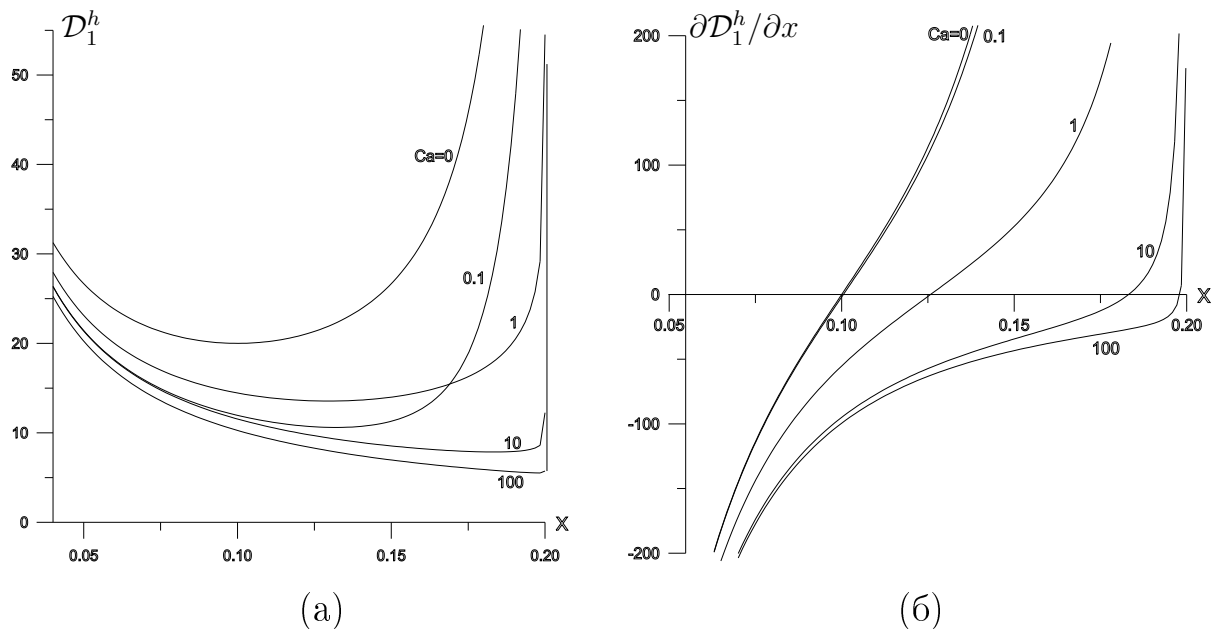


Рис. 2.5. Зависимости  $\mathcal{D}_1^h$  (а) и  $\partial \mathcal{D}_1^h / \partial x$  (б) от  $c_a$ .

Свойство 1 гарантирует существование единственного решения вариационной задачи на интервале  $(0, L)$ . Согласно свойству 2, узел 2 может приближаться к узлу 3 на любое малое расстояние. Таким образом, модифицировав процесс вычисления первой производной от функционала по формуле (2.16), находится решение задачи минимизации  $\mathcal{D}^h$  на новом классе регуляризованных функционалов  $\mathcal{D}_1^h$ . Функционалы из данного класса обладают бесконечным барьером при любых  $c_a$  и позволяют сгущать сетку в областях разрывов мониторной функции произвольным образом, что в задачах моделирования разрывных течений должно приводить к существенному повышению точности расчетов. Эти три свойства сохраняются и в общем случае, когда сетка содержит  $N_1$  ячеек.

Трехточечная модель адаптации показывает, что ошибка вычислений, обусловленная размазыванием разрыва в интегральной норме  $L_1$  или  $L_2$  ведет себя как  $Cd$ , где  $d$  – ширина размазанного скачка,  $C$  – константа. Следующее следствие заключается в том, что в гиперболических задачах наличие двух соседних ячеек, одна из которых находится в зоне размазанного скачка, а другая в области гладкого течения, размеры которых отличаются во много раз, не понижает точность решения. Таким образом сетка может резко, за одну ячейку, сгущаться к разрыву.



Рассмотрим теперь частный случай построения двумерных адаптивных сеток, когда дискретный функционал также удастся свести к однопараметрическому. Предположим что мониторная функция  $f$  в функционале (2.5) зависит только от переменной  $x$ . В качестве области  $\mathcal{P}$  берем прямоугольник со сторонами  $N_1$  и 1. При построении отображения  $\mathcal{P}$  на область  $\Omega$  задающие отображение функции имеют вид  $x=x(\xi)$ ,  $y=a\eta$  ( $a=\text{const}$ ) и  $f_y=x_\eta=y_\xi=0$ . Функционал (2.5) примет вид (здесь полагаем  $a=1$ )

$$\mathcal{D} = \frac{1}{2} \int_0^1 \int_0^{N_1} \frac{x_\xi^2(1 + f_x^2) + 1}{x_\xi \sqrt{1 + f_x^2}} d\xi d\eta = \frac{1}{2} \int_0^{N_1} \frac{x_\xi^2(1 + f_x^2) + 1}{x_\xi \sqrt{1 + f_x^2}} d\xi. \quad (2.18)$$

Как и раньше, вместо  $f$  используем  $c_a f$ . Функционал (2.18) отличается от одномерного (2.3) дополнительным членом

$$\int_0^{N_1} x_\xi \sqrt{1 + c_a^2 f_x^2} d\xi,$$

выражающим длину кривой графика мониторной функции  $c_a f$  в сечении  $y=\text{const}$ . Наличие этого члена определяет разницу свойств одномерного и двумерного регуляризованных дискретных функционалов.

Будем придерживаться предположений, используемых в трехточечной модели адаптации. Аппроксимация функционала (2.18) на левой половине сетки, состоящей из двух ячеек, имеет вид

$$\mathcal{D}^h = x + \frac{1}{x} + (L-x) \sqrt{1 + c_a^2 (\Delta u)^2 / (L-x)^2} + \frac{1}{(L-x) \sqrt{1 + c_a^2 (\Delta u)^2 / (L-x)^2}}.$$

Дискретный функционал  $\mathcal{D}^h$  обладает такими же свойствами как и функционал в одномерном случае. На интервале  $(0, L)$  при  $c_a < c_a^{\text{кр}}$  существует максимум и минимум  $\mathcal{D}^h$ , которые исчезают при  $c_a > c_a^{\text{кр}}$  (значение  $c_a^{\text{кр}}$ , конечно, отличается от значения для функционала (2.14)).

Для регуляризации  $\mathcal{D}^h$  опять замораживаем производную  $(u_x)_{i+1/2}$  при нахождении производной от нового функционала  $\mathcal{D}_1^h$ , т.е. считаем

выражение под знаком корня во втором и третьем слагаемом не зависящим от  $x$ . Получим

$$\frac{\partial \mathcal{D}_1^h}{\partial x} = 1 - \frac{1}{x^2} - \sqrt{1 + c_a^2(\Delta u)^2/(L-x)^2} + \frac{1}{(L-x)^2 \sqrt{1 + c_a^2(\Delta u)^2/(L-x)^2}}.$$

Проинтегрировав данное выражение и положив постоянную интегрирования равной 0, получим явный вид  $\mathcal{D}_1^h$

$$\mathcal{D}_1^h = \frac{1}{x} + x + \sqrt{(L-x)^2 + c_a^2(\Delta u)^2} + \frac{1}{c_a \Delta u} (1 - c_a^2(\Delta u)^2) \ln \left[ \frac{c_a \Delta u}{L-x} + \sqrt{1 + \frac{c_a^2(\Delta u)^2}{(L-x)^2}} \right].$$

На рис. 2.6 представлены зависимости  $\mathcal{D}_1^h$  и  $\partial \mathcal{D}_1^h / \partial x$  от  $x$  для различных  $c_a$ . Отличие от одномерного случая состоит в том, что как только выражение  $1 - c_a^2(\Delta u)^2$  становится отрицательным, т.е. в данном случае при  $c_a > 1/\Delta u = 2$ , функционал теряет выпуклость и у него нет стационарных точек. На первый взгляд кажется, что это приведет к схлопыванию правой ячейки при попытке найти минимум  $\mathcal{D}_1^h$  с помощью итерационной процедуры (2.15). В действительности же этого не происходит по следующей причине. Найдем вторую производную от  $\mathcal{D}_1^h$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{D}_1^h}{\partial x^2} = \frac{1}{x^3} + \frac{2(L-x)^2 + c_a^2(\Delta u)^2}{(L-x)^2 \sqrt{(L-x)^2 + c_a^2(\Delta u)^2}} \left[ \frac{1}{(L-x)^2 + c_a^2(\Delta u)^2} + 1 \right].$$

При стремлении узла 2 к узлу 3, т.е.  $x$  к  $L$ , имеем  $L-x \ll c_a \Delta u$  и, следовательно, отношение первой и второй производных в (2.15) с точностью до бесконечно малой величины равно

$$(L-x^l) \frac{1 - c_a^2(\Delta u)^2}{1 + c_a^2(\Delta u)^2}.$$

Поскольку  $1 - c_a^2(\Delta u)^2 < 0$ , то  $x^l$  на каждой итерации получает приращение, меньшее чем расстояние до правого узла  $x_3 = L$ . Длина правой ячейки остается большей нуля с точностью до машинного нуля или заданной точности вычислений при любых  $c_a > 1/\Delta u$ .

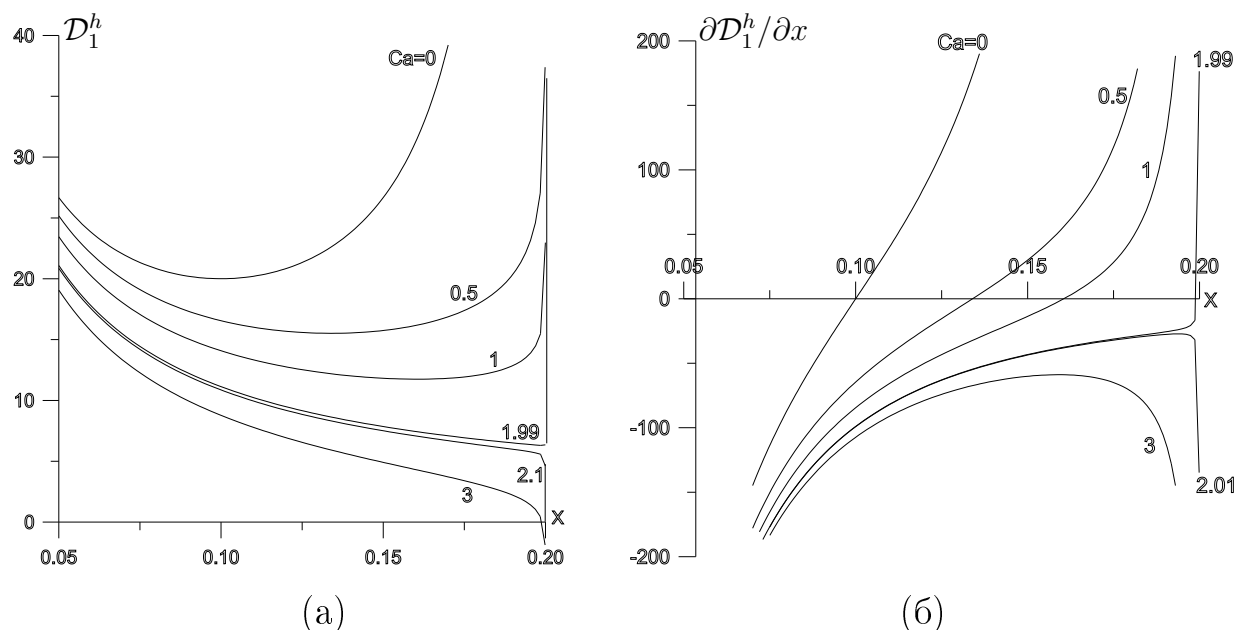


Рис. 2.6. Зависимости  $D_1^h$  (а) и  $\partial D_1^h / \partial x$  (б) от  $c_a$  в двумерном случае.

Приближение трехточечной модели адаптации применимо и в общем случае при расчете разрывных двумерных течений. В окрестности любой точки, лежащей на линии разрыва, можно рассматривать локальную декартову систему координат с осью  $y$ , направленной по касательной к линии разрыва в рассматриваемой точке. Тогда в первом приближении можно считать  $x=x(\xi)$ ,  $y=a\eta$  и пренебречь малыми членами  $f_y, x_\eta, y_\xi$ . Наличие этих малых членов в функционале при генерации сетки обуславливает постоянное движение ее узлов вдоль некоторых траекторий около среднего положения.

Итак, в двумерном случае может оказаться, что регуляризованный функционал при значениях  $c_a$  больших некоторой величины не будет иметь минимума и стационарных точек. Тем не менее процесс решения системы алгебраических уравнений (2.10) с помощью итерационной процедуры, подобно описанной в разделе 1.7 процедуре (1.15), приводит к сильному сгущению линий сетки в окрестности разрывов. При этом ячейки сетки остаются выпуклыми благодаря "барьерности" итерационной процедуры. В дальнейшем, для краткости ссылки, будем называть процесс решения системы (2.10) (а также в трехмерном случае соответствующей системы, рассматриваемой в разделе 2.10) минимизацией дис-

кретного функционала, независимо от того существует минимум функционала или нет.

## 2.6 Адаптация с помощью решения уравнения Эйлера

Посмотрим, что даст использование уравнения Эйлера при построении адаптивных сеток. Аппроксимация уравнения Эйлера (2.4) на трехточечном шаблоне имеет вид

$$x = (L - x)\sqrt{1 + c_a^2(\Delta u)^2/(L - x)^2},$$

откуда получаем

$$x_{min} = \frac{L}{2} + \frac{c_a^2(\Delta u)^2}{2L},$$

и, следовательно, при  $c_a\Delta u=L$  произойдет схлопывание правой ячейки. В данном случае барьера нет и поэтому в многомерных задачах, где линии сетки сильно искривляются в окрестности линии разрыва (например, ударной волны) и, следовательно, производная от мониторной функции  $f$  по направлению нормали к разрыву меняется от ячейки к ячейке, в одних ячейках линии сетки могут еще не сгуститься с заданной точностью, а другие ячейки будут уже иметь самопересечения. Таким образом, использование уравнений Эйлера для адаптации сетки не позволяет сильно сгущать сеточные линии и существенно увеличить точность расчетов.

## 2.7 Расстановка узлов на границе

Проведенный анализ свойств дискретных функционалов в одномерном и двумерном случаях показал, что они являются несогласованными между собой, т.е. осуществляемое с их помощью сгущение сетки к разрыву мониторной функции происходит по разному внутри области  $\Omega$  и на ее границе  $\partial\Omega$ . Следовательно, возникает задача согласованной расстановки узлов сетки внутри области  $\Omega$  и на ее границе  $\partial\Omega$ .

Существует несколько способов расстановки узлов сетки на границе области  $\partial\Omega$ . Самый простой это заданное фиксированное располо-

жение граничных узлов. Назовем его способом *фиксированных узлов*. В этом случае при адаптации в окрестности точки, где разрыв мониторной функции подходит к границе  $\partial\Omega$ , возникает неустойчивость при генерации сетки, особенно при расчете нестационарных задач, когда разрыв движется по границе, и как следствие возникает неустойчивость в расчете основной физической задачи.

Второй способ состоит в применении безусловной минимизации при пересчете координат граничных узлов, т.е. аналогично внутренним узлам, и проектировании полученного вектора сдвига узла на границу  $\partial\Omega$  (*безусловная минимизация*, см., например, [151](Jacquotte, 1999)). Такой способ может использоваться только если разрыв подходит к границе почти под прямым углом. Если, например, в газе ударная волна отходит от границы не под прямым углом или падает и отражается от  $\partial\Omega$ , то при сгущении граничные узлы перехлестываются и примыкающие к ним ячейки сетки вырождаются.

В третьем способе используется процедура минимизации одномерного функционала (2.3) (*одномерная минимизация*, см. [43](Иваненко, 1993)). Он надежнее первых двух и иногда может использоваться при адаптации. Но, как было показано в разделе 2.5, дискретные функционалы, одномерный для граничных узлов и двумерный для внутренних, являются несогласованными. Поэтому при адаптации коэффициент  $c_a$  и итерационный параметр  $\tau$  для них приходится подбирать отдельно, что требует дополнительной работы, и этот процесс особенно трудоемок при решении нестационарных задач. Часто он приводит к нежелательному смещению узлов на границе и даже их перехлесту, а следовательно, к вырождению ячеек сетки.

Возникает необходимость в согласованной расстановке узлов сетки внутри области  $\Omega$  и на ее границе  $\partial\Omega$ . В рассматриваемом способе расстановки узлов, который был предложен в [6, 89, 90](Азаренок, 2002, 2003), решается задача условной минимизации дискретного функционала при наличии ограничений типа равенств, задающих  $\partial\Omega$  (способ *условной ми-*

нимизации). Необходимо минимизировать следующий функционал:

$$\mathcal{D}_1^h = \sum_{n=1}^{N_c} \sum_{k=1}^4 \frac{1}{4} [E_k]_i + \sum_{l \in \mathcal{L}} \lambda_l Q_l = \mathcal{D}^h + \sum_{l \in \mathcal{L}} \lambda_l Q_l; \quad (2.19)$$

здесь  $\mathcal{D}^h$  обозначает функционал (2.9) с замороженными производными от мониторинговой функции, ограничения  $Q_l = Q(x_l, y_l) = 0$  задают границу области  $\partial\Omega$ ,  $\lambda_l$  – множители Лагранжа,  $\mathcal{L}$  – множество граничных узлов сетки. Поскольку предполагается, что функция  $Q(x, y)$  является дифференцируемой, очевидно, что функционал  $\mathcal{D}_1^h$  сохраняет бесконечный барьер на границе множества выпуклых сеток.

Система алгебраических уравнений, аналогичная (2.10), теперь дополнена ограничениями типа равенств

$$R_x = \frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial x_n} + \lambda_n \frac{\partial Q_n}{\partial x_n} = 0, \quad R_y = \frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial y_n} + \lambda_n \frac{\partial Q_n}{\partial y_n} = 0, \quad Q_n = 0,$$

здесь  $\lambda_n = 0$  если номер узла  $n \notin \mathcal{L}$  и ограничения типа равенств заданы только для граничных узлов  $n \in \mathcal{L}$ .

Рассмотрим способ минимизации функционала в предположении, что выпуклая сетка получена на  $l$ -м шаге итераций. Координаты  $n$ -го узла на  $l+1$ -м шаге получаются с использованием следующей квазиньютоновской процедуры:

$$\begin{aligned} \tau R_x + \frac{\partial R_x}{\partial x_n} (x_n^{l+1} - x_n^l) + \frac{\partial R_x}{\partial y_n} (y_n^{l+1} - y_n^l) + \frac{\partial R_x}{\partial \lambda_n} (\lambda_n^{l+1} - \lambda_n^l) &= 0, \\ \tau R_y + \frac{\partial R_y}{\partial x_n} (x_n^{l+1} - x_n^l) + \frac{\partial R_y}{\partial y_n} (y_n^{l+1} - y_n^l) + \frac{\partial R_y}{\partial \lambda_n} (\lambda_n^{l+1} - \lambda_n^l) &= 0, \\ \tau Q_n + \frac{\partial Q_n}{\partial x_n} (x_n^{l+1} - x_n^l) + \frac{\partial Q_n}{\partial y_n} (y_n^{l+1} - y_n^l) &= 0, \end{aligned} \quad (2.20)$$

где

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_x}{\partial x_n} &= \frac{\partial^2 \mathcal{D}^h}{\partial x_n^2} + \lambda_n \frac{\partial^2 Q_n}{\partial x_n^2}, \quad \frac{\partial R_x}{\partial y_n} = \frac{\partial^2 \mathcal{D}^h}{\partial x_n \partial y_n} + \lambda_n \frac{\partial^2 Q_n}{\partial x_n \partial y_n}, \quad \frac{\partial R_x}{\partial \lambda_n} = \frac{\partial Q_n}{\partial x_n}, \\ \frac{\partial R_y}{\partial x_n} &= \frac{\partial^2 \mathcal{D}^h}{\partial x_n \partial y_n} + \lambda_n \frac{\partial^2 Q_n}{\partial x_n \partial y_n}, \quad \frac{\partial R_y}{\partial y_n} = \frac{\partial^2 \mathcal{D}^h}{\partial y_n^2} + \lambda_n \frac{\partial^2 Q_n}{\partial y_n^2}, \quad \frac{\partial R_y}{\partial \lambda_n} = \frac{\partial Q_n}{\partial y_n}. \end{aligned}$$

Выразив из третьего уравнения системы (2.20) разность  $y_n^{l+1}-y_n^l$  и подставив ее в оставшиеся два, получим линейную систему двух уравнений

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_n^{l+1} - x_n^l \\ \lambda_n^{l+1} - \lambda_n^l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{13} \\ a_{23} \end{pmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{\partial R_x}{\partial x_n} - \frac{\partial R_x}{\partial y_n} \frac{\partial Q_n}{\partial x_n} \bigg/ \frac{\partial Q_n}{\partial y_n}, & a_{12} &= \frac{\partial Q_n}{\partial x_n}, \\ a_{21} &= \frac{\partial R_y}{\partial x_n} - \frac{\partial R_y}{\partial y_n} \frac{\partial Q_n}{\partial x_n} \bigg/ \frac{\partial Q_n}{\partial y_n}, & a_{22} &= \frac{\partial Q_n}{\partial y_n}, \\ a_{13} &= \tau \left[ \frac{\partial R_x}{\partial y_n} Q_n \bigg/ \frac{\partial Q_n}{\partial y_n} - R_x \right], & a_{23} &= \tau \left[ \frac{\partial R_y}{\partial y_n} Q_n \bigg/ \frac{\partial Q_n}{\partial y_n} - R_y \right]. \end{aligned}$$

Введя обозначения  $\Delta = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$ ,  $\Delta_1 = a_{13}a_{22} - a_{23}a_{12}$ ,  $\Delta_2 = a_{11}a_{23} - a_{21}a_{13}$  (поскольку  $Q_n=0$ , выражения для  $a_{13}, a_{23}$  упростятся), получим

$$x_n^{l+1} = x_n^l + \Delta_1/\Delta, \quad \lambda_n^{l+1} = \lambda_n^l + \Delta_2/\Delta, \quad (2.21)$$

а  $y_n^{l+1}$  находится из третьего уравнения системы (2.20). Если ограничения разрешены относительно  $y$  в виде  $Q(x, y) = y - q_1(x) = 0$ , тогда

$$\frac{\partial Q_n}{\partial x_n} = -\frac{\partial g_n}{\partial x_n}, \quad \frac{\partial Q_n}{\partial y_n} = 1,$$

и расчетные формулы упрощаются. Ограничения могут быть разрешены относительно  $x$  в виде  $Q(x, y) = x - q_2(y) = 0$  и тогда

$$\frac{\partial Q_n}{\partial x_n} = 1, \quad \frac{\partial Q_n}{\partial y_n} = -\frac{\partial \tilde{g}_n}{\partial y_n}.$$

В этом случае следует из третьего уравнения системы (2.20) выразить разность  $x_n^{l+1}-x_n^l$  и подставить ее в первые два. Приведенные выше две формы задания границы могут заменять одна другую. Например, на участках границы почти параллельных оси  $x$ , следует использовать уравнение границы  $y=q_1(x)$ , а там где граница почти параллельна оси  $y$  следует брать  $x=q_2(y)$ .

Если граница области  $\partial\Omega$  задана параметрически  $x=x(t)$ ,  $y=y(t)$  или таблично  $(x, y)_n$ , тогда можно применять следующий алгоритм. При

определении координат  $n$ -го узла на интервале  $(x_{n-1}, x_{n+1})$  строится интерполяционная парабола  $t=t(x)$  по значениям в узлах  $n-1, n, n+1$ . Из (2.21) вычисляется промежуточное значение  $\tilde{x}_n^{l+1}$ , затем из интерполяционной формулы определяется  $t_n=t(\tilde{x}_n^{l+1})$  и из параметрических формул окончательные значения  $x_n^{l+1}, y_n^{l+1}$ .

Другой способ управления движением граничных узлов при параметрическом задании границы области  $\partial\Omega$  состоит в решении системы алгебраических уравнений (*параметрическая минимизация*)

$$R_t = R_x \frac{\partial x_n}{\partial t_n} + R_y \frac{\partial y_n}{\partial t_n} = 0$$

с помощью ньютоновской процедуры

$$\tau R_t + \frac{\partial R_t}{\partial t_n} (t_n^{l+1} - t_n^l) = 0.$$

Здесь

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_t}{\partial t_n} = & \frac{\partial R_x}{\partial x_n} \left( \frac{\partial x_n}{\partial t_n} \right)^2 + \frac{\partial R_y}{\partial y_n} \left( \frac{\partial y_n}{\partial t_n} \right)^2 + \left( \frac{\partial R_x}{\partial y_n} + \frac{\partial R_y}{\partial x_n} \right) \frac{\partial x_n}{\partial t_n} \frac{\partial y_n}{\partial t_n} + \\ & + R_x \frac{\partial^2 x_n}{\partial t_n^2} + R_y \frac{\partial^2 y_n}{\partial t_n^2}, \quad R_x = \frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial x_n}, \quad R_y = \frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial y_n}. \end{aligned}$$

В случае аналитически заданной мониторной функции условная и параметрическая минимизации дают одинаковые результаты. В то же время расчеты двумерных течений газа показали, что расстановку граничных узлов предпочтительнее проводить с использованием условной минимизации, поскольку процедура параметрической минимизации не всегда обеспечивает согласованную расстановку узлов внутри области  $\Omega$  и на ее границе  $\partial\Omega$ , и ее использование может привести к вырождению ячеек сетки на границе.

## 2.8 Адаптация к аналитически заданной мониторной функции

Рассмотрим простой пример, иллюстрирующий несогласованное и согласованное сгущение узлов внутри области  $\Omega$  и вдоль ее границы  $\partial\Omega$ , когда



для расстановки граничных узлов используются способы, описанные в разделе 2.7. Строится адаптивная сетка с числом узлов  $51 \times 51$  в квадрате  $0 \leq x, y \leq 1$ , когда мониторинговая функция задана в виде

$$f(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{при } y < 0.5, \\ 0 & \text{при } y \geq 0.5. \end{cases}$$

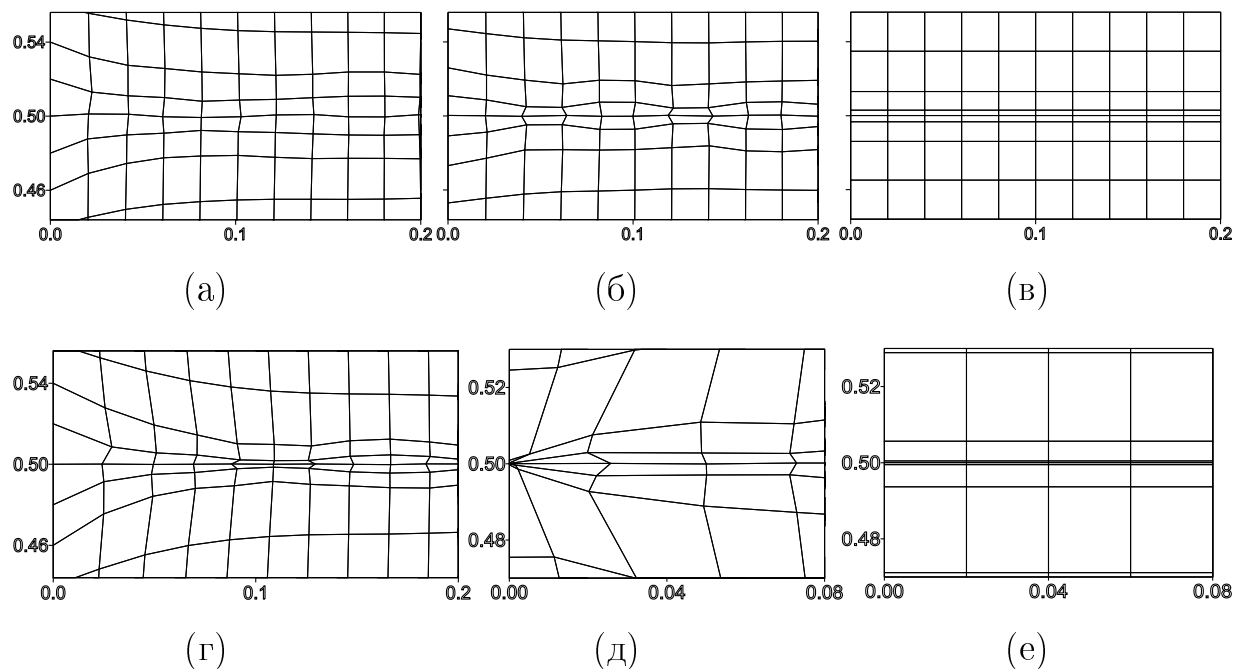


Рис. 2.7. Способы фиксированных узлов (а),(г), одномерной минимизации (б),(д), безусловной, условной или параметрической (в),(е) минимизации.

В (2.20) итерационный параметр задается  $\tau=0.15$ . Фрагменты адаптивных сеток около левой границы  $\partial\Omega$  в окрестности разрыва  $f$  представлены на рис. 2.7. В первой серии расчетов  $c_a=0.1$  (см. рис. 2.7а–2.7в), когда используются способы фиксированных узлов (см. рис. 2.7а) и одномерной минимизации (см. рис. 2.7б), параллельность горизонтальных линий сетки нарушается, а при применении безусловной, условной или параметрической минимизации сохраняется (см. рис. 2.7в). Во второй серии расчетов  $c_a=0.15$  (см. рис. 2.7г–2.7е). В способе фиксированных узлов (см. рис. 2.7г) горизонтальные линии сетки изгибаются еще больше. Использование одномерной минимизации (см. рис. 2.7д) приводит к

"переползанию" граничных узлов друг через друга и, следовательно, к вырождению приграничных ячеек. В расчете с помощью безусловной, условной или параметрической минимизации (см. рис. 2.7е) горизонтальные линии сетки почти сливаются, но остаются параллельными и сетка является невырожденной. В этом примере безусловная минимизация дает такие же результаты как и условная и параметрическая благодаря тому, что линия разрыва подходит ортогонально к границе  $\partial\Omega$ .

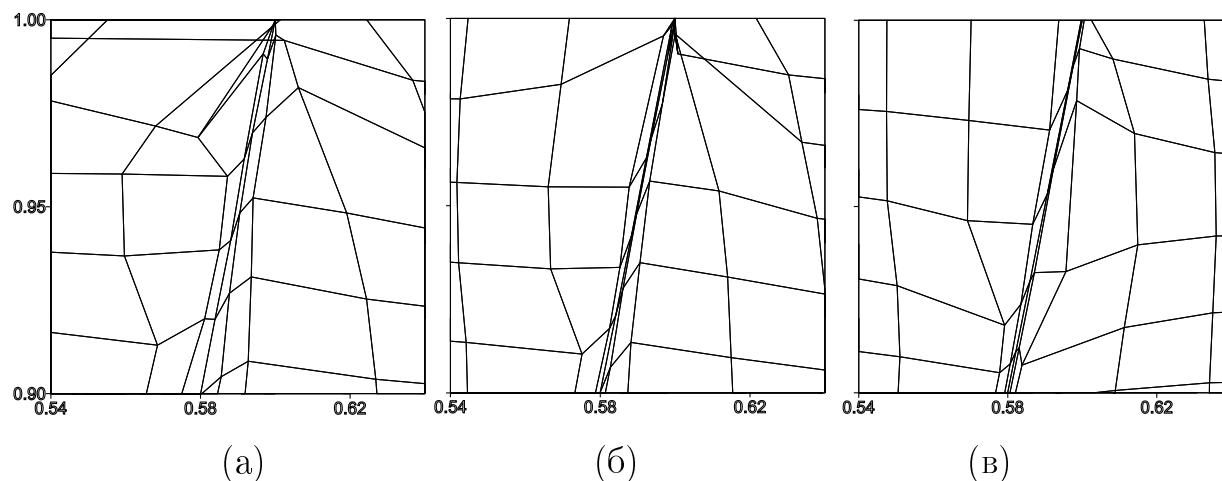


Рис. 2.8. Безусловная (а), одномерная (б), условная и параметрическая (в) минимизации.

В следующем примере линия разрыва наклонена к границе  $\partial\Omega$ . Мониторная функция имеет вид

$$f(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{при } y > 5x - 2, \\ 0 & \text{при } y \leq 5x - 2. \end{cases}$$

Коэффициент адаптации  $c_a=0.3$ , итерационный параметр  $\tau=0.1$ . Фрагменты адаптивных сеток около верхней границы  $\partial\Omega$  в окрестности разрыва  $f$  представлены на рис. 2.8. Здесь использование безусловной (см. рис. 2.8а) и одномерной минимизации (см. рис. 2.8б) приводит к переползанию граничных узлов друг через друга уже через несколько десятков итераций по сетке. Условная и параметрическая минимизация (см. рис. 2.8в) обеспечивают невырожденность сетки. Для аналитически заданной мониторинной функции эти два способа дают одинаковые результаты.

## 2.9 Функционал в трехмерном случае

В случае  $n=3$  функционал (2.2), записанный на многообразии  $\mathcal{M}$  в пространстве  $\mathbb{R}^{3+m}$ , примет вид

$$\mathcal{D} = \frac{1}{3^{3/2}} \iiint_{\mathcal{P}} \frac{[\text{tr}(G^{-1}\tilde{g})]^{3/2} \sqrt{\det G}}{\sqrt{\det \tilde{g}}} d\xi^1 d\xi^2 d\xi^3. \quad (2.22)$$

В многообразии  $\mathcal{M}$  в точке с координатами  $\tilde{\mathbf{r}}=(x^1, x^2, x^3, f^1, \dots, f^m)$  компоненты метрического тензора  $\tilde{g}$  задаются соотношениями

$$\tilde{g}_{ij} = \tilde{\mathbf{r}}_{\xi^i} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{\xi^j}, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (2.23)$$

где  $\tilde{\mathbf{r}}_{\xi^i}=(x_{\xi^i}^1, x_{\xi^i}^2, x_{\xi^i}^3, f_{\xi^i}^1, \dots, f_{\xi^i}^m)$ . Поскольку каждая компонента мониторинговой функции  $f^p=f^p(x^1, x^2, x^3)$  и, следовательно,

$$f_{\xi^i}^p = f_{x^j}^p x_{\xi^i}^j, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad p = 1, \dots, m, \quad (2.24)$$

то имеем для компонент метрического тензора

$$\tilde{g}_{ij} = \alpha_{kl} \frac{\partial x^k}{\partial \xi^i} \frac{\partial x^l}{\partial \xi^j}, \quad (2.25)$$

где

$$\alpha_{kl} = \delta_{kl} + \frac{\partial f^p}{\partial x^k} \frac{\partial f^p}{\partial x^l}, \quad k, l = 1, 2, 3, \quad p = 1, 2, \dots, m, \quad (2.26)$$

$\delta_{kl}$  – символ Кронекера. Компоненты метрического тензора  $G_{ij}$  в точке пространства  $X^1, X^2, X^3$  задаются по формулам аналогичным (2.23).

Найдем выражение для определителя матрицы  $\tilde{g}$ . Подставив в  $\det \tilde{g}$  коэффициенты (2.25), (2.26), после довольно громоздких преобразований, которые для краткости опускаем, получим

$$\det \tilde{g} = \left( 1 + \sum_{p=1}^m (f_{x^1}^p)^2 + (f_{x^2}^p)^2 + (f_{x^3}^p)^2 \right) \det g, \quad (2.27)$$

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

$$\sqrt{\det g} = \mathbf{r}_{\xi^1} \cdot (\mathbf{r}_{\xi^2} \times \mathbf{r}_{\xi^3}),$$

где  $\mathbf{r}=(x^1, x^2, x^3)$ . Если в (2.27) для скалярной мониторной функции  $f$  перейти к дифференцированию по переменным  $\xi^i$ , то получим формулу для  $\det \tilde{g}$ , рассматривавшуюся в [74, стр. 102].

Подставив (2.27) в (2.22), получим окончательный вид функционала  $\mathcal{D}$  [149](Ivanenko, 2004)

$$\mathcal{D} = \frac{1}{3^{3/2}} \iiint_{\mathcal{P}} \frac{[\text{tr}(G^{-1}\tilde{g})]^{3/2} \sqrt{\det G}}{\sqrt{\det g} \sqrt{1 + \sum_{p=1}^m (f_{x^1}^i)^2 + (f_{x^2}^i)^2 + (f_{x^3}^i)^2}} d\xi^1 d\xi^2 d\xi^3. \quad (2.28)$$

При отсутствии адаптации, когда все компоненты  $f^i = \text{const}$ , многообразие  $\mathcal{M}$  совпадает с областью  $\Omega$ , а (2.28) переходит в функционал (1.7).

## 2.10 Аппроксимация и минимизация функционала

Предположим, что в области  $\Omega$  необходимо построить структурированную адаптивную сетку с числом узлов  $N_1, N_2, N_3$  по трем координатным направлениям  $i, j, k$  соответственно. В качестве области  $\mathcal{P}$  рассматриваем прямоугольный параллелепипед с ребрами  $N_1-1, N_2-1, N_3-1$ . Для каждой линейчатой ячейки, число которых равно  $N_c = (N_1-1)(N_2-1)(N_3-1)$ , аппроксимацию функционала (2.28) будем проводить на 10 базисных тетраэдрах, рассмотренных в разделе 1.5. В результате получим дискретный аналог функционала, разностную функцию

$$\mathcal{D}^h = \sum_{n=1}^{N_c} \sum_{m=1}^{10} \frac{1}{10} [E_m]_n, \quad (2.29)$$

где  $[E_m]_n$  – подынтегральное выражение в (2.28), вычисленное для  $m$ -го тетраэдра  $n$ -й ячейки.

Если множество невырожденных сеток, состоящих из 12-гранных ячеек, не пусто, то система алгебраических уравнений, записанных для внутренних узлов сетки,

$$R_{x^i} = \frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial x_n^i} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.30)$$

имеет по крайней мере одно решение, являющееся невырожденной сеткой. Здесь  $n$  – глобальный номер узла сетки. Для нахождения этого решения следует применять метод безусловной минимизации функции  $\mathcal{D}^h$ , взяв в качестве начального приближения невырожденную сетку.

Для нахождения минимума  $\mathcal{D}^h$  используется безусловная минимизация. Имея невырожденную сетку на  $l$ -м шаге итераций, координаты  $n$ -го узла сетки на  $l+1$ -м шаге вычисляются с использованием квазиньютоновской процедуры (1.15). Для осуществления итерационной процедуры (1.15) необходимо уметь вычислять первые и вторые производные в узле сетки от разностной функции  $\mathcal{D}^h$ . Они были получены в [12, 14] (Азаренок, 2007, 2008) и приведены в следующем разделе.

## 2.11 Расчетные формулы

Представим подынтегральное выражение в (2.28) в виде  $E = U/V$ , где

$$U = \gamma (G^{ij} \tilde{g}_{ji})^{3/2}, \quad V = \sqrt{\det g} = \mathbf{r}_{\xi^1} \cdot (\mathbf{r}_{\xi^2} \times \mathbf{r}_{\xi^3}),$$

$$\gamma = 3^{-3/2} \sqrt{\det G} \left( 1 + \sum_{=1}^m (f_{x^1}^p)^2 + (f_{x^2}^p)^2 + (f_{x^3}^p)^2 \right)^{-1/2}.$$

Для получения производных воспользуемся правилом дифференцирования отношения функций

$$E_{x^i} = \frac{U_{x^i} - EV_{x^i}}{V}, \quad E_{x^i x^j} = \frac{U_{x^i x^j} - 2E_{x^i} V_{x^j} - EV_{x^i x^j}}{V}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Рассмотрим дифференцирование числителя  $U$

$$U_{x^m} = \frac{3}{2} \gamma (G^{ij} \tilde{g}_{ji})^{1/2} G^{kl} \frac{\partial \tilde{g}_{lk}}{\partial x^m}, \quad (2.31)$$

$$U_{x^m x^n} = \frac{3}{2} \gamma (G^{ij} \tilde{g}_{ji})^{-1/2} \left[ \frac{1}{2} G^{ij} \frac{\partial \tilde{g}_{ji}}{\partial x^m} G^{kl} \frac{\partial \tilde{g}_{lk}}{\partial x^n} + G^{ij} \tilde{g}_{ji} G^{kl} \frac{\partial^2 \tilde{g}_{lk}}{\partial x^m \partial x^n} \right],$$

$i, j, k, l, m, n = 1, 2, 3$ . При дифференцировании производные  $f_{x^j}^p$  считаются фиксированными, т.е. производные от мониторной функции замораживаются. Причины этого для одномерного и двумерного случаев обсуждались в разделе 2.5, а для трехмерного рассматриваются в разделе 2.14.

В разделе 2.10 отмечалось, что аппроксимация функционала проводится на 10 базисных тетраэдрах. Рассмотрим линейное отображение  $\tilde{\mathbf{r}}^h(\boldsymbol{\xi})$ , переводящее базисный тетраэдр  $T_{1245}$  из пространства  $\xi^1, \xi^2, \xi^3$  (см. рис. 1.3б) в соответствующий угловой тетраэдр 12-гранной ячейки, построенной в многообразии  $\mathcal{M}$  из  $\mathbb{R}^{3+m}$ . При этом линейное отображение  $\mathbf{r}^h(\boldsymbol{\xi})$ , трансформирующее этот базисный тетраэдр в тетраэдр  $T_{1245}$  12-гранной ячейки из пространства  $x^1, x^2, x^3$  (см. рис. 1.2б), имеет вид

$$\mathbf{r}^h = (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)\xi^1 + (\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_1)\xi^2 + (\mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_1)\xi^3 + \mathbf{r}_1, \quad 0 \leq \xi^1, \xi^2, \xi^3; \xi^1 + \xi^2 + \xi^3 \leq 1.$$

Подставив производные  $\mathbf{r}_{\xi^i}^h$  в (2.25), получим формулы для определения компонент метрического тензора  $\tilde{g}_{ij}$

$$\begin{aligned} \tilde{g}_{11} &= \alpha_{kl}(x_2^k - x_1^k)(x_2^l - x_1^l), \quad \tilde{g}_{22} = \alpha_{kl}(x_4^k - x_1^k)(x_4^l - x_1^l), \\ \tilde{g}_{33} &= \alpha_{kl}(x_5^k - x_1^k)(x_5^l - x_1^l), \quad \tilde{g}_{12} = \alpha_{kl}(x_2^k - x_1^k)(x_4^l - x_1^l), \\ \tilde{g}_{13} &= \alpha_{kl}(x_2^k - x_1^k)(x_5^l - x_1^l), \quad \tilde{g}_{23} = \alpha_{kl}(x_4^k - x_1^k)(x_5^l - x_1^l), \end{aligned}$$

$k, l=1, 2, 3$ . Коэффициенты  $\alpha_{kl}$  находятся из (2.26), и для их вычисления необходимо знать разностные производные  $(f_{x^k}^i)^h$  в узлах сетки. Они определяются ниже.

При вычислении производных от  $U$  необходимо в (2.31) вместо  $x^k$  подставлять  $x_i^k$ , где  $i$  – номер вершины тетраэдра  $T_{1245}$ . Для вершины 1 производные от  $\tilde{g}_{ij}$  равны

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_1^k} &= 2\alpha_{kl}(x_1^l - x_2^l), \quad \frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_1^k} = 2\alpha_{kl}(x_1^l - x_4^l), \quad \frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_1^k} = 2\alpha_{kl}(x_1^l - x_5^l), \\ \frac{\partial \tilde{g}_{12}}{\partial x_1^k} &= 2\alpha_{kl}(2x_1^l - x_2^l - x_4^l), \quad \frac{\partial \tilde{g}_{13}}{\partial x_1^k} = 2\alpha_{kl}(2x_1^l - x_2^l - x_5^l), \\ \frac{\partial \tilde{g}_{23}}{\partial x_1^k} &= 2\alpha_{kl}(2x_1^l - x_4^l - x_5^l), \quad \frac{\partial^2 \tilde{g}_{ij}}{\partial x_1^k \partial x_1^l} = 2\alpha_{kl}, \quad k, l, i, j=1, 2, 3. \end{aligned}$$

Производные в вершинах 2, 4, 5 вычисляются сходным образом. Они могут быть выражены через производные в вершине 1, что существенно сокращает количество операций при вычислениях. Для вершины 2

выпишем производные, неравные нулю

$$\frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_2^k} = -\frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_1^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{12}}{\partial x_2^k} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_1^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{13}}{\partial x_2^k} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_1^k}, \quad \frac{\partial^2 \tilde{g}_{11}}{\partial x_2^k \partial x_2^l} = 2\alpha_{kl},$$

$k, l=1, 2, 3$ .

Также поступаем с вершиной 4

$$\frac{\partial \tilde{g}_{12}}{\partial x_4^k} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_1^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{23}}{\partial x_4^k} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_1^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_4^k} = -\frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_1^k}, \quad \frac{\partial^2 \tilde{g}_{22}}{\partial x_4^k \partial x_4^l} = 2\alpha_{kl}$$

и с вершиной 5

$$\frac{\partial \tilde{g}_{13}}{\partial x_5^k} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_1^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{23}}{\partial x_5^k} = -\frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_1^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_5^k} = -\frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_1^k}, \quad \frac{\partial^2 \tilde{g}_{33}}{\partial x_5^k \partial x_5^l} = 2\alpha_{kl}.$$

Выражения для производных от знаменателя  $V$  приведены в разделе 1.8. Поскольку подынтегральное выражение  $E$  инвариантно относительно поворота системы координат  $\boldsymbol{\xi}$ , для остальных семи угловых тетраэдров формулы дифференцирования  $U$  и  $V$  останутся неизменными. Нужно только произвести соответствующую замену индексов.

Приведем формулы для определения компонент метрического тензора  $\tilde{g}_{ij}$  на базисном тетраэдре  $T_{2457}$  (см. рис. 1.3в). Для этого рассмотрим линейное отображение  $\tilde{\mathbf{r}}^h(\boldsymbol{\xi})$ , переводящее базисный тетраэдр  $T_{2457}$  в соответствующий внутренний тетраэдр 12-гранной ячейки, построенной в многообразии  $\mathcal{M}$ . При этом линейное отображение  $\mathbf{r}^h(\boldsymbol{\xi})$ , трансформирующее этот базисный тетраэдр в тетраэдр  $T_{2457}$  12-гранной ячейки из пространства  $x^1, x^2, x^3$  (см. рис. 1.2в), имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{r}^h = & \frac{1}{2}(\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_5)\xi^1 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_5)\xi^2 + \\ & + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_7 + \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4)\xi^3 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_4 + \mathbf{r}_5 - \mathbf{r}_7). \end{aligned}$$

Подставив производные  $\mathbf{r}_{\xi^i}^h$  в (2.25), получим формулы для определения компонент метрического тензора  $\tilde{g}_{ij}$

$$\begin{aligned}
\tilde{g}_{11} &= \frac{1}{4}\alpha_{kl}(x_7^k + x_2^k - x_5^k - x_4^k)(x_7^l + x_2^l - x_5^l - x_4^l), \\
\tilde{g}_{22} &= \frac{1}{4}\alpha_{kl}(x_7^k + x_4^k - x_5^k - x_2^k)(x_7^l + x_4^l - x_5^l - x_2^l), \\
\tilde{g}_{33} &= \frac{1}{4}\alpha_{kl}(x_7^k + x_5^k - x_2^k - x_4^k)(x_7^l + x_5^l - x_2^l - x_4^l), \\
\tilde{g}_{12} &= \frac{1}{4}\alpha_{kl}(x_7^k + x_2^k - x_5^k - x_4^k)(x_7^l + x_4^l - x_5^l - x_2^l), \\
\tilde{g}_{13} &= \frac{1}{4}\alpha_{kl}(x_7^k + x_2^k - x_5^k - x_4^k)(x_7^l + x_2^l - x_5^l - x_4^l), \\
\tilde{g}_{23} &= \frac{1}{4}\alpha_{kl}(x_7^k + x_4^k - x_5^k - x_2^k)(x_7^l + x_2^l - x_5^l - x_4^l),
\end{aligned}$$

$k, l=1, 2, 3$ .

При вычислении производных от  $U$  необходимо в (2.31) вместо  $x^k$  подставлять  $x_i^k$ . Для вершины 2 производные от  $\tilde{g}_{ij}$  равны

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}\alpha_{kl}(x_7^l + x_2^l - x_5^l - x_4^l), & \frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}\alpha_{kl}(x_5^l + x_2^l - x_7^l - x_4^l), \\
\frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}\alpha_{kl}(x_4^l + x_2^l - x_7^l - x_5^l), & \frac{\partial^2 \tilde{g}_{ii}}{\partial (x_2^k)^2} &= \frac{1}{2}\alpha_{kk}, \\
\frac{\partial \tilde{g}_{12}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}\alpha_{kl}(x_4^l - x_2^l), & \frac{\partial \tilde{g}_{13}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}\alpha_{kl}(x_5^l - x_2^l), & \frac{\partial \tilde{g}_{23}}{\partial x_2^k} &= \frac{1}{2}\alpha_{kl}(x_2^l - x_7^l), \\
\frac{\partial^2 \tilde{g}_{12}}{\partial (x_2^k)^2} &= \frac{\partial^2 \tilde{g}_{13}}{\partial (x_2^k)^2} = \frac{1}{2}\alpha_{kk}, & \frac{\partial^2 \tilde{g}_{23}}{\partial (x_2^k)^2} &= -\frac{1}{2}\alpha_{kk}, & i, j, l &= 1, 2, 3,
\end{aligned}$$

для смешанных производных  $\frac{\partial^2 \tilde{g}_{ij}}{\partial x_2^k \partial x_2^l} = \frac{1}{2}\alpha_{kl}, \quad l \neq k$ .

Для вершины 4 выпишем ненулевые производные, выраженные через производные в вершине 2,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_4^k} &= -\frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_2^k}, & \frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_4^k} &= -\frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_2^k}, & \frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_4^k} &= \frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_2^k}, & \frac{\partial \tilde{g}_{12}}{\partial x_4^k} &= -\frac{\partial \tilde{g}_{12}}{\partial x_2^k}, \\
\frac{\partial \tilde{g}_{13}}{\partial x_4^k} &= \frac{1}{2}\alpha_{kl}(x_4^l - x_7^l), & \frac{\partial \tilde{g}_{23}}{\partial x_4^k} &= \frac{1}{2}\alpha_{kl}(x_5^l - x_4^l), \\
\frac{\partial^2 \tilde{g}_{ii}}{\partial (x_4^k)^2} &= \frac{\partial^2 \tilde{g}_{13}}{\partial (x_4^k)^2} = \frac{1}{2}\alpha_{kk}, & \frac{\partial^2 \tilde{g}_{12}}{\partial (x_4^k)^2} &= \frac{\partial^2 \tilde{g}_{23}}{\partial (x_4^k)^2} = -\frac{1}{2}\alpha_{kk}.
\end{aligned}$$

Смешанные производные не изменятся.



Для вершины 5 получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_5^k} &= -\frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_2^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_5^k} = \frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_2^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_5^k} = -\frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_2^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{13}}{\partial x_5^k} = -\frac{\partial \tilde{g}_{13}}{\partial x_2^k}, \\ \frac{\partial \tilde{g}_{23}}{\partial x_5^k} &= -\frac{\partial \tilde{g}_{23}}{\partial x_4^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{12}}{\partial x_5^k} = \frac{1}{2}\alpha_{kl}(x_5^l - x_7^l), \\ \frac{\partial^2 \tilde{g}_{ii}}{\partial (x_5^k)^2} &= \frac{\partial^2 \tilde{g}_{12}}{\partial (x_5^k)^2} = \frac{1}{2}\alpha_{kk}, \quad \frac{\partial^2 \tilde{g}_{13}}{\partial (x_5^k)^2} = \frac{\partial^2 \tilde{g}_{23}}{\partial (x_5^k)^2} = -\frac{1}{2}\alpha_{kk}.\end{aligned}$$

Для вершины 7 получаем

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_7^k} &= \frac{\partial \tilde{g}_{11}}{\partial x_2^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_7^k} = -\frac{\partial \tilde{g}_{22}}{\partial x_2^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_7^k} = -\frac{\partial \tilde{g}_{33}}{\partial x_2^k}, \\ \frac{\partial \tilde{g}_{12}}{\partial x_7^k} &= -\frac{\partial \tilde{g}_{12}}{\partial x_5^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{13}}{\partial x_7^k} = -\frac{\partial \tilde{g}_{13}}{\partial x_4^k}, \quad \frac{\partial \tilde{g}_{23}}{\partial x_7^k} = -\frac{\partial \tilde{g}_{23}}{\partial x_2^k}, \\ \frac{\partial^2 \tilde{g}_{ii}}{\partial (x_7^k)^2} &= \frac{\partial^2 \tilde{g}_{12}}{\partial (x_7^k)^2} = \frac{\partial^2 \tilde{g}_{13}}{\partial (x_7^k)^2} = \frac{\partial^2 \tilde{g}_{23}}{\partial (x_7^k)^2} = \frac{1}{2}\alpha_{kk}.\end{aligned}$$

Выражения для производных от знаменателя  $V$  приведены в разделе 1.8. Для второго внутреннего базисного тетраэдра, который отображается в тетраэдр  $T_{1368}$  (см. рис. 1.2в), можно применять полученные формулы дифференцирования  $U$  и  $V$  при соответствующей замене индексов.

Необходимо вычислять разностную производную  $f_{x^i}^h$  (верхний индекс  $p$  для краткости опущен, в предположении что  $f$  – скалярная функция) в узлах сетки. Для этого разрешим систему (2.24) относительно  $f_{x^i}$

$$f_{x^i} = b_{ij}^{-1} f_{\xi^j}, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (2.32)$$

где  $b^{-1}$  – матрица, обратная по отношению к матрице Якоби  $\partial x^i / \partial \xi^j$  для отображения  $\overline{\mathcal{P}} \rightarrow \overline{\Omega}$ . Производная для углового тетраэдра  $T_{1245}$ , которую обозначим  $(f_{x^i}^h)_1$ , определяется из (2.32) с использованием аппроксимаций для  $f_{\xi^j}^h$  и  $(x_{\xi^j}^i)^h$

$$\begin{aligned}(x_{\xi^1}^i)^h &= x_2^i - x_1^i, \quad (x_{\xi^2}^i)^h = x_4^i - x_1^i, \quad (x_{\xi^3}^i)^h = x_5^i - x_1^i, \quad i = 1, 2, 3, \\ f_{\xi^1}^h &= f_2 - f_1, \quad f_{\xi^2}^h = f_4 - f_1, \quad f_{\xi^3}^h = f_5 - f_1.\end{aligned}$$

Затем  $f_{x^i}^h$  переинтерполируется в узле сетки с использованием значений производных  $(f_{x^i}^h)_l$  в восьми угловых тетраэдрах, примыкающих к

этому узлу

$$f_{x^i}^h = \sum_{l=1}^8 (f_{x^i}^h)_l V_l \left( \sum_{l=1}^8 V_l \right)^{-1},$$

где  $V_l$  – объем  $l$ -го тетраэдра.

Если при моделировании значения мониторной функции заданы в центрах ячеек, их следует переинтерполировать в узлы сетки.

Также как и в разделе 2.2 вводится коэффициент адаптации  $c_a$ . Для этого вместо компонент  $f^i$  в расчетных формулах используются  $c_a f^i$ . Дополнительно  $f^i$  масштабируются таким образом, чтобы разность максимального и минимального значений  $f^i$  была равна длине диагонали прямоугольного параллелепипеда, описанного вокруг физической области  $\Omega$ , т.е.

$$f_{\max}^i - f_{\min}^i = \left[ \sum_{j=1}^3 (x_{\max}^j - x_{\min}^j)^2 \right]^{1/2}.$$

Теперь, когда вычислена  $E$  и ее производные в вершинах десяти тетраэдров, можно формировать элементы системы уравнений квазиныютоновской процедуры (1.15). Пусть локальным номерам вершин ячейки  $1, 2, \dots, 8$  соответствуют глобальные номера узлов сетки  $n_1, n_2, \dots, n_8$ . Тогда значение  $E$  и ее производных в вершине 1 тетраэдра  $T_{1245}$  добавляются к  $\mathcal{D}^h$  и элементам системы (1.15)

$$\mathcal{D}^h = \mathcal{D}^h + E, \quad [R_{x^i}]_{n_1} = [R_{x^i}]_{n_1} + E_{x^i}, \quad [R_{x^i x^j}]_{n_1} = [R_{x^i x^j}]_{n_1} + E_{x^i x^j}.$$

$i, j=1, 2, 3$ . Здесь используется запись, принятая в языках программирования. Она подразумевает, например, что новое значение  $\mathcal{D}^h$  стало равным  $\mathcal{D}^h + E$ . Значения, вычисленные в вершинах 2, 4 и 5 тетраэдра добавляются к  $\mathcal{D}^h$  и соответствующим членам  $[R_{x^i}]_{n_2}, [R_{x^i x^j}]_{n_2}, [R_{x^i}]_{n_4}, [R_{x^i x^j}]_{n_4}, [R_{x^i}]_{n_5}, [R_{x^i x^j}]_{n_5}$ . Точно также поступаем со значениями  $E$  и ее производными, вычисленными в вершинах остальных девяти тетраэдров.

Алгоритм непосредственно переносится на неструктурированные сетки. Нужно только задать соответствие между локальным номером вершины ячейки и глобальным номером узла сетки.

## 2.12 Расстановка узлов на границе

В случаях когда при моделировании основной задачи в физической области  $\Omega$  ее граница  $\partial\Omega$  движется и форма  $\Omega$  существенно изменяется, необходимо осуществлять перераспределение узлов по границе  $\partial\Omega$ . Движение узлов внутри области  $\Omega$  и по  $\partial\Omega$  следует осуществлять согласованно. Для этого используется условная минимизация дискретного функционала, рассмотренная в разделе 1.12. Необходимо минимизировать следующий дискретный функционал:

$$\mathcal{D}_1^h = \sum_{n=1}^{N_c} \sum_{m=1}^{10} \frac{1}{10} [E_m]_n + \sum_{\tilde{\mathbf{r}}_l \in \partial\Omega} \lambda_l Q(\tilde{\mathbf{r}}_l) = \mathcal{D}^h + \sum_{l \in \mathcal{L}} \lambda_l Q_l.$$

Здесь ограничения  $Q_l = Q(\mathbf{r}_l) = 0$  задают  $\partial\Omega$ ,  $\lambda_l$  – множители Лагранжа,  $\mathcal{L}$  – множество граничных узлов сетки.

Система алгебраических уравнений, аналогичная (2.30), теперь дополнена ограничениями типа равенств

$$R_{x^i} = \frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial x_n^i} + \lambda_n \frac{\partial Q_n}{\partial x_n^i} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad Q_n = 0.$$

Здесь  $\lambda_n = 0$  если номер узла  $n \notin \mathcal{L}$  и ограничения заданы только для граничных узлов  $n \in \mathcal{L}$ .

Используется метод минимизации дискретного функционала  $\mathcal{D}_1^h$  в предположении, что невырожденная сетка получена на  $l$ -м шаге итераций. Координаты  $n$ -го узла на  $l+1$ -м шаге получаются с использованием квазиньютоновской процедуры (1.19).

## 2.13 Примеры построения сеток

**2.13.1 Подковообразная область.** В пространстве  $x, y, z$  область снизу ограничена верхней полусферой радиуса  $r=1$  с центром в начале координат и плоскостью  $z=0$ , сверху – поверхностью, закрываемой вращающейся вокруг оси  $z$  верхней половинкой эллипса  $z>0$ ,

$$x^2/a^2 + z^2/b^2 = 1, \quad a = 2, \quad b = 9.$$

Эта подковообразная область использовалась для генерации двумерных сеток в [158](Knupp, Luczak, 1995), [46](Иваненко, 2000), [16](Азаренок, 2009). Строится регулярная сетка  $61 \times 61 \times 51$ . В отличие от цилиндрической сетки, она получается не в результате вращения двумерной сетки вокруг оси  $z$ . Схематический вид на область снизу представлен на рис. 2.9, где показаны четыре граничные координатные поверхности  $i, j=1, 61$ , расположенные в плоскости  $z=0$ , и проекция поверхности  $k=1$  (полусфера) на эту плоскость. Отметим, что линейчатые шестигранные ячейки сетки, примыкающие к четырем граничным ребрам области  $i=1, j=1$ ;  $i=1, j=61$ ;  $i=61, j=1$ ;  $i=61, j=61$  вырождаются в линейчатые треугольные призмы (см. рис. 1.8).

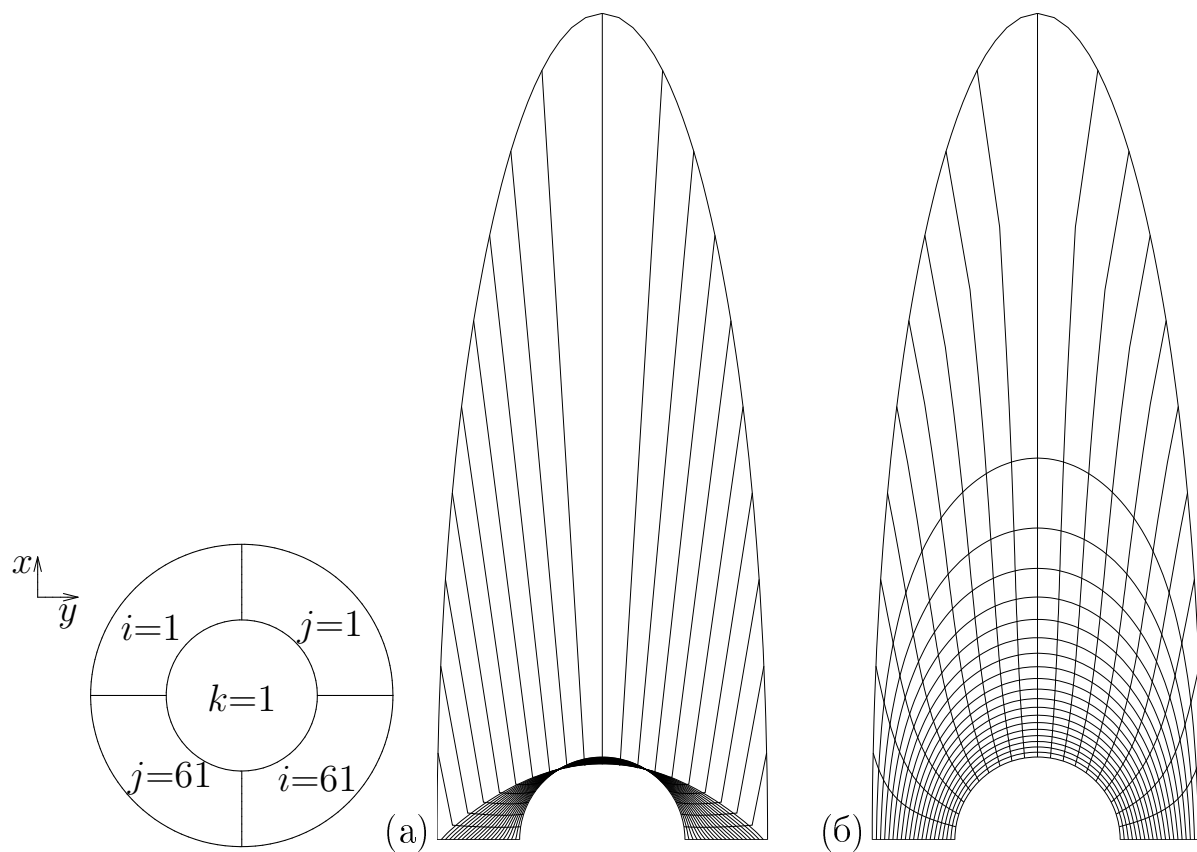


Рис. 2.9. Рис. 2.10. Сетка  $101 \times 101$  в 2D области. Метод Winslow (a), вариационный барьерный метод (б).

Для того чтобы оценить сложность области, рассмотрим сначала построение двумерной сетки в сечении этой области плоскостью  $x=y$ . Несмотря на то что согласно теореме Радó гармоническое отображе-

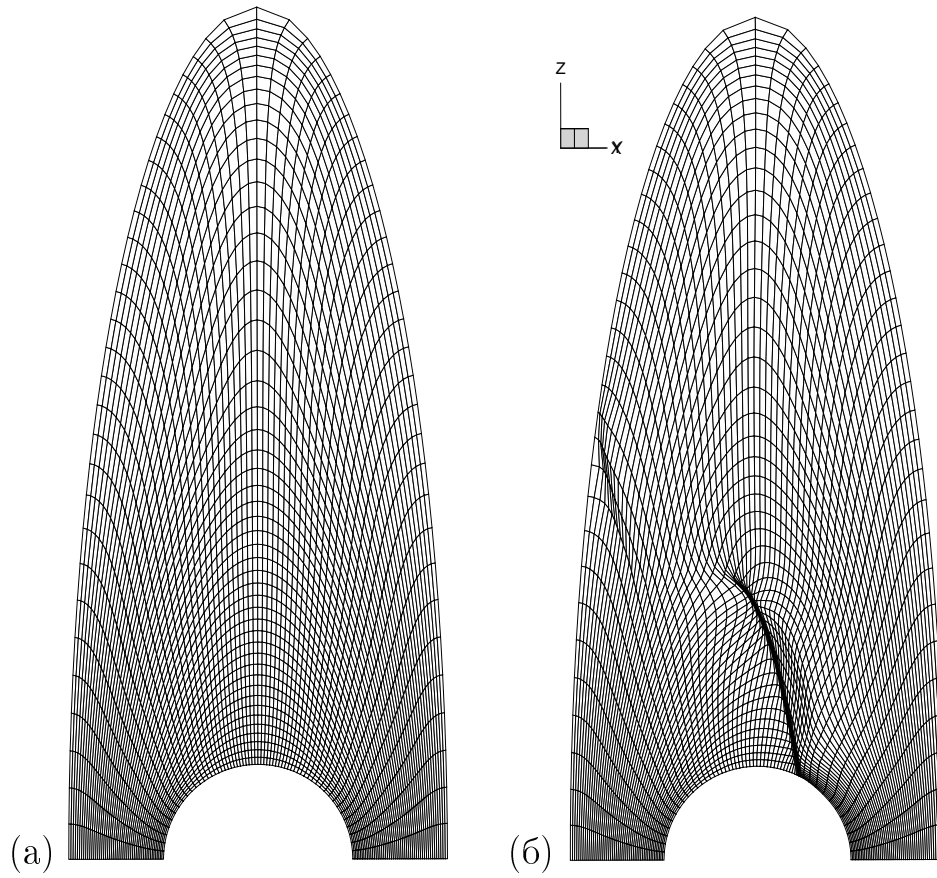


Рис. 2.11. Координатная поверхность  $i=31$  сетки без адаптации (а), с адаптацией (б).

ние является диффеоморфизмом, сетка  $101 \times 101$ , полученная методом Winslow [201], вырождена, см. рис. 2.10а (здесь изображены только каждая 5-я  $i$  и  $j$  линия). Это происходит из-за ошибок аппроксимации [16] (Азаренок, 2009). Вариационный барьерный метод дает невырожденную сетку, см. рис. 2.10б, но с очень вытянутыми ячейками у верхней границы. Такую же сетку мы получили бы в координатной поверхности  $i=31$  в трехмерном случае если бы использовали в качестве  $G_{ij}$  единичный тензор. Поэтому управляющий метрический тензор  $G_{ij}$  подбирается таким образом, чтобы ячейки у верхней границы области не были слишком вытянутыми, см. координатную поверхность  $i=31$  сетки на рис. 2.11а.

Заданы две поверхности в пространстве

$$z^1 = 3 - 5(x + 0.8)(x + 0.4)(x + 0.2), \quad z^2 = 3 - 5(y + 0.8)(y + 0.4)(y + 0.2),$$

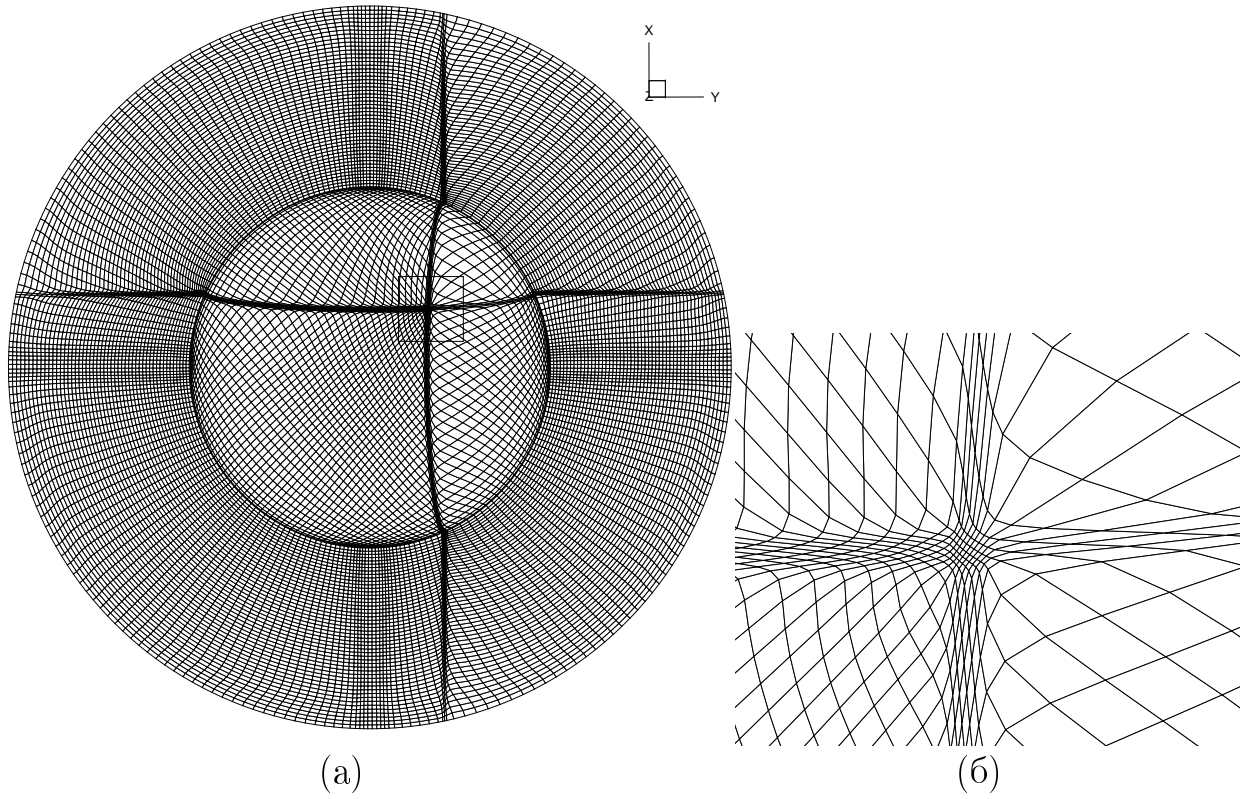


Рис. 2.12. Вид сетки снизу (а) и ее фрагмент (б).

определяющие форму слоев высоких градиентов. Компоненты мониторинговой функции  $f^i$ ,  $i=1, 2$ , для заданной точки  $x, y, z$  вычисляются по формулам

$$f^i = \begin{cases} 1, & \text{если } z \geq z^i + \delta^i \\ 0.5(z - z^i + \delta^i)/\delta^i, & \text{если } |z - z^i| < \delta^i \\ 0, & \text{если } z \leq z^i - \delta^i, \end{cases} \quad (2.33)$$

где  $\delta^i = 0.02\sqrt{1 + (z^i/x^i)^2}$  и используется обозначение  $x^1=x$ ,  $x^2=y$ . Коэффициент адаптации  $c_a=0.015$ .

Управляющий метрический тензор  $G_{ij}$  берется равным  $g_{ij}$  с предыдущей стадии расчета, т.е. для сетки, приведенной на рис. 2.11а. Такое задание  $G_{ij}$  при вычислениях без адаптации приводит к воспроизведению этой же сетки, при том что функционал  $\mathcal{D}^h$  принимает абсолютное минимальное значение равное 1. Поэтому при подключении адаптации значение функционала будет расти. При построении сетки используется движение узлов по граничным поверхностям и ребрам области, а в

случае адаптации дополнительно включается движение восьми угловых точек области по окружностям радиуса  $r=1$  и  $r=2$  в плоскости  $z=0$ . На рис. 2.11б и рис. 2.12 приведена адаптивная сетка. Проверка гексаэдральной адаптивной сетки показала, что все линейчатые ячейки являются невырожденными.

**2.13.2 Область “матрешка”.** Регулярная сетка  $46 \times 46 \times 16$  строится для оболочки (см. рис. 2.13). Здесь также, как и в разделе 2.13.1, четыре граничные поверхности  $i, j=1, 46$  лежат в плоскости  $y=0$ , а поверхности  $k=1, 16$  заматаются образующими при вращении вокруг оси  $z$  на  $180^\circ$ . Координаты опорных точек для образующих линий были предоставлены Т.Н. Брониной. Построение сеток без адаптации в этой области проводилось в [22](Бронина, Ушакова, 2006). Гексаэдральные ячейки, примыкающие к граничным ребрам области  $i, j=1; i=1, j=46; i=46, j=1; i, j=46$  вырождаются в линейчатые треугольные призмы.

На рис. 2.13а представлена начальная сетка. На шести граничных поверхностях сетка строится с помощью вариационного барьерного метода, см., например, [44](Иваненко, 1997), затем с использованием трансфинитной интерполяции генерируется сетка внутри области, из которой получается невырожденная сетка с помощью процедуры, описанной в разделе 1.12. Затем сетка сглаживается при задании управляющего метрического тензора  $G_{ij}$  таким образом, чтобы приграничные ячейки не были слишком вытянуты (см. рис. 2.13б). После этого подключается процедура адаптации, с тем чтобы сгустить сетку в том месте, где внутри оболочки имеется вкладыш из другого материала и размер ячеек в касательном направлении к поверхностям  $k=1, 16$  (в каждой радиальной полуплоскости в касательном направлении к образующим) должен быть меньше. Для этого скалярная мониторинговая функция  $f$  задается линейно зависящей от угла между прямыми линиями обозначающими границы вкладыша. Адаптивная сетка на граничных поверхностях  $i, j=1, 46, k=1$  показана на рис. 2.13в, а на граничной поверхности  $k=16$  на рис. 2.13г.

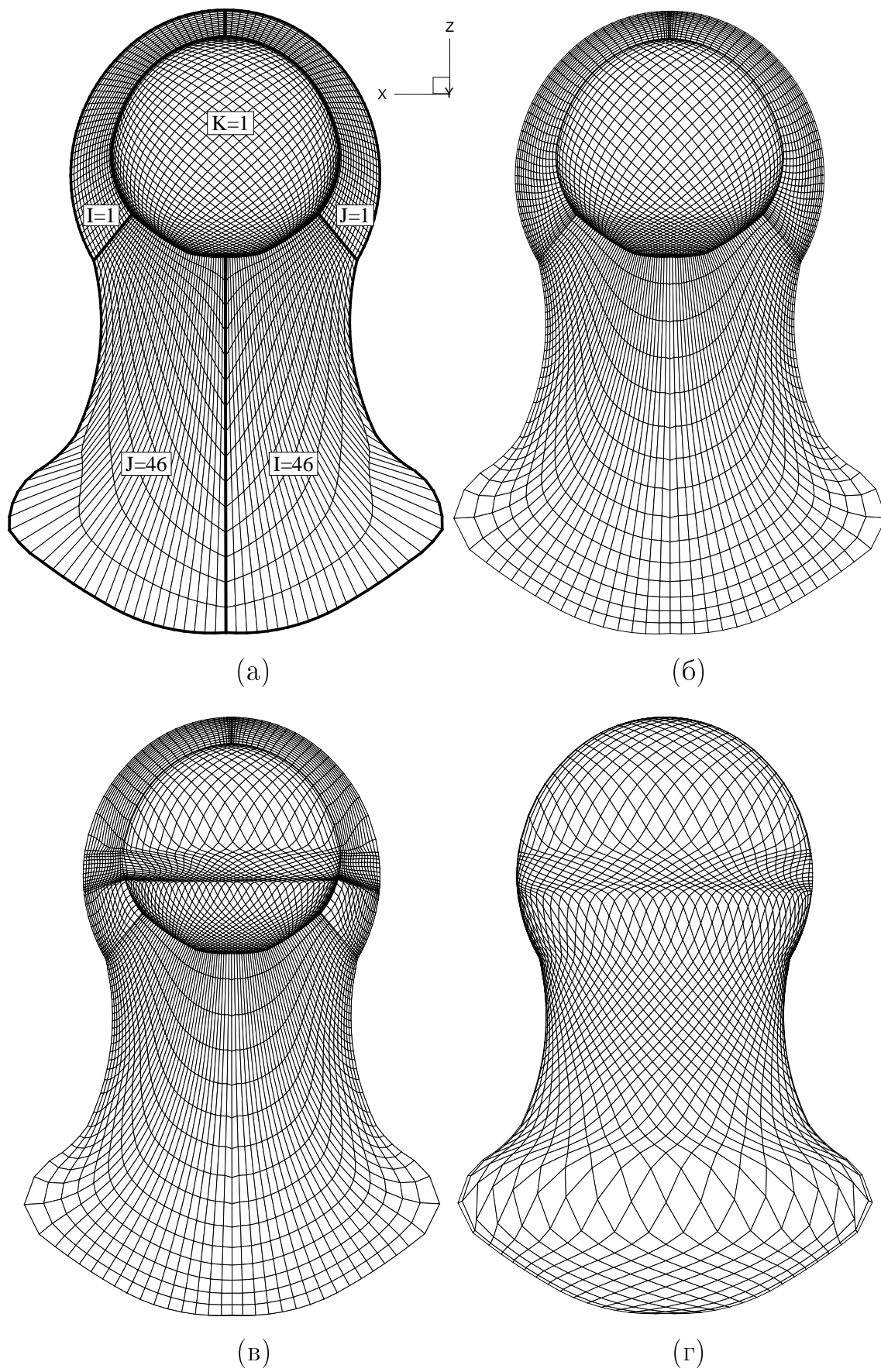


Рис. 2.13. Начальная сетка с единичным метрическим тензором  $G_{ij}$  (а); дополнительное управление формой ячеек (б); адаптивная сетка (в); координатная поверхность  $k = 16$  (г).



Проверка линейчатых ячеек построенной сетки показала, что они являются невырожденными.

**2.13.3 Межлопаточный канал турбины.** Сетка  $81 \times 61 \times 41$  строится в межлопаточном канале турбины. Заданием управляющего метрического тензора  $G_{ij}$  обеспечивается сгущение координатных поверхностей сетки к лопаткам турбины. Поверхность в пространстве вида

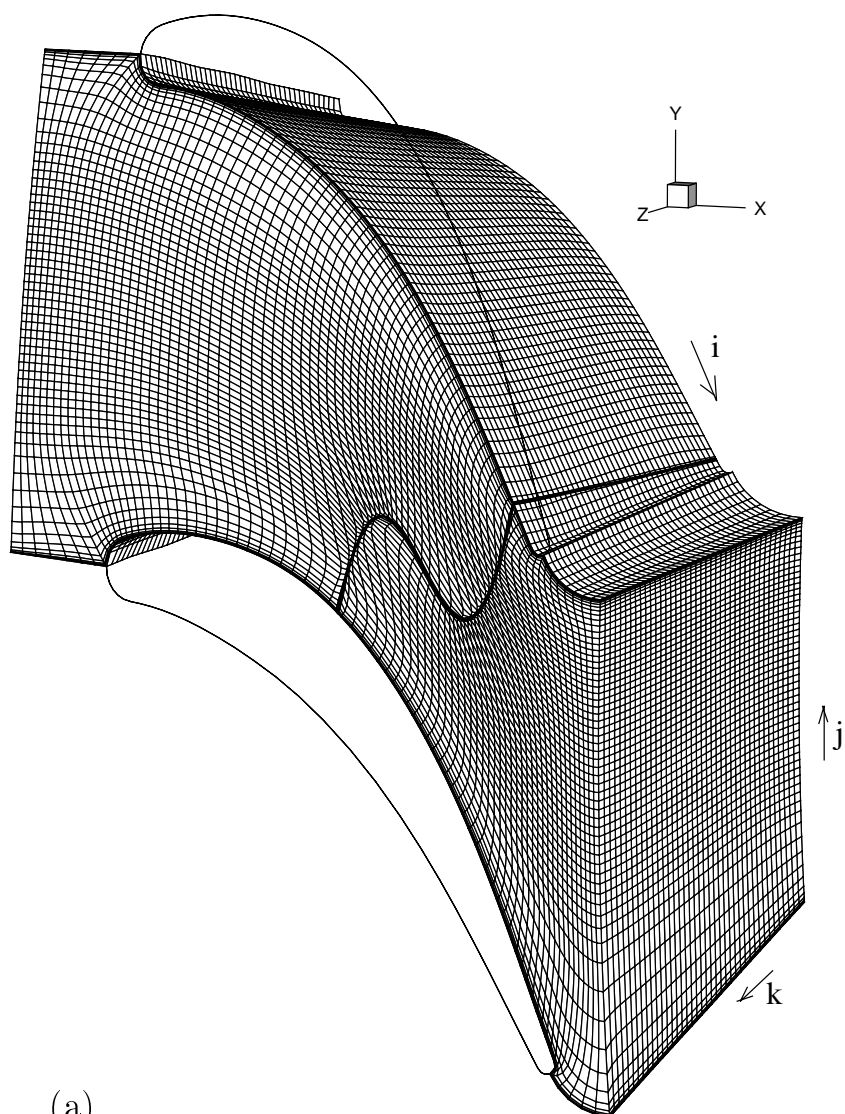
$$y = c_1(x - c_2)(x - c_3)(x - c_4) + c_5, \quad c_i = \text{const}$$

определяет форму слоя высоких градиентов. Скалярная мониторинговая функция вычисляется по формулам аналогичным (2.33). Адаптивная сетка представлена на рис. 2.14а, а фрагмент граничной поверхности  $k=41$  на рис. 2.14б. Проверка показала, что все гексаэдральные ячейки сетки невырождены.

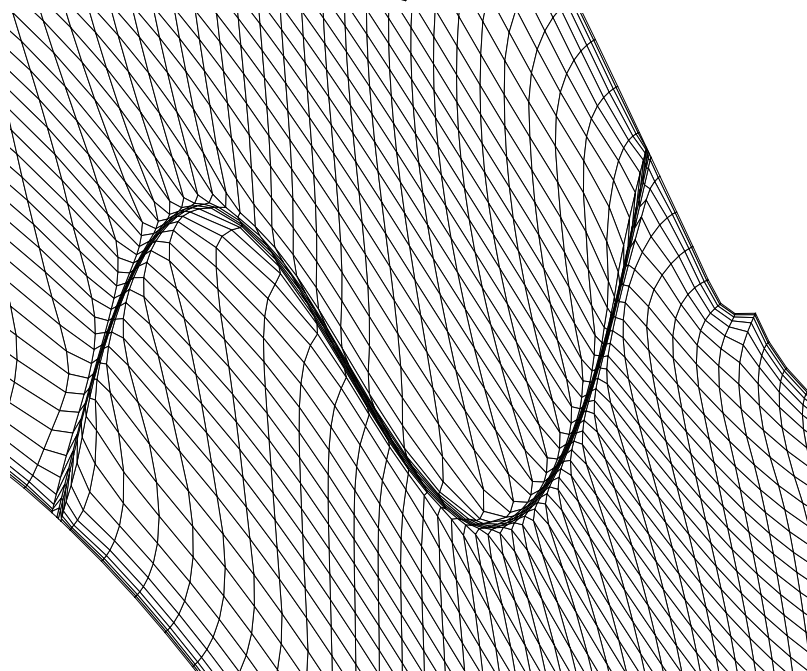
## 2.14 Особенности при адаптации к разрывным функциям

На модельном примере рассматриваются особенности построения адаптивных сеток, которые возникают при расчете трехмерных гидродинамических задач с разрывным решением. В знаменателе функционала (2.28) присутствуют производные от мониторинговой функции  $f$  (здесь  $f$  скалярная функция). Если  $f$  терпит разрыв при переходе через некоторую поверхность разрыва, то при сгущении узлов адаптивной сетки к этой поверхности одна из производных, определяемых численно, будет стремиться к  $\infty$ . Это приводит к исчезновению бесконечного барьера у  $\mathcal{D}^h$  и вырождению сетки. В настоящем разделе обсуждаются механизм исчезновения барьера и пути преодоления возникающих при этом трудностей по аналогии с разделом 2.5.

Здесь анализируется случай разрывной  $f$  при решении нелинейного уравнения переноса в одномерном приближении, т.е. когда искомая функция зависит только от одной переменной  $x$ , при том что построение



(a)



(б)

Рис. 2.14. Адаптивная сетка в межлопаточном канале турбины (а); фрагмент граничной поверхности  $k=41$  (б).

сетки осуществляется в области  $\Omega$  из пространства  $x, y, z$  с использованием функционала (2.28). Решается задача Коши для уравнения переноса с разрывными начальными данными (2.11), описанная в разделе 2.4. Также как и в разделе 2.4 используется схема С.К. Годунова на подвижной сетке. Опять рассматриваем только две ячейки сетки, изображенной на рис. 2.3а, где узлы  $i_c-2, i_c-1, i_c$  (здесь  $i_c=3$ ) являются узлами трехмерной прямоугольной сетки с постоянными шагами по  $y$  и  $z$  и некоторым заданным числом ячеек по этим двум направлениям. Переходя в подвижную систему координат, движущуюся со скоростью разрыва  $w$  (см. рис. 2.3б), получим что в процессе минимизации функционала граничные узлы 1 и 3 фиксированы, а движется только узел 2. Положив  $x_1=0$ , получим  $x_3=L$ , где  $L=2h$ ,  $h$  – шаг начальной равномерной сетки. Координата  $x$  узла 2 является переменной и определяется в результате решения вариационной задачи. Значения функции  $u$  в этих трех узлах определяются через линейную интерполяцию значений  $u$  в центрах ячеек и, следовательно,  $u_1=u_2=u_l$ ,  $u_3=(u_l+u_r)/2$ .

Далее рассмотрим аппроксимацию функционала (2.28) на этой сетке, когда в качестве мониторной функции берется  $u$ , умноженная на коэффициент адаптации  $c_a$ , многообразие  $\mathcal{M}$  задается координатами  $\mathbf{x}=(x, y, z, c_a u)$ , а параметрическая область  $\mathcal{P}$  представляет из себя прямоугольный параллелепипед с ребрами  $N_1, 1, 1$ , направленными вдоль осей  $\xi, \eta, \zeta$  соответственно. Метрический тензор  $G_{ij}$  является единичным тензором. В силу одномерности задачи (2.11) мониторная функция  $u$  в (2.28) зависит только от переменной  $x$ . Тогда отображение  $\mathbf{x}(\xi): \overline{\mathcal{P}} \rightarrow \overline{\Omega}$  задается функциями  $x=x(\xi)$ ,  $y=a\eta$ ,  $z=b\zeta$  (полагаем, что постоянные  $a=b=1$ ). Тогда компоненты метрического тензора  $\tilde{g}_{ij}$  равны

$$\tilde{g}_{11} = x_\xi^2(1 + c_a^2 u_x^2), \quad \tilde{g}_{22} = 1, \quad \tilde{g}_{33} = 1, \quad \tilde{g}_{12} = \tilde{g}_{13} = \tilde{g}_{23} = 0.$$

Функционал (2.28) примет вид

$$\mathcal{D} = \frac{1}{3^{3/2}} \int_0^1 \int_0^1 \int_0^{N_1} \frac{(\tilde{g}_{11} + \tilde{g}_{22} + \tilde{g}_{33})^{3/2}}{\sqrt{\det g} \sqrt{1 + c_a^2 u_x^2}} d\xi d\eta d\zeta = \frac{1}{3^{3/2}} \int_0^{N_1} \frac{[x_\xi^2(1 + c_a^2 u_x^2) + 2]^{3/2}}{x_\xi \sqrt{1 + c_a^2 u_x^2}} d\xi.$$

Интеграл вычисляем по формуле прямоугольников на сетке из двух ячеек. В результате получаем разностный функционал (опущены коэффициенты  $3^{-3/2}$  и появляющийся после аппроксимации  $1/2$ )

$$\mathcal{D}^h = \sum_{i=1}^2 \frac{[(x_\xi)_{i+1/2}^2(1 + c_a^2(u_x)_{i+1/2}^2) + 2]^{3/2}}{(x_\xi)_{i+1/2} \sqrt{1 + c_a^2(u_x)_{i+1/2}^2}} \Delta \xi_{i+1/2}.$$

Используя разностные соотношения для производных

$$(x_\xi)_{i+1/2} = (x_{i+1} - x_i) / \Delta \xi_{i+1/2}, \quad (u_x)_{i+1/2} = (u_{i+1} - u_i) / (x_{i+1} - x_i),$$

где  $\Delta \xi_{i+1/2}=1$ , получаем в левой и правой ячейках

$$(x_\xi)_{3/2} = x, \quad (u_x)_{3/2} = 0, \quad (x_\xi)_{5/2} = L - x, \quad c_a(u_x)_{5/2} = \beta / (L - x);$$

здесь  $\beta = c_a |u_3 - u_2| = 0.5 c_a |u_r - u_l|$ . Тогда дискретный функционал  $\mathcal{D}^h$  примет вид

$$\mathcal{D}^h = \frac{(x^2 + 2)^{3/2}}{x} + \frac{\left[ (L - x)^2 \left( 1 + \frac{\beta^2}{(L - x)^2} \right) + 2 \right]^{3/2}}{(L - x) \sqrt{1 + \frac{\beta^2}{(L - x)^2}}}, \quad (2.34)$$

а производная от  $\mathcal{D}^h$  имеет вид

$$\frac{\partial \mathcal{D}^h}{\partial x} = \frac{2\sqrt{x^2 + 2}(x^2 - 1)}{x^2} + \frac{2(L - x)\sqrt{(L - x)^2 + \beta^2 + 2}}{[(L - x)^2 + \beta^2]^{3/2}} (1 - (L - x)^2 - \beta^2). \quad (2.35)$$

На рис. 2.15 представлены графики зависимостей  $\mathcal{D}^h$  и  $\partial \mathcal{D}^h / \partial x$  от  $x$  для различных значений коэффициента адаптации  $c_a$  при  $u_l=2$ ,  $u_r=1$  и шаге начальной сетки  $h=0.1$ . Здесь имеем  $\beta=0.5c_a$ . Поведение  $\mathcal{D}^h$  аналогично поведению  $\mathcal{D}^h$  в одномерном и двумерном случаях для этой модели, описанному в разделе 2.5. Видно, что при  $c_a=0$  функционал  $\mathcal{D}^h$  имеет минимум в точке  $x=0.1$ , что соответствует равномерной сетке. При  $c_a>0$  функционал теряет выпуклость (см. рис. 2.15б), правее минимума в окрестности узла 3 появляется максимум и, таким образом, задача на поиск экстремума не имеет единственного решения. И если с увеличением  $c_a$  минимум функционала  $\mathcal{D}^h$  сдвигается вправо, что соответствует

смещению узла 2 к 3, т.е. сгущению сетки на разрыве, то максимум  $\mathcal{D}^h$  сдвигается влево от узла 3, что соответствует разрежению сетки. При построении трехмерных сеток это может приводить к резким смещениям узлов сетки (перескок с минимума на максимум и наоборот в процессе итераций), т.е. к перехлестыванию координатных поверхностей сетки и, как следствие, к неустойчивости решения основной задачи. Более того, по достижении некоторого критического значения  $c_a^{\text{кр}}$  оба экстремума на интервале  $(0, L)$  сливаются и далее исчезают (см. кривую  $c_a=0.2$  на рис. 2.15). При  $c_a > c_a^{\text{кр}}$  минимизация  $\mathcal{D}^h$  приводит к схлопыванию правой ячейки.

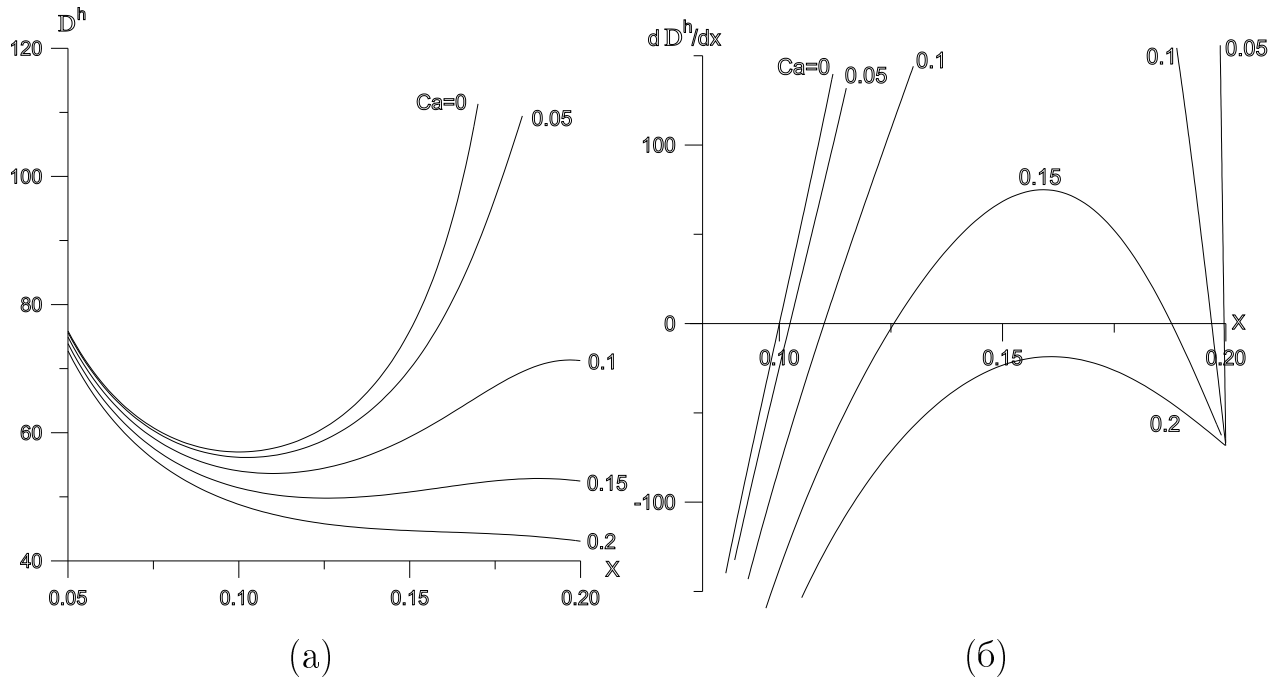


Рис. 2.15.

Рассмотрим прием, предложенный в [44] (Иваненко, 1997) и использовавшийся в разделе 2.5, когда при дифференцировании  $\mathcal{D}^h$  производные от мониторинговой функции замораживаются, т.е.  $u_x$  полагается не зависящей от  $x$ . Находим производную от нового функционала, считая  $\beta/(L-x)$  фиксированным в (2.34), т.е. не зависящем от  $x$ . Получаем

$$\frac{\partial \mathcal{D}_1^h}{\partial x} = \frac{2\sqrt{x^2 + 2}(x^2 - 1)}{x^2} + \frac{2(L-x)\sqrt{(L-x)^2 + \beta^2 + 2}}{(L-x)\sqrt{(L-x)^2 + \beta^2}}(1 - (L-x)^2 - \beta^2). \quad (2.36)$$

Чтобы получить явный вид  $\mathcal{D}_1^h$ , проинтегрируем (2.36), полагая постоянную интегрирования равной нулю. Имеем

$$\mathcal{D}_1^h = \frac{(x^2 + 2)^{3/2}}{x} + \frac{(1 - \beta^2)\sqrt{\beta^2 + 2}}{\beta} \ln \left[ 1 + \beta^2 + \frac{\beta^2(\beta^2 + 2)}{(L - x)^2} + \frac{\beta A}{(L - x)^2} \right] + A + \beta^2 \ln[1 + \beta^2 + (L - x)^2 + A], \quad (2.37)$$

$$A = \sqrt{(L - x)^2 + \beta^2} \sqrt{(L - x)^2 + \beta^2 + 2}.$$

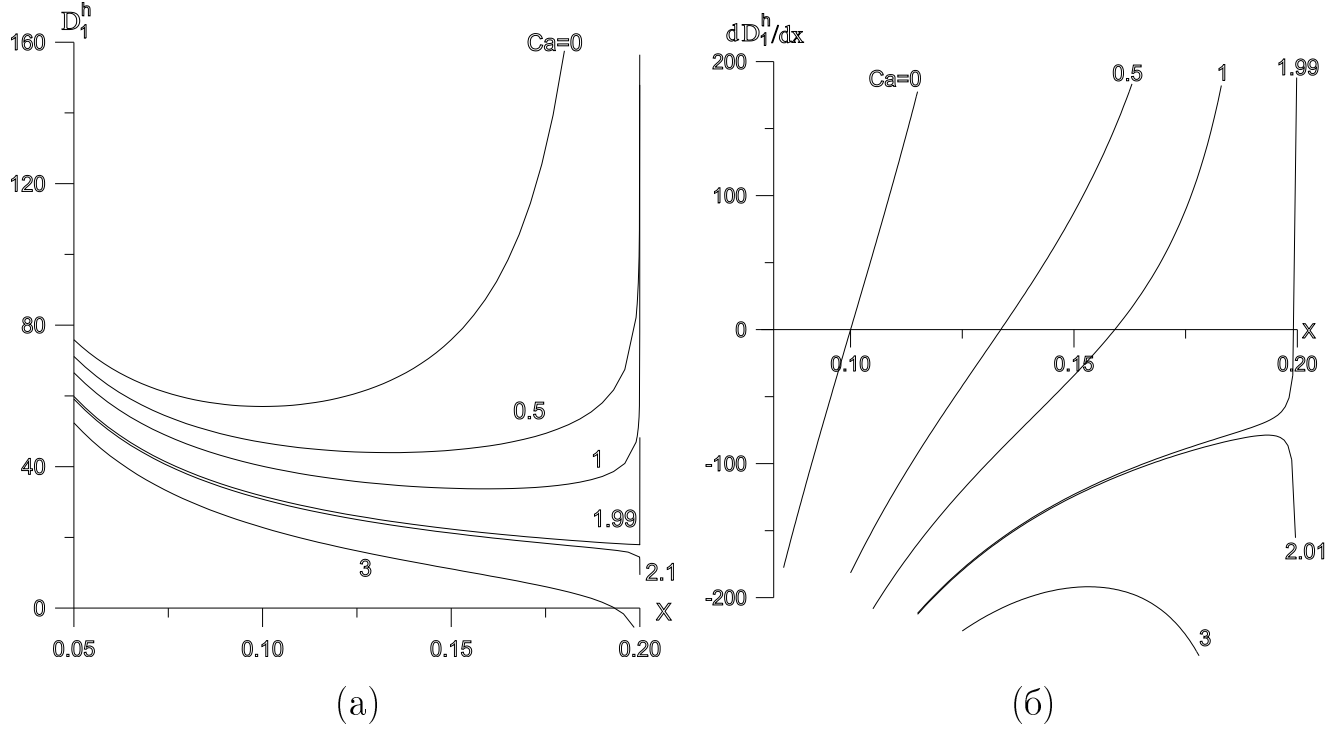


Рис. 2.16.

На рис. 2.16а и 2.16б представлены графики зависимостей  $\mathcal{D}_1^h$  и  $\partial \mathcal{D}_1^h / \partial x$  от  $x$ . Можно заключить следующее:

1. При  $s_a < 2$  ( $\beta < 1$ ) функционал является выпуклым на интервале  $(0, L)$ .
2. При  $s_a \rightarrow 2$  координата  $x$ , отвечающая минимуму  $\mathcal{D}_1^h$ , стремится к  $L$ , иными словами, сетка может сильно сгущаться.
3.  $\mathcal{D}_1^h$  имеет бесконечный барьер, предотвращающий схлопывание правой ячейки.

Такое же поведение наблюдается в одномерном случае, но при любых значениях  $c_a$  (см. раздел 2.5). При  $c_a > 2$ , когда узел 2 приближается к узлу 3 и, следовательно,  $L - x \rightarrow 0$ , доминирующим в (2.37) становится второе слагаемое с отрицательным знаком, поскольку в этом случае  $1 - \beta^2 < 0$ . На рис. 2.16а и 2.16б видно, что функционал теряет выпуклость при  $c_a > 2$ . Может показаться, что при минимизации функционала с помощью процедуры (1.15) правая ячейка схлопнется. Однако, до некоторого значения  $c_a$  этого не происходит по следующей причине. Для данной модельной задачи итерационная процедура (1.15) является методом Ньютона и координата узла 2 на  $l+1$ -м шаге вычисляется по формуле

$$x^{l+1} = x^l - \tau \frac{\partial \mathcal{D}_1^h}{\partial x} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{D}_1^h}{\partial x^2} \right)^{-1}. \quad (2.38)$$

Найдем вторую производную от  $\mathcal{D}_1^h$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{D}_1^h}{\partial x^2} = \frac{2}{\sqrt{x^2 + 2}} \left( x + \frac{1}{x} + \frac{4}{x^3} \right) + \frac{(L-x)[((L-x)^2 + \beta^2)^2 + (L-x)^2 + \beta^2] + 4}{0.5(L-x)^2 \sqrt{(L-x)^2 + \beta^2} \sqrt{(L-x)^2 + \beta^2 + 2}}.$$

При  $L - x^l \rightarrow 0$ , оставив в первой и второй производной, соответственно, только члены порядка  $O((L - x^l)^{-1})$  и  $O((L - x^l)^{-2})$ , получим в (2.38)

$$x^{l+1} - x^l = -\tau \frac{(\beta^2 + 2)(1 - \beta^2)}{\beta^2 + 4} (L - x^l).$$

Поскольку  $\tau < 1$  и  $1 - \beta^2 < 0$ , то очевидно, что приращение  $x^{l+1} - x^l$  будет заведомо меньше расстояния до узла 3 до тех пор пока не выполнено равенство

$$-(\beta^2 + 2)(1 - \beta^2)/(\beta^2 + 4) = 1.$$

Разрешив это уравнение, получим  $\beta \simeq 1.565$  или для нашего примера  $c_a \simeq 3.13$ . Таким образом, в интервале значений  $1 \leq \beta < 1.565$  ( $2 \leq c_a < 3.13$ ) длина правой ячейки будет оставаться большей нуля с точностью до машинного нуля или заданной точности вычислений. При  $\beta \geq 1.565$  правая ячейка схлопнется. В этом проявляется отличие от двумерного случая, где  $x^l$  при осуществлении итераций (2.38) получает приращение меньшее, чем расстояние до узла 3 при любых  $\beta \geq 1$  (см. раздел 2.5).

Итак, существует три интервала значений коэффициента адаптации  $c_a = 2\beta/|u_r - u_l|$  для разрывной мониторинной функции. В первом  $0 < \beta < 1$  функционал  $\mathcal{D}_1^h$  имеет бесконечный барьер, обеспечивающий невырожденность сетки. Во втором интервале  $1 \leq \beta < 1.565$  проявляется барьерность итерационной процедуры, не позволяющая схлопнуться правой ячейке. В третьем интервале  $\beta \geq 1.565$  соседние узлы по разные стороны от разрыва слипаются и сетка вырождается. Отметим, что на практике второй интервал также непригоден для построения невырожденной трехмерной сетки. Описанная модель легко обобщается на случай  $N_1 - 1 > 4$  интервалов сетки по оси  $x$ .

Рассмотренный механизм объясняет движение узлов в трехмерных задачах гидродинамики с разрывной мониторинной функцией  $f$ . В окрестности некоторой точки, лежащей на поверхности разрыва  $f$ , можно рассмотреть локальную декартову систему координат с осью  $x$ , направленной вдоль нормали к поверхности разрыва. Тогда в первом приближении можно считать  $x = x(\xi)$ ,  $y = a\eta$ ,  $z = b\zeta$  и пренебречь малыми членами, содержащими  $f_y, f_z$ . Поведение адаптивной сетки в зависимости от  $c_a$  осуществляется в рамках рассмотренной модели.

Для того чтобы избежать вырождения сетки, в [2] (Азаренок, Иваненко, 2000) было предложено ограничивать величину градиента мониторинной функции  $\tilde{f} = c_a f$ . Сперва на начальной сетке вычисляются значения производных в узлах  $\tilde{f}_x^h, \tilde{f}_y^h, \tilde{f}_z^h$  и задается максимально допустимое значение модуля градиента мониторинной функции  $F_{max} = \chi \max(|\nabla \tilde{f}|)$ , где  $\chi < 1$  – некоторый коэффициент, подбираемый в процессе счета. Далее в процессе адаптации градиент функции в узлах пересчитывается следующим образом:

$$\nabla \tilde{f}^* = \begin{cases} F_{max} \nabla \tilde{f} / |\nabla \tilde{f}|, & \text{если } |\nabla \tilde{f}| > F_{max}, \\ \nabla \tilde{f}, & \text{если } |\nabla \tilde{f}| \leq F_{max}. \end{cases}$$

Полученные значения  $\tilde{f}_x^*, \tilde{f}_y^*, \tilde{f}_z^*$  используются в (2.29) вместо  $\tilde{f}_x^h, \tilde{f}_y^h, \tilde{f}_z^h$ . Описанная процедура равносильна заданию минимальной толщины слоя больших градиентов, аппроксимирующих поверхность разрыва  $f$ .



В дополнение к рассмотренным выше примерам построения адаптивных трехмерных сеток в модельных задачах в следующей главе эффективность разработанных алгоритмов демонстрируется при решении двумерных нестационарных задач газовой динамики, когда течение содержит ударные волны и контактные разрывы.

## ГЛАВА 3

# ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ОДНОМЕРНОГО И ДВУМЕРНОГО ТЕЧЕНИЙ ГАЗА И ПРИЛОЖЕНИЯ

В настоящей главе описывается численный метод расчета двумерных течений идеального газа на подвижных сетках. Разностная схема представляет собой модификацию схемы С.К. Годунова [31](Годунов, 1959), [32](Годунов и др., 1976) второго порядка аппроксимации по пространству и времени [1, 5, 6, 85, 86, 88–90](Азаренок, 1997,2000–2003), [2, 84, 87,91,148](Азаренок, Иваненко, 1999,2000–2002), [92](Azarenok, Ivanenko, Tang, 2003), [93](Azarenok, Tang, 2004). Схема обобщена на случай течений газа с выделением химической энергии для расчета детонационных волн [7, 8](Азаренок, 2004,2005), [93, 95](Azarenok, Tang, 2004,2005). При этом зона горения разрешается сгущением узлов подвижной адаптивной разностной сетки. Предложен монотонизирующий алгоритм, см. раздел 3.2, и алгоритм решения задачи о распаде разрыва для уравнения химической кинетики, см. раздел 3.3. Приведены ряд тестовых расчетов для одномерных и двумерных задач, демонстрирующих эффективность использования адаптивных сеток, а также примеры, где адаптивные сетки позволяют разрешить тонкую структуру решения течений газа со взрывом и горением.

### 3.1 Постановка задачи для одномерного случая

Система уравнений, описывающая течение идеального газа при наличии химической реакции, имеет вид

$$\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x} = \mathbf{c}, \quad (3.1)$$

$$\boldsymbol{\sigma}=(\rho, \rho u, E, \rho Z)^{\top}, \quad \mathbf{a}=(\rho u, \rho u^2 + p, u(E + p), \rho u Z)^{\top}, \quad \mathbf{c}=(0, 0, 0, -\rho Z K)^{\top}.$$

Здесь  $u$  – скорость,  $p$  – давление,  $\rho$  – плотность,  $E$  – полная энергия,  $T$  – температура,  $Z$  – доля непрореагировавшего горючего вещества

( $0 \leq Z \leq 1$ ),  $K$  – скорость химической реакции. Полная энергия имеет вид

$$E = \rho(e + 0.5u^2) + q_o \rho Z ,$$

где  $e, q_o$  – внутренняя и химическая энергии единицы массы газа соответственно. В уравнении состояния идеального газа  $p = (\kappa - 1)e\rho$ , где  $\kappa$  – показатель адиабаты, отношение удельных теплоемкостей, предполагается постоянным в ходе реакции, т.е. не зависящим от температуры и состава газа. Температура связана с плотностью и давлением через уравнение состояния  $T = p/\rho R$ , где  $R$  – газовая постоянная.

В случае газа без химической реакции задача Коши в окрестности задания начальных данных имеет единственное решение при выполнении закона неубывания энтропии на разрывах, а также при условии, что внутренняя энергия  $e = e(V, S)$  является выпуклой функцией относительно своих аргументов, удельного объема  $V = 1/\rho$  и энтропии  $S$ , т.е. удовлетворяет неравенствам

$$e_{VV} > 0 , \quad e_{VVeSS} - e_{VS}^2 > 0$$

и дополнительно условиям Бете–Вейля

$$e_{VS} < 0 , \quad e_{VVV} < 0 .$$

Для идеального газа эти условия на  $e$  выполнены.

Скорость химической реакции  $K$  зависит от температуры  $T$  согласно закону химической кинетики

$$K(T) = K_o \exp(-E^+/T) , \quad (3.2)$$

где  $E^+$  – энергия активации,  $K_o$  – константа скорости. Иногда экспоненциальная зависимость (3.2) заменяется более простой кинетической моделью

$$K(T) = \begin{cases} 0, & \text{если } T < T_{\text{ин}}, \\ 1/\tau_o, & \text{если } T > T_{\text{ин}}, \end{cases} \quad (3.3)$$

где  $T_{\text{ин}}$  – температура инициирования химической реакции,  $\tau_o$  – масштабный множитель.

Для конструирования численной схемы на подвижных сетках необходима интегральная форма записи уравнений, которая может быть получена, если проинтегрировать (3.1) по произвольной области  $\Omega$  в плоскости  $x, t$

$$\iint_{\Omega} \left( \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x} \right) dx dt = \iint_{\Omega} \mathbf{c} dx dt ,$$

а затем перейти в левой части к контурному интегралу

$$\oint_{\partial\Omega} \boldsymbol{\sigma} dx - \mathbf{a} dt = \iint_{\Omega} \mathbf{c} dx dt , \quad (3.4)$$

где контур  $\partial\Omega$  ограничивает область  $\Omega$ . Уравнения (3.4) представляют собой интегральные законы сохранения и описывают как гладкие течения газа, так и разрывные.

Выясним какие граничные условия необходимо задавать при расчете горения. Пусть детонационная волна движется слева направо в сторону непрореагировавшего покоящегося газа в нормальном режиме горения, т.е. режиме Чепмена-Жуге (ЧЖ). По отношению к несгоревшему газу детонационная волна движется со сверхзвуковой скоростью и спереди следует задавать все четыре параметра течения:  $u_n=0$ ,  $p_n$ ,  $\rho_n$ ,  $Z_n=1$ .

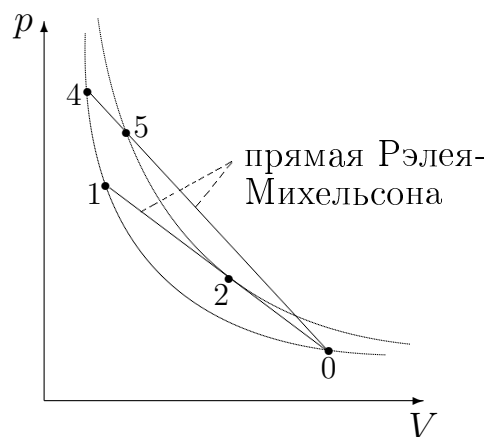


Рис. 3.1.

Задание граничных условий за детонационной волной, со стороны полностью сгоревшего газа, зависит от того, в каком режиме происходит

горение. На  $(p, V)$ -диаграмме, изображенной на рис. 3.1, нижняя адиабата Гюгонио отвечает несгоревшему газу, верхняя – полностью прореагировавшему газу. Процесс, проходящий через состояния 0, 1, 2 на прямой Рэлея-Михельсона, соответствует нормальному режиму горения ЧЖ, а процесс, проходящий через состояния 0, 4, 5, – пересжатой детонационной волне. Рассмотрим нормальный режим горения. В точке Жуге (точка 2 на рис. 3.1) адиабата Гюгонио совпадает с изоэнтропой продуктов реакции, которая и определяет скорость звука  $(\partial p / \partial \rho)_s$ . Прямая Рэлея-Михельсона касается адиабаты Гюгонио для полностью сгоревшего газа в точке 2. Поэтому детонационная волна движется со звуковой скоростью относительно сгоревшего газа и ни одна характеристика не приходит на нее сзади. Следовательно, на левой границе нет необходимости задавать граничные условия. Обычно в этом случае при расчетах задают мягкие граничные условия на все четыре параметра течения  $\partial f / \partial x = 0$  ( $f = u, p, \rho$  или  $Z$ ).

В случае пересжатой детонационной волны скорость волны меньше местной скорости звука в продуктах реакции. На волну со стороны сгоревшего газа приходит одна характеристика и на левой границе задается скорость поршня, равная скорости полностью сгоревшего газа  $u = u_{\text{ст}}$ .

В качестве тестовой задачи в дальнейшем используется модель стационарного горения Зельдовича–Неймана–Дорина (ЗНД), см., например, [40] (Зельдович, Компанеец, 1955), когда в нормальном режиме волна движется со скоростью  $D_{\text{чж}}$ . При стационарном режиме первые три обыкновенных дифференциальных уравнения (ОДУ) системы (3.1) интегрируются и сводятся к алгебраическим соотношениям, а последнее ОДУ химической кинетики интегрируется численно. Таким образом, в любой точке детонационной волны параметры газа могут быть определены с высокой точностью.

### 3.2 Разностная схема

Разностная схема рассматривалась в [1, 2, 8, 95] (Азаренок, 1997, 2000, 2005). На плоскости переменных  $x, t$  введем разностную подвижную сетку, ячейка которой в моменты времени  $t^n$  и  $t^{n+1}$  изображена на рис. 3.2, с шагом  $h_{i+1/2} = x_{i+1}^n - x_i^n$  на временном слое  $n$  и  $h^{i+1/2} = x_{i+1}^{n+1} - x_i^{n+1}$  на слое  $n+1$ , а также с шагом по времени  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ , где  $n, j$  – положительные целые индексы. В дальнейшем, как и в разделе 2.4, там где возможно будем опускать индекс по времени, подразумевая, что запись индекса сверху соответствует временному слою  $n+1$ , а внизу – слою  $n$ . Пусть в момент времени  $t^n$  задано значение сеточных функций  $\mathbf{f}_{i+1/2} = (u, p, \rho, Z)_{i+1/2}^\top$  по середине отрезка  $i+1/2$ , т.е. в точках  $x_{i+1/2}^n$ . Например, в качестве  $u_{i+1/2}$  берется осредненное значение  $u(x, t^n)$  на отрезке  $i+1/2$

$$u_{i+1/2} = \frac{1}{h_{i+1/2}} \int_{x_i^n}^{x_{i+1}^n} u(x, t^n) dx .$$

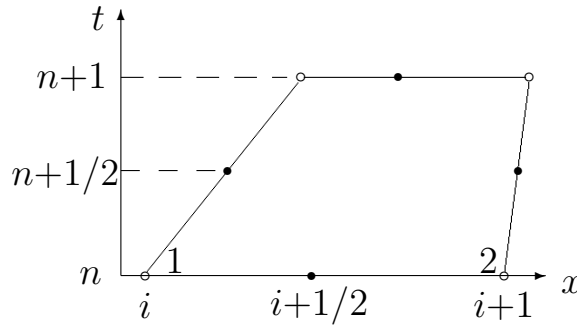


Рис. 3.2. Ячейка  $i+1/2$  в моменты времени  $t^n$  и  $t^{n+1}$ .

После интегрирования системы (3.4) вдоль контура четырехугольника, изображенного на рис. 3.2, получаем систему разностных уравнений

$$\begin{aligned} \sigma^{i+1/2} h^{i+1/2} - \sigma_{i+1/2} h_{i+1/2} - \sigma_{i+1} h_{i+1} + \sigma_i h_i + \Delta t (\mathbf{a}_{i+1} - \mathbf{a}_i) = \\ = 0.5 \Delta t (h^{i+1/2} + h_{i+1/2}) \mathbf{c}_{i+1/2}^{n+1/2} , \end{aligned} \quad (3.5)$$

где величины  $\sigma^{i+1/2}$  взяты в точке  $x_{i+1/2}^{n+1}$ , а  $\sigma_i$ ,  $\mathbf{a}_i$  и  $\sigma_{i+1}$ ,  $\mathbf{a}_{i+1}$  – в точках  $x_i^{n+1/2}$  и  $x_{i+1}^{n+1/2}$  соответственно,  $h_i = x_i^{n+1} - x_i^n$  – проекция боковой стороны  $x_i^n x_i^{n+1}$  на ось  $x$ . Величина  $\mathbf{c}_{i+1/2}^{n+1/2}$  взята в центре четырехугольника.

Для пересчета значений  $\mathbf{f}^{i+1/2}$  на верхнем слое  $n+1$  со вторым порядком точности необходимо уметь вычислять потоки через граничные точки ячейки, т.е. значения  $\mathbf{f}_i$  и  $\mathbf{f}_{i+1}$ , в момент времени  $t^{n+1/2}$ . Расчет будем проводить в два этапа по схеме предиктор-корректор. На первом этапе предиктор полагаем  $\mathbf{f}_i = \mathbf{f}_{1,i+1/2}$  и  $\mathbf{f}_{i+1} = \mathbf{f}_{2,i+1/2}$ , т.е. равным значениям на краях отрезка  $i+1/2$  в момент  $t^n$  вместо  $t^{n+1/2}$ , см. рис. 3.2. Для определения величин  $\mathbf{f}_{1,i+1/2}$ ,  $\mathbf{f}_{2,i+1/2}$  используется линейная интерполяция

$$\mathbf{f}_{1,i+1/2} = \mathbf{f}_{i+1/2} - 0.5\delta\mathbf{f}_{i+1/2}h_{i+1/2}, \quad \mathbf{f}_{2,i+1/2} = \mathbf{f}_{i+1/2} + 0.5\delta\mathbf{f}_{i+1/2}h_{i+1/2}. \quad (3.6)$$

Производная  $\delta\mathbf{f}_{i+1/2}$  определяется через вспомогательные значения  $\tilde{\mathbf{f}}_{1,i+1/2}$ ,  $\tilde{\mathbf{f}}_{2,i+1/2}$  на концах отрезка

$$\delta\mathbf{f}_{i+1/2} = (\tilde{\mathbf{f}}_{2,i+1/2} - \tilde{\mathbf{f}}_{1,i+1/2})/h_{i+1/2}. \quad (3.7)$$

Вспомогательное значение на левом конце отрезка  $\tilde{\mathbf{f}}_{1,i+1/2}$  находится из разложения  $\mathbf{f}$  в ряд Тейлора в окрестности точки  $x_i^n$  до членов третьего порядка малости, а для  $\tilde{\mathbf{f}}_{2,i+1/2}$  в окрестности  $x_{i+1}^n$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{f}}_{1,i+1/2} &= \mathbf{f}_{i+1/2} - \frac{h_{i+1/2}(\mathbf{f}_{i+1/2} - \mathbf{f}_{i-1/2})}{h_{i+1/2} + h_{i-1/2}} - \frac{h_{i+1/2}^2(\mathbf{f}'_{i+1/2} - \mathbf{f}'_{i-1/2})}{4(h_{i+1/2} + h_{i-1/2})}, \\ \tilde{\mathbf{f}}_{2,i+1/2} &= \mathbf{f}_{i+1/2} + \frac{h_{i+1/2}(\mathbf{f}_{i+3/2} - \mathbf{f}_{i+1/2})}{h_{i+3/2} + h_{i+1/2}} - \frac{h_{i+1/2}^2(\mathbf{f}'_{i+3/2} - \mathbf{f}'_{i+1/2})}{4(h_{i+3/2} + h_{i+1/2})}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

В (3.8) каждая компонента производной  $\mathbf{f}'_{i+1/2}$  определяется с помощью принципа минимальных производных [50](Колган, 1972). Например, для скорости  $u$  имеем

$$u'_{i+1/2} = \begin{cases} u'_i, & \text{если } |u'_i| \leq |u'_{i+1}| \\ u'_{i+1}, & \text{иначе,} \end{cases}$$

где  $u'_i$  вычисляется из разностного соотношения

$$u'_i = \frac{2(u_{i+1/2} - u_{i-1/2})}{(h_{i+1/2} + h_{i-1/2})}.$$

Далее используется предложенная в [121](Colella, Woodward, 1984) сглаживающая процедура корректировки  $\tilde{\mathbf{f}}_{1,i+1/2}$  и  $\tilde{\mathbf{f}}_{2,i+1/2}$ . Для этого на отрезке  $(x_i^n, x_{i+1}^n)$  строится интерполяционная парабола для каждой из компонент вектора  $\mathbf{f}$ . Например, для скорости  $U$  имеем

$$U(\zeta) = a_0 + a_1\zeta + a_2\zeta^2, \quad \zeta = (x - x_{i+1/2}^n)/h_{i+1/2}, \quad x_i^n \leq x \leq x_{i+1}^n, \quad -1/2 \leq \zeta \leq 1/2,$$

Парабола принимает на концах отрезка следующие значения:  $U(-1/2) = u_{1,i+1/2}$ ,  $U(1/2) = u_{2,i+1/2}$  а среднее значение  $u_{i+1/2}$  вычисляется по формуле

$$u_{i+1/2} = \int_{-1/2}^{1/2} U(\zeta) d\zeta.$$

Коэффициенты параболы берутся равными

$$a_1 = \tilde{u}_{2,i+1/2} - \tilde{u}_{1,i+1/2}, \quad a_2 = 3(\tilde{u}_{1,i+1/2} + \tilde{u}_{2,i+1/2}) - 6u_{i+1/2}.$$

Ставится условие, что парабола не должна достигать своего экстремума внутри отрезка. В противном случае проводится корректировка значений  $\tilde{u}_{1,i+1/2}$ ,  $\tilde{u}_{2,i+1/2}$  для обеспечения монотонности параболы. Это может происходить в двух случаях:

а)  $u_{i+1/2}$  не лежит внутри интервала значений от  $\tilde{u}_{1,i+1/2}$  до  $\tilde{u}_{2,i+1/2}$ . В этом случае парабола заменяется отрезком прямой  $U(\zeta) = u_{i+1/2}$ , т.е.

$$\tilde{u}_{1,i+1/2} = \tilde{u}_{2,i+1/2} = u_{i+1/2}, \quad \text{если} \quad (\tilde{u}_{2,i+1/2} - u_{i+1/2})(u_{i+1/2} - \tilde{u}_{1,i+1/2}) \leq 0;$$

б)  $u_{i+1/2}$  находится внутри указанного интервала, но лежит достаточно близко к  $\tilde{u}_{1,i+1/2}$  или  $\tilde{u}_{2,i+1/2}$ . В этом случае подправляется  $\tilde{u}_{1,i+1/2}$  или  $\tilde{u}_{2,i+1/2}$  (то, которое лежит дальше от  $u_{i+1/2}$ ) следующим образом

$$\begin{cases} \tilde{u}_{1,i+1/2} = u_{i+1/2} + 2(u_{i+1/2} - \tilde{u}_{2,i+1/2}), & \text{если } a_1^2 < -a_1a_2, \\ \tilde{u}_{2,i+1/2} = u_{i+1/2} + 2(u_{i+1/2} - \tilde{u}_{1,i+1/2}), & \text{если } a_1^2 < a_1a_2. \end{cases}$$

После этого из (3.7) определяется  $\delta\mathbf{f}_{i+1/2}$ , а из (3.8) находятся вспомогательные значения  $\tilde{\mathbf{f}}_{1,i+1/2}$  и  $\tilde{\mathbf{f}}_{2,i+1/2}$ . Дополнительно полагаем  $\mathbf{c}_{i+1/2}^{n+1/2} = \mathbf{c}_{i+1/2}^n$ . Теперь промежуточные значения  $\tilde{\mathbf{f}}^{i+1/2}$  в момент времени  $t^{n+1}$  могут быть вычислены из (3.5).



На второй стадии корректор для определения потоков через края ячейки решается задача о распаде разрыва, но не в момент  $t^n$ , как было предложено в схеме С.К. Годунова [31](Годунов, 1959), [32](Годунов и др., 1976), а в момент  $t^{n+1/2}$ . На неподвижной сетке решать задачу о распаде разрыва в момент  $t^{n+1/2}$  было предложено в [63](Родионов, 1987). Для получения предраспадных значений сначала вычисляем значения функций на краях ячейки в момент времени  $t^{n+1}$ , используя для этого  $\bar{\mathbf{f}}^{i+1/2}$  и производные с  $n$ -го слоя  $\delta \mathbf{f}_{i+1/2}$  по формулам, аналогичным (3.6). Взяв среднее от краевых значений на слоях  $n$  и  $n+1$ , получаем предраспадные величины

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{1,i+1/2}^{n+1/2} &= 0.5 \left[ \mathbf{f}_{i+1/2} + \bar{\mathbf{f}}^{i+1/2} - 0.5 \delta \mathbf{f}_{i+1/2} (h_{i+1/2} + h^{i+1/2}) \right], \\ \mathbf{f}_{2,i+1/2}^{n+1/2} &= 0.5 \left[ \mathbf{f}_{i+1/2} + \bar{\mathbf{f}}^{i+1/2} + 0.5 \delta \mathbf{f}_{i+1/2} (h_{i+1/2} + h^{i+1/2}) \right]. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Этот алгоритм вычисления предраспадных величин на неподвижной сетке был предложен в [63](Родионов, 1987).

Зная предраспадные величины  $\mathbf{f}_{2,i+1/2}^{n+1/2}$  и  $\mathbf{f}_{1,i+1/2}^{n+1/2}$  с обеих сторон узла  $i$ , можно определить послераспадные величины  $\mathbf{f}_i^{n+1/2}$  и  $\mathbf{f}_{i+1}^{n+1/2}$  для расчета потоков через края ячейки, решая задачу о распаде разрыва (см. ниже раздел 3.3). Подставив их в (3.5), получим окончательные величины параметров течения  $\mathbf{f}^{i+1/2}$  в момент  $t^{n+1}$ .

Описанная схема имеет второй прыжок точности по пространству и времени при условии, что течение гладкое во всей счетной области и сетка квазиравномерная, т.е.

$$h_{i+1/2} - h_{i-1/2} = o(h_{i+1/2}).$$

При наличии сильных и слабых разрывов в решении формальный порядок точности схемы, оцениваемый в интегральной норме  $L_1$ , см. [35](Годунов, 1997), снижается до первого [1](Азаренок, 1997).

### 3.3 Задача о распаде разрыва на подвижной сетке

Моделирование проводится в предположении, что в зоне горения детонационной волны размещено несколько узлов сетки (или линий сетки в двумерном случае). На прямой Рэлея–Михельсона зона горения заключена между точками 1 и 2 или 4 и 5, см. рис. 3.1. Таким образом, настоящая модель отвечает реальному физическому процессу, когда сначала проходит ударная волна (переход из точки 0 в 1 или из 0 в 4), разогревающая газ, а затем идет процесс горения. В этой модели можно использовать задачу о распаде разрыва для негорючего газа, поскольку в момент перехода через ударную волну химическая реакция еще не началась.

Задача о распаде разрыва для идеального газа на неподвижной сетке была рассмотрена в [31](Годунов, 1959) и на подвижной сетке в [32](Годунов и др., 1976) при условии постоянства предраспадных величин справа и слева от разрыва. Здесь применяется та же схема, с той только разницей, что решается задача в момент времени  $t^{n+1/2}$ . На неподвижной сетке решать задачу о распаде разрыва в момент  $t^{n+1/2}$  было предложено в [63](Родионов, 1987). Пусть слева и справа от узла  $i$ , перемещающегося со скоростью  $w_i$ , заданы предраспадные значения  $\mathbf{f}_{2,i-1/2}^{n+1/2}$  и  $\mathbf{f}_{1,i+1/2}^{n+1/2}$ , а структура возникающего после распада разрыва автомодельного течения имеет вид, изображенный на рис. 3.3. На рис. 3.3 показаны пять возможных случаев положения отрезка  $(x_i^{n+1/2}, x_i^{n+1})$  относительно волновой структуры автомодельного течения.

В зависимости от того в какую зону течения попадает узел  $i$  в момент  $t^{n+1}$  выбираются послераспадные значения  $\mathbf{f}_i^{n+1/2}$  (за исключением  $Z_i^{n+1/2}$ ). В качестве  $\mathbf{f}_i^{n+1/2}$  берем следующую величину:

1.  $\mathbf{f}_i^{n+1/2} = \mathbf{f}_{2,i-1/2}^{n+1/2}$ , если  $w_i < d_{ув}$ , где  $d_{ув}$  – скорость левой ударной волны;
2.  $\mathbf{f}_i^{n+1/2} = \mathbf{f}_2$ , если  $d_{ув} < w_i < d_{кр}$ , где  $\mathbf{f}_2$  – величины параметров за ударной волной,  $d_{кр}$  – скорость контактного разрыва;
3.  $\mathbf{f}_i^{n+1/2} = \mathbf{f}_3$ , если  $d_{кр} < w_i < d_{вл}^l$ , где  $\mathbf{f}_3$  – величины параметров в области между контактным разрывом и левой характеристикой в волне

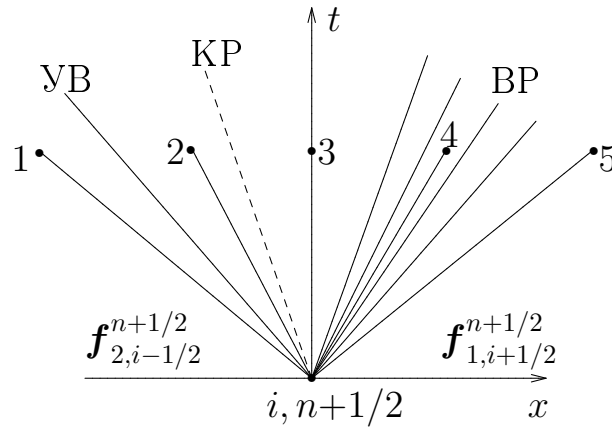


Рис. 3.3. Пять возможных случаев расположения отрезка  $(x_i^{n+1/2}, x_i^{n+1})$  относительно волновой структуры автомодельного течения. УВ – ударная волна, КР – контактный разрыв, ВР – веер волн разрежения. Точки  $1, \dots, 5$  указывают на положение узла  $i$  в момент  $t^{n+1}$ .

разрежения, имеющей скорость  $d_{\text{вр}}^{\text{л}}$ ;

4.  $\mathbf{f}_i^{n+1/2} = \varphi(x/t)$ , если  $d_{\text{вр}}^{\text{л}} < w_i < d_{\text{вр}}^{\text{п}}$ , где  $d_{\text{вр}}^{\text{п}}$  – скорость правой характеристики в волне разрежения. Здесь параметры потока рассчитываются в волне разрежения в зависимости от автомодельной переменной  $x/t$ ;

5.  $\mathbf{f}_i^{n+1/2} = \mathbf{f}_{1,i+1/2}^{n+1/2}$ , если  $w_i > d_{\text{вр}}^{\text{п}}$ .

Поскольку для уравнения химической кинетики, записанного в характеристической форме,

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + u \frac{\partial Z}{\partial x} = -ZK$$

характеристикой является  $dx/dt=u$ , для определения  $Z_i^{n+1/2}$  используем условие на разрыве [8](Азаренок, 2005)

$$Z_i^{n+1/2} = \begin{cases} Z_{2,i-1/2}^{n+1/2}, & \text{если } w_i < d_{\text{кр}}, \\ Z_{1,i+1/2}^{n+1/2}, & \text{если } w_i > d_{\text{кр}}, \end{cases} \quad (3.10)$$

см. рис. 3.4 с изображением двух возможных случаев положения отрезка  $(x_i^{n+1/2}, x_i^{n+1})$  относительно волновой структуры автомодельного течения.

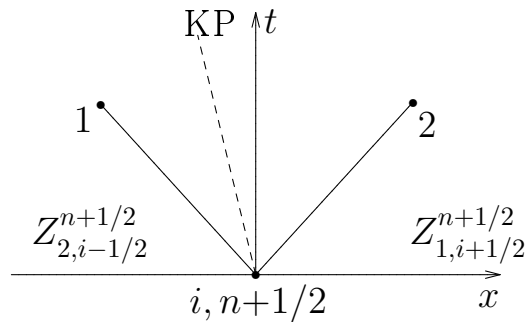


Рис. 3.4. КР – контактный разрыв. Точки 1, 2 указывают на положение узла  $i$  в момент  $t^{n+1}$ .

### 3.4 Устойчивость схемы

Величина шага по времени в ячейке  $i+1/2$  определяется по формуле [32](Годунов и др., 1976)

$$\Delta t_{i+1/2} = \frac{h_{i+1/2}}{\max(d_i^n - w_{i+1}, -d_{i+1}^n + w_i)} . \quad (3.11)$$

Здесь  $d_i^n$  и  $d_{i+1}^n$  – скорости распространения самой правой и самой левой волн при распаде разрыва, соответственно, в узлах  $i$  и  $i+1$ ,  $w_i$  – скорость перемещения узла  $i$ . Формула (3.11) имеет ясный физический смысл и оценивает время, в течение которого возмущения от левого узла ячейки достигнут правого подвижного узла, а также время, в течение которого возмущения от правого узла ячейки достигнут левого подвижного узла. Из этих двух времен выбирается минимальное.

Шаг  $\Delta t$  на текущем временном слое  $t^n$  оценивается в виде

$$\Delta t = \nu \min_i \Delta t_{i+1/2} . \quad (3.12)$$

Коэффициент запаса  $\nu$  (в англоязычной литературе – коэффициент Куранта–Фридрихса–Леви) есть поправка на нелинейность задачи и подбирается экспериментально. Для схемы С.К. Годунова в [32, стр. 133] приведена эмпирическая формула для  $\nu$ . Там же в §17 приведен пример, где используется постоянное  $\nu=0.9$ . Для схем высокого порядка точности следует брать  $\nu=0.5$  и иногда даже меньше. Поскольку шаг  $\Delta t_{i+1/2}$  зависит от значений параметров потока на краях ячейки (с их помощью

решается задача о распаде разрыва и находятся скорости, используемые в (3.11)) и скорости узлов, при проведении расчетов полученное на предыдущем шаге значение  $\Delta t$  используется на следующем шаге.

### 3.5 Система уравнений для двумерного случая

Система уравнений, описывающая течение идеального газа при наличии химической реакции в двумерном случае, в декартовой системе координат имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial y} &= \mathbf{c}, \\ \boldsymbol{\sigma} &= (\rho, \rho u, \rho v, E, \rho Z)^\top, \quad \mathbf{a} = (\rho u, \rho u^2 + p, \rho uv, u(E+p), \rho u Z)^\top, \\ \mathbf{b} &= (\rho v, \rho uv, \rho v^2 + p, v(E+p), \rho v Z)^\top, \quad \mathbf{c} = (0, 0, 0, 0, -\rho K Z)^\top, \end{aligned} \quad (3.13)$$

где  $u$  и  $v$  – компоненты скорости. Полная энергия определяется как

$$E = \rho[e + 0.5(u^2 + v^2)] + q_o \rho Z.$$

Расчет осуществляется на основе интегральных законов сохранения, имеющих вид [32](Годунов и др., 1976)

$$\oint_{\partial V} \boldsymbol{\sigma} \, dx dy + \mathbf{a} \, dy dt + \mathbf{b} \, dt dx = \iiint_V \mathbf{c} \, dx dy dt. \quad (3.14)$$

Здесь в левой части интегрирование проводится по ориентированной замкнутой поверхности  $\partial V$ , ограничивающей объем  $V$ , гомеоморфной сфере в пространстве  $x, y, t$ .

### 3.6 Разностная схема

Пусть в физической области построена регулярная сетка, заданная координатами узлов  $(x, y)_{i,j}$ ,  $i=1, 2, \dots, N_1$ ,  $j=1, 2, \dots, N_2$  в моменты времени  $t^n$  и  $t^{n+1}$ . Для аппроксимации (3.14) используется идея из [32](Годунов и др., 1976) с некоторыми дополнениями. Применим (3.14) к отдельному

гексаэдру, изображенному на фиг. 3.5, где нижнее и верхнее основания суть четырехугольная ячейка  $i+1/2, j+1/2$  в моменты  $t^n$  и  $t^{n+1}$  соответственно. После интегрирования получим

$$\begin{aligned} & \sigma^{i+1/2, j+1/2} S_{1'2'3'4'} - \sigma_{i+1/2, j+1/2} S_{1234} + \\ & + Q_{411'4'} + Q_{233'2'} + Q_{122'1'} + Q_{344'3'} = c_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} V, \end{aligned} \quad (3.15)$$

где  $\sigma^{i+1/2, j+1/2}$  и  $\sigma_{i+1/2, j+1/2}$  – значения параметров течения в центре четырехугольной ячейки в моменты  $t^{n+1}$  и  $t^n$ ,  $S_{1'2'3'4'}$  и  $S_{1234}$  – площадь ячейки, т.е. площади оснований гексаэдра,  $V$  – объем гексаэдра. Каждая

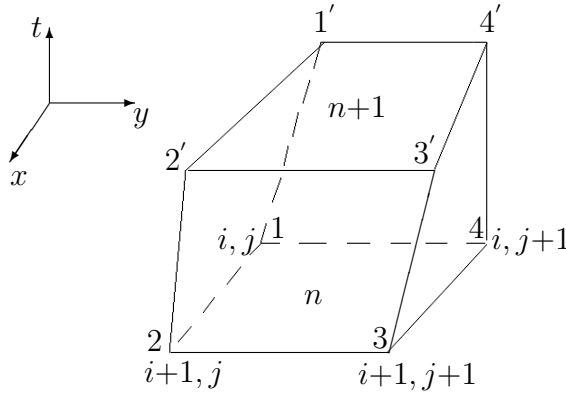


Рис. 3.5. Ячейка сетки  $i+1/2, j+1/2$  с момента  $t^n$  по  $t^{n+1}$  замечает гексаэдр в пространстве  $x, y, t$ .

из четырех векторных величин  $Q_{122'1'}$ ,  $Q_{411'4'}$ ,  $Q_{233'2'}$ ,  $Q_{344'3'}$  в (3.15) представляет осредненные потоки массы, импульса, энергии и массы реагента через соответствующую из боковых граней в направлении вектора внешней нормали. В соответствии с индексами берутся значения параметров в центрах боковых граней гексаэдра. Например, величина  $Q_{122'1'}$  имеет следующую структуру:

$$Q_{122'1'} = \sigma_{i+1/2, j}^{n+1/2} S_{122'1'}^{xy} + \mathbf{a}_{i+1/2, j}^{n+1/2} S_{122'1'}^{yt} + \mathbf{b}_{i+1/2, j}^{n+1/2} S_{122'1'}^{tx}. \quad (3.16)$$

Здесь  $(\sigma, \mathbf{a}, \mathbf{b})_{i+1/2, j}^{n+1/2}$  находятся через значения параметров  $\mathbf{f}$ , взятых посередине стороны 12 четырехугольной ячейки в момент  $t^{n+1/2}$ ,  $S_{122'1'}^{xy}$ ,  $S_{122'1'}^{yt}$ ,  $S_{122'1'}^{tx}$  – площади проекций грани  $122'1'$  на соответствующие

щие координатные плоскости, вычисляемые по формулам

$$\begin{aligned} S_{122'1'}^{xy} &= \iint_{122'1'} dx dy = 0.5[(x_{2'} - x_1)(y_{1'} - y_2) - (x_{1'} - x_2)(y_{2'} - y_1)] , \\ S_{122'1'}^{yt} &= \iint_{122'1'} dy dt = 0.5\Delta t(y_{2'} + y_2 - y_1 - y_{1'}) , \\ S_{122'1'}^{tx} &= \iint_{122'1'} dt dx = -0.5\Delta t(x_{2'} + x_2 - x_1 - x_{1'}) . \end{aligned}$$

Хорошее приближение для объема гексаэдра дает среднее от площади ячейки, умноженное на шаг  $\Delta t$

$$V = 0.5(S_{1'2'3'4'} + S_{1234})\Delta t ,$$

где, например,  $S_{1234} = 0.5[(x_3 - x_1)(y_4 - y_2) - (x_4 - x_2)(y_3 - y_1)]$ .

Для нахождения значений величин на слое  $n+1$  используется алгоритм, аналогичный одномерному из раздела 3.2, с применением монотонизирующей процедуры в предположении о линейном распределении параметров внутри каждой ячейки вдоль координатных линий  $i+1/2$  и  $j+1/2$ . Линия  $i+1/2$  составлена из отрезков, соединяющих середины противоположных сторон ячеек. Например, для ячейки  $i+1/2, j+1/2$  такой отрезок соединяет середины сторон 12 и 34 (см. фиг. 3.5). Таким же образом формируется координатная линия  $j+1/2$ . На шаге предиктор для определения  $(\sigma, \mathbf{a}, \mathbf{b})_{i+1/2, j}^{n+1/2}$  в (3.16) берутся значения параметров течения  $\mathbf{f}$  посередине ребра 12 в момент  $t^n$ , вычисляемые по первой формуле из (3.6) вдоль линии  $j+1/2$ . Шаг по сетке вдоль линии  $j+1/2$  при фиксированном индексе  $i$  в момент  $t^n$  определяется по формуле

$$h_{j+1/2} = \frac{1}{2} \sqrt{(x_{i,j+1} + x_{i+1,j+1} - x_{i,j} - x_{i+1,j})^2 + (y_{i,j+1} + y_{i+1,j+1} - y_{i,j} - y_{i+1,j})^2},$$

и аналогично определяется  $h_{i+1/2}$  – шаг вдоль линии  $i+1/2$ . При вычислении вектора  $\mathbf{c}^{n+1/2}$  параметры течения берутся в центре нижней грани гексаэдра.

Определив все четыре потока  $\mathbf{Q}$  на боковых гранях, вычислим промежуточные значения  $\bar{\mathbf{f}}^{i+1/2, j+1/2}$  из (3.15).

На шаге корректор величины  $(\sigma, \mathbf{a}, \mathbf{b})_{i+1/2, j}^{n+1/2}$ , входящие в (3.16), необходимо вычислять в центре грани, т.е. посередине ребра 12 в момент

$t^{n+1/2}$  из решения задачи о распаде разрыва с учетом скорости движения этого ребра ячейки. Формулы для нахождения данных величин приведены в [32, §24](Годунов и др., 1976). Отметим лишь, что их необходимо применять для момента времени  $t^{n+1/2}$  как и в одномерном случае. При определении  $\mathbf{c}_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2}$  значения  $\mathbf{f}_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2}$  задаются как среднее от  $\mathbf{f}_{i+1/2,j+1/2}$  и  $\bar{\mathbf{f}}^{i+1/2,j+1/2}$ .

Шаг по времени  $\Delta t$  определяется из условия устойчивости на подвижных сетках, см. [32](Годунов и др., 1976):

$$\Delta t = \nu \min_{i,j} \frac{\Delta t'_{i+1/2,j+1/2} \Delta t''_{i+1/2,j+1/2}}{\Delta t'_{i+1/2,j+1/2} + \Delta t''_{i+1/2,j+1/2}}, \quad (3.17)$$

где  $\Delta t'_{i+1/2,j+1/2}$ ,  $\Delta t''_{i+1/2,j+1/2}$  – допустимые "одномерные" шаги, вычисляемые из (3.11), в направлении координатных линий  $i$  и  $j$  соответственно, коэффициент запаса  $\nu=0.5$ .

### 3.7 Расчеты течения газа без химической кинетики

В приводимых ниже примерах ошибка  $\|Er\|_{L_1}$  решения для сеточной функции  $f^h$  относительно точного значения  $f^T$  в одномерном случае вычисляется по формуле

$$\begin{aligned} \|Er\|_{L_1} &= \int_{\Omega} |f^h(x) - f^T(x)| dx \approx \\ &\approx \sum_{i=1}^{N_1-1} \Delta x_i \sum_{j=1}^{j_{max}} \left| f_{i+1/2} + q_j h_{i+1/2} f'_{i+1/2} - f^T(x_{i+1/2} + q_j h_{i+1/2}) \right|, \end{aligned}$$

здесь  $N_1$  – число узлов сетки, отрезок  $(i, i+1)$  делится равномерно на  $j_{max}=100$  частей,  $q_j=(j-0.5)/j_{max}-0.5$  и  $\Delta x_i=h_{i+1/2}/j_{max}$ . Производная  $f'_{i+1/2}$  вычисляется с помощью линейной интерполяции

$$f'_{i+1/2} = \frac{f_{i+3/2} - f_{i+1/2}}{h_{i+3/2} + h_{i+1/2}} + \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{h_{i+1/2} + h_{i-1/2}}.$$

В двумерном случае формула для вычисления ошибки имеет вид

$$\|Er\|_{L_1} = \iint_{\Omega} |f^h(x, y) - f^T(x, y)| dx dy \approx$$



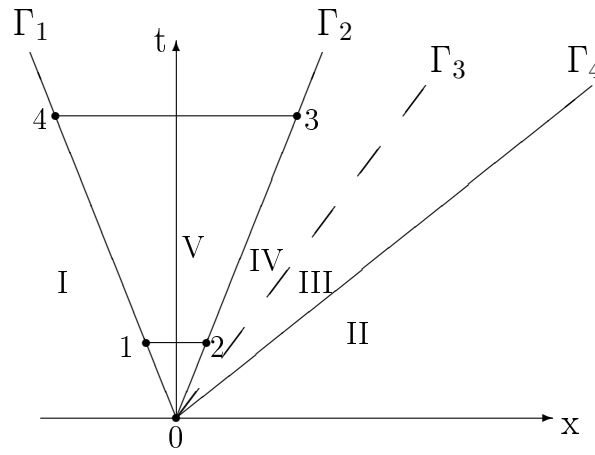


Рис. 3.6.

$$\approx \sum_{i=1}^{N_1-1} \sum_{j=1}^{N_2-1} |f_{i+1/2,j+1/2} - f^T(x_{i+1/2}, y_{j+1/2})| \Delta S_{i+1/2,j+1/2},$$

где  $\Delta S_{i+1/2,j+1/2}$  – площадь ячейки.

**3.7.1 Задача о распаде разрыва I.** Следующий расчет был проведен с целью проверки порядка сходимости схемы при расчете параметров газа в волне разрежения, образующейся в задаче о распаде разрыва. В начальный момент времени  $t=0$  идеальный газ с  $\kappa=1.4$  имеет следующие параметры:

$$(u, p, \rho) = \begin{cases} (1, 10, 8), & \text{при } x < 0, \\ (1.5, 1, 1), & \text{при } x \geq 0. \end{cases}$$

При  $t>0$  автомодельная картина возникающего течения имеет вид, изображенный на рис. 3.6. Четыре луча  $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3, \Gamma_4$  разбивают верхнюю полуплоскость на пять областей. В областях I, II, III, IV имеем постоянные течения, а в области V – центрированную волну разрежения. Лучи  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  являются линиями слабого разрыва или предельными характеристиками, имеющими наклоны  $w_1=x/t=-0.3228756$  и  $w_2=1.1818377$ . Контактный разрыв  $\Gamma_3$  имеет наклон  $w_3=2.2539278$ , ударная волна  $\Gamma_4$  имеет наклон  $w_4=3.2190952$ . В областях III и IV имеем значения  $u=2.2539278$  и  $p=2.2960737$ ,  $\rho_{III}=1.7811368$ ,  $\rho_{IV}=2.7967348$ .

Расчет проводился на подвижной равномерной сетке в области волны разрежения с выделением в процессе решения предельных характе-

Таблица 3.1.

$N$	$\ Er\ _{L_1} \cdot 10^7$	$r_1$	$\ Er\ _{L_\infty} \cdot 10^7$	$r_\infty$
20	231525	—	141917	—
40	58135	1.99	34634	2.03
80	14588	1.99	9333	1.89
160	3674	1.99	2702	1.79
320	944	1.96	913	1.56

ристик  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  с момента времени  $t=0.1$ , когда были заданы начальные условия на отрезке 12 (см. рис. 3.6), до  $t=0.4$  (отрезок 34). Результаты расчетов приведены в табл. 3.1. Здесь  $N$  – число интервалов сетки по  $x$ . Ошибки  $\|Er\|_{L_1}$  и  $\|Er\|_{L_\infty}$  в нахождении плотности  $\rho$  характеризуют слабую и сильную (локальную) сходимость решения к точному  $\rho^T$ , где

$$\|Er\|_{L_\infty} = \max_i |\rho_{i+1/2} - \rho^T(x_{i+1/2})|.$$

В случае двух расчетов с шагами  $h, \tau$  и  $0.5h, 0.5\tau$  порядок слабой сходимости определяется по формуле

$$r_1 = \frac{1}{\ln 2} \ln \frac{\|Er(h, \tau)\|_{L_1}}{\|Er(0.5h, 0.5\tau)\|_{L_1}}$$

и аналогично вычисляется порядок сильной сходимости  $r_\infty$ . Из табл. 1 видно, что порядок слабой сходимости  $r_1$  равен двум. Порядок сильной сходимости  $r_\infty$  немного меньше 2, за исключением последнего расчета.

**3.7.2 Задача о распаде разрыва II.** Рассматривается одномерное течение идеального газа с начальными данными

$$(u, p, \rho) = \begin{cases} (0, 1, 1), & \text{при } 0 \leq x < 0.5, \\ (0, 0.1, 0.125), & \text{при } 0.5 \leq x \leq 1, \end{cases}$$

отношение теплоемкостей  $\kappa=1.4$ . Автомодельное течение при  $t>0$  включает волну разрежения, контактный разрыв и ударную волну. Расчет задачи Коши проводится до  $t=0.25$  на отрезке  $(0, 1)$ . Число интервалов

Таблица 3.2.

$c_a$	$n$	$\tau$	$\ Er\ _{L_1}$	$\ Er\ _{L_1}^{\text{BP}}$	$\ Er\ _{L_1}^{\text{KP}}$	$\ Er\ _{L_1}^{\text{YB}}$
0	67	—	0.005926	0.002229	0.002256	0.001441
1	127	0.6	0.004125	0.001529	0.001723	0.000874
2	179	0.6	0.002950	0.001002	0.001340	0.000608
4	236	0.35	0.002443	0.001220	0.000975	0.000249
8	319	0.35	0.001787	0.000913	0.000725	0.000149

начальной равномерной сетки  $N=60$ . Поскольку к концу расчета ударная волна почти доходит до правого конца отрезка, справа добавляется еще 10 интервалов, чтобы исключить влияние правой границы на узлы, притягиваемые в зону скачка при адаптации.

При адаптации в качестве мониторинговой функции используется плотность, поскольку  $\rho$  терпит разрыв при переходе через скачок и контактный разрыв. На каждом шаге по  $t$  осуществляется 50 итераций по сетке. Оказалось, что использование критерия сходимости

$$\max_i \left| x_i^{p+1} - x_i^p \right| < \delta, \quad \text{где } \delta \approx 10^{-5} - 10^{-4}$$

для остановки итерационной процедуры минимизации функционала  $\mathcal{D}^h$  аналогичной (1.15) дает бóльшую ошибку.

Распределение плотности в момент  $t=0.25$  приведено на рис. 3.7а. В табл. 3.2 представлена зависимость ошибки  $\|Er\|_{L_1}$ , вычисляемой для  $\rho$ , от коэффициента адаптации  $c_a$ . Здесь  $n$  – число шагов по  $t$ ,  $\tau$  – итерационный параметр в процедуре минимизации функционала. Видно что при  $c_a=8$  ошибка уменьшается в 3.32 раза, дальнейшее увеличение  $c_a$  не дает увеличения точности.

Чтобы проследить влияние адаптации на точность разрешения различных волновых структур вычислялась ошибка, накапливаемая в об-

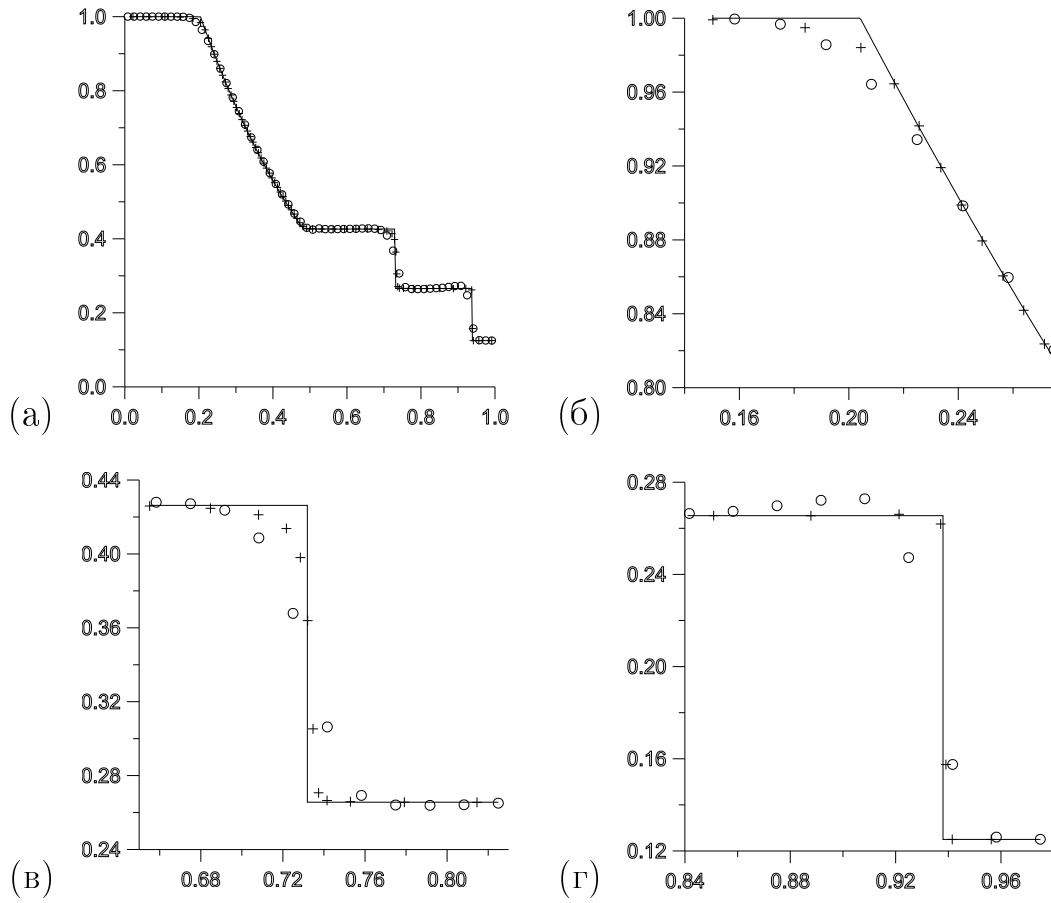


Рис. 3.7. Задача о распаде разрыва (а), окрестность волны разрежения, примыкающей к невозмущенному потоку (б), контактный разрыв (в), ударная волна (г). Сплошная линия – точное решение, "о" и "+" – решение на равномерной и адаптивной ( $c_a=8$ ) сетках соответственно.

ласти волны разрежения, контактного разрыва и скачка

$$\|Er\|_{L_1}^{\text{вр}} = \int_0^{x_a} |\rho^h - \rho^T| dx, \quad \|Er\|_{L_1}^{\text{кр}} = \int_{x_a}^{x_b} |\rho^h - \rho^T| dx,$$

$$\|Er\|_{L_1}^{\text{ув}} = \int_{x_b}^1 |\rho^h - \rho^T| dx,$$

где

$$x_a = 0.5(d_{\text{вр}}^{\text{п}} + d_{\text{кр}})t, \quad x_b = 0.5(d_{\text{кр}} + d_{\text{ув}})t,$$

$d_{\text{вр}}^{\text{п}}, d_{\text{кр}}, d_{\text{ув}}$  – скорости распространения крайней правой характеристики в волне разрежения, контактного разрыва и ударной волны соответственно. Эти ошибки также представлены в табл. 3.2. На рис. 3.7б показан фрагмент решения в окрестности области, где волна разрежения при-

мыкает к невозмущенному потоку. Из табл. 3.2 видно, что на подвижной сетке ошибка  $\|Er\|_{L_1}^{\text{bp}}$  уменьшается в 2.44 раза благодаря более точному представлению решения в окрестности слабого разрыва и в 2 раза меньшему шагу по пространству. Ширина размазывания контактного разрыва на адаптивной сетке также уменьшается (см. рис. 3.7в), что позволяет уменьшить ошибку  $\|Er\|_{L_1}^{\text{kp}}$  в 3.11 раза. Отметим, что при использовании схемы второго порядка точности контактная зона размазывается со временем, на равномерной фиксированной сетке пропорционально  $t^{1/3}$  [48](Иванов и др., 1980). Максимальный выигрыш в точности достигается в окрестности скачка,  $\|Er\|_{L_1}^{\text{yb}}$  уменьшается в 9.67 раз благодаря уменьшению шага по  $x$  примерно в 8 раз и подавлению осцилляций за ударной волной, амплитуда которых на равномерной сетке достигает 1.8% (см. рис. 3.7г). Отметим работу [55](Самарский, Мажукин и др., 1993), где подавление осцилляций в окрестности разрывов решения осуществлялось за счет согласованного с решением движения узлов адаптивной сетки. Таким образом, на подвижной сетке максимальный выигрыш в точности получен в окрестности скачка, минимальный – в области волны разрежения. В [171] (Mackenzie и др., 2000) данный пример был также посчитан на подвижной адаптивной сетке. При таком же  $N$  ошибка  $\|Er\|_{L_1}$ , вычисляемая для  $\rho$ , уменьшалась в 1.09–1.81 раза в зависимости от различных используемых мониторинговых функций.

**3.7.3 Сверхзвуковое течение в канале.** Следующий тест показывает какой выигрыш в отношении оперативной памяти компьютера и времени моделирования может дать применение процедуры адаптации по сравнению с расчетами, проводимыми на квазиравномерных фиксированных сетках.

В плоский канал подается слева идеальный газ с параметрами  $(M, p, \rho)_{\infty} = (2.5, 1, 1)$ , где  $M$  – число Маха,  $\kappa = 1.4$  (см. рис. 3.8). Вверху и внизу имеется два клина, угол наклона каждого равен  $5^\circ$ . Установившееся течение имеет следующую структуру. Две присоединенные к

вершинам клиньев ударные волны пересекаются, отражаются от стенок канала, опять пересекаются и т.д., деля область течения на несколько подобластей с постоянными параметрами потока, которые могут быть точно вычислены.

На первой стадии расчет осуществляется на квазиравномерной сетке, построенной с помощью вариационного барьерного метода [42] (Иваненко, Чарахчян, 1988), до выхода решения на стационарное значение. На второй стадии подключается процедура адаптации. Единственным подбираемым в процессе расчета параметром является коэффициент адаптации  $c_a$ . Для того чтобы получить равномерное сгущение линий сетки к ударным волнам по всей области,  $c_a$  подбирается зависящим линейно от  $x$ . Для получения максимальной точности расчетов необходимо осуществить от нескольких сотен до нескольких тысяч итераций по сетке в зависимости от ее размеров, объединенных с решением газодинамической задачи. На каждом временном шаге проводится одна итерация по сетке и, следовательно, расчет параметров течения на новом временном слое проводится дважды по всем ячейкам. Время "подгонки" линий сетки к ударным волнам составляет порядка и более времени расчета первой стадии. Для адаптации узлов по границе используется метод условной минимизации.

Расчет течения в канале проводится на четырех последовательно измельченных сетках с числом узлов  $65 \times 17$ ,  $129 \times 33$ ,  $257 \times 65$  и  $513 \times 129$ . В качестве мониторинговой функции используется  $\rho$ . На рис. 3.8 приведены 3 адаптивные сетки. Здесь первая стадия выхода на стационарное решение при  $t=15$  занимает 1739 шагов по времени. Коэффициент адаптации задается равным

$$c_a = 0.2 - 0.15(15 - x)/15.$$

Подключение процедуры адаптации дает достаточно сильное сгущение узлов сетки уже через 200 шагов по  $t$  и выигрыш по точности в 2 раза (см. фрагмент сетки на рис. 3.9а, где двумя пересекающимися диагональными прямыми линиями указаны положения ударных волн для точного

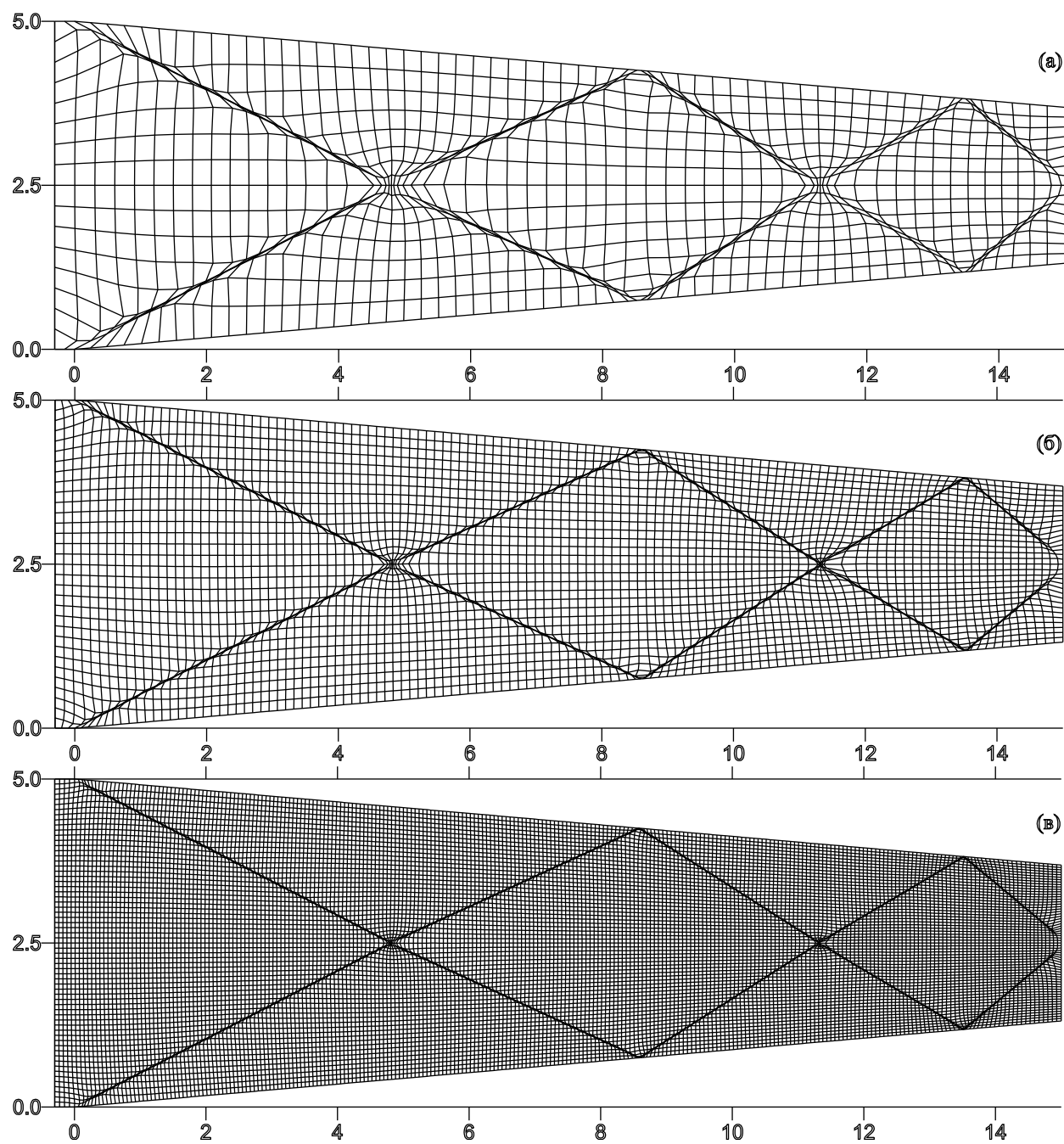


Рис. 3.8. Адаптивная сетка  $65 \times 17$  (а),  $129 \times 33$  (б) и  $257 \times 65$  (в) узлов.

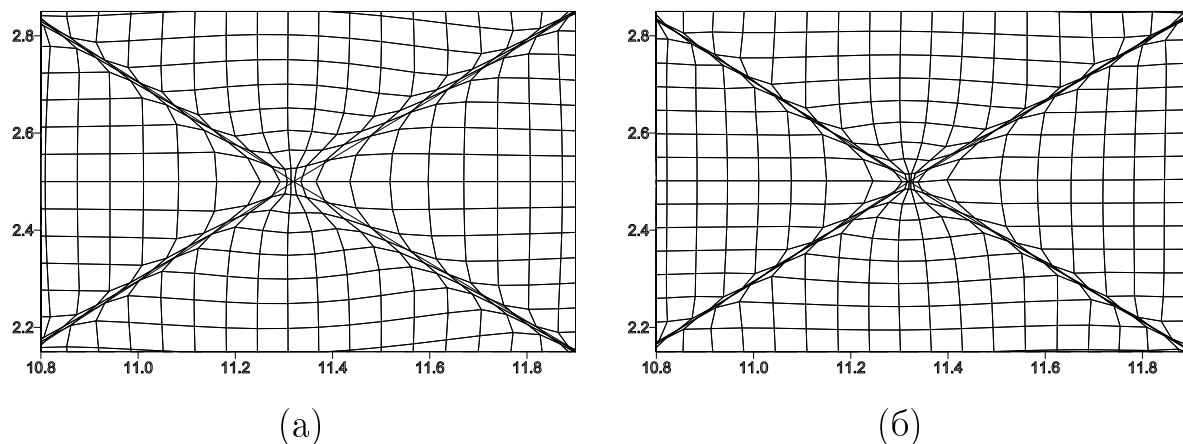


Рис. 3.9. Фрагменты сетки  $257 \times 65$  через 200 шагов (а), 2200 шагов (б).

решения). Но с другой стороны на рис. 3.9а видно, что линии сетки еще недостаточно сгустились к разрывам в окрестностях пересечений ударных волн. Приходится осуществить еще 2000 шагов по  $t$ , что дает дополнительный выигрыш по точности в 2.5 раза (см. фрагмент сетки на рис. 3.9б). Приведенные на рис. 3.9 фрагменты адаптивной сетки показывают, что как и в одномерном случае ударная волна размазывается на три ячейки. В окрестности разрывов ячейки очень узкие. На основании проведенного в разделе 2.5 анализа можно сказать что ошибка, обусловленная размазыванием ударных волн, уменьшается во много раз. Благодаря адаптации амплитуда осцилляций в решении за ударными волнами уменьшается в десятки раз.

Зная точное решение можно посчитать ошибку  $\|Er\|_{L_1}$ , оцениваемую по плотности. Зависимость  $\|Er\|_{L_1}$  от количества ячеек сетки представлена в табл. 3.3. Приведенные в табл. 3.3 данные показывают, что адаптация позволяет увеличить точность расчетов в 4 раза на самой грубой сетке и в 5 раз на остальных. С другой стороны видно, что удвоение числа интервалов по каждому направлению на квазиравномерной сетке повышает точность примерно в два раза. Таким образом, для всех сеток кроме самой грубой использование адаптации равносильно увеличению интервалов в 5 раз по каждому направлению на квазиравномерной сетке. Это дает экономию памяти компьютера в 25 раз и уменьшает время



Таблица 3.3.

Сетка	Ошибка $  Er  _{L_1}$ для $\rho$	
	Квазиравномерная сетка	Адаптивная сетка
65×17	1.5598	0.4070
129×33	0.8274	0.1666
257×65	0.4290	0.0846
513×129	0.2207	0.0444

счета примерно в 50–60 раз.

**3.7.4 Расчет обтекания крылового профиля.** В следующих двух примерах адаптивные сетки применяются для расчета обтекания крылового профиля NASA0012 идеальным газом. Первый случай это трансзвуковое течение газа с параметрами  $(M, p, \rho)_\infty = (0.85, 1, 1)$  ( $M$  – число Маха),  $\kappa=1.4$  и углом атаки  $\alpha=1^\circ$ . Стационарное течение устанавливается к моменту  $t=20$  за 7345 шагов. На рис. 3.10а,б представлены фрагмент квазиравномерной сетки О-типа 141×81 и изолинии числа Маха соответственно. Видно, что ударные волны, одна более сильная в верхней части течения и другая более слабая внизу, достаточно сильно размазаны. На рис. 3.11 представлены фрагмент адаптивной сетки и изолинии числа Маха, в качестве мониторинговой функции используется плотность.

Адаптация с использованием условной минимизации осуществляется как вдоль границы профиля, так и вдоль линии  $y=0$ , идущей от кормовой части профиля, которой на параметрической плоскости соответствуют границы квадрата  $\xi=0$  и  $\xi=1$ . Сетка сгущается за 150 шагов, что составляет примерно 4% от времени расчета первой стадии. На ударных волнах аспектное число в четырехугольных ячейках достигает 50, что позволяет говорить о том что ошибки, обуславливаемые размазыванием скачков, удастся значительно уменьшить. Использование одномерной и

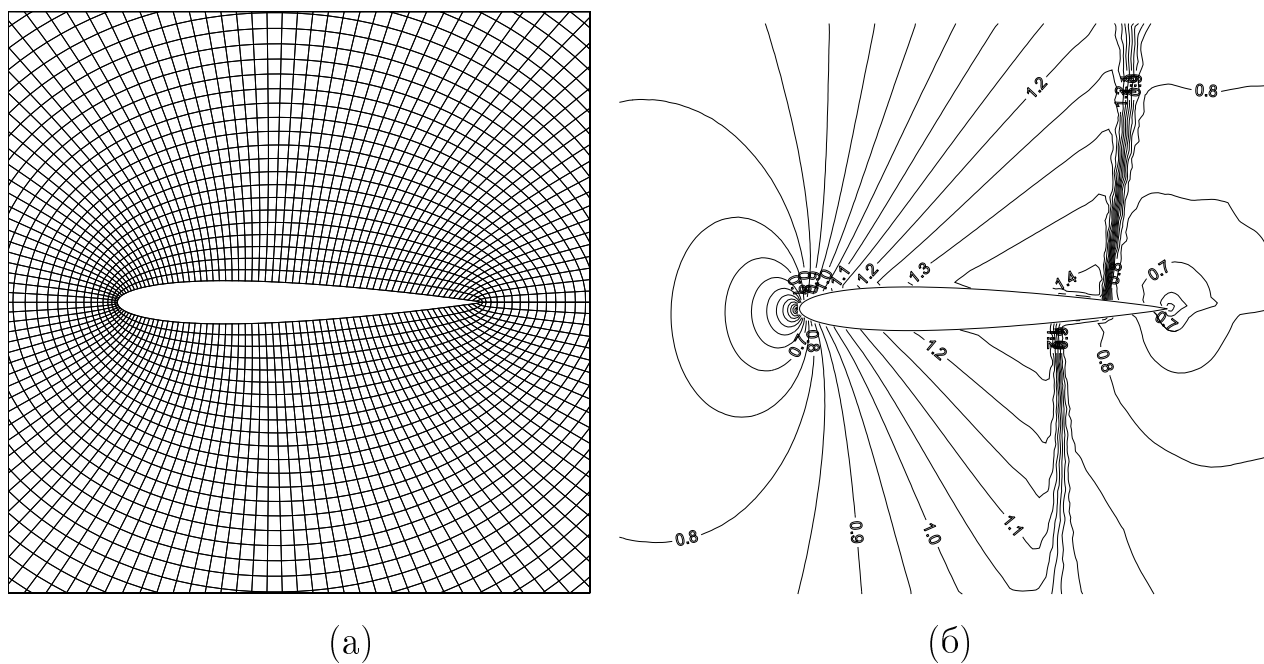


Рис. 3.10. Квазиравномерная сетка  $141 \times 81$  (а), изолинии  $M$  (б).

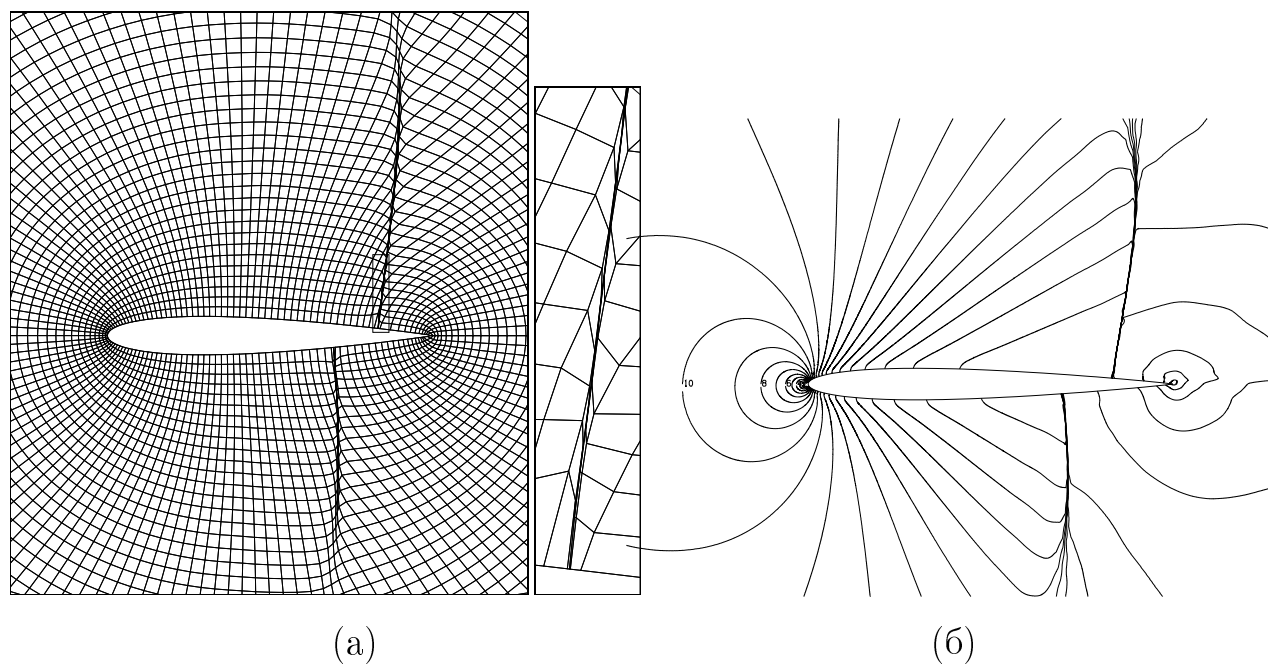


Рис. 3.11. Адаптивная сетка (а), изолинии  $M$  (б).

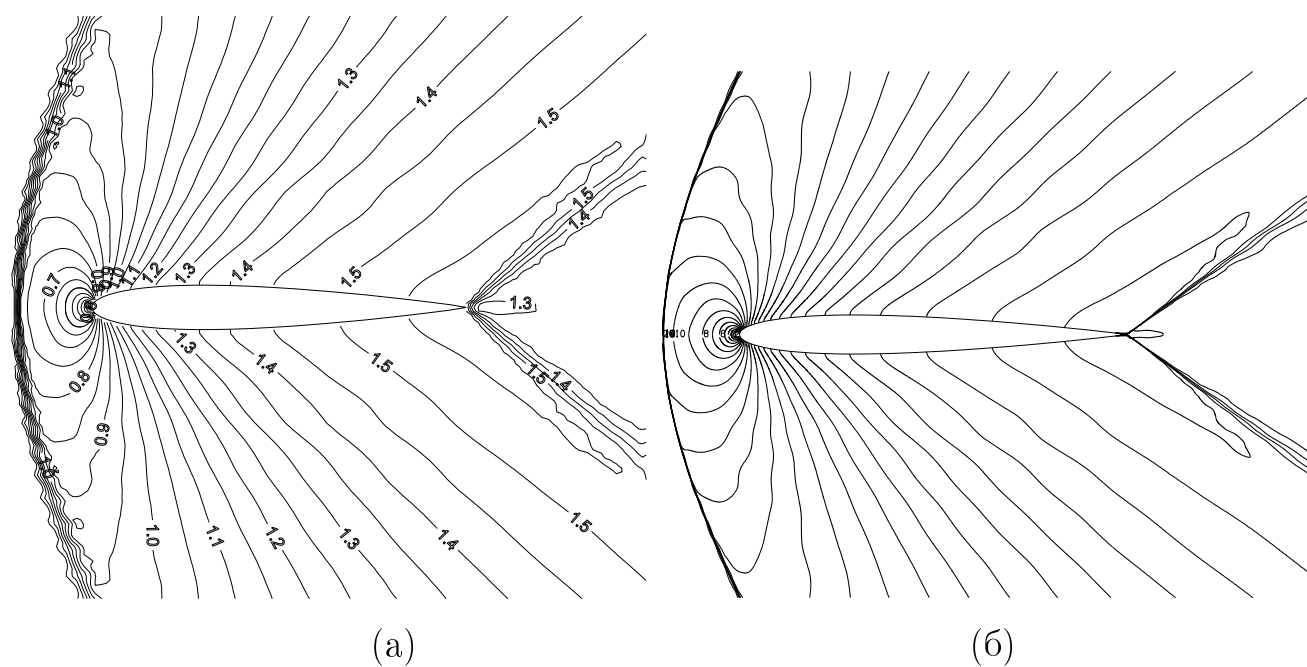


Рис. 3.12. Сверхзвуковое течение. Изолинии  $M$  на квазиравномерной (а) и адаптивной (б) сетках.

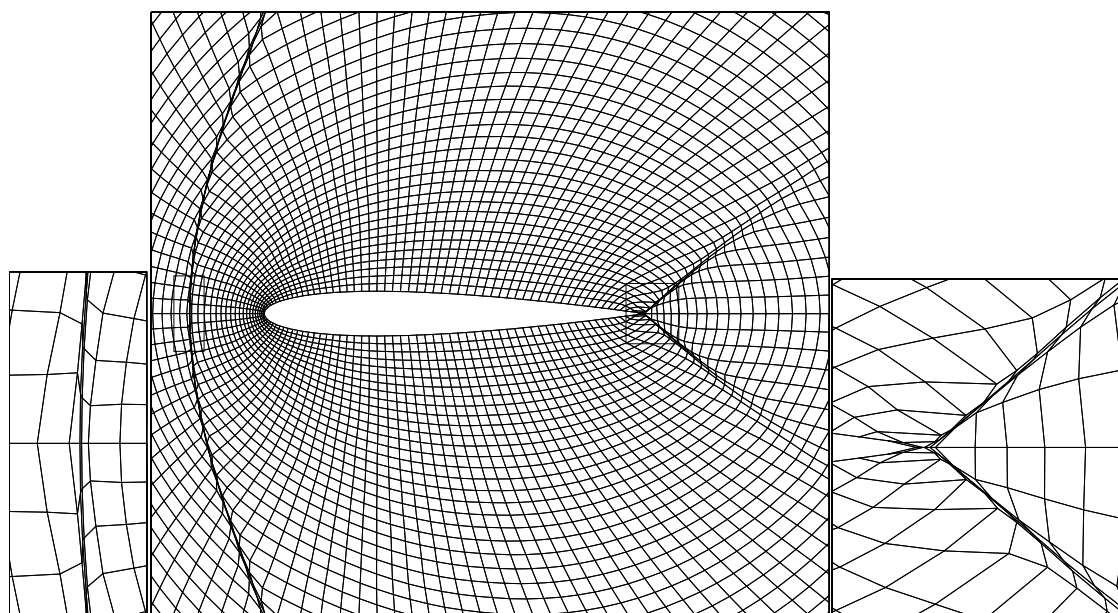


Рис. 3.13. Адаптивная сетка.

параметрической минимизации при расстановке граничных узлов приводит к вырождению сетки в окрестности ударных волн.

Во втором случае проводится расчет сверхзвукового обтекания профиля газом с параметрами  $M_\infty=1.3$  и  $\alpha=0^\circ$ . Стационарное течение устанавливается к моменту  $t=5$  за 5882 шагов, процедура адаптации занимает 200 шагов или около 7% от времени расчета первой стадии. На рис. 3.12 представлены изолинии  $M$ , посчитанные на квазиравномерной и адаптивной сетках  $121 \times 51$ , а на рис. 3.13 фрагмент адаптивной сетки. Видно что сгущение узлов четко описывает как отошедшую ударную волну, так и два слабых скачка, идущих от кормовой части профиля.

**3.7.5 Течение в плоском канале.** Постановка задачи взята из [121](Colella, Woodward, 1984), которая неоднократно использовалась в разных работах для тестирования методик расчета течения идеального газа. В канале длиной 3 и высотой 1 (безразмерные величины) имеется снизу ступенька высотой 0.2, расположенная на расстоянии 0.6 от входа. В начальный момент времени канал заполнен газом, движущимся параллельно стенкам канала, с параметрами  $(u, v, p, \rho)=(3, 0, 1, 1.4)$ ,  $\kappa=1.4$ . Вдоль стенок канала ставится условие непротекания, на входе – значения параметров невозмущенного потока, а на выходе, где течение является сверхзвуковым, ставятся мягкие граничные условия. Задача является эволюционной, стационарное течение устанавливается к моменту  $t=12$ . Однако, уже примерно с  $t=4$  структура течения изменяется слабо. К моменту времени  $t=0.5$  формируется головная ударная волна (см. адаптивную сетку и изолинии плотности  $\rho$  на рис. 3.14а,б), которая, расширяясь, к моменту  $t=1$  доходит до верхней стенки и отражается от нее (см. рис. 3.14в,г). Через некоторое время, при  $t=2$ , происходит ее вторичное отражение от ступеньки, а у верхней стенки канала формируется ножка Маха и от тройной точки отходит тангенциальный разрыв (см. рис. 3.15а,б). К моменту  $t=4$  ударная волна троекратно отражается от верхней стенки канала и ступеньки, контактный разрыв дважды

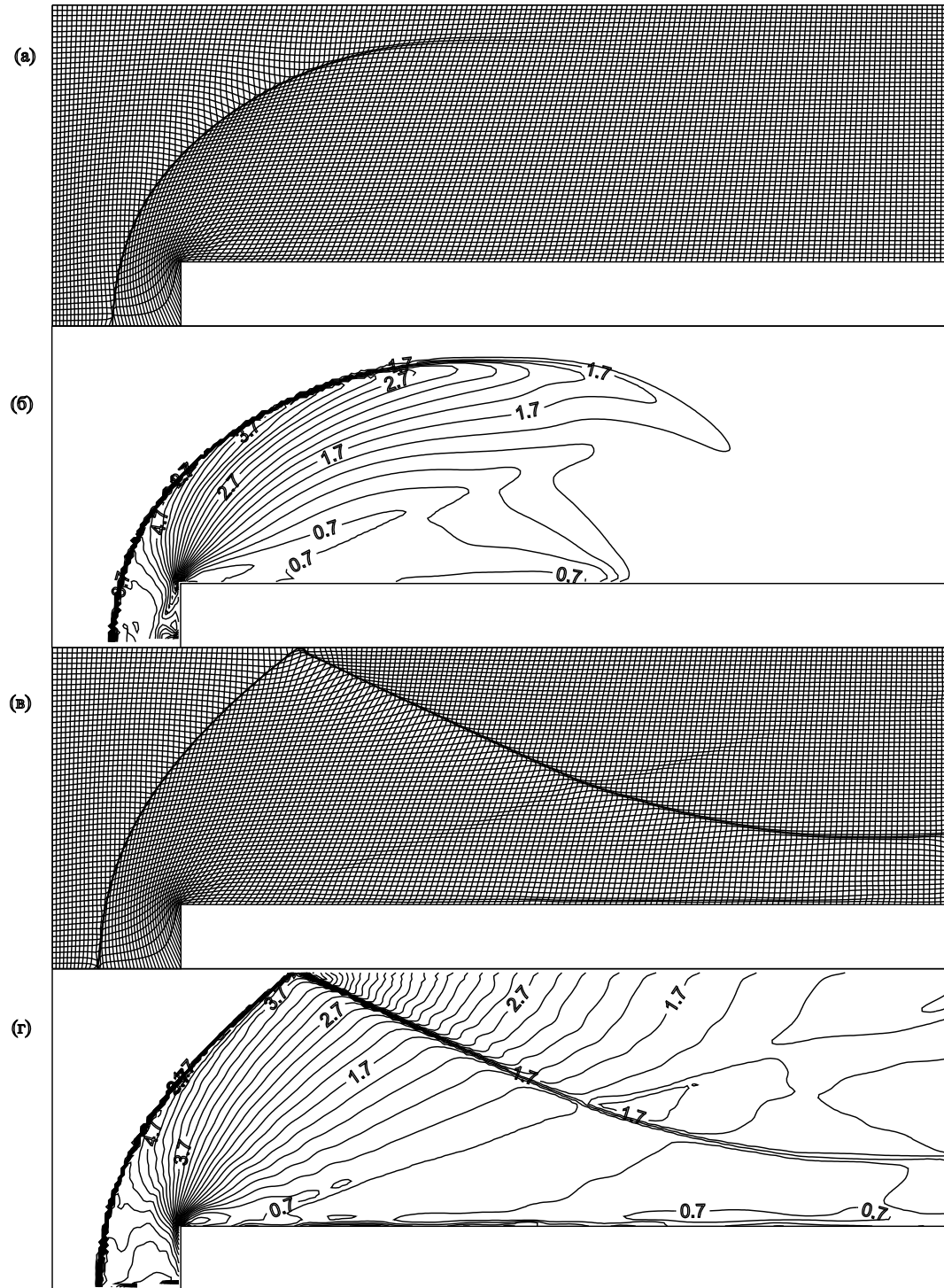


Рис. 3.14. Адаптивная сетка  $181 \times 61$  и изолинии  $\rho$  при  $t=0.5$  (а,б) и  $t=1$  (в,г). Адаптация по  $\mathbf{f}=(u, v, p, \rho)$ .

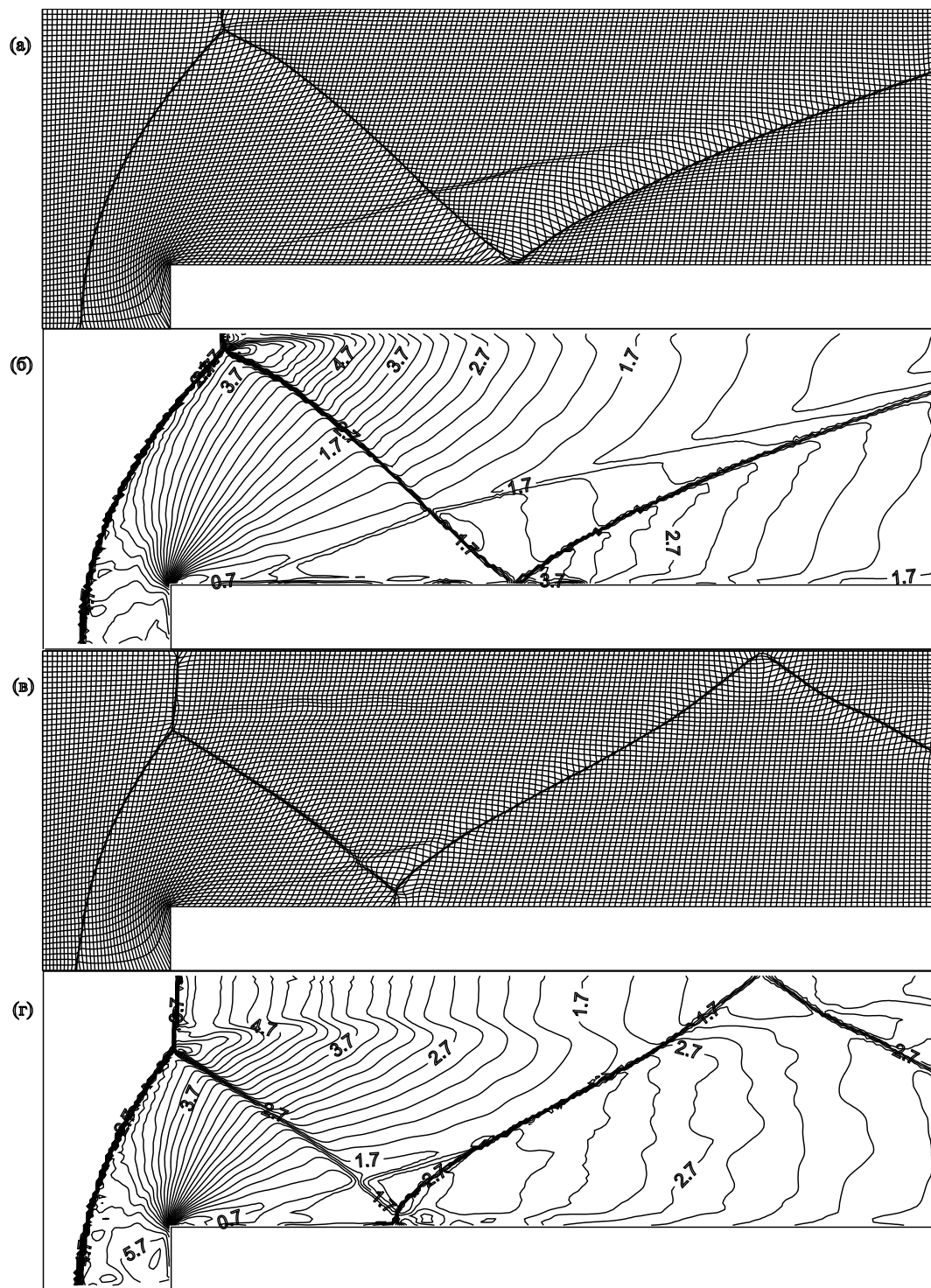


Рис. 3.15. Сетка и изолинии  $\rho$  при  $t=2$  (а,б) и  $t=4$  (в,г).

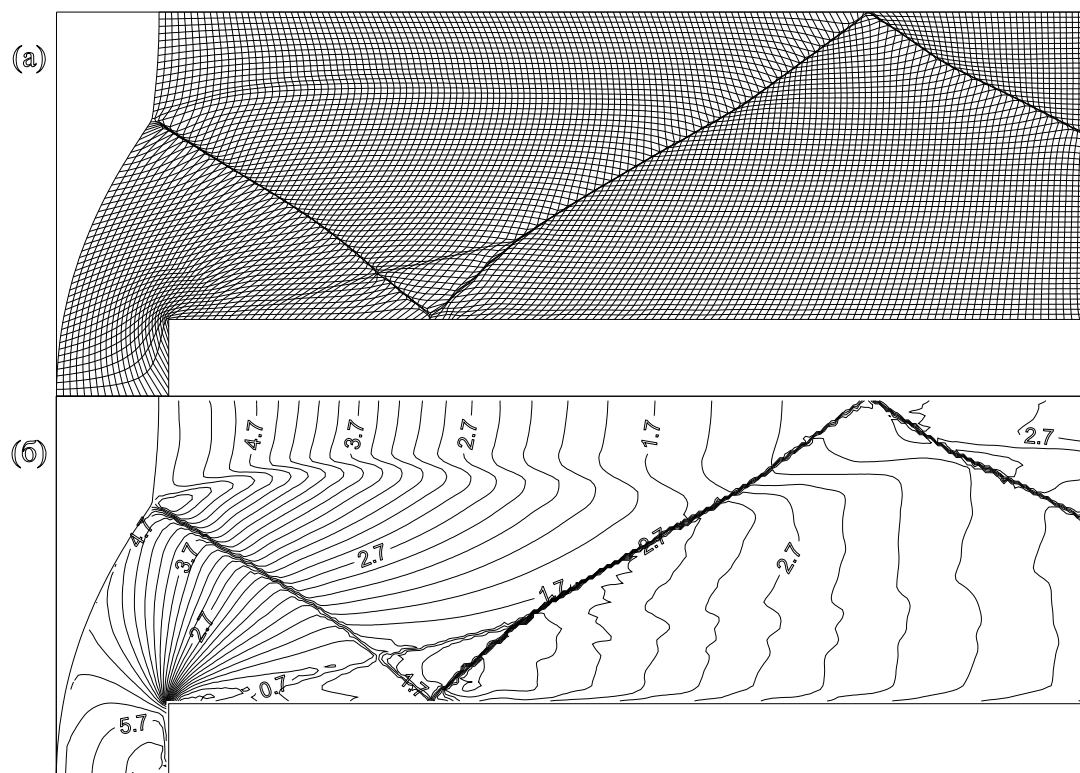


Рис. 3.16. Сетка  $151 \times 61$  и изолинии  $\rho$  при  $t=4$ . Адаптация по  $\rho$ .

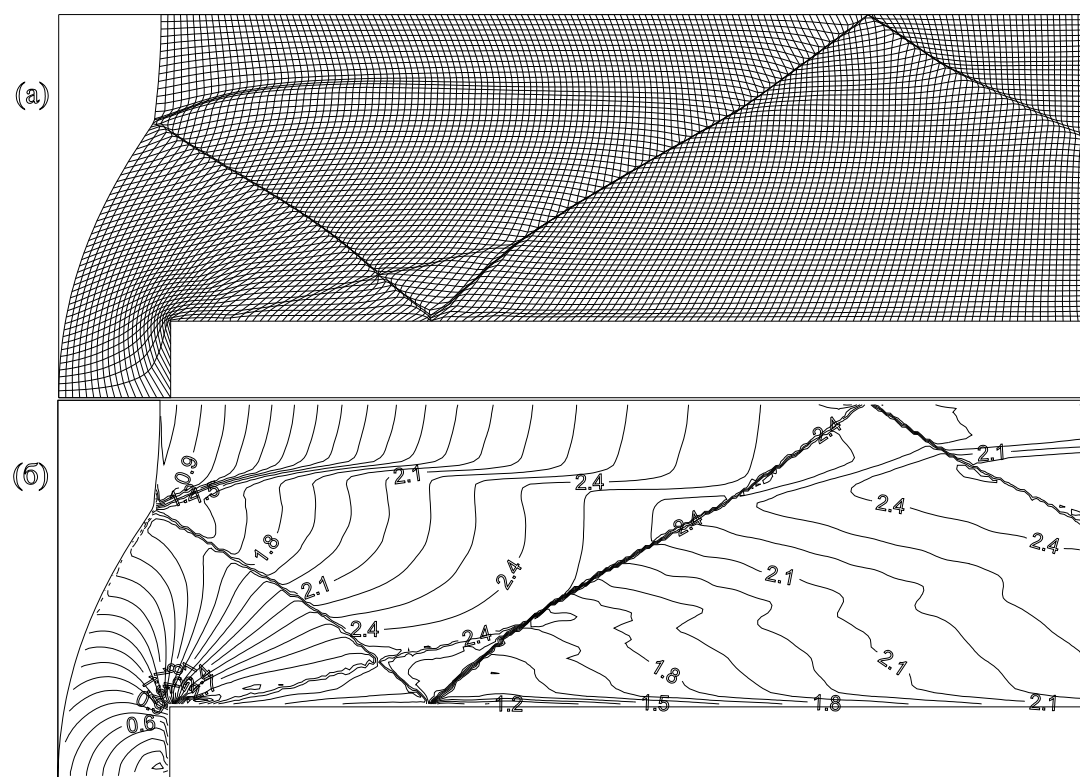


Рис. 3.17. Сетка  $151 \times 61$  и изолинии  $|V|$  при  $t=4$ . Адаптация по  $|V|$ .

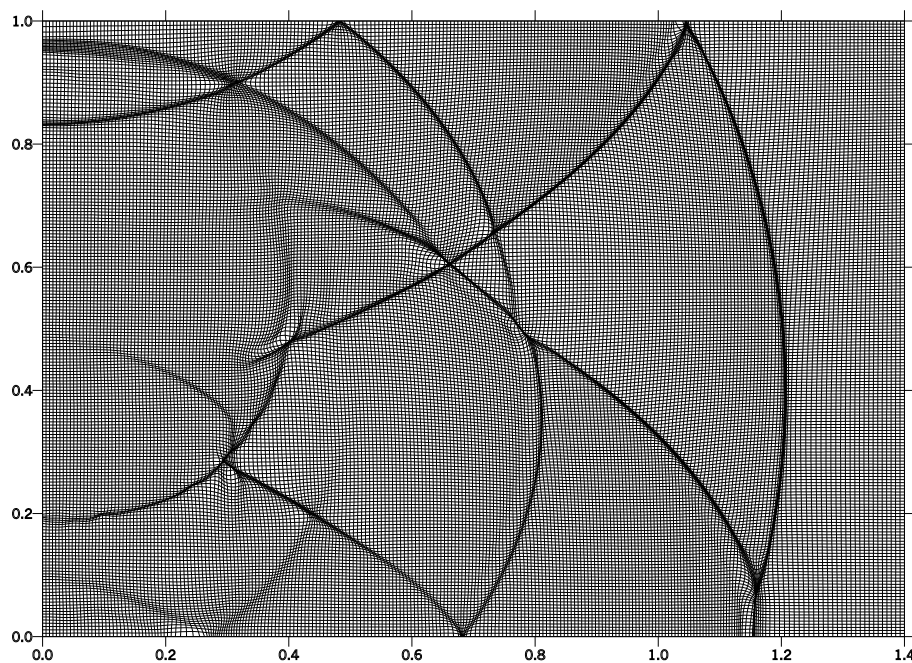


Рис. 3.18. Адаптивная сетка  $201 \times 251$ . Мониторная функция  $p$ .

пересекается с ударной волной около верхней стенки, практически не влияя на ее характер (см. рис. 3.15в,г). К моменту времени  $t=1$  немного правее угла ступеньки возникает слабая ударная волна, обусловленная идущими от угла возмущениями, которая усиливается к моменту  $t=4$ . Она сливается с ударной волной, отраженной от ступеньки, и слегка изменяет направление распространения отраженной волны. Адаптация проводится к векторной мониторной функции  $\mathbf{f}=(u, v, p, \rho)^\top$ . На рис. 3.16 представлен расчет с выделением головной ударной волны и адаптацией по плотности, а на рис. 3.17 с адаптацией по модулю скорости. Во втором случае тангенциальный разрыв, выходящий из тройной точки, обозначен сгущением сеточных линий существенно сильнее, чем в первом. Причина лежит в форме изолиний мониторной функции. В первом случае изолинии  $\rho$  в окрестности тангенциального разрыва имеют овражную форму (см. рис. 3.16б), а во втором ступенчатую (см. рис. 3.17б).

**3.7.6 Расчет задачи о взрыве.** Рассматривается течение газа (взрыв) в  $\mathbb{R}^3$  между двумя параллельными стенками, расположенными



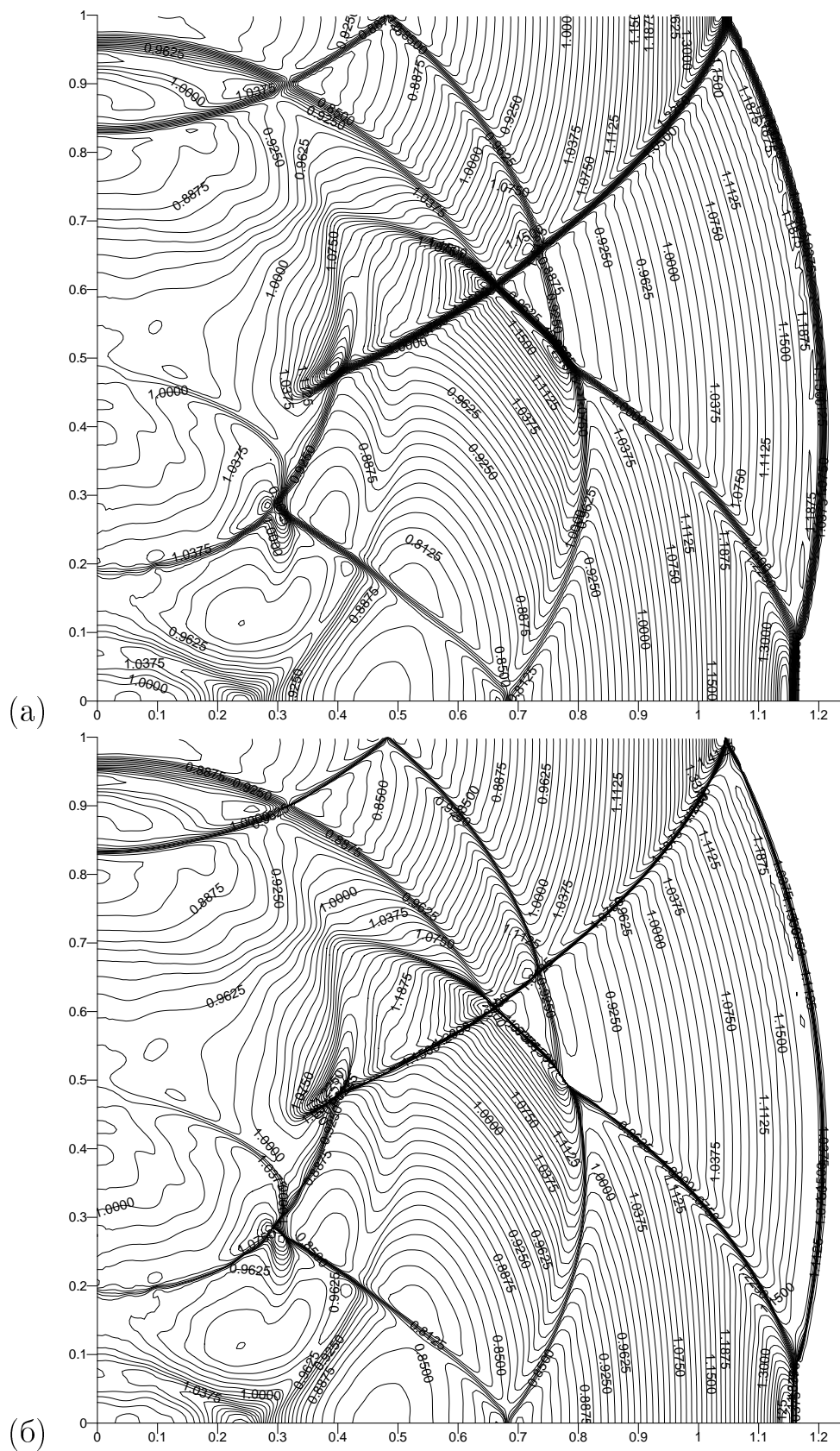
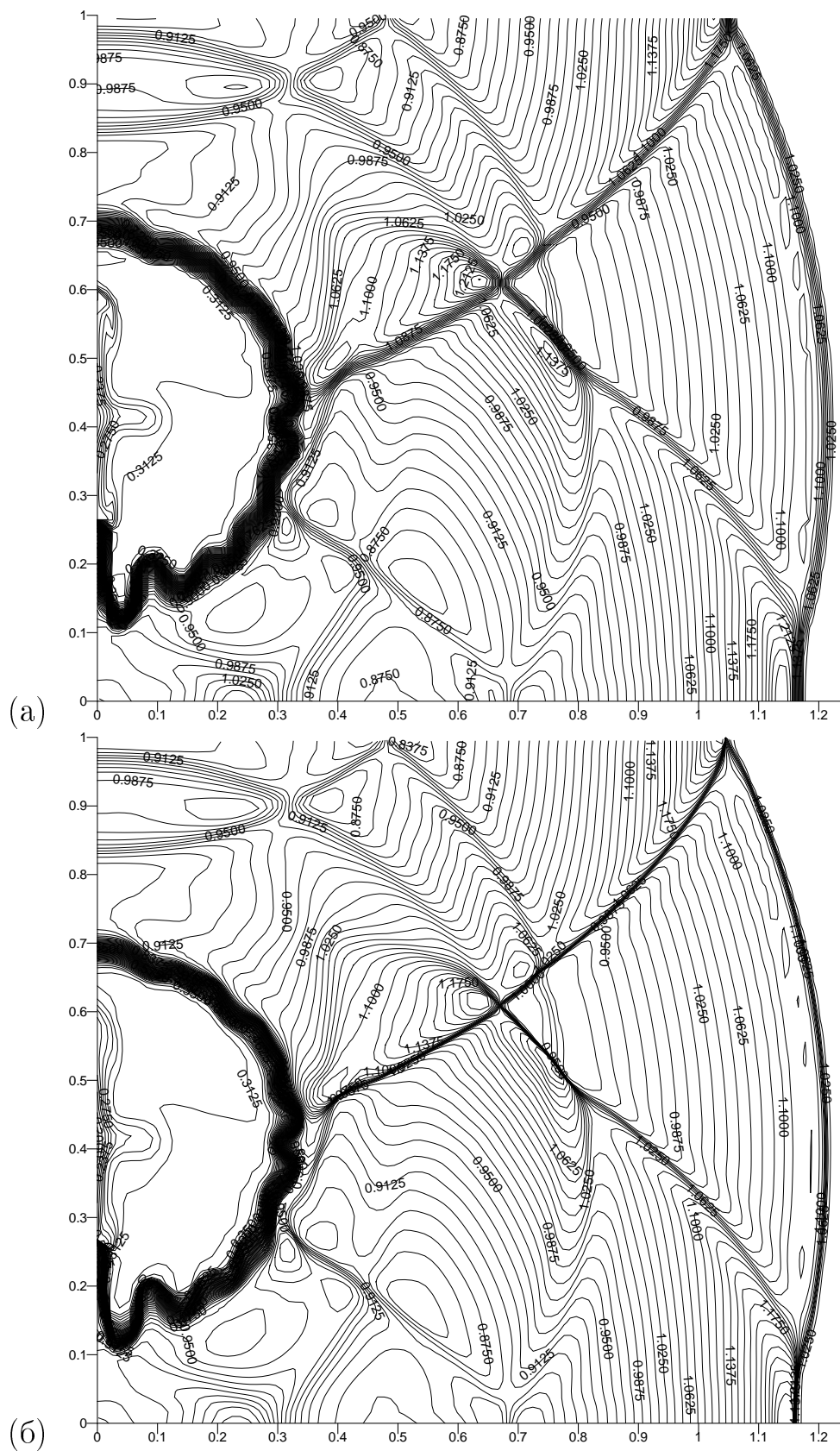


Рис. 3.19. Изолинии  $p$  для расчетов на прямоугольной (а) и адаптивной (б) сетках  $201 \times 251$ .



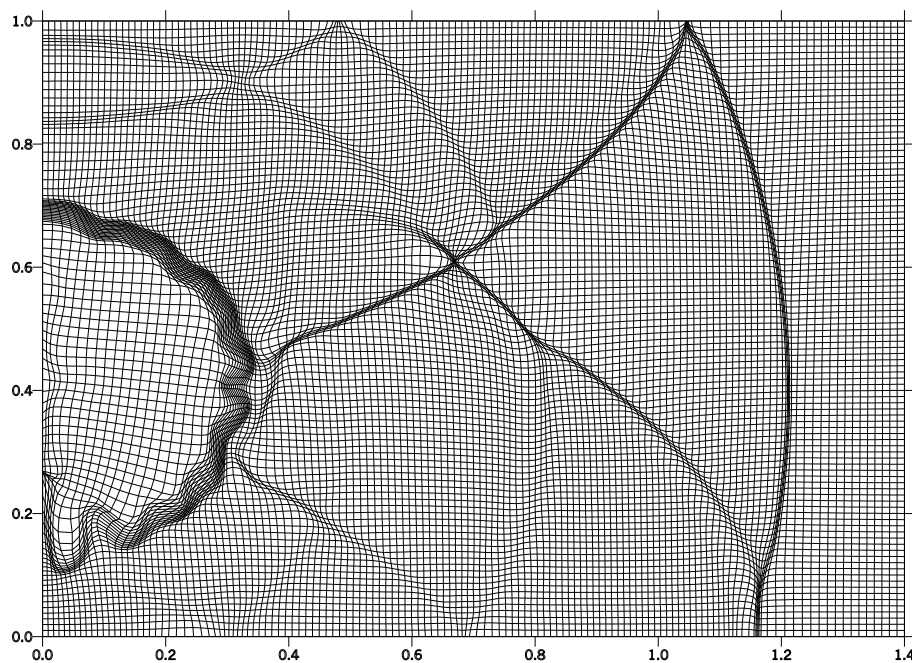


Рис. 3.21. Адаптивная сетка  $101 \times 141$ . Мониторная функция  $\rho$ .

при  $z=0, 1$ . Постановка взята из [163](Langseth, LeVeque, 2000). Первоначально газ покоится и имеет параметры  $(p, \rho)_2 = (1, 1)$  повсюду за исключением сферы с центром в точке  $(0, 0, 0.4)$  и радиусом 0.2. Внутри сферы  $(p, \rho)_1 = (5, 1)$ . Отношение теплоемкостей  $\kappa = 1.4$ . Начальный разрыв в давлении вызывает образование ударной волны, движущейся в сторону от центра сферы, тангенциального разрыва и волны разрежения, движущейся к центру сферы. Ударная волна достигает стенок, отражается от них, взаимодействует с тангенциальным разрывом и т.д. К моменту  $t=0.7$  в области течения возникают несколько ударных волн и сильный тангенциальный разрыв, окружающий область низкой плотности в окрестности первоначальной сферы. До тех пор пока ударная волна не достигла стенки  $z=0$ , задача является сферически симметричной, после этого сохраняется осевая симметрия с осью  $x, y=0$ . Расчет проводится в осесимметричной постановке в области  $(x, z) \in [0, 1.4] \times [0, 1]$ . На оси  $x=0$  ставится условие симметрии, на стенках условие отражения, на линии  $x=1.4$  задаются невозмущенные параметры потока. Изолинии давления в интервале  $p=0.775-1.5$  с шагом  $\Delta p=0.0125$  в момент  $t=0.7$ , посчитан-

ного на прямоугольной сетке  $201 \times 251$ , представлены на рис. 3.19а.

В первой серии расчетов с адаптацией в качестве мониторинной функции  $f$  используется давление  $p$ . На рис. 3.19б и 3.18 показаны изолинии  $p$  и адаптивная сетка. Здесь как интенсивные скачки, так и волны сжатия четко обозначены сгустившимися линиями сетки. Поскольку  $p$  нечувствительно к тангенциальным разрывам, адаптивная сетка не сгущается к ним. В следующих расчетах в качестве мониторинной функции используется плотность  $\rho$ . Изолинии плотности в интервале значений  $\rho=0.2-1.3$  с шагом  $\Delta\rho=0.0125$ , посчитанной на прямоугольной и адаптивной сетках, приведены на рис. 3.20а и 3.20б соответственно. Здесь на адаптивной сетке  $101 \times 141$  тангенциальный разрыв обозначен очень четко (см. рис. 3.21).

Из приведенных примеров видно, что адаптивная сетка выглядит как набор блоков, границы которых определяются автоматически сгущающимися координатными линиями. Внутри каждого блока сетка близка к квазиравномерной.

### 3.8 Расчеты течения газа с химической кинетикой

#### 3.8.1 Одномерная детонация в режиме Чепмена-Жуге.

Рассматривается процесс стационарного распространения детонации при разложении озона в среде, имеющей состав 25% озона и 75% кислорода, при комнатной температуре, см. [122](Colella и др., 1986), [105](Ben-Artzi, 1989). Волна идет слева направо. Параметры полностью сгоревшего газа слева и несгоревшего справа перед детонационной волной в единицах СГСЕ следующие:

$$(u, p, \rho, Z) = \begin{cases} (4.162 \cdot 10^4, 6.27 \cdot 10^6, 1.945 \cdot 10^{-3}, 0) & \text{при } x \rightarrow -\infty \\ (0, 8.321 \cdot 10^5, 1.201 \cdot 10^{-3}, 1) & \text{перед волной,} \end{cases} \quad (3.18)$$

показатель адиабаты  $\kappa=1.4$ , газовая постоянная  $R=1$ , химическая энергия  $q_o=5.196 \cdot 10^9$ . Используется упрощенная кинетическая модель (3.3) с

$\tau_o=1.717 \cdot 10^{-10}$  и  $T_{\text{ин}}=1.155 \cdot 10^9$ . В этом случае ширина зоны реакции составляет примерно  $5 \cdot 10^{-5}$ . Расчет проводится на сетке из 100 ячеек. По мере продвижения волны справа ячейки добавляются к сетке, а слева убираются. В начальный момент  $t=0$  левая граница отстоит на расстоянии 40 ячеек от точки  $x=0$ , соответствующей пику профиля волны в модели ЗНД, используемой в начальных условиях. На левой границе ставятся мягкие граничные условия, а на правой задаются значения несгоревшего газа перед волной. Во всех случаях в условии (3.12) задается коэффициент запаса  $\nu=0.5$ .

Первый расчет проводился на равномерной фиксированной сетке с шагом  $h=5 \cdot 10^{-6}$  (зона горения занимает 10 ячеек) и при  $\Delta t=5 \cdot 10^{-12}$ . Профили давления и плотности в момент  $t=10^{-8}$  приведены на рис. 3.22. Ошибка, оцениваемая в норме  $L_1$  относительно решения ЗНД в интервале  $0.008 < x < 0.011$ , приведена в табл. 3.4.

Таблица 3.4.

Сетка	Ошибка для $p$	Ошибка для $\rho$
Равномерная , $h=5 \cdot 10^{-6}$	$1.22 \cdot 10^2$	$3.28 \cdot 10^{-8}$
Адаптивная, $h_{\min}=1.56 \cdot 10^{-6}$	$1.37 \cdot 10^2$	$4.00 \cdot 10^{-8}$

Для второго расчета на грубой сетке с  $h=5 \cdot 10^{-5}$  (одна ячейка в зоне горения) и  $\Delta t=5 \cdot 10^{-11}$  результаты в момент  $t=10^{-7}$  представлены на рис. 3.23. Пик в профиле волны отсутствует и скорость волны определяется неверно. Последнее объясняется тем, что при достижении температуры в ячейке значения  $T_{\text{ин}}$  происходит полное выделение химической энергии и сдвиг фронта волны вправо на одну ячейку.

Третий расчет проводился с адаптацией. Начинался расчет на равномерной сетке  $h=5 \cdot 10^{-5}$  при распределении параметров согласно (3.18). После достижения установившегося режима полученное решение и индуцированная им адаптивная сетка использовались в качестве начальных данных при дальнейшем моделировании, иначе была бы получе-

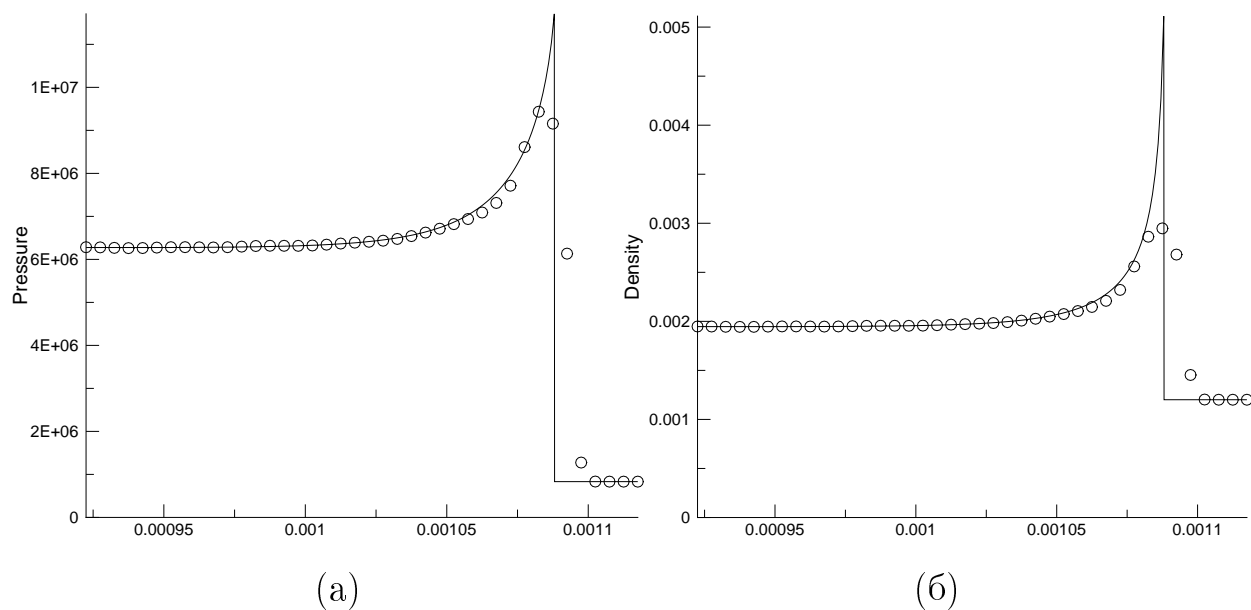


Рис. 3.22. Равномерная сетка с шагами  $h=5\cdot 10^{-6}$  и  $\Delta t=5\cdot 10^{-12}$ . Профили  $p$  (а) и  $\rho$  (б) для  $t=10^{-8}$ . Сплошная линия показывает решение ЗНД.

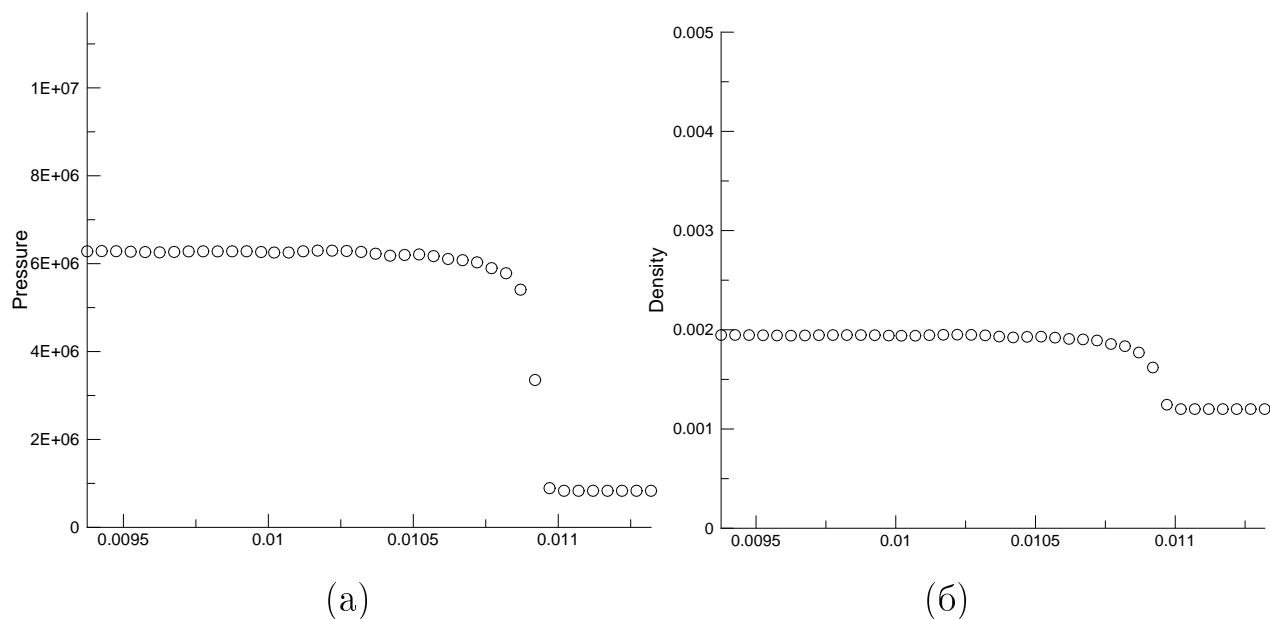


Рис. 3.23. Равномерная сетка с шагами  $h=5\cdot 10^{-5}$  и  $\Delta t=5\cdot 10^{-11}$ . Профили  $p$  (а) и  $\rho$  (б) для  $t=10^{-7}$ .

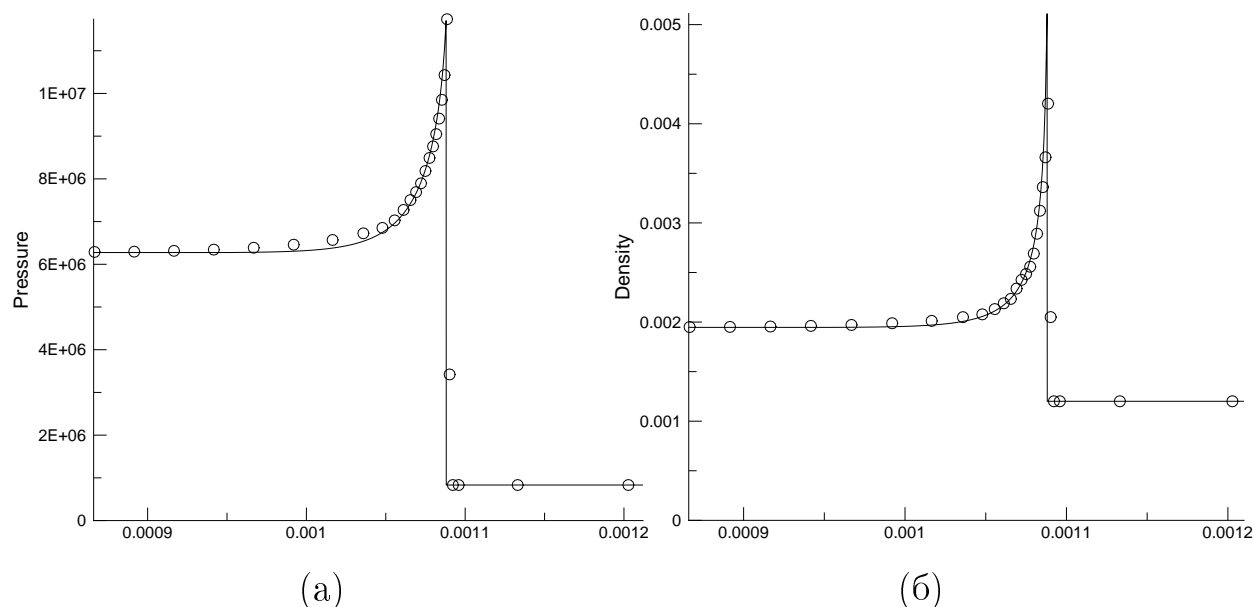


Рис. 3.24. Адаптивная сетка. Шаг начальной сетки  $h=5\cdot 10^{-5}$ .

на неправильная скорость детонационной волны. В качестве мониторинговой функции бралось  $Z$  и задавался коэффициент адаптации  $c_a=0.7$ . На каждом шаге по  $t$  проводилось 20 итераций по сетке и при минимизации функционала задавался итерационный параметр  $\tau=0.4$ . Результаты для  $t=10^{-7}$  представлены на рис. 3.24 и в табл. 3.4. Видно, что пики давления и плотности имеют большую амплитуду, чем в случае фиксированной сетки на рис. 3.22, вследствие того что минимальный размер ячейки в окрестности пика достигает  $h_{\min}=1.56\cdot 10^{-6}$ , т.е. в 3.2 раза меньше, чем шаг сетки для рис. 3.22. Итак, размер ячейки в зоне максимального градиента уменьшается в 32 раза по сравнению с шагом начальной сетки. Шаг по времени уменьшается примерно в этой же пропорции, что следует из условия устойчивости (3.11). В действительности эффективное уменьшение  $h$  происходит примерно в 45 раз, поскольку перед детонационной волной (уже через 2 ячейки)  $h=7.1\cdot 10^{-5}$ , а в конце зоны горения  $h=2.5\cdot 10^{-5}$ . Несмотря на лучшее разрешение пика, ошибка для “адаптивного” решения немного больше, чем для равномерной мелкой сетки с  $h=5\cdot 10^{-6}$  (см. табл. 3.4.). Это объясняется недостаточным числом узлов сетки, расположенных в гладкой зоне горения при адаптации. Тем не менее благодаря адаптации, на сетке изначально в 10 раз более грубой,

получено почти такое по точности решение как и на мелкой фиксированной сетке. Интересно проследить структуру подвижной сетки, которая следует поведению решения. Со стороны ударной волны, где решение меняется скачком, сетка резко сгущается. Со стороны зоны горения, где решение меняется плавно, шаг сетки меняется также постепенно.

**3.8.2 Неустойчивая пересжатая волна в одномерном течении.** В [40](Зельдович, Компанец, 1955) говорится о том, что пересжатая детонационная волна может распространяться в стационарном режиме при условии, что сзади движется поршень, не позволяющий образовываться волне разрежения. Позже, сначала экспериментально, а затем и теоретически, см., например, [135](Erpenbeck, 1964), [164](Lee, Stewart, 1990), было показано, что в некотором диапазоне параметров пересжатая волна может быть неустойчивой.

В [136](Fickett, Wood, 1966), [109](Bourlioux и др., 1991), [179](Quirk, 1994) и др. был проведен расчет одного такого режима с кинетической моделью (3.2) для скорости реакции. Здесь безразмерные параметры потока по отношению к значениям в несгоревшем газе перед волной таковы:  $(u, p, \rho, Z)_n = (0, 1, 1, 1)$ ,  $q_o = 50$ ,  $E^+ = 50$ ,  $K_o = 230.75$ ,  $\kappa = 1.2$ ,  $R = 1$ , степень пересжатия  $(D_o/D_{чж})^2 = 1.6$ , где  $D_o$  – скорость ударной волны в момент  $t=0$ . Моделирование проводилось в неподвижной системе координат в первом случае на фиксированной сетке, а во втором с выделением разогревающей ударной волны, когда равномерная сетка движется со скоростью ударной волны  $D$ . В обоих случаях шаг  $h=0.05$ , что соответствует размещению 20 ячеек на полуширину профиля волны  $L_{1/2}$  в решении ЗНД, которое использовалось в качестве начальных данных. Начальная сетка состоит из 100 ячеек. На левой границе задана скорость поршня для решения ЗНД, т.е.  $u=u_{cr}$ , и мягкие условия для остальных параметров.

Для первого расчета на рис. 3.25 показана зависимость давления на пике детонационной волны от времени (сплошная линия). Видно, что



стационарный режим нарушается и развивается неустойчивость с периодическими пульсациями. Для сравнения крестиками отмечены максимальные и минимальные значения давления при пульсациях, взятые из [109](Bourlioux и др., 1991), где использовалась схема РРМ (piecewise parabolic method) четвертого порядка аппроксимации по  $x$  и расчет проводился на фиксированной сетке с таким же  $h$  при выделении разогревающей ударной волны. Представленные на рис. 3.25 результаты схожи с данными, полученными сквозным счетом по схемам со 2-го по 4-й порядок аппроксимации по  $x$  [109](Bourlioux и др., 1991), [179](Quirk, 1994). Результаты второго расчета с выделением ударной волны на равномерной подвижной сетке представлены на рис. 3.26. В области развитой неустойчивости результаты практически идентичны значениям, полученным по схеме РРМ с выделением ударной волны [109](Bourlioux и др., 1991), отмеченные на рис. 3.26 крестиками.

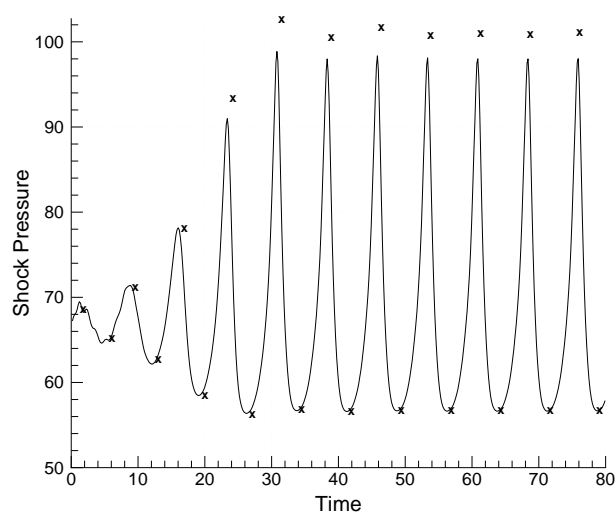


Рис. 3.25. Фиксированная сетка.

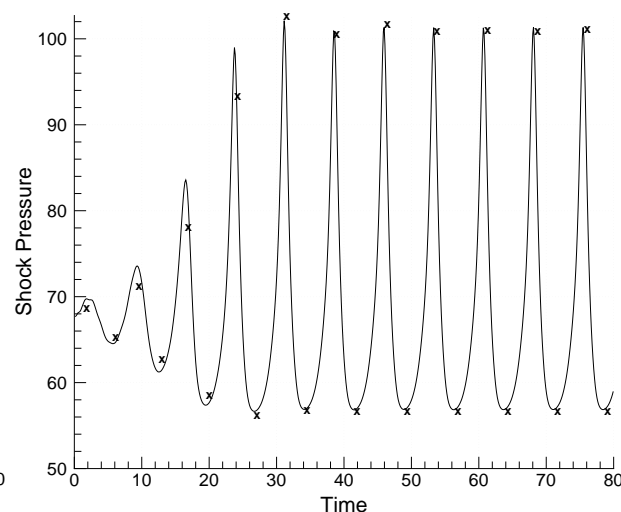


Рис. 3.26. Подвижная сетка.

Длина счетной области  $L_{об}$  (или число ячеек) определяется отслеживанием правой характеристики, исходящей из правого узла сетки (в случае выделения разрыва это ударная волна), и левой характеристики, исходящей из левого узла сетки. Таким образом, при моделировании на фиксированной сетке справа через определенные интервалы времени добавляются ячейки. Слева ячейки убираются, поскольку левая характе-

ристика, исходящая из левого узла сетки, движется вправо. Из-за пульсаций скорость ударной волны  $D$  непостоянна. Поэтому длина счетной области к моменту времени  $t$  оценивается по формуле

$$L_{об}(t) = L_{об}(0) - (u_{сг} - c_{сг})t + \int_0^t D(\tau)d\tau , \quad (3.19)$$

где  $L_{об}(0)$  – начальная длина области,  $u_{сг}$  и  $c_{сг}$  – скорости поршня и звука в левой ячейке. Скорость волны  $D$  из-за пульсаций изменяется периодически относительно начального значения  $D_o=8.613$  (взятого из решения ЗНД) примерно от 7.9 до 10.5. Интегрируя (3.19) численно при моделировании процесса, получим, что ко времени  $t=80$  размер счетной области  $L_{об} \approx 534L_{1/2}$ , или  $N=10680$  ячеек. Следует сказать, что подстановка постоянного значения  $D_o$  в (3.19) дает почти такую же длину области, с разницей в несколько ячеек. Таким образом, хорошим приближением для  $L_{об}$  является

$$L_{об}(t) = L_{об}(0) - (u_{сг} - c_{сг})t + D_o t . \quad (3.20)$$

В условии устойчивости (3.12) задавался коэффициент запаса  $\nu=0.5$ . При расчете на подвижной сетке приходилось после  $t=45$  уменьшать  $\nu$  до 0.45.

Интересно отметить, что шаг по времени  $\Delta t$  на подвижной сетке существенно больше  $\Delta t$  на фиксированной сетке. Например, в момент  $t=0$  в левой крайней ячейке подвижной сетки с номером  $i=3/2$ , где можно использовать линейное приближение

$$d_1^n = u_{сг} + c_{сг} = 10.499 , \quad d_2^n = u_{сг} - c_{сг} = 1.999$$

и скорости узлов равны скорости ударной волны  $w_1 = w_2 = D_o = 8.613$ , из (3.11) получаем

$$\Delta t_{3/2} = \frac{h}{\max(d_1^n - w_2 , -d_2^n + w_1)} = 7.55 \times 10^{-3} .$$

Между тем, на фиксированной сетке с  $w_i=0$  имеем  $\Delta t_{3/2}=4.76 \times 10^{-3}$ . В правой ячейке  $N+1/2$  сразу за ударной волной с послераспадными значениями в узлах подвижной сетки  $d_N^n=10.626$  и  $d_{N+1}^n=4.782$  получаем  $\Delta t_{N+1/2}=1.31 \times 10^{-2}$ . На фиксированной сетке с  $d_N^n=10.635$  и  $d_{N+1}^n=4.76$  имеем шаг  $\Delta t_{N+1/2}=4.70 \times 10^{-3}$ . Таким образом, отношение шагов растет от 1.59 в левой ячейке до 2.78 в правой. Это объясняется тем, что левая характеристика, исходящая из крайнего левого узла сетки, движется в том же направлении, что и сама сетка. Конечно, согласно (3.12) необходимо брать минимальный  $\Delta t_{i+1/2}$  и умножать его на  $\nu$ . К моменту  $t=80$  расчет включал 35597 шагов по  $t$  на фиксированной сетке и 23488 шагов на подвижной сетке.

### 3.8.3 Неустойчивая пересжатая волна в плоском канале.

Теоретическое исследование структуры волны в неустойчивом режиме проводилось, например, в [137](Fickett, Davis, 1979). Картина двумерного течения довольно сложная, поэтому необходимо осуществлять точное численное моделирование. Следующий пример, взятый из [110](Bourlioux, Majda, 1992), связан с моделированием течения пересжатой волны в плоском канале, когда возникающие поперечные ударные волны формируют так называемую ячеистую структуру.

Детонационная волна со степенью пересжатия  $(D_o/D_{\text{чж}})^2=1.2$  распространяется вправо в плоском канале, высота которого равна  $10L_{1/2}$ . Для химической реакции используется кинетическая модель (3.2). Безразмерные параметры равны  $q_o=50$ ,  $E^+=10$ ,  $K_o=3.124$ , отношение теплоемкостей  $\kappa=1.2$ . Справа от волны покоится непрореагировавший газ с параметрами  $(u, v, p, \rho, Z)_n=(0, 0, 1, 1, 1)$ . В качестве начального условия используется решение ЗНД. На верхней и нижней стенке канала ставятся периодические условия. На левой границе задается скорость поршня  $u_{\text{ст}}$  и мягкие условия для остальных параметров. Квадратная сетка имеет шаги  $h_x=h_y=h=0.05$ , т.е. 20 ячеек/ $L_{1/2}$ . Первоначально плоский фронт волны ЗНД возмущается в течение первых  $10^3$  шагов по времени введе-

нием в малую область (шириной 5 и высотой 100 ячеек сразу за ударной волной) газа с константой скорости  $K'_o=0.8K_o$ . Во всех расчетах коэффициент запаса  $\nu=0.5$ . Моделирование проводилось в неподвижной системе координат.

Следующий вопрос состоит в том, как далеко от фронта волны следует ставить левую границу, т.е. поршень. Моделирование проводится до  $t \simeq 63$ , и, следовательно, в устойчивом режиме модели ЗНД с  $D_o=7.459$ ,  $u_{ct}=4.704$ ,  $c_{ct}=4.0$  и с первоначальной длиной счетной области  $5L_{1/2}$  можно оценить из (3.20), что к концу расчета ее длина составит примерно  $424L_{1/2}$ , или 8480 ячеек. На такой сетке время моделирования будет слишком большим. Было проведено несколько предварительных расчетов на грубой сетке с шагом  $h=0.2$  до  $t=40$ , когда структура течения является достаточно развитой. В первом случае, согласно (3.20), в конце длина счетной области  $L_{об}$  достигает  $275L_{1/2}$  (1375 ячеек). Во втором случае  $L_{об}$  ограничивается величиной  $60L_{1/2}$  (300 ячеек) и в третьем  $40L_{1/2}$  (200 ячеек). По мере продвижения фронта волны справа добавлялся ряд ячеек, а слева после достижения максимально заданной  $L_{об}$  убирался. Разница максимального пикового давления для первого и второго расчетов в момент  $t=40$  составила не более 0.01%, а для первого и третьего - не более 1%. Поэтому для подробных расчетов было решено ставить заднюю границу на расстоянии  $40L_{1/2}$  от фронта волны и, таким образом, основное моделирование проводилось на сетке  $800 \times 200$  ячеек.

Первоначально расчет осуществлялся на квадратной сетке и время счета до  $t=60$  на РС Pentium 2.0 ГГц составило 36 часов. На рис. 3.27 показаны изолинии давления  $p$  для времени от  $t=60.060$  до 62.735. Общая структура решения сходна с результатами из [110](Bourlioux, Majda, 1992), [179](Quirk, 1994) и имеет периодический характер, когда сначала в центре зарождается “ячейка” благодаря поперечным ударным волнам, отходящим от головной волны. Затем центральная ячейка суживается и исчезает и зарождаются ячейки у верхней и нижней стенки. Изменение структуры течения за период показано на рис. 3.27 [93](Azararenok, Tang,

2004).

При построении подвижной сетки на новом слое  $t^{n+1}$  начальное приближение задается с использованием скорости  $D_o$

$$x_{i,j}^{n+1} = x_{i,j}^n + D_o \Delta t, \quad y_{i,j}^{n+1} = y_{i,j}^n.$$

Расчет на подвижной сетке проводился двумя способами. В первом фронт ударной волны выделялся. Дополнительно может подключаться адаптация узлов к особенностям решения. На рис. 3.28 показаны 60 передних рядов ячеек сетки в момент  $t=60.44$  когда расчет проводится с выделением фронта волны и адаптацией. В качестве мониторинговой функции  $f$  используется плотность (см. рис. 3.28а) или давление (см. рис. 3.28б). Можно осуществлять только сгущение линий сетки к выделяемому фронту волны (см. рис. 3.29). Для этого используется функционал (1.6), предложенный в [46](Иваненко, 2000) (см. раздел 1.2). Сгущение линий сетки  $X(\xi, \eta), Y(\xi, \eta)$  в параметрической области к фронту волны задавалось следующим образом. Отношение ширины к высоте в прямоугольной ячейке менялось от  $\varepsilon$  до 1 квадратично при движении от правой границы вглубь области за 60 слоев ячеек. Параметр  $\varepsilon$  задавался равным 0.1 для рис. 3.29а и 0.05 для рис. 3.29в.

Во втором способе использовалась глобальная адаптация без выделения фронта волны с давлением в качестве  $f$  (см. рис. 3.30). При адаптации на каждом шаге по  $t$  проводилось 2 итерации по сетке. Адаптация имеет целью разрешить главные (наиболее интенсивные) особенности в решении, и в этих местах сетка сгущается как можно сильнее. Поэтому шаг по времени от значений  $\Delta t_{\text{кв}} = 1.5 \cdot 10^{-3}$  на квадратной сетке уменьшался на пять и более порядков величины на адаптивной. Отметим что  $\Delta t$  не постоянно, периодически увеличивается, затем уменьшается и т.д. даже в стационарных задачах. Это объясняется, как было отмечено в разделе 2.5, отсутствием минимума у дискретного функционала при адаптации к разрывной мониторинговой функции. Разумеется, невозможно проводить весь расчет с таким малым  $\Delta t$ . Имеются два выхода: 1) начинать сгущать сетку, стартуя с квадратной в нужный момент  $t$ ;

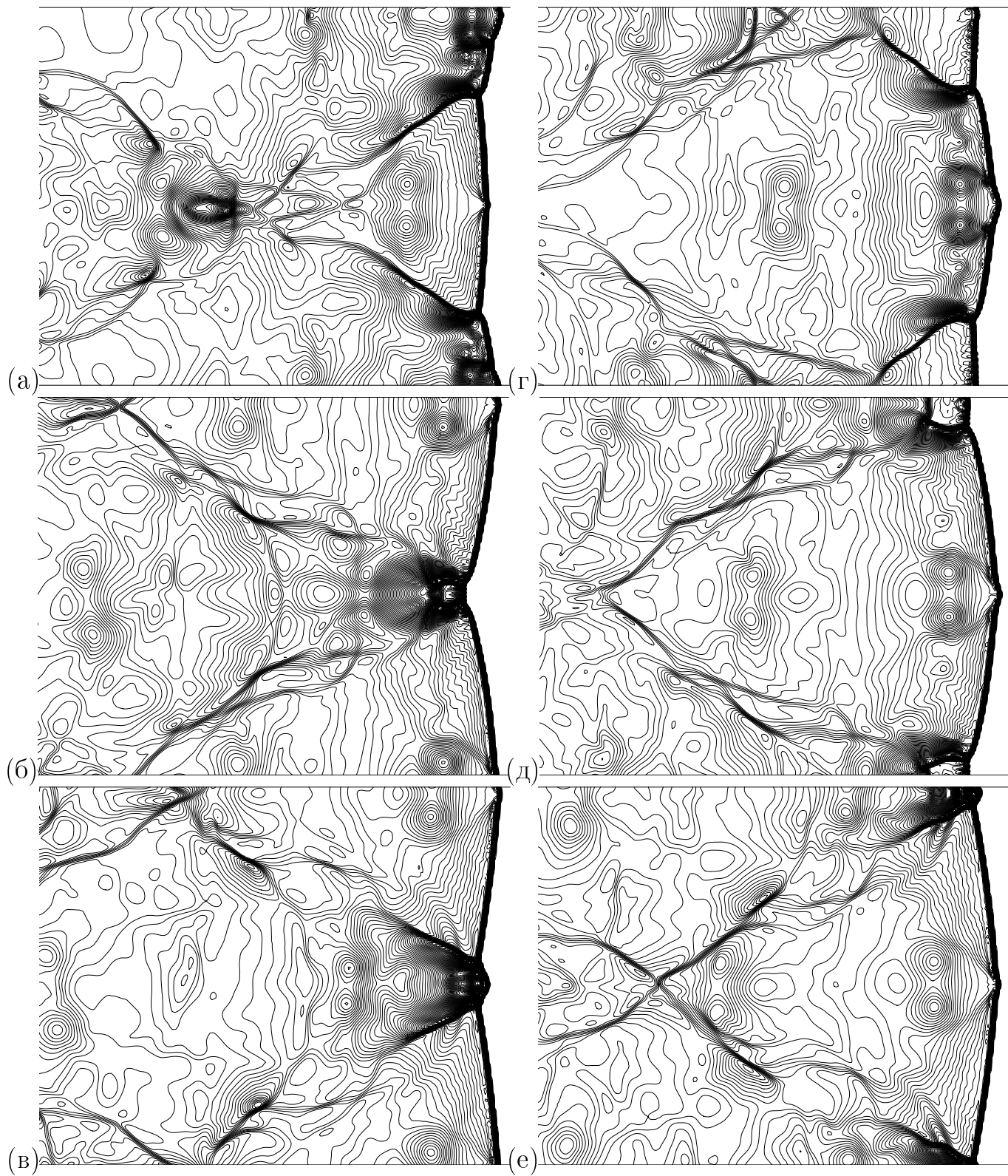


Рис. 3.27. Изолинии  $p$  в моменты  $t=60.060$  (а),  $60.824$  (б),  $61.205$  (в),  $61.981$  (г),  $62.362$  (д),  $62.735$  (е) при расчете на квадратной сетке. Представлены результаты только для 250 передних рядов ячеек.

2) уменьшая  $c_a$  (задание  $c_a=0$  приведет к построению квазиравномерной сетки в области  $\Omega$ ), ослабить сгущение линий сетки и увеличить  $\Delta t$ . Сгущение линий сетки к фронту волны (см. рис. 3.29) приводит к падению шага  $\Delta t$  на порядок относительно  $\Delta t_{\text{кв}}$ .

Отметим важность использования в проведенном расчете функционала (2.19), т.е. условной минимизации при движении граничных узлов. Использование одномерного функционала вдоль граничной кривой приводит к возникновению неустойчивости в процессе расстановки узлов как на границе, так и далеко в глубине области. Граничные узлы переползают друг через друга и ячейки вырождаются.

Рассмотрим некоторые особенности численного решения, полученного разными способами. Изолинии плотности в момент  $t=60.44$  для расчета на квадратной сетке приведены на рис. 3.31а. Структура течения в окрестности фронта волны внутри ячейки сильно размазана из-за осцилляций (несмотря на использование монотонизирующей процедуры, небольшие осцилляции присутствуют). Невозможно различить, насколько близко фронт горения подходит к разогревающей ударной волне. Тангенциальный разрыв внутри ячейки также замазан. Результаты для расчета с выделением фронта волны показаны на рис. 3.31б. Здесь ясно различимы фронт горения и тангенциальный разрыв внутри ячейки. Но в глубине области, где сетка квазиравномерная, точность падает, зоны горения и ударные волны размазываются. Видно, что вне ячейки зона горения не имеет структуры. При подключении адаптации (см. сетку на рис. 3.28а) области горения различаются лучше (см. рис. 3.31в), именно оттого, что сетка "чувствует" особенности в изменении плотности. Использование сгущения сетки к фронту волны (см. сетку на рис. 3.29а) позволяет различить внутри ячейки слабый тангенциальный разрыв между основным тангенциальным разрывом и фронтом ударной волны (см. рис. 3.31г). Как видно из сравнения рис. 3.28а и 3.28б разные параметры по-разному управляют сеткой. Плотность чувствительна к зонам горения, а давление к ударным волнам. Это хорошо заметно

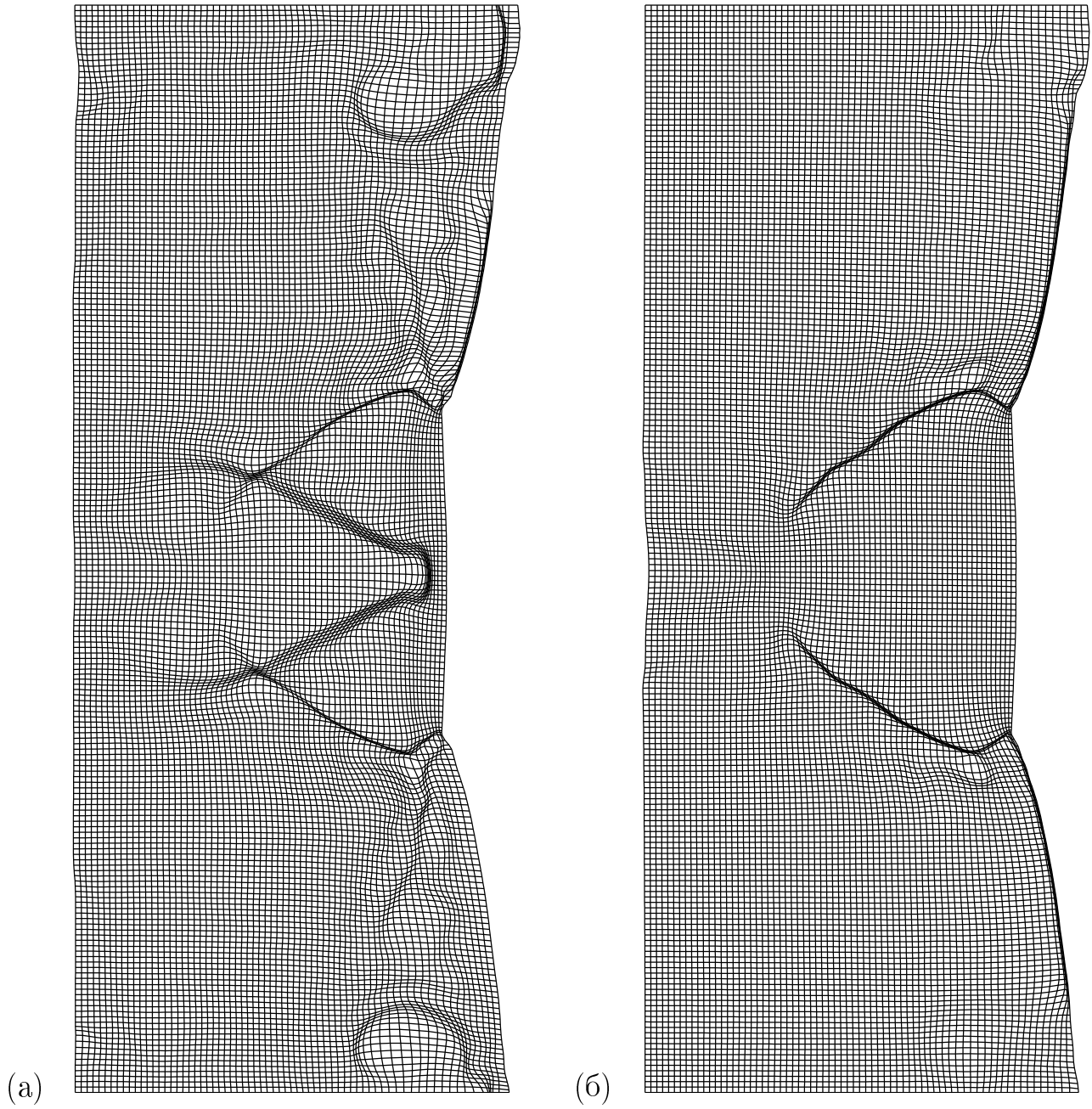


Рис. 3.28. Выделение фронта волны и адаптация. Показаны 60 передних рядов ячеек сетки в момент  $t=60.44$ . В качестве мониторинговой функции  $f$  используется плотность (а) и давление (б).



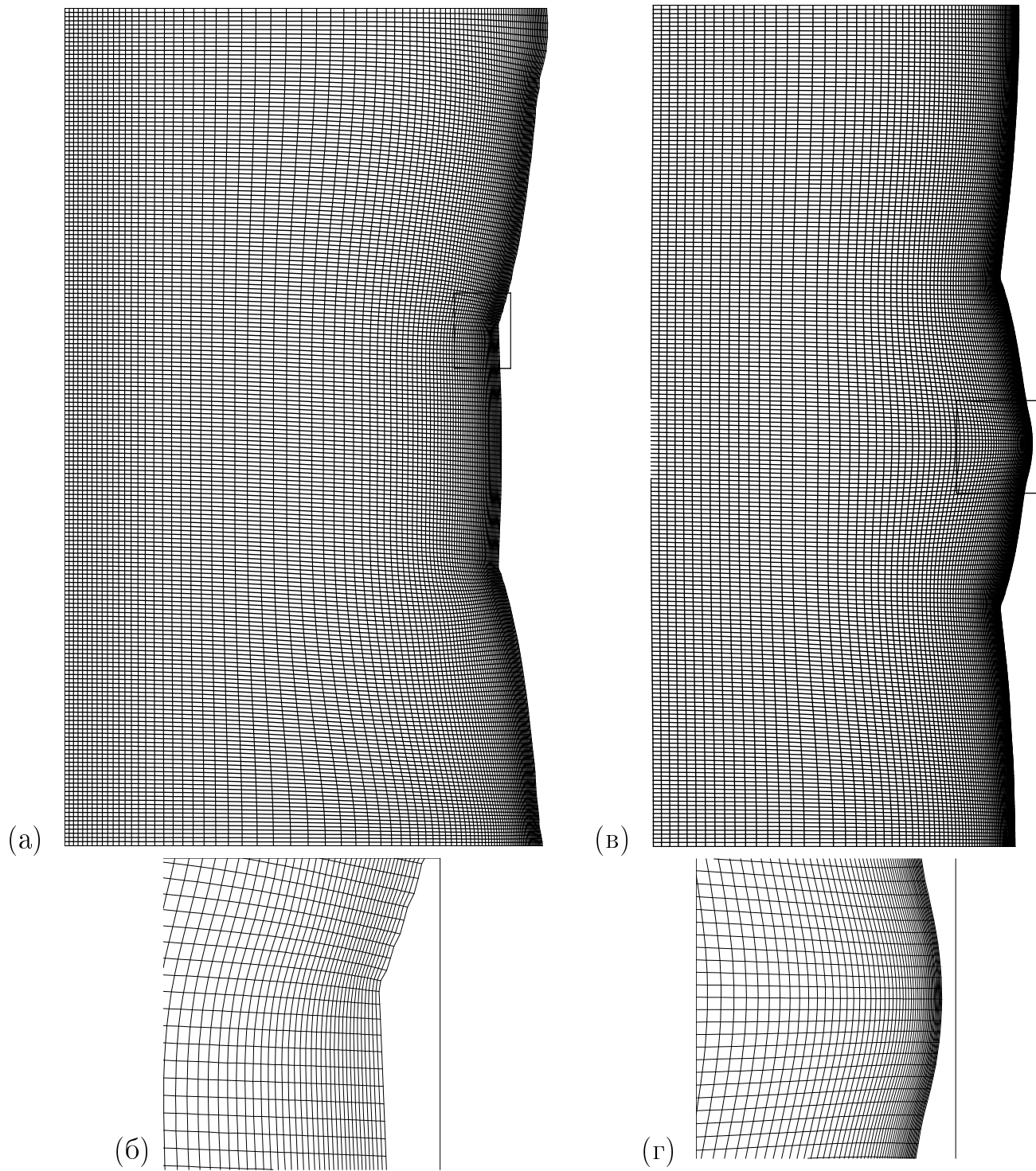


Рис. 3.29. Выделение фронта волны и сгущение к нему линий сетки. Сетка для  $t=60.44$  (а), фрагмент (в), и  $t=61.59$  (б), фрагмент (г).

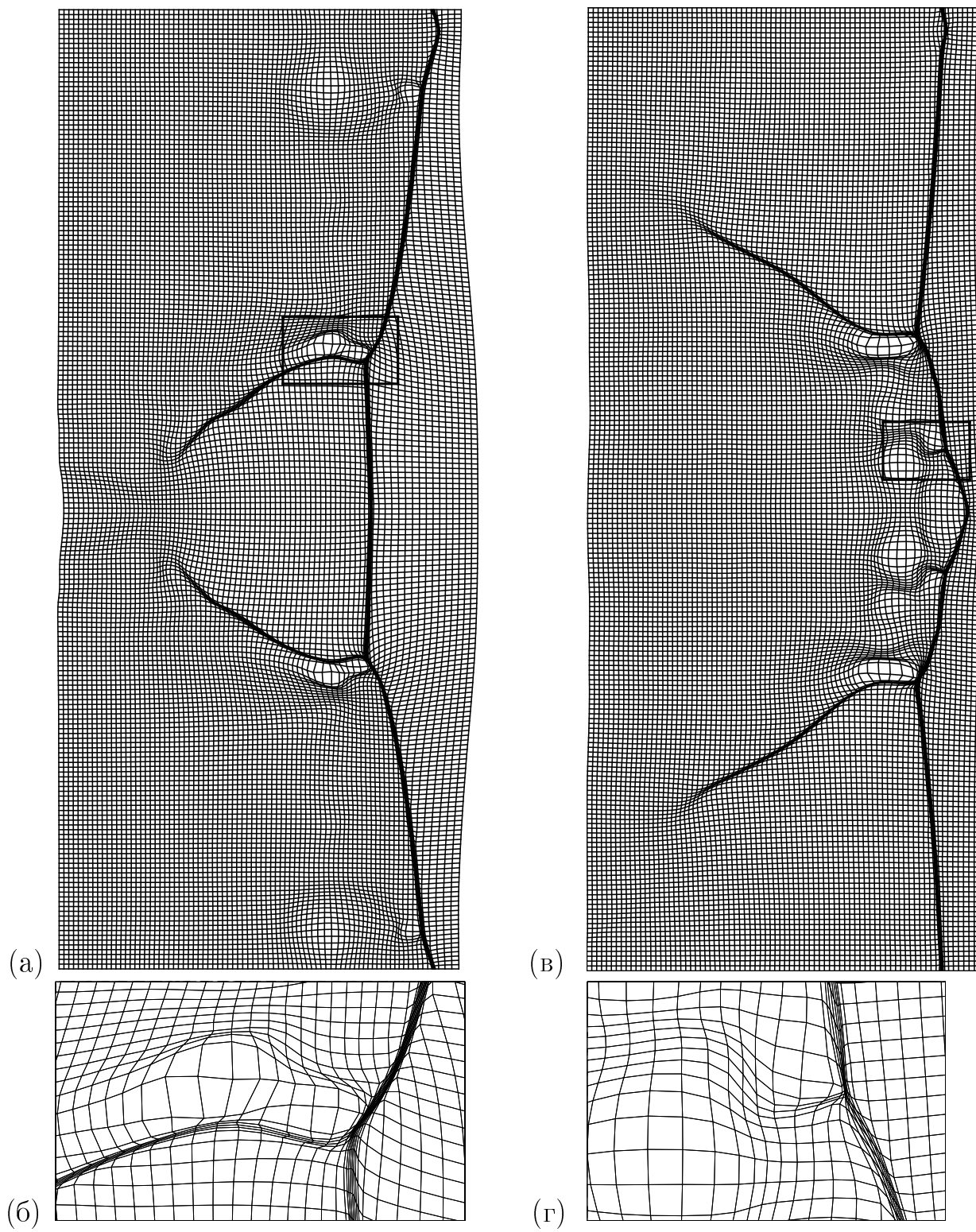


Рис. 3.30. Глобальная адаптация с давлением в качестве  $f$ . Сетка в момент  $t=60.44$  (а), фрагмент (в), и  $t=61.59$  (б), фрагмент (г).

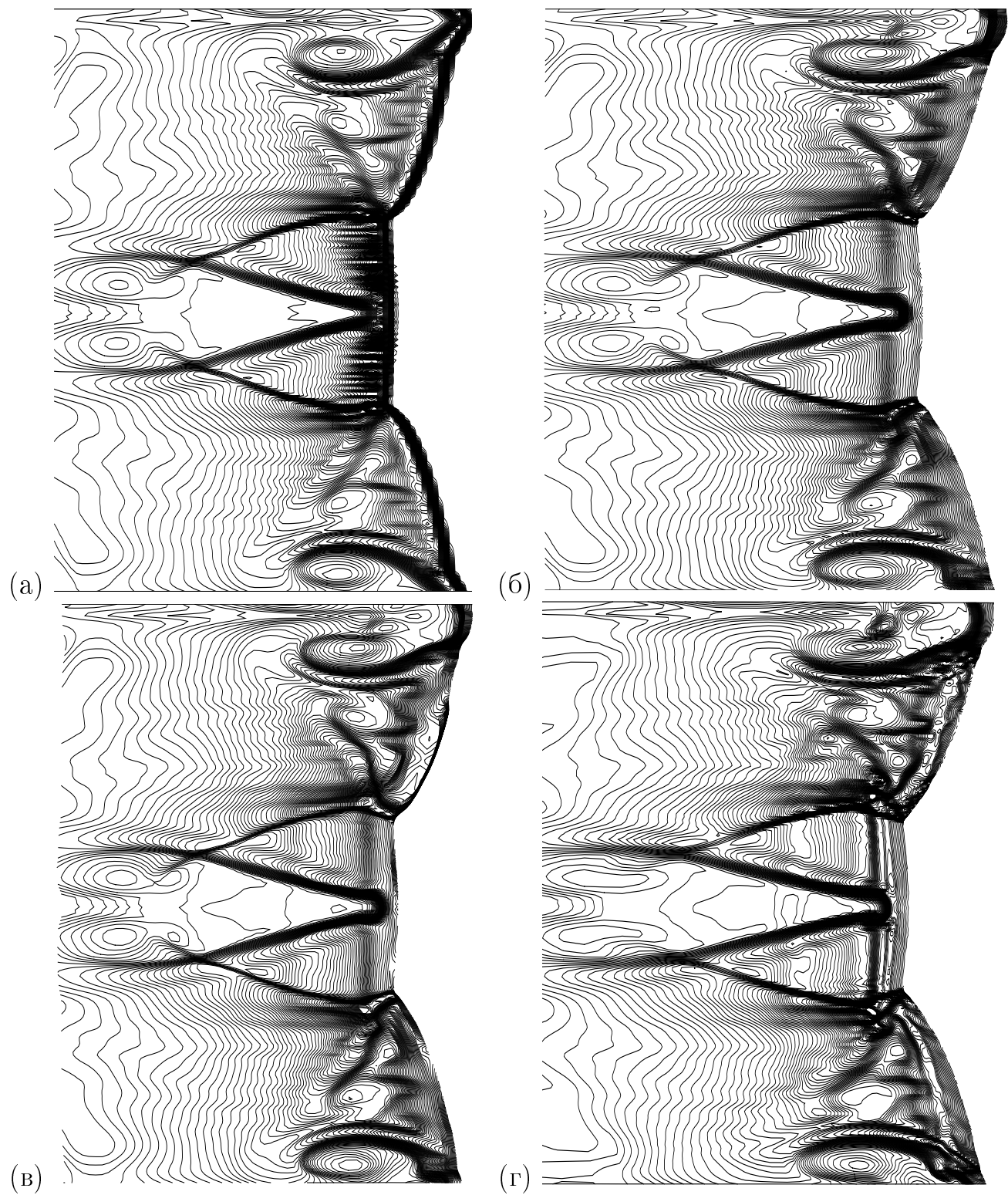


Рис. 3.31. Изолинии  $\rho$  в момент  $t=60.44$ . Квадратная сетка (а), подвижная сетка с выделением фронта волны (б), подключение адаптации (в) (см. сетку на рис. 3.28(а)); сгущение сетки к фронту волны (г) (см. сетку на рис. 3.29(а)).

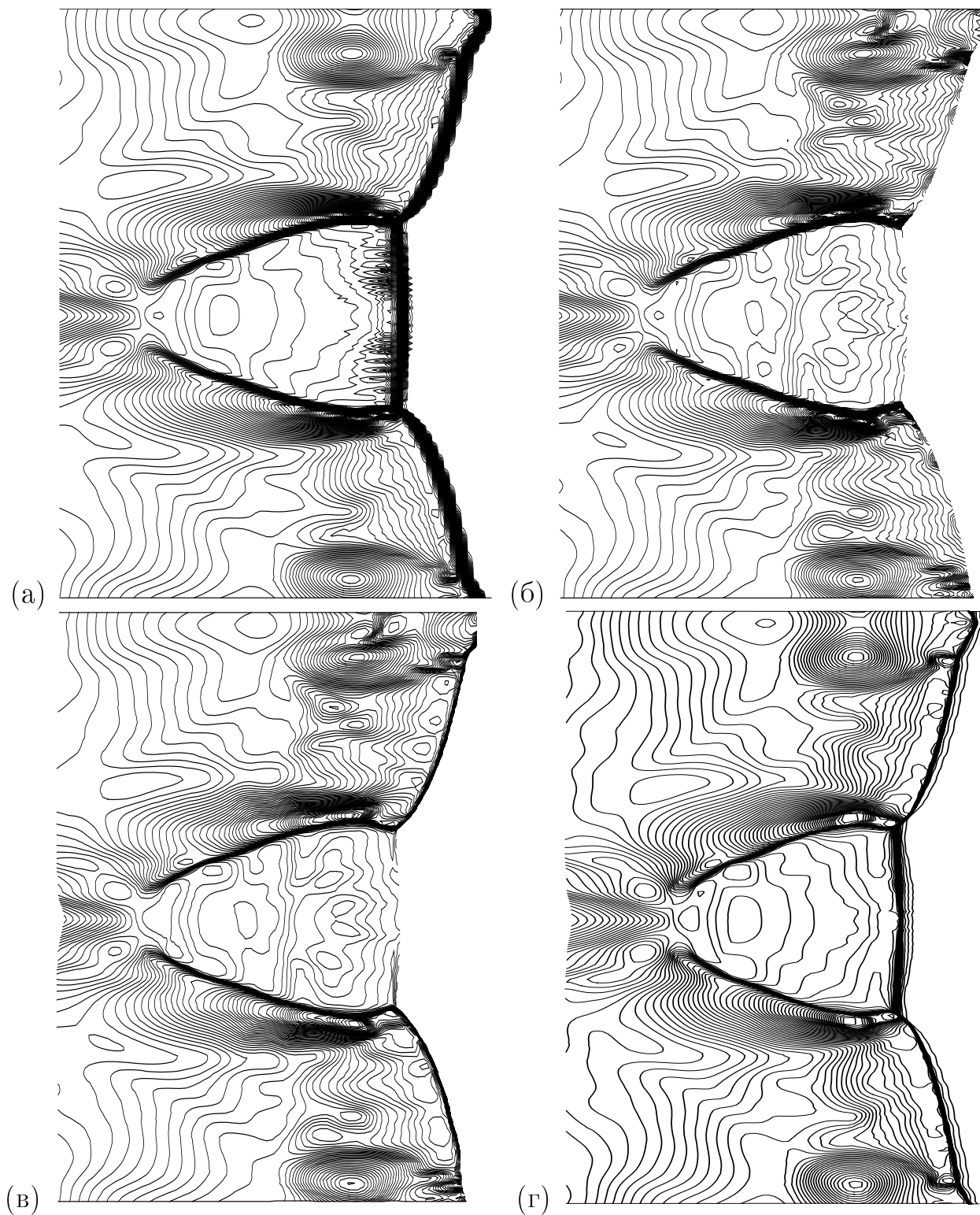


Рис. 3.32. Изолинии  $p$  в момент  $t=60.44$ . Квадратная сетка (а), подвижная сетка с выделением фронта волны (б), подключение адаптации (в) (см. сетку на рис. 3.28(б)), глобальная адаптация (г) (см. сетку на рис. 3.30(а)).

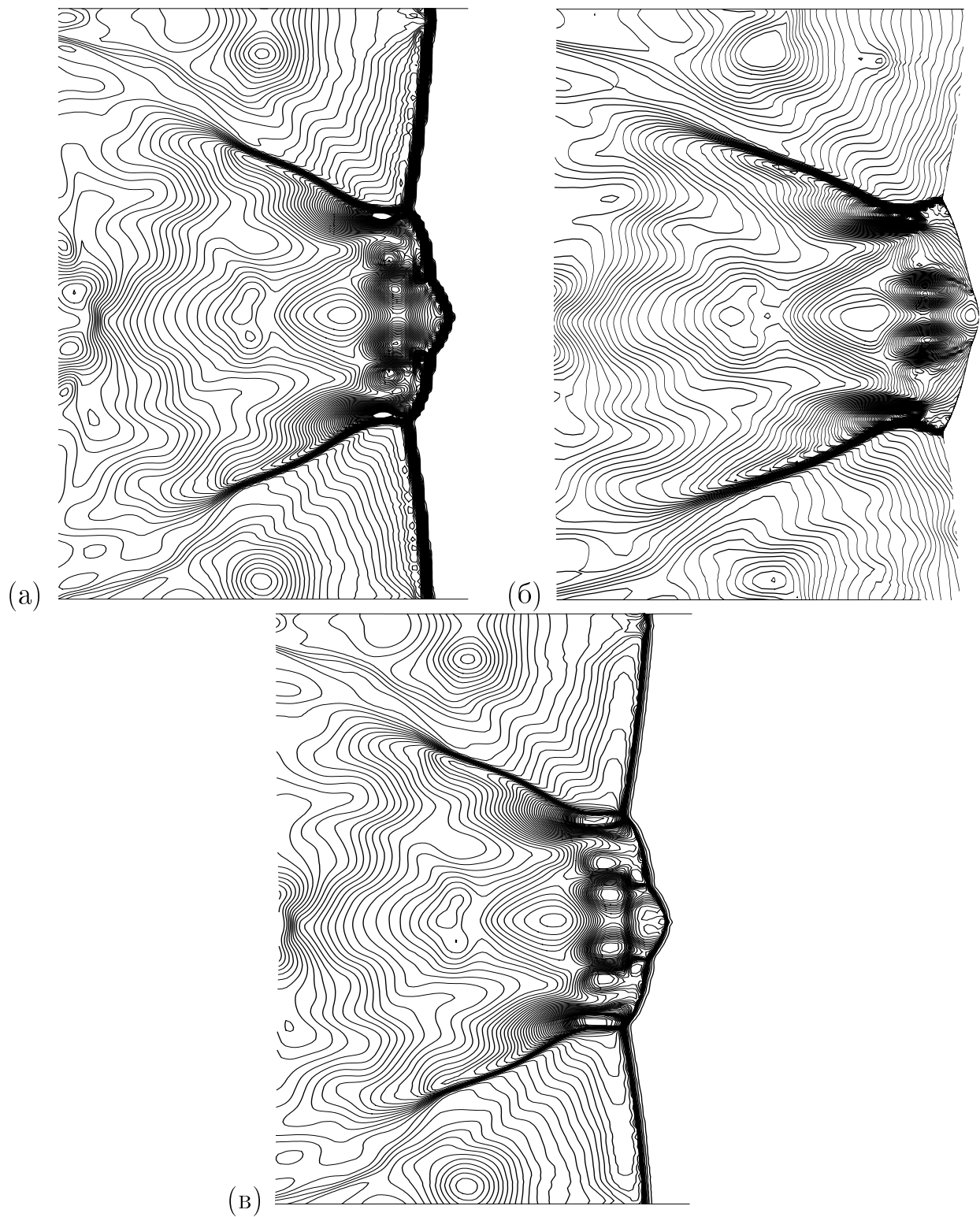


Рис. 3.33. Изолинии  $p$  в момент  $t=61.59$ . Квадратная сетка (а), подвижная сетка со сгущением линий к фронту волны (б) (см. сетку на рис. 3.29(в)), глобальная адаптация (в) (см. сетку на рис. 3.30(в)).

на рис. 3.30, где сетка сгущается к зарождающимся слабым поперечным ударным волнам, отходящим от головного скачка. Изолинии давления в момент  $t=60.44$  при расчете различными способами представлены на рис. 3.32.

На фрагменте сетки (см. рис. 3.30б), можно наблюдать сильное увеличение размеров ячеек в области между интенсивной и слабой поперечными ударными волнами. На первый взгляд, кажется, что аппроксимация здесь ухудшается. Однако следует отметить, что сгущение линий сетки к ударным волнам приводит к тому, что сквозной расчет по схеме сводится к пересчету параметров с использованием соотношений Гюгонио на скачке. Это следует из того, что соотношения Гюгонио выводятся из интегральных законов сохранения, записанных для контура, окружающего скачок, ширина которого стремится к нулю. Такой контур вдоль разрыва можно мысленно провести через центры узких ячеек, примыкающих к разрыву слева и справа. Экспериментальное подтверждение этому можно увидеть, сравнивая контуры давления на рис. 3.32. При расчете на квадратной сетке (см. рис. 3.32а), за головным скачком внутри ячейки наблюдаются осцилляции, несмотря на использование монотонизатора. При выделении фронта волны, когда применяется специальная процедура пересчета величин через скачок (см. рис. 3.32б и 3.32в), осцилляции пропадают. Осцилляции исчезают и при использовании глобальной адаптации (см. рис. 3.32г), где расчет ведется сквозным счетом. Таким образом, разрежение сетки между слабым и сильным скачками не должно привести к понижению точности решения.

Изолинии давления в момент  $t=61.59$  показаны на рис. 3.33. Как и ожидалось, по сравнению с моделированием на квадратной сетке (см. рис. 3.33а), использование глобальной адаптации (см. рис. 3.33б), дает лучшее разрешение в окрестности зарождающихся слабых поперечных скачков.

## ГЛАВА 4

### АЛГОРИТМ КОНСЕРВАТИВНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ НА ГЕКСАЭДРАЛЬНЫХ СЕТКАХ

Необходимость интерполяции физических величин с одной разностной гексаэдральной сетки на другую встречается, например, при решении задач гидродинамики. При моделировании на некоторых подвижных сетках (например, в лагранжевых координатах) со временем некоторые ячейки сетки могут вырождаться. Для того чтобы избежать остановки расчетов, следует переинтерполировать физические величины со старой “плохой” сетки на новую “хорошую”. В некоторых случаях необходимо осуществлять консервативную интерполяцию, когда количество величины в одном и том же локальном объеме должно оставаться неизменным после интерполяции. В настоящей главе описывается метод консервативной интерполяции физических величин с одной регулярной гексаэдральной сетки на другую [3,4,10,13,94,98] (Азаренок, 2002,2003,2006,2008, Azarenok, 2005). Интерполяция сводится к определению объема фигуры пересечения ячеек старой и новой сеток. Гексаэдральная ячейка с линейчатыми гранями заменяется двумя 12-гранниками с плоскими треугольными гранями, что приводит к задаче построения фигуры пересечения двух 12-гранников. Для текущей ячейки новой сетки предложен оптимальный алгоритм перебора ячеек старой сетки, имеющих в пересечении с ней непустое множество. Проводится оценка ошибки интерполяции. Рассмотрены примеры интерполяции.

#### 4.1 Постановка задачи

Пусть в области  $\Theta \subset \mathbb{R}^3$  заданы две регулярные невырожденные сетки, состоящие из гексаэдральных ячеек. На одной сетке, называемой старой и обозначаемой  $\omega_o$ , заданы значения консервативных газодинамических величин. Другую сетку, на которую необходимо осуществить интерполяцию величин, назовем новой и обозначим  $\omega_n$ .

В главе 1 отмечалось, что линейчатая ячейка задается с помощью трилинейного отображения единичного куба из параметрического пространства в физическое (см. рис. 4.1), которое может быть представлено в виде

$$\mathbf{r} = (1 - \zeta)\{\xi[(1 - \eta)\mathbf{r}_2 + \eta\mathbf{r}_3] + (1 - \xi)[\eta\mathbf{r}_4 + (1 - \eta)\mathbf{r}_1]\} + \zeta\{\xi[(1 - \eta)\mathbf{r}_6 + \eta\mathbf{r}_7] + (1 - \xi)[\eta\mathbf{r}_8 + (1 - \eta)\mathbf{r}_5]\}, \quad (4.1)$$

где координаты восьми вершин ячейки  $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ ,  $i=1, \dots, 8$ , считаются заданными, а величины  $\xi, \eta, \zeta$  в параметрическом пространстве  $\mathbb{R}^3$  определяют единичный куб  $0 \leq \xi, \eta, \zeta \leq 1$ . Боковые грани гексаэдральной ячейки в общем случае являются линейчатыми поверхностями второго порядка. Например, грань 1234 ( $\zeta=0$ ) определена соотношением

$$\mathbf{r} = \xi[(1 - \eta)\mathbf{r}_2 + \eta\mathbf{r}_3] + (1 - \xi)[\eta\mathbf{r}_4 + (1 - \eta)\mathbf{r}_1]. \quad (4.2)$$

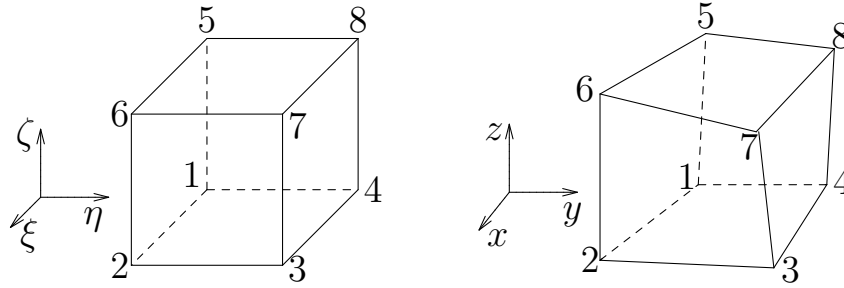


Рис. 4.1. Единичный куб из пространства  $\xi, \eta, \zeta$  отображается посредством (4.1) в линейчатую ячейку из пространстве  $x, y, z$ .

Интерполяция является консервативной, т.е. общее количество консервативной величины (например, массы, компонент импульса, полной энергии и т.д.) в рассматриваемой области должно оставаться локально неизменным после интерполяции. К примеру, для плотности интерполяция задается формулой

$$m_n = \int_{V_n} \rho_o(\mathbf{r}) dV, \quad (4.3)$$

где  $\rho_o(\mathbf{r})$  – известное распределение плотности на сетке  $\omega_o$ ,  $V_n$  – объем ячейки новой сетки,  $m_n$  – масса вещества, заключенная в этой ячейке.



После этого среднее значение плотности в новой ячейке вычисляется по формуле

$$\rho_n = \frac{m_n}{V_n}.$$

Далее будем говорить об интерполяции плотности  $\rho$ , подразумевая под ней любую консервативную величину. Поскольку в каждой ячейке сетки  $\omega_o$  задается свое распределение  $\rho_o(\mathbf{r})$ , для вычисления интеграла (4.3) необходимо найти все области пересечения рассматриваемой новой ячейки со старыми ячейками и по этим областям провести интегрирование для определения массы ячейки  $m_n$ . Если распределение плотности по ячейкам задано в классе кусочно-постоянных функций, то необходимо просто найти объемы всех областей пересечения рассматриваемой ячейки сетки  $\omega_n$  с ячейками сетки  $\omega_o$ .

Определение области пересечения двух гексаэдральных ячеек является сложной задачей, поскольку приходится выделять линии пересечения линейчатых поверхностей в  $\mathbb{R}^3$ , решая дифференциальные уравнения, см. [126](Dukowich, Radial, 1991). Эти уравнения имеют особенности в тех областях где, например, грани ячеек пересекаются и почти параллельны, в местах соприкосновения граней и т.д. Вместо этого решается задача поиска пересечения 12-гранных ячеек с плоскими треугольными гранями, что существенно облегчает задачу интерполяции.

Поскольку в настоящей работе рассматривается интерполяция первого порядка точности, для чего следует вычислять объемы областей пересечения ячеек, удобнее перейти от интегрирования по объему к интегрированию по поверхности, т.к. интегрирование по плоским областям поверхности является более простой задачей. Из векторного анализа известно, что объем фигуры может быть выражен через поверхностный интеграл

$$V = \frac{1}{3} \iint_S \mathbf{r} \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{3} \iint_S \mathbf{r} \cdot \mathbf{n} \, dS, \quad (4.4)$$

где  $V$  – объем, ограниченный замкнутой поверхностью  $S$ ,  $\mathbf{n}$  – единичный вектор внешней нормали к поверхности  $S$ ,  $dS$  – элемент поверхности.

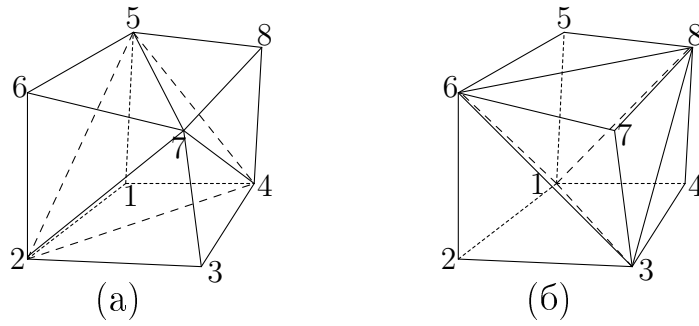


Рис. 4.2. Пара 12-гранных ячеек, полусумма объема которых равна объему гексаэдральной ячейки с теми же вершинами.

Вместо линейчатой ячейки рассмотрим два 12-гранника с теми же вершинами, изображенные на рис. 4.2, которые имеют плоские треугольные грани. Докажем следующее утверждение, оформленное в виде теоремы [10, 13](Азаренок, 2006, 2008)

**Теорема 4.1.1** *Объем линейчатой ячейки равен среднему от объемов двух 12-гранных ячеек.*

**Доказательство.** Определим вклад в объем 12-гранной ячейки от треугольных граней 124 и 234 (см. рис. 4.2а). Треугольник 124 задается линейным отображением параметрического треугольника  $\Delta^2 = \{(\xi, \eta) : 0 \leq \xi, \eta, \xi + \eta \leq 1\}$

$$\mathbf{r} = (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)\xi + (\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_1)\eta + \mathbf{r}_1,$$

а элемент поверхности  $d\mathbf{S}$  треугольной грани 124 суть

$$d\mathbf{S} = \mathbf{r}_{14} \times \mathbf{r}_{12} d\eta d\xi = (\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_1) \times (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) d\eta d\xi.$$

Нетрудно проверить, что скалярное произведение векторов  $\mathbf{r}$  и  $d\mathbf{S}$  равно

$$\mathbf{r} \cdot d\mathbf{S} = (\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_4) d\eta d\xi,$$

где  $(\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_4) = \mathbf{r}_2 \cdot (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_4)$  обозначает смешанное произведение векторов. Следовательно, вклад в объем ячейки от треугольной грани 124 равен

$$V_{124} = \frac{1}{3} \iint_{S_{124}} \mathbf{r} \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{3} (\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_4) \int_0^1 \int_0^{1-\xi} d\eta d\xi = \frac{1}{6} (\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_4). \quad (4.5)$$

Формула (4.5) выражает объем тетраэдра с четвертой вершиной, помещенной в начало координат. Соответственно для треугольной грани 234 радиус вектор  $\mathbf{r}$  и элемент поверхности  $d\mathbf{S}$  задаются соотношениями

$$\begin{aligned}\mathbf{r} &= (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3)\xi + (\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_3)\eta + \mathbf{r}_3, \\ d\mathbf{S} &= \mathbf{r}_{32} \times \mathbf{r}_{34} d\eta d\xi = (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3) \times (\mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_3) d\eta d\xi,\end{aligned}$$

а вклад в объем ячейки от треугольной грани 234 равен

$$V_{234} = \frac{1}{3} \iint_{S_{234}} \mathbf{r} \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{3} (\mathbf{r}_4 \mathbf{r}_3 \mathbf{r}_2) \int_0^1 \int_0^{1-\xi} d\eta d\xi = \frac{1}{6} (\mathbf{r}_4 \mathbf{r}_3 \mathbf{r}_2).$$

Суммарный вклад в объем ячейки от треугольных граней 124 и 234 есть

$$V'_{1234} = \frac{1}{6} (\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_4) + \frac{1}{6} (\mathbf{r}_4 \mathbf{r}_3 \mathbf{r}_2).$$

Таким же образом легко проверить, что если часть границы 12-гранника составлена из треугольных граней 123 и 134 (см. рис. 4.2б), то вклад в объем ячейки от этой поверхности равен

$$V''_{1234} = \frac{1}{6} (\mathbf{r}_3 \mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1) + \frac{1}{6} (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_4 \mathbf{r}_3).$$

Взяв среднее от  $V'_{1234}$  и  $V''_{1234}$ , получим формулу, выражающую вклад в объем линейчатой ячейки при интегрировании по линейчатой грани 1234, см. [125](Dukowich, 1988)

$$V_{1234} = \frac{1}{2} (V'_{1234} + V''_{1234}) = \frac{1}{12} [(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_4 \mathbf{r}_3) + (\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_4) + (\mathbf{r}_3 \mathbf{r}_2 \mathbf{r}_1) + (\mathbf{r}_4 \mathbf{r}_3 \mathbf{r}_2)]. \quad (4.6)$$

Таким же образом рассматривается замена каждой из оставшихся 5 граней линейчатой ячейки на две пары треугольных граней. Для них выполняются соотношения аналогичные (4.6).  $\square$

Ранее в [69](Ушакова, 2001) с помощью вычисления тройного интеграла было показано, что объем линейчатой ячейки равен половине суммы объемов 10 тетраэдров, формирующих два 12-гранника изображенных на рис. 4.2. Это равносильно утверждению теоремы 4.1.1.

Из доказательства теоремы 4.1.1 вытекает следующее утверждение.

**Следствие 4.1.1** *Всего можно составить 32 различные пары 12-гранных ячеек, для которых справедлива теорема 4.1.1.*

Например, каждый из 12-гранников, представленных на рис. 4.3, состоит из пары тетраэдров и пары пирамид с четырехугольным основанием. Отличие от рис. 4.2 состоит в том, что при построении нижних треугольных граней проводятся другие диагонали.

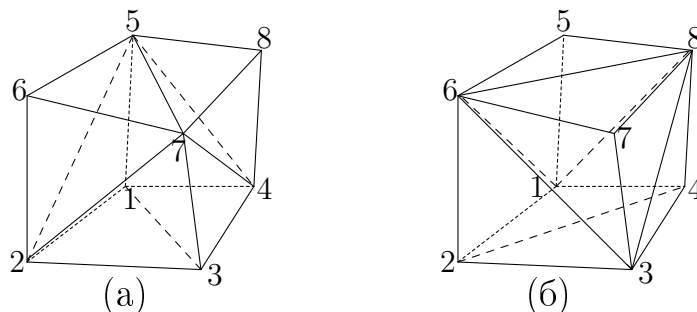


Рис. 4.3. Другая пара 12-гранных ячеек, полусумма объема которых равна объему гексаэдральной ячейки с теми же вершинами.

Для осуществления интерполяции плотности с одной гексаэдральной сетки на другую рассматривается следующий подход [10, 13, 98] (Азаренок, 2006–2008). При вычислении интеграла (4.3) каждой линейчатой ячейке ставится в соответствие две 12-гранные ячейки, изображенные на рис. 4.2. Интеграл (4.3) заменяется средним от значений четырех интегралов. В первом интегрирование осуществляется по области пересечения первой 12-гранной ячейки сетки  $\omega_n$  с первой 12-гранной ячейкой сетки  $\omega_o$ , а во втором – со второй 12-гранной ячейкой сетки  $\omega_o$ . В третьем и четвертом интегрирование осуществляется для второй 12-гранной ячейки сетки  $\omega_n$  по области ее пересечения с первой и второй 12-гранной ячейкой сетки  $\omega_o$ . Таким образом, при интегрировании построение области пересечения двух линейчатых ячеек заменяется на построение четырех областей пересечения различных пар 12-гранных ячеек с треугольными гранями.

Требования, предъявляемые к сеткам  $\omega_o$  и  $\omega_n$ , состоят в невырожденности соответствующих им сеток, состоящих из 12-гранных ячеек 1-го или второго типа.

## 4.2 Общее описание метода

Введем следующие обозначения.  $\Omega_n$  – текущая 12-гранная ячейка новой сетки (новая ячейка);  $\Omega_n^{ijk}$  – ячейка, вершины которой имеют глобальные номера  $i+p, j+s, k+t$ , где  $1 \leq i \leq I, 1 \leq j \leq J, 1 \leq k \leq K, p, s, t=0, 1$ , и  $I=N_1-1, J=N_2-1, K=N_3-1$  – число ячеек по трем направлениям;  $\Omega_o$  – текущая 12-гранная ячейка старой сетки (старая ячейка);  $\Omega_{on}$  – фигура пересечения ячеек  $\Omega_o$  и  $\Omega_n$ ;  $\mathcal{L}_{on}$  – линия пересечения граничных поверхностей ячеек  $\Omega_o$  и  $\Omega_n$ , а если их несколько, то используется обозначение  $\mathcal{L}_{on}^i$ ;  $\Delta_n^l, \Delta_o^l$  – треугольные грани ячеек  $\Omega_n$  и  $\Omega_o$  соответственно,  $l=1, 2, \dots, 12$ ;  $\mathbf{r}_i, \tilde{\mathbf{r}}_i$  – радиус-векторы вершин граней  $\Delta_n^l$  и  $\Delta_o^l$  соответственно,  $i=1, 2, 3$ .

Рассмотрим две соседние грани, например, 124 и 234 (см. рис. 4.2а). Полагаем, что противоположные по отношению к диагонали 24 вершины 1 и 3 в треугольниках имеют локальный номер 1. Две другие вершины пронумерованы так, чтобы задавать внешнюю нормаль при последовательном обходе вершин. Таким образом, получаем следующее соответствие между номерами вершин 12-гранника и треугольных граней

№ вершины в 12-граннике	№ вершины в треугольнике
1 2 4	1 3 2
2 3 4	2 1 3

Аналогично задается соответствие для оставшихся 10 треугольных граней. Отметим, что для второго 12-гранника, изображенного на рис. 4.2б, соответствие вершин будет другим. Для треугольников 123 и 134 имеем

№ вершины в 12-граннике	№ вершины в треугольнике
1 2 3	2 1 3
1 3 4	3 2 1

Алгоритм интерполяции состоит из пяти этапов.

**Этап I.** Построение линии пересечения граничных поверхностей 12-гранных ячеек  $\Omega_n$  и  $\Omega_o$ . На этом этапе находится ломанная линия  $\mathcal{L}_{on}$ ,

каждое звено которой суть линия пересечения двух треугольных граней ячеек. Предполагается, что линия  $\mathcal{L}_{on}$  является контуром, без точек ветвления. Может существовать несколько таких линий  $\mathcal{L}_{on}^i$ .

**Этап II.** Построение фигуры пересечения ячеек. На данном этапе находится  $\Omega_{on}$ , фигура пересечения ячеек  $\Omega_o$  и  $\Omega_n$ . Он осуществляется одновременно с этапом I. На каждой из рассматриваемых треугольных граней ячеек  $\Omega_o$  (или  $\Omega_n$ ) строится многоугольник, высекаемый линией  $\mathcal{L}_{on}$  и лежащий внутри ячейки  $\Omega_n$  (или  $\Omega_o$ ). Этот многоугольник есть часть границы искомой фигуры  $\Omega_{on}$ . Поскольку может существовать несколько  $\mathcal{L}_{on}^i$ , то и многоугольников на рассматриваемой грани может быть больше одного (но не более двух). Внутри многоугольника заключена плоская многоугольная поверхность. Объединение всех многоугольных поверхностей образует границу  $\Omega_{on}$ . Отметим, что область  $\Omega_{on}$  может состоять из двух отдельных симплексов.

**Этап III.** Вычисление объема и массы фигуры пересечения  $\Omega_{on}$ .

**Этап IV.** Перебор ячеек сетки  $\omega_o$ . Необходимо найти окружение рассматриваемой новой линейчатой ячейки, которое состоит из старых ячеек  $\Omega_o^q$ ,  $q=1, 2, \dots, q_{max}$ , имеющих в пересечении с ячейкой  $\Omega_n$  непустое множество (здесь используется один индекс  $q$  при нумерации ячеек окружения). При вычислениях достаточно найти окружение одной из двух 12-гранных ячеек  $\Omega_n$  по одной из двух  $\Omega_o$  и использовать его для второй  $\Omega_n$ . Для текущей ячейки  $\Omega_n$  следует использовать оптимальный алгоритм перебора ячеек сетки  $\omega_o$ , с тем чтобы проверять только ячейки окружения  $\Omega_o^q$ .

**Этап V.** Расчет массы  $m_n$ , заключенной в новой ячейке, и значения плотности в ней.

### 4.3 Этап I. Построение линии пересечения $\mathcal{L}_{on}$

Алгоритм построения линии пересечения граней 12-гранных ячеек  $\mathcal{L}_{on}$  состоит из двух шагов.

**Шаг 1.** Последовательно перебираем 12 граней ячейки  $\Omega_n$  и для каждой из них рассматриваем 12 граней ячейки  $\Omega_o$  до тех пор пока не будет найдена пара пересекающихся граней, скажем  $\Delta_n^{l_1}$  и  $\Delta_o^{l_2}$ . Находим концы отрезков пересечения – вершины ломаной  $\mathcal{L}_{on}$ .

**Шаг 2.** Последовательно находим звенья ломаной  $\mathcal{L}_{on}$ , используя следующие два свойства: а)  $\mathcal{L}_{on}$  является замкнутой линией, б) концы звена ломанной лежат на сторонах треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  или  $\Delta_o^{l_2}$ .

**4.3.1 Шаг 1. Определение вершин ломаной  $\mathcal{L}_{on}$ .** Рассмотрим грани ячеек  $\Delta_n^{l_1}$  и  $\Delta_o^{l_2}$  с локальной нумерацией вершин 1, 2, 3. Для определения линии пересечения этих граней необходимо выписать уравнения плоскостей, проходящих через их вершины.

С целью упрощения выкладок осуществим преобразование координат  $x, y, z$  так, чтобы в новой системе  $x', y', z'$  начало координат совпадало с вершиной 1 треугольника  $\Delta_n^{l_1}$ , ось  $x'$  проходила через его сторону 12, а плоскость  $x, y$  лежала в плоскости треугольника. Для этого необходимо осуществить сдвиг и поворот старой системы координат. Сдвиг задается  $\mathbf{r}_1$ , радиус-вектором вершины 1. Определим координаты ортов новой системы координат  $\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}'$  через орты старой системы  $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ . Имеем

$$\mathbf{i}' = \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}, \quad \mathbf{k}' = \frac{\mathbf{i}' \times (\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1)}{|\mathbf{i}' \times (\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1)|}, \quad \mathbf{j}' = \mathbf{k}' \times \mathbf{i}'.$$

Следовательно, получаем разложение для ортов

$$\mathbf{i}' = \alpha_{11}\mathbf{i} + \alpha_{12}\mathbf{j} + \alpha_{13}\mathbf{k}, \quad \mathbf{j}' = \alpha_{21}\mathbf{i} + \alpha_{22}\mathbf{j} + \alpha_{23}\mathbf{k}, \quad \mathbf{k}' = \alpha_{31}\mathbf{i} + \alpha_{32}\mathbf{j} + \alpha_{33}\mathbf{k}; \quad (4.7)$$

здесь  $\alpha_{ij}$  – компоненты матрицы  $\mathcal{A}$ , задающей поворот системы координат. В новой системе вершины треугольника имеют координаты

$$\mathbf{r}'_1 = \mathcal{A}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1) = 0, \quad \mathbf{r}'_2 = \mathcal{A}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = (x'_2, 0, 0), \quad \mathbf{r}'_3 = \mathcal{A}(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1) = (x'_2, y'_2, 0).$$

Для краткости будем в дальнейшем опускать штрих при записи символов, подразумевая (если не специально не отмечается), что работаем в

новой системе координат. Уравнение плоскости, проходящей через вершины треугольника  $\Delta_n^{l_1}$ , в новых координатах имеет вид

$$z = 0. \quad (4.8)$$

Теперь рассмотрим грань старой ячейки, треугольник  $\Delta_o^{l_2}$ . В новой системе координаты вершины  $\Delta_o^{l_2}$  задаются преобразованием

$$\tilde{\mathbf{r}}'_i = \mathcal{A}(\tilde{\mathbf{r}}_i - \mathbf{r}_1) = 0,$$

где  $\mathbf{r}_1$  – координаты вершины 1 треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  в старой системе координат. Опять для краткости будем опускать штрих у символов, подразумевая, что работаем в новой системе координат.

Уравнение плоскости, проходящей через три вершины треугольника  $\Delta_o^{l_2}$ , суть

$$\begin{vmatrix} x - \tilde{x}_1 & y - \tilde{y}_1 & z - \tilde{z}_1 \\ \tilde{x}_2 - \tilde{x}_1 & \tilde{y}_2 - \tilde{y}_1 & \tilde{z}_2 - \tilde{z}_1 \\ \tilde{x}_3 - \tilde{x}_1 & \tilde{y}_3 - \tilde{y}_1 & \tilde{z}_3 - \tilde{z}_1 \end{vmatrix} = 0,$$

или

$$Ax + By + Cz + D = 0, \quad (4.9)$$

$$\text{где} \quad A = (\tilde{y}_2 - \tilde{y}_1)(\tilde{z}_3 - \tilde{z}_1) - (\tilde{y}_3 - \tilde{y}_1)(\tilde{z}_2 - \tilde{z}_1),$$

$$B = -(\tilde{x}_2 - \tilde{x}_1)(\tilde{z}_3 - \tilde{z}_1) + (\tilde{x}_3 - \tilde{x}_1)(\tilde{z}_2 - \tilde{z}_1),$$

$$C = (\tilde{x}_2 - \tilde{x}_1)(\tilde{y}_3 - \tilde{y}_1) - (\tilde{x}_3 - \tilde{x}_1)(\tilde{y}_2 - \tilde{y}_1), \quad D = -A\tilde{x}_1 - B\tilde{y}_1 - C\tilde{z}_1.$$

Для определения отрезка линии пересечения треугольников  $\Delta_n^{l_1}$  и  $\Delta_o^{l_2}$  ищем пересечение плоскостей (4.8) и (4.9). Подставив (4.8) в (4.9), получим уравнение прямой

$$Ax + By + D = 0. \quad (4.10)$$

Сначала следует проверить пересекает ли прямая (4.10) стороны треугольника  $\Delta_n^{l_1}$ . В соответствии с количеством сторон треугольника возможны три случая.



1. Рассмотрим возможность пересечения прямой (4.10) со стороной 12, уравнение которой суть  $y=0$ . Подставив его в (4.10), получим

$$Ax + D = 0. \quad (4.11)$$

Здесь возможны три варианта.

1.1. *Первый вариант.* Коэффициенты  $A, D=0$ , тогда линия пересечения плоскостей совпадает со стороной 12 треугольника  $\Delta_n^{l_1}$ . Следовательно, ищем точку пересечения стороны 12 со сторонами  $\tilde{1}\tilde{2}, \tilde{1}\tilde{3}$  или  $\tilde{2}\tilde{3}$  треугольника  $\Delta_o^{l_2}$ .

1.1.1. Сначала проверяем пересекаются ли стороны 12 и  $\tilde{1}\tilde{2}$ . Точка пересечения  $Q$  с радиус-вектором  $\mathbf{r}$  лежит на сторонах 12 и  $\tilde{1}\tilde{2}$ . Для ее нахождения запишем уравнения сторон в параметрической форме

$$\mathbf{r} = t\mathbf{r}_2, \quad (4.12)$$

$$\mathbf{r} = (1 - \tilde{t})\tilde{\mathbf{r}}_1 + \tilde{t}\tilde{\mathbf{r}}_2, \quad (4.13)$$

где  $0 \leq t, \tilde{t} \leq 1$ . Приравниваем правые части векторных уравнений и используем соотношение для компоненты  $y$  (напомним, что  $\mathbf{r}_2 = (x_2, 0, 0)$ )

$$0 = (1 - \tilde{t})\tilde{y}_1 + \tilde{t}\tilde{y}_2,$$

откуда получаем  $\tilde{t} = \tilde{y}_1 / (\tilde{y}_1 - \tilde{y}_2)$ , а уравнение для компоненты  $x$

$$x_2 t = (1 - \tilde{t})\tilde{x}_1 + \tilde{t}\tilde{x}_2$$

служит для определения параметра  $t = [(1 - \tilde{t})\tilde{x}_1 + \tilde{t}\tilde{x}_2] / x_2$ . Если оба параметра лежат в интервале

$$0 \leq t, \tilde{t} \leq 1, \quad (4.14)$$

то  $Q(tx_2, 0, 0)$  является точкой пересечения сторон 12 и  $\tilde{1}\tilde{2}$ , и ее берем в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то переходим к следующему пункту.

1.1.2. Смотрим пересекаются ли стороны 12 и  $\tilde{1}\tilde{3}$ . Уравнение стороны  $\tilde{1}\tilde{3}$  имеет вид

$$\mathbf{r} = (1 - \tilde{t})\tilde{\mathbf{r}}_1 + \tilde{t}\tilde{\mathbf{r}}_3. \quad (4.15)$$

Как и в п. 1.1.1 составляем векторное уравнение, приравнивая правые части уравнений (4.12) и (4.15), откуда находим параметры

$$\tilde{t} = \frac{\tilde{y}_1}{\tilde{y}_1 - \tilde{y}_3}, \quad t = \frac{(1 - \tilde{t})\tilde{x}_1 + \tilde{t}\tilde{x}_3}{x_2}.$$

Если выполнено условие (4.14), то  $Q(tx_2, 0, 0)$  является точкой пересечения сторон 12 и  $\tilde{1}\tilde{3}$ , и ее берем в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, переходим к следующему пункту.

1.1.3. Смотрим пересекаются ли стороны 12 и  $\tilde{2}\tilde{3}$ . Уравнение стороны  $\tilde{2}\tilde{3}$  имеет вид

$$\mathbf{r} = (1 - \tilde{t})\tilde{\mathbf{r}}_2 + \tilde{t}\tilde{\mathbf{r}}_3. \quad (4.16)$$

Приравнивая правые части уравнений (4.12) и (4.16), находим параметры

$$\tilde{t} = \frac{\tilde{y}_2}{\tilde{y}_2 - \tilde{y}_3}, \quad t = \frac{(1 - \tilde{t})\tilde{x}_2 + \tilde{t}\tilde{x}_3}{x_2}.$$

Если выполнено условие (4.14), то  $Q(tx_2, 0, 0)$  является точкой пересечения сторон 12 и  $\tilde{2}\tilde{3}$ , и ее берем в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если нет, то сторона 12 не пересекает стороны треугольника  $\Delta_o^{l_2}$ . Переходим к рассмотрению стороны 13 треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  (см. п. 2).

1.2. *Второй вариант.* В (4.11) коэффициенты  $A=0$ ,  $D \neq 0$ . Тогда плоскости (4.8) и (4.9) не пересекаются и, следовательно, треугольные грани тоже. Следует перейти к рассмотрению следующей стороны 13 (см. п. 2).

1.3. *Третий вариант.* Коэффициент  $A \neq 0$ . Тогда из (4.11) получаем  $x = -D/A$  и, используя проекцию на ось  $x$  уравнения (4.12) для стороны 12, т.е.  $x = tx_2$ , определяем параметр  $t = -D/(Ax_2)$ . Если  $0 \leq t \leq 1$ , то тогда необходимо проверить лежит точка пересечения  $Q(tx_2, 0, 0)$  внутри (включая границы) треугольника  $\Delta_o^{l_2}$  или нет. Используем алгоритм  $A$  проверки (см. ниже). Если  $Q \in \Delta_o^{l_2}$ , то используем ее в качестве следующей вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если  $Q \notin \Delta_o^{l_2}$ , то сторона 12 не пересекается со сторонами треугольника  $\Delta_o^{l_2}$ , и переходим к рассмотрению стороны 13 треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  (см. п. 2).

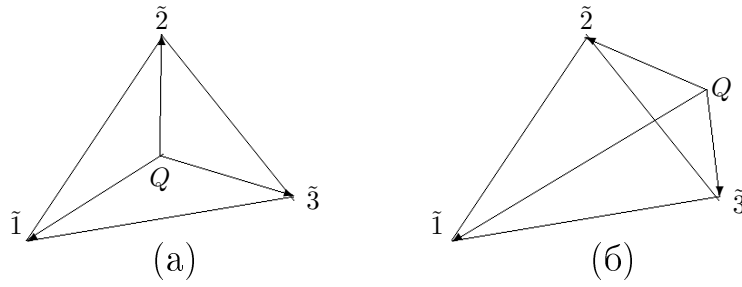


Рис. 4.4.

**Алгоритм А.** На рис. 4.4 представлены два случая расположения точки  $Q$ . Пусть  $\mathbf{r}_{Q\tilde{1}}$ ,  $\mathbf{r}_{Q\tilde{2}}$ ,  $\mathbf{r}_{Q\tilde{3}}$  обозначают векторы, проведенные из  $Q$  в точки  $\tilde{1}, \tilde{2}, \tilde{3}$  соответственно. Составляем два векторных произведения

$$\mathbf{a} = \mathbf{r}_{Q\tilde{1}} \times \mathbf{r}_{Q\tilde{2}}, \quad \mathbf{b} = \mathbf{r}_{Q\tilde{2}} \times \mathbf{r}_{Q\tilde{3}}.$$

Если  $Q$  лежит внутри или на границе треугольника (см. рис. 4.4а), то скалярное произведение  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \geq 0$ . Если же  $Q$  лежит снаружи треугольника (см. рис. 4.4б), то  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} < 0$ .

2. Далее рассмотрим возможность пересечения прямой (4.10) со стороной 13, уравнение которой есть  $x=ky$ , где  $k=x_3/y_3$ . Подставив его в (4.10), получим

$$(Ak + B)y + D = 0. \quad (4.17)$$

Опять рассматриваем три возможных варианта.

2.1. *Первый вариант.* Коэффициенты удовлетворяют условиям  $Ak + B = 0$ ,  $D = 0$ . Тогда линия пересечения плоскостей (4.10) совпадает со стороной 13 треугольника  $\Delta_n^{l_1}$ . Следовательно, ищем точку пересечения стороны 13 со сторонами  $\tilde{1}\tilde{2}$ ,  $\tilde{1}\tilde{3}$  или  $\tilde{2}\tilde{3}$  треугольника  $\Delta_o^{l_2}$ .

2.1.1. Сначала проверяем пересекаются ли стороны 13 и  $\tilde{1}\tilde{2}$ . Точка пересечения  $Q$  лежит на сторонах 13 и  $\tilde{1}\tilde{2}$ . Для ее нахождения запишем уравнения стороны 13 в параметрической форме

$$\mathbf{r} = t\mathbf{r}_3, \quad (4.18)$$

где  $0 \leq t \leq 1$ , и вспоминаем (4.13) для стороны  $\tilde{1}\tilde{2}$ . Приравняв правые части (4.18) и (4.13), получаем

$$t\mathbf{r}_3 = (1 - \tilde{t})\tilde{\mathbf{r}}_1 + \tilde{t}\tilde{\mathbf{r}}_2.$$

Записав проекции этого уравнения на оси  $x$  и  $y$ , получим систему двух уравнений относительно параметров  $t, \tilde{t}$

$$tx_3 = (1 - \tilde{t})\tilde{x}_1 + \tilde{t}\tilde{x}_2, \quad ty_3 = (1 - \tilde{t})\tilde{y}_1 + \tilde{t}\tilde{y}_2,$$

откуда находим

$$\tilde{t} = \frac{\tilde{x}_1 y_3 - \tilde{y}_1 x_3}{x_3(\tilde{y}_2 - \tilde{y}_1) - y_3(\tilde{x}_2 - \tilde{x}_1)}, \quad t = \frac{(1 - \tilde{t})\tilde{y}_1 + \tilde{t}\tilde{y}_2}{y_3}.$$

Если выполнено условие (4.14), то  $Q(tx_3, ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон 13 и  $\tilde{1}\tilde{2}$ , и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то переходим к следующему пункту.

2.1.2. Смотрим пересекаются ли стороны 13 и  $\tilde{1}\tilde{3}$ . Приравнивая правые части уравнений (4.18) и (4.15), имеем

$$t\mathbf{r}_3 = (1 - \tilde{t})\tilde{\mathbf{r}}_1 + \tilde{t}\tilde{\mathbf{r}}_3.$$

Также как и в п. 2.1.1 составляем систему двух уравнений относительно  $t$  и  $\tilde{t}$ , разрешив которую, находим

$$\tilde{t} = \frac{\tilde{x}_2 y_3 - \tilde{y}_1 x_3}{x_3(\tilde{y}_3 - \tilde{y}_1) - y_3(\tilde{x}_3 - \tilde{x}_1)}, \quad t = \frac{(1 - \tilde{t})\tilde{y}_1 + \tilde{t}\tilde{y}_3}{y_3}.$$

Если выполняется условие (4.14), то  $Q(tx_3, ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон 13 и  $\tilde{1}\tilde{3}$ , и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то переходим к следующему пункту.

2.1.3. Смотрим пересекаются ли стороны 13 и  $\tilde{2}\tilde{3}$ . Приравнивая правые части уравнений (4.18) и (4.16), имеем

$$t\mathbf{r}_3 = (1 - \tilde{t})\tilde{\mathbf{r}}_2 + \tilde{t}\tilde{\mathbf{r}}_3.$$

Откуда находим

$$\tilde{t} = \frac{\tilde{x}_2 y_3 - \tilde{y}_2 x_3}{x_3(\tilde{y}_3 - \tilde{y}_2) - y_3(\tilde{x}_3 - \tilde{x}_2)}, \quad t = \frac{(1 - \tilde{t})\tilde{y}_2 + \tilde{t}\tilde{y}_3}{y_3}.$$

Если выполняется условие (4.14), то  $Q(tx_3, ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон 13 и  $\tilde{2}\tilde{3}$ , и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если же нет, то сторона 13 не пересекает стороны треугольника  $\Delta_o^{l_2}$ . Переходим к рассмотрению стороны 23 треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  (см. п. 3).

2.2. *Второй вариант.* Коэффициенты (4.11) удовлетворяют условиям  $Ak+B=0$ ,  $D \neq 0$ , тогда плоскости (4.8) и (4.9) не пересекаются и, следовательно, треугольные грани тоже. Следует перейти к рассмотрению следующей стороны 23 (см. п. 3).

2.3. *Третий вариант.* Коэффициенты (4.11) удовлетворяют условию  $Ak+B \neq 0$ . Из (4.17) получаем  $y = -D/(Ak+B)$ . Подставив его в проекцию уравнения (4.18) на ось  $y$ , определяем

$$t = -D/[(Ak+B)y_3].$$

Если  $0 \leq t \leq 1$ , тогда необходимо проверить лежит точка  $Q(tx_3, ty_3, 0)$  внутри  $\Delta_o^{l_2}$  или нет. Для этого используем алгоритм А проверки. Если  $Q \in \Delta_o^{l_2}$ , то берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если же нет, то сторона 13 не пересекает стороны треугольника  $\Delta_o^{l_2}$ . Переходим к рассмотрению стороны 23 треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  (см. п. 3).

3. Рассмотрим возможность пересечения прямой (4.10) со стороной 23, уравнение которой задано в виде  $x = ky + p$ , где

$$k = \frac{x_3 - x_2}{y_3 - y_2}, \quad p = \frac{y_3 x_2 - y_2 x_3}{y_3 - y_2}.$$

Подставив его в (4.10), получим

$$(Ak + B)y + Ap + D = 0. \quad (4.19)$$

Снова рассматриваем три возможных варианта.

3.1. *Первый вариант.* Коэффициенты удовлетворяют условиям  $Ak+B=0$ ,  $Ap+D=0$ . Тогда линия пересечения плоскостей (4.10) совпадает со стороной 23 треугольника  $\Delta_n^{l_1}$ . Следовательно, необходимо искать точку пересечения стороны 23 со сторонами  $\tilde{1}\tilde{2}$ ,  $\tilde{1}\tilde{3}$  или  $\tilde{2}\tilde{3}$  треугольника  $\Delta_o^{l_2}$ .

3.1.1. Сначала проверяем пересекаются ли стороны 23 и  $\tilde{1}\tilde{2}$ . Точка пересечения  $Q$  лежит на сторонах 23 и  $\tilde{1}\tilde{2}$ . Для ее нахождения запишем уравнение стороны 23

$$\mathbf{r} = (1 - t)\mathbf{r}_2 + t\mathbf{r}_3, \quad (4.20)$$

и вспоминаем (4.13) для  $\tilde{1}\tilde{2}$ . Приравнивая правые части (4.20) и (4.13), получаем систему

$$(1 - t)\mathbf{r}_2 + t\mathbf{r}_3 = (1 - \tilde{t})\tilde{\mathbf{r}}_1 + \tilde{t}\tilde{\mathbf{r}}_2.$$

Используя проекции векторного уравнения на оси  $x$  и  $y$ , находим

$$\tilde{t} = \frac{(\tilde{x}_1 - x_2)(y_3 - y_2) - (\tilde{y}_1 - y_2)(x_3 - x_2)}{(\tilde{y}_2 - \tilde{y}_1)(x_3 - x_2) - (\tilde{x}_2 - \tilde{x}_1)(y_3 - y_2)}, \quad t = \frac{(1 - \tilde{t})\tilde{y}_1 + \tilde{t}\tilde{y}_2 - y_2}{y_3 - y_2}.$$

Если выполняется условие (4.14), то  $Q((1-t)x_2+tx_3, (1-t)y_2+ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон 23 и  $\tilde{1}\tilde{2}$ , и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то переходим к следующему пункту.

3.1.2. Смотрим пересекаются ли стороны 23 и  $\tilde{1}\tilde{3}$ . Приравнивая правые части уравнений (4.20) и (4.15), получаем

$$(1 - t)\mathbf{r}_2 + t\mathbf{r}_3 = (1 - \tilde{t})\tilde{\mathbf{r}}_1 + \tilde{t}\tilde{\mathbf{r}}_3.$$

Разрешив систему как и ранее, находим параметры

$$\tilde{t} = \frac{(\tilde{x}_1 - x_2)(y_3 - y_2) - (\tilde{y}_1 - y_2)(x_3 - x_2)}{(\tilde{y}_3 - \tilde{y}_1)(x_3 - x_2) - (\tilde{x}_3 - \tilde{x}_1)(y_3 - y_2)}, \quad t = \frac{(1 - \tilde{t})\tilde{y}_1 + \tilde{t}\tilde{y}_3 - y_2}{y_3 - y_2}.$$

Если выполняется условие (4.14), то  $Q((1-t)x_2+tx_3, (1-t)y_2+ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон 23 и  $\tilde{1}\tilde{3}$ , и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то переходим к следующему пункту.

3.1.3. Смотрим пересекаются ли стороны 23 и  $\tilde{2}\tilde{3}$ . Приравнивая правые части уравнений (4.20) и (4.16), получаем

$$(1 - t)\mathbf{r}_2 + t\mathbf{r}_3 = (1 - \tilde{t})\tilde{\mathbf{r}}_2 + \tilde{t}\tilde{\mathbf{r}}_3.$$

Разрешив систему как и ранее, находим параметры

$$\tilde{t} = \frac{(\tilde{x}_2 - x_2)(y_3 - y_2) - (\tilde{y}_2 - y_2)(x_3 - x_2)}{(\tilde{y}_3 - \tilde{y}_2)(x_3 - x_2) - (\tilde{x}_3 - \tilde{x}_2)(y_3 - y_2)}, \quad t = \frac{(1 - \tilde{t})\tilde{y}_2 + \tilde{t}\tilde{y}_3 - y_2}{y_3 - y_2}.$$

Если выполняется условие (4.14), то  $Q((1-t)x_2+tx_3, (1-t)y_2+ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон 23 и  $\tilde{1}\tilde{3}$ , и ее берем в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то сторона 23 не пересекает стороны треугольника  $\Delta_o^{l_2}$ . В этом случае проверяем пересекает ли прямая (4.10) стороны  $\Delta_o^{l_2}$  (см. п. 4).

3.2. *Второй вариант.* Коэффициенты удовлетворяют условиям  $Ak+B=0$ ,  $Ap+D \neq 0$ . Тогда плоскости (4.8) и (4.9) не пересекаются и, следовательно, треугольные грани тоже. Переходим к п. 4.

3.3. *Третий вариант.* Коэффициенты удовлетворяют условиям  $Ak+B \neq 0$ . Тогда из (4.19) получаем  $y = -(Ap+D)/(Ak+B)$ . Подставляя  $y$  в проекцию уравнения (4.20) на ось  $y$ , находим

$$t = - \left( \frac{Ap + D}{Ak + B} + y_2 \right) / (y_3 - y_2).$$

Если  $0 \leq t \leq 1$ , тогда проверяем лежит ли  $Q((1-t)x_2+tx_3, (1-t)y_2+ty_3, 0)$  внутри треугольника  $\Delta_o^{l_2}$  или нет. Для этого используем алгоритм А. Если  $Q \in \Delta_o^{l_2}$ , то берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если  $Q \notin \Delta_o^{l_2}$ , то не существует точки пересечения стороны 23 со сторонами треугольника  $\Delta_o^{l_2}$ , и переходим к п. 4.

Далее следует проверить пересекает ли прямая (4.10) стороны треугольной грани старой ячейки, т.е. треугольника  $\Delta_o^{l_2}$ . В соответствии с количеством сторон треугольника здесь также возможны три случая.

4. Рассмотрим возможность пересечения прямой (4.10) стороны  $\tilde{1}\tilde{2}$ . Прямая (4.10) и сторона  $\tilde{1}\tilde{2}$  могут быть либо параллельны друг другу либо нет. Соответственно рассматриваем два случая.

4.1. Они параллельны. Здесь возможны два варианта расположения прямых линий в пространстве.

4.1.1. Если координаты  $\tilde{z}_1 = \tilde{z}_2 \neq 0$ , тогда прямые не имеют общих точек, и переходим к рассмотрению стороны  $\tilde{1}\tilde{3}$  (см. п. 5).

4.1.2. Координаты  $\tilde{z}_1=\tilde{z}_2=0$ , тогда прямая (4.10) и сторона  $\tilde{1}\tilde{2}$  совпадают и необходимо проверить пересекает ли сторона  $\tilde{1}\tilde{2}$  стороны новой ячейки  $\Delta_n^{l_1}$ .

4.1.2.1. Ищем пересечение  $\tilde{1}\tilde{2}$  со стороной 12 (см. п. 1.1.1). Если найденные параметры  $t, \tilde{t}$  удовлетворяют условию (4.14), то  $Q(tx_2, 0, 0)$  является точкой пересечения сторон, и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то переходим к следующему пункту.

4.1.2.2. Ищем пересечение  $\tilde{1}\tilde{2}$  со стороной 13 (см. п. 2.1.1). Если найденные параметры  $t, \tilde{t}$  удовлетворяют условию (4.14), то  $Q(tx_3, ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон, и ее берем в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то переходим к следующему пункту.

4.1.2.3. Ищем пересечение  $\tilde{1}\tilde{2}$  со стороной 23 (см. п. 3.1.1). Если условие (4.14) выполняется, то  $Q((1-t)x_2+tx_3, (1-t)y_2+ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон, и ее берем в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, тогда переходим к рассмотрению стороны  $\tilde{1}\tilde{3}$  треугольника  $\Delta_o^{l_2}$  (см. п. 5).

4.2. Прямая линия пересечения плоскостей (4.10) и сторона  $\tilde{1}\tilde{2}$  не параллельны. Приравнивая проекцию уравнения (4.13) на ось  $z$  к нулю (поскольку треугольник  $\Delta_n^{l_1}$  лежит в плоскости  $z=0$ ), получаем

$$(1 - \tilde{t})\tilde{z}_1 + \tilde{t}\tilde{z}_2 = 0.$$

Откуда находим  $\tilde{t}=\tilde{z}_2/(\tilde{z}_1-\tilde{z}_3)$ . Если  $0\leq\tilde{t}\leq 1$ , то проверяем лежит ли точка  $Q((1-\tilde{t})\tilde{x}_1+\tilde{t}\tilde{x}_2, (1-\tilde{t})\tilde{y}_1+\tilde{t}\tilde{y}_2, 0)$  внутри треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  с помощью алгоритма А. Если да, то берем  $Q$  в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если нет, тогда переходим к рассмотрению стороны  $\tilde{1}\tilde{3}$  треугольника  $\Delta_o^{l_2}$  (см. п. 5).

5. Рассмотрим возможность пересечения прямой (4.10) со стороной  $\tilde{1}\tilde{3}$ , уравнение которой суть (4.15). Прямая (4.10) и сторона  $\tilde{1}\tilde{3}$  могут быть либо параллельны друг другу либо нет. В соответствии с этим рас-



смаатриваем два случая.

5.1. Они параллельны. Здесь возможны два варианта расположения прямых в пространстве.

5.1.1. Если координаты  $\tilde{z}_1 = \tilde{z}_3 \neq 0$ , тогда прямые не имеют общих точек, и переходим к рассмотрению стороны  $\tilde{1}\tilde{3}$  (см. п. 6).

5.1.2. Координаты  $\tilde{z}_1 = \tilde{z}_3 = 0$ , тогда прямая (4.10) и сторона  $\tilde{1}\tilde{3}$  совпадают, и необходимо проверить пересекает ли сторона  $\tilde{1}\tilde{3}$  стороны новой ячейки  $\Delta_n^{l_1}$ .

5.1.2.1. Ищем пересечение  $\tilde{1}\tilde{3}$  со стороной 12 (см. п. 1.1.2). Если параметры  $t, \tilde{t}$  удовлетворяют условию (4.14), то  $Q(tx_2, 0, 0)$  является точкой пересечения сторон, и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то переходим к следующему пункту.

5.1.2.2. Ищем пересечение  $\tilde{1}\tilde{3}$  со стороной 13 (см. п. 2.1.2). Если параметры  $t, \tilde{t}$  удовлетворяют условию (4.14), то  $Q(tx_3, ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон, и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то переходим к следующему пункту.

5.1.2.3. Ищем пересечение  $\tilde{1}\tilde{3}$  со стороной 23 (см. п. 3.1.2). Если  $t, \tilde{t}$  удовлетворяют условию (4.14), то  $Q((1-t)x_2 + tx_3, (1-t)y_2 + ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон, и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, тогда переходим к рассмотрению стороны  $\tilde{2}\tilde{3}$  треугольника  $\Delta_o^{l_2}$  (см. п. 6).

5.2. Прямая (4.10) и сторона  $\tilde{1}\tilde{3}$  не параллельны. Приравнивая проекцию уравнения стороны (4.15) на  $z$  к нулю, получаем

$$(1 - \tilde{t})\tilde{z}_1 + \tilde{t}\tilde{z}_3 = 0.$$

Откуда находим  $\tilde{t} = \tilde{z}_2 / (\tilde{z}_1 - \tilde{z}_3)$ . Если  $0 \leq \tilde{t} \leq 1$ , то проверяем лежит ли точка  $Q((1-\tilde{t})\tilde{x}_1 + \tilde{t}\tilde{x}_3, (1-\tilde{t})\tilde{y}_1 + \tilde{t}\tilde{y}_3, 0)$  внутри треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  с помощью алгоритма А. Если да, то берем  $Q$  в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если нет, тогда переходим к рассмотрению стороны  $\tilde{2}\tilde{3}$  треугольника  $\Delta_o^{l_2}$  (см. п. 6).

6. Наконец рассмотрим возможность пересечения прямой (4.10) стороны  $\tilde{2}\tilde{3}$ , уравнение которой суть (4.16). Прямая (4.10) и сторона  $\tilde{2}\tilde{3}$  могут быть либо параллельны друг другу либо нет. В соответствии с этим рассматриваем два случая.

6.1. Они параллельны. Здесь возможны два варианта расположения линий в пространстве.

6.1.1. Если координаты  $\tilde{z}_2=\tilde{z}_3\neq 0$ , тогда линии не имеют общих точек, и переходим к рассмотрению следующей треугольной грани  $\Delta_o^{l_2+1}$ . Если  $l_2=12$ , то рассматриваем следующую треугольную грань  $\Delta_n^{l_1+1}$ .

6.1.2. Координаты  $\tilde{z}_2=\tilde{z}_3=0$ . Тогда прямая (4.10) и сторона  $\tilde{2}\tilde{3}$  совпадают, и необходимо проверить пересекает ли сторона  $\tilde{2}\tilde{3}$  стороны новой ячейки  $\Delta_n^{l_1}$ .

6.1.2.1. Ищем пересечение  $\tilde{2}\tilde{3}$  со стороной 12 (см. п. 1.1.3). Если найденные параметры  $t, \tilde{t}$  удовлетворяют условию (4.14), то  $Q(tx_2, 0, 0)$  является точкой пересечения сторон, и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то переходим к следующему пункту.

6.1.2.2. Ищем пересечение  $\tilde{2}\tilde{3}$  со стороной 13 (см. п. 2.1.3). Если параметры  $t, \tilde{t}$  удовлетворяют условию (4.14), то  $Q(tx_3, ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон, и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, то переходим к следующему пункту.

6.1.2.3. Ищем пересечение  $\tilde{2}\tilde{3}$  со стороной 23 (см. п. 3.1.3). Если  $t, \tilde{t}$  удовлетворяют условию (4.14), то  $Q((1-t)x_2+tx_3, (1-t)y_2+ty_3, 0)$  является точкой пересечения сторон, и берем ее в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если условие (4.14) не выполняется, тогда переходим к рассмотрению следующей треугольной грани  $\Delta_o^{l_2+1}$ . Если  $l_2=12$ , то рассматриваем следующую треугольную грань  $\Delta_n^{l_1+1}$ .

6.2. Прямая (4.10) и сторона  $\tilde{2}\tilde{3}$  не параллельны. Тогда приравниваем

проекцию уравнения (4.16) на  $z$  к нулю

$$(1 - \tilde{t})\tilde{z}_2 + \tilde{t}\tilde{z}_3 = 0.$$

Откуда определяем параметр  $\tilde{t} = \tilde{z}_2 / (\tilde{z}_1 - \tilde{z}_3)$ . Если  $0 \leq \tilde{t} \leq 1$ , то проверяем лежит ли точка  $Q((1 - \tilde{t})\tilde{x}_2 + \tilde{t}\tilde{x}_3, (1 - \tilde{t})\tilde{y}_2 + \tilde{t}\tilde{y}_3, 0)$  внутри треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  с помощью алгоритма А. Если да, то берем  $Q$  в качестве очередной вершины линии  $\mathcal{L}_{on}$ . Если нет, тогда переходим к рассмотрению следующей треугольной грани  $\Delta_o^{l_2+1}$ . Если  $l_2 = 12$ , то рассматриваем следующую треугольную грань  $\Delta_n^{l_1+1}$ .

После того как найдена точка  $Q$ , необходимо вернуться в старую систему координат посредством обратного поворота осей и сдвига начала координат. Для этого используется матрица  $\mathcal{A}^\top$ , транспонированная к матрице поворота  $\mathcal{A}$  из (4.7). Координаты точки  $Q$  в старой системе координат определяются по формуле

$$\mathbf{r}_Q = \mathcal{A}^\top \mathbf{r}'_Q + \mathbf{r}_1.$$

**4.3.2 Шаг 2. Определение звеньев ломаной  $\mathcal{L}_{on}$ .** Для определения звеньев ломанной  $\mathcal{L}_{on}$  необходимо задать правило перехода с текущей треугольной грани ячейки на соседнюю к ней, в зависимости от того какую сторону текущего треугольника пересекает  $\mathcal{L}_{on}$ . Для этого используем матрицу перехода  $\mathcal{G}_{lm}$ ,  $l = 1, \dots, 12$ ,  $m = 1, 2, 3$ . Здесь  $l$  – номер грани ячейки,  $m$  – номер стороны треугольной грани. Элементы матрицы  $\mathcal{G}_{lm}$  указывают на какую грань выходит линия  $\mathcal{L}_{on}$  с  $l$ -й грани пересекая  $m$ -ю сторону треугольника.

После нахождения очередной точки  $Q^i$  на шаге 1, на шаге 2 происходит переход на соседнюю треугольную грань, новой или старой 12-гранной ячейки, в зависимости от того сторону какой грани пересекает линия  $\mathcal{L}_{on}$ . Далее повторяем шаг 1 и т.д. до тех пор пока очередная точка  $Q^i$  не совпадет с первой вершиной  $Q^1$  ломаной  $\mathcal{L}_{on}$ . Все точки пересечения вносятся в список  $\mathcal{L}_{on}$ . Затем проверяем еще не рассматривавшиеся грани ячеек  $\Omega_n$  и  $\Omega_o$  с целью нахождения еще одной линии пересечения

граней ячеек, поскольку две треугольные грани не могут пересекаться дважды. Всего необходимо перебрать  $12 \times 12 = 144$  пары граней новой и старой ячеек.

В дальнейшем понадобится определять лежит ли некоторая точка  $O$  внутри 12-гранной ячейки или нет. Опишем процедуру проверки.

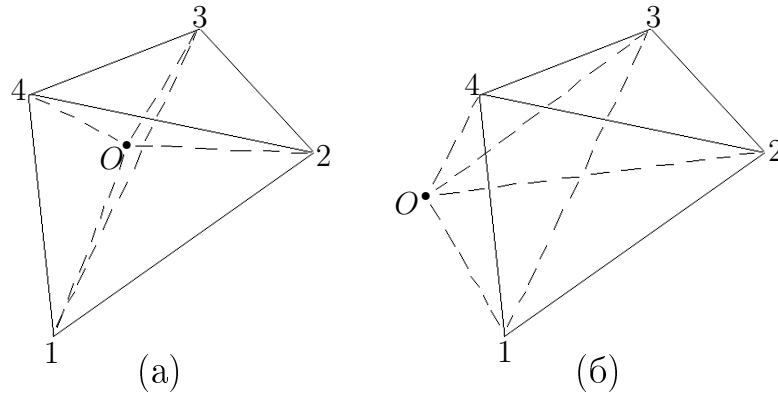


Рис. 4.5.

**Алгоритм В.** Разделим ячейку на пять тетраэдров как показано на рис. 4.2. Рассмотрим тетраэдр  $T_{1234}$  (см. рис. 4.5). Соединив точку  $O$  с каждой из вершин  $T_{1234}$ , получим четыре новых тетраэдра  $T_{O234}$ ,  $T_{O134}$ ,  $T_{O124}$  и  $T_{O123}$ . Если точка  $O$  лежит внутри  $T_{1234}$  (см. рис. 4.5а), его объем равен сумме объемов четырех тетраэдров

$$V_{T_{1234}} = V_{T_{O234}} + V_{T_{O134}} + V_{T_{O124}} + V_{T_{O123}},$$

где, например,  $V_{T_{1234}} = \frac{1}{6}(\mathbf{r}_{12}\mathbf{r}_{13}\mathbf{r}_{14})$ . В противном случае (см. рис. 4.5б)

$$V_{T_{1234}} < V_{T_{O234}} + V_{T_{O134}} + V_{T_{O124}} + V_{T_{O123}}.$$

Проверив таким способом все пять тетраэдров, определим лежит ли точка  $O$  внутри одного из них. Если да, то  $O$  находится внутри 12-гранной ячейки. Если же нет, тогда  $O$  находится вне ячейки.

#### 4.4 Этап II. Построение фигуры пересечения ячеек

Построение фигуры пересечения 12-гранных ячеек  $\Omega_{on}$  осуществляется одновременно с построением линий пересечения граней  $\mathcal{L}_{on}^i$ . На треуголь-

ных гранях 12-гранников строятся многоугольники  $P^i$ , вырезаемые линиями  $\mathcal{L}_{on}^i$ . Предполагается, что на одной грани ячейки может быть 0,1 или 2 многоугольника. Это допущение подтверждено экспериментально, но строго не доказано. Внутри многоугольника заключена плоская многоугольная поверхность, для удобства также обозначаемая  $P^i$ . Объединение всех многоугольных поверхностей  $\bigcup_{i=1}^m P^i$  формирует поверхность фигуры пересечения ячеек  $\Omega_{on}$ , являющейся симплексом. Построение  $P^i$  состоит в следующем. Когда линия  $\mathcal{L}_{on}^i$  пересекает, например, грань новой ячейки (это может быть один отрезок от стороны до стороны треугольника, см. рис. 4.6а, а может быть и составленная из нескольких звеньев ломанная, см. рис. 4.6б) и делит ее на две части, для построения  $P^i$  оставляется та часть грани, которая лежит внутри старой ячейки (заштрихованная область на рис. 4.6а,б). Это не значит, что оставшаяся часть грани отбрасывается из дальнейшего рассмотрения. На ней может быть вырезан другой многоугольник этой же линией  $\mathcal{L}_{on}^i$  или другой. Равно как и заштрихованная область может частично отрезаться при дальнейшем формировании многоугольника  $P^i$  этой же линией или другой (см., например, рис. 4.6в). Аналогично при пересечении линией  $\mathcal{L}_{on}^i$  грани старой ячейки оставляется та ее часть, которая лежит внутри новой ячейки.

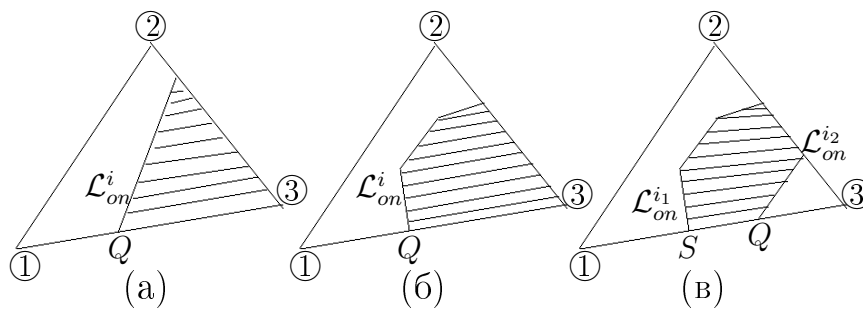


Рис. 4.6.

Рассмотрим построение плоских граней многогранника  $\Omega_{on}$ , вырезаемых на треугольных гранях ячейки  $\Omega_n$ . Для этого необходимо ввести следующие обозначения. Переменные  $X^{ij}, Y^{ij}, Z^{ij}$  задают координаты  $j$ -

й вершины  $i$ -го многоугольника  $P^i$ . Поскольку на одной грани ячейки может быть вырезан 0,1 или 2 многоугольника, его номер  $i$  задается по правилу

$$i = l_1 + 12m, \quad (4.21)$$

где  $l_1$  – номер грани  $\Delta_n^{l_1}$ ,  $m=0, \dots, N_{pol}^{l_1}-1$ ,  $N_{pol}^{l_1}$  – число существующих многоугольников на грани  $\Delta_n^{l_1}$ . Если  $N_{pol}^{l_1}=0$ , то  $m=0$ . Обозначим число вершин у  $P^i$  переменной  $N_{tot}^i$ . Переменная  $N_{nod}^{ik}$  показывает сколько вершин многоугольника  $P^i$  расположено на  $k$ -й стороне рассматриваемой грани  $\Delta_n^{l_1}$ ,  $k=1, 2, 3$ . Переменная  $N_v^{ikl}=j$  указывает на номер вершины  $P^i$ , расположенной на  $k$ -й стороне треугольника  $\Delta_n^{l_1}$ . Здесь индексы  $l$  и  $l_1$  имеют разный смысл.  $l$  есть порядковый номер вершины многоугольника на  $k$ -й стороне треугольника  $\Delta_n^{l_1}$ . Вершин на одной стороне треугольника может быть несколько и поэтому  $l=1, \dots, N_{nod}^{ik}$ .  $X_Q, Y_Q, Z_Q$  – координаты точки  $Q$ , текущей вершины ломаной  $\mathcal{L}_{on}^i$ . Она может лежать как на стороне, так и внутри треугольника  $\Delta_n^{l_1}$ .  $R^1, R^2$  – концы рассматриваемой стороны треугольника. Причем в качестве  $R^1$  берется такая точка, чтобы окрестность точки  $Q$  на отрезке  $[QR^1]$  лежала внутри старой ячейки  $\Omega_o$ . На рис. 4.6а,б для стороны 13 точкой  $R^1$  является вершина 3 треугольника, а на рис. 4.6в – вершина 1. На рис. 4.6в видно, что сама точка  $R^1$ , т.е. вершина 1, может не лежать внутри  $\Omega_o$ . Соответственно  $R^2$  обозначает противоположный конец стороны треугольника, т.е. вершину 1 для стороны 13 на рис. 4.6а,б, а на рис. 4.6в вершину 3.

Порядок построения вершин ломаной  $\mathcal{L}_{on}^i$  не совпадает с последовательной нумерацией вершин многоугольников. Поэтому при рассмотрении очередной точки  $Q$  возможны следующие три действия:

- 1) Продолжение формирования одного из существующих на грани  $\Delta_n^{l_1}$  многоугольников (сюда же относится и формирование нового многоугольника), и занесение точки  $Q$  в список его вершин.
- 2) Разбиение одного многоугольника на два, и занесение точки  $Q$  в список вершин одного из них.
- 3) Слияние двух многоугольников в один, и занесение точки  $Q$  в спи-

сок вершин многоугольника.

Опишем основные шаги построения многоугольников  $P^i$  на треугольной грани  $\Delta_n^{l_1}$ .

1. Если при переходе линии  $\mathcal{L}_{on}^i$  с одной грани  $\Omega_o$  на другую образуется новая вершина многоугольника внутри текущей грани  $\Omega_n$ , что соответствует появлению излома у  $\mathcal{L}_{on}^i$  внутри треугольника (см. рис. 4.6б), тогда заносим в список точку  $Q$  в качестве новой вершины многоугольника  $P^i$  следующим образом:

1.1. Номер  $j$  увеличивается на 1 (здесь и в дальнейшем удобно использовать правило записи, применяемое в языках программирования)

$$j=j+1, \quad N_{tot}^i = N_{tot}^i + 1, \quad X^{ij}=X_Q, \quad Y^{ij}=Y_Q, \quad Z^{ij}=Z_Q.$$

Если вдобавок  $Q$  является первой точкой линии  $\mathcal{L}_{on}^i$ , тогда начинаем формировать новый многоугольник на этой грани, т.е. сначала присваиваем

$$N_{pol}^{l_1} = N_{pol}^{l_1} + 1, \quad i = l_1 + 12(N_{pol}^{l_1} - 1), \quad (4.22)$$

и после этого заносим точку  $Q$  в список вершин  $P^i$ .

1.2. Формирование многоугольника  $P^i$  может начаться внутри грани  $\Delta_n^{l_1}$ . Например, на рис. 4.7а сначала строятся вершины 1, 2, 3 многоугольника  $P^{i_1}$ , далее линия  $\mathcal{L}_{on}^i$  выходит из грани, а затем заходит обратно, формируя вершины 1', 2' нового многоугольника  $P^{i_2}$  (условия, будет ли при повторном вхождении  $\mathcal{L}_{on}^i$  на грань формироваться  $P^{i_2}$  или же продолжится формирование  $P^{i_1}$ , рассматриваются в п. 2). Следующая вершина 3' (отрезок 2'3' показан пунктирной линией) совпадет с вершиной 1 многоугольника  $P^{i_1}$ , и необходимо объединить многоугольники  $P^{i_1}$ ,  $P^{i_2}$  в один  $P^{i_1}$ , перенумеровав вершины как показано на рис. 4.7б. На рис. 4.7б внутренность многоугольника 12345 специально не заштрихована, т.к. возможен вариант, когда его внешность лежит внутри старой ячейки, и тогда в список вершин  $P^{i_1}$  следует добавить все три вершины треугольной грани  $\Delta_n^{l_1}$ .

2. Линия  $\mathcal{L}_{on}^i$  заходит на рассматриваемую треугольную грань  $\Delta_n^{l_1}$

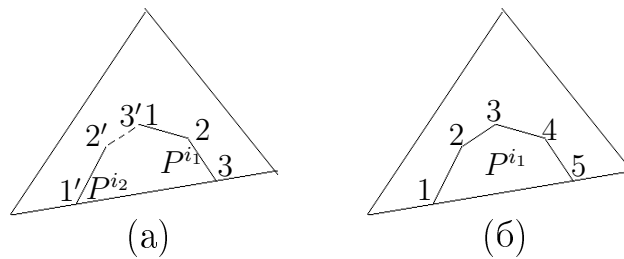


Рис. 4.7.

через  $k$ -ю сторону.

2.1. Новый многоугольник формируется в следующих случаях:

2.1.1. На  $k$ -й стороне треугольника  $\triangle_n^{l_1}$  внутри отрезка  $[QR^1]$  нет вершин  $P^i$  (см. рис. 4.6а,б), т.е. когда  $N_{nod}^{ik}=0$ . Отметим, что здесь  $Q$  – текущая точка, еще не внесенная в список вершин  $P^i$ .

2.1.2. На  $k$ -й стороне треугольника  $\triangle_n^{l_1}$  уже есть вершины многоугольника  $P^i$ , но лежащие на отрезке  $[QR^2]$  (на рис. 4.8а это точка  $S$ , пересечение линии  $\mathcal{L}_{on}^{i_2}$  и стороны 13). Зная номер  $j$  для точки  $S$  (напомним, что  $j=N_v^{ikl}$ ), полагаем  $X_S=X^{ij}$  и находим параметр

$$t = \frac{X_S - X_Q}{X_{R^1} - X_Q},$$

который должен удовлетворять условию  $t \leq 0$ . Если  $X_{R^1} = X_Q$ , то параметр  $t$  вычисляется по  $y$  или  $z$ -координате).

2.1.3. Возможны и более сложные варианты, представленные на рис. 4.8б. Если формирование многоугольника  $P^{i_2}$  с вершинами  $1'2'3'4'5'$  начинается с вершины  $1'$ , когда уже построены вершины  $1,6$  многоугольника  $P^{i_1}$  с вершинами  $123456$ , тогда приведенный в п. 2.1.2 алгоритм правильно укажет, что точка  $Q$  (т.е.  $1'$ ) относится к  $P^{i_2}$ . Но если сначала строится вершина  $5'$ , то  $Q$  (т.е.  $5'$ ) будет ошибочно занесена в список вершин многоугольника  $P^{i_1}$ . Следовательно, нужна дополнительная проверка. Необходимо из точек  $1,6$  выбрать ближайшую к  $5'$  (это точка  $1$ ), на отрезке  $[5'1]$  взять некоторую точку  $Q'$  в окрестности точки  $1$  и проверить лежит ли она внутри ячейки  $\Omega_o$ , используя алгоритм В. Из рис. 4.8б видно, что окрестность точки  $1$  не лежит внутри  $\Omega_o$ , и точка  $5'$  заносится в список вершин  $P^{i_2}$ .



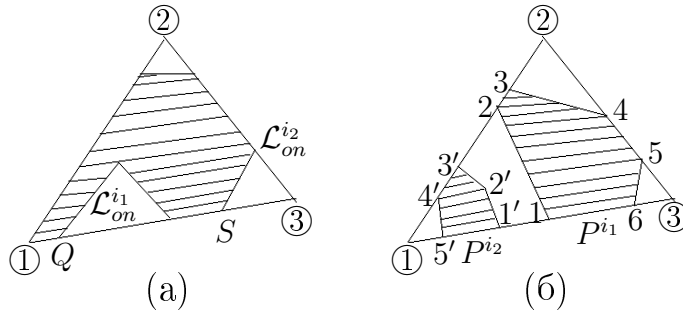


Рис. 4.8.

В п. 2.1.1–2.1.3 при формировании нового многоугольника  $P^i$  его номер находится по правилу (4.22).

Кроме текущей точки  $Q$  необходимо дополнительно проверить являются ли вершины треугольной грани  $\Delta_n^{l_1}$  вершинами многоугольника. Здесь возможны два варианта.

I. Если вершина треугольника  $R^1$  не лежит внутри старой ячейки (на рис. 4.8б это вершина 1), то в список вершин  $P^i$  заносится только точка  $Q$

$$N_{tot}^i=1, N_{nod}^{ik}=1, l=N_{nod}^{ik}, N_v^{ikl}=1, j=N_v^{ikl}, X^{ij}=X_Q, Y^{ij}=Y_Q, Z^{ij}=Z_Q.$$

II. Если вершина треугольника  $R^1$  лежит внутри старой ячейки (вершина 1 треугольника на рис. 4.8а), то в список вершин многоугольника заносятся точки  $R^1$  и  $Q$

$$l=1, N_v^{ikl}=1, j=N_v^{ikl}, X^{ij}=X_{R^1}, Y^{ij}=Y_{R^1}, Z^{ij}=Z_{R^1};$$

$$N_{tot}^i=2, N_{nod}^{ik}=2, l=N_{nod}^{ik}, N_v^{ikl}=2, j=N_v^{ikl}, X^{ij}=X_Q, Y^{ij}=Y_Q, Z^{ij}=Z_Q.$$

Здесь необходимо занести точку  $R^1$  в список вершин  $P^i$  как расположенную одновременно и на соседней стороне  $k_1$  треугольной грани (на рис. 4.8а для вершины 1 это сторона треугольника 12, имеющая номер  $k_1=1$ ), т.е. присвоить

$$N_{nod}^{ik_1} = 1, N_v^{ik_1 1} = 1.$$

2.2. Формирование текущего многоугольника  $P^i$  продолжается в следующих случаях:

2.2.1. Внутри отрезка  $[QR^1]$  уже находится вершина многоугольника  $P^i$  (на рис. 4.9а это точка 8). В этом случае  $Q$  вносится в список вершин  $P^i$  под номером 9. Однако, в случае, представленном на рис. 4.9б (здесь непронумерованные вершины  $P^i$  считаются еще не построенными), нельзя вносить точку  $Q$  в список под номером 7, т.к. нарушится последовательность нумерации вершин  $P^i$ . Сначала необходимо поменять нумерацию уже найденных вершин  $P^i$ , как показано на рис. 4.9в, а затем заносить  $Q$  в список под номером 7. Отличие случаев, изображенных на рис. 4.9а,б, состоит в следующем. На обоих рисунках  $j$ -я вершина, лежащая в направлении вершины  $R^1$  от  $Q$  (на рис. 4.9а это точка 8, а на рис. 4.9б это точка 6), является последней по счету, т.е.  $j=N_{tot}^i$ . Но на рис. 4.9а две уже найденные точки на текущей стороне треугольника под номерами 8 и 2 (2 – ближайшая к  $Q$  со стороны  $R^2$ ) не являются соседними в списке вершин  $P^i$ , а на рис. 4.9б точки 6 и 5 соседние. Поэтому во втором случае необходимо сначала поменять нумерацию вершин на противоположную для всех точек кроме последней шестой. Соответственно меняются значения переменной  $N_v^{ikl}$  для вершин  $P^i$ .

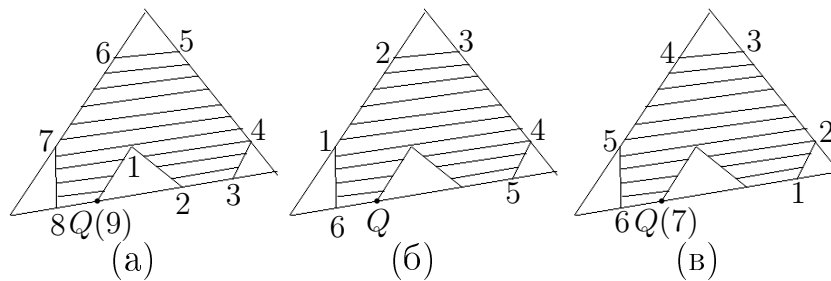


Рис. 4.9.

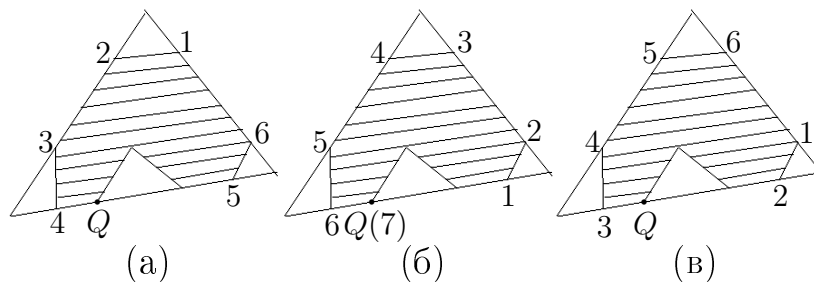


Рис. 4.10.

2.2.2. Может случиться так, что  $j$ -я вершина  $P^i$ , ближайшая к  $Q$  со стороны вершины  $R^1$ , не является последней в списке, т.е.  $j < N_{tot}^i$ . На рис. 4.10а представлен пример, когда сначала нужно сдвинуть нумерацию вершин в списке на два влево (чтобы  $j$ -я вершина  $P^i$ ,  $j=4$ , стала последней по счету), а затем внести в него  $Q$  (см. рис. 4.10б). В случае, представленном на рис. 4.10в, сначала меняется нумерация вершин  $P^i$  на противоположную, сдвигается влево на два их нумерация, а потом  $Q$  вносится в список. В результате получим многоугольник, изображенный на рис. 4.10б. Нетрудно увидеть отличие случаев, представленных на рис. 4.10а,в. В первом (см. рис. 4.10а) ближайшая к  $Q$  точка в направлении вершины  $R^1$  имеет номер  $j=4$ , а ближайшая к  $Q$  в направлении вершины  $R^2$  номер 5. Следовательно, направление обхода вершин многоугольника совпадает с направлением движения от точки 4 к  $Q$ . Во втором случае (см. рис. 4.10в) направление обхода вершин  $P^i$  противоположно движению от точки  $j=3$  (лежащей от  $Q$  в направлении вершины  $R^1$ ) к  $Q$ .

3. Линия  $\mathcal{L}_{on}^i$  выходит из грани  $\Delta_n^{l_1}$  через  $k$ -ю сторону. Здесь рассматриваются два случая, в зависимости от того сколько многоугольников (один или два) расположено на этой грани.

3.1. На грани  $\Delta_n^{l_1}$  существует только один многоугольник  $P^i$ .

3.1.1. Если еще не существует точек пересечения  $\mathcal{L}_{on}^i$  с рассматриваемой стороной треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  (см. рис. 4.6а,б), то продолжаем формирование текущего многоугольника  $P^i$  и заносим точку  $Q$  в список его вершин

$$j=j+1, X^{ij}=X_Q, Y^{ij}=Y_Q, Z^{ij}=Z_Q, N_{tot}^i=N_{tot}^i+1, N_{nod}^{ik}=1, N_v^{ik1}=j.$$

Если вершина треугольника  $R^1$  лежит внутри старой ячейки  $\Omega_o$  (на рис. 4.6а,б это вершина 3 треугольника), то дополнительно заносим  $R^1$  в список вершин  $P^i$

$$j=j+1, X^{ij}=X_{R^1}, Y^{ij}=Y_{R^1}, Z^{ij}=Z_{R^1}, N_{tot}^i=N_{tot}^i+1, N_{nod}^{ik}=2, N_v^{ik2}=j.$$

Здесь также необходимо занести  $R^1$  в список вершин  $P^i$ , как располо-

женную одновременно и на соседней стороне  $k_1$  текущей треугольной грани  $\Delta_n^{l_1}$ , т.е. присвоить

$$N_{nod}^{ik_1} = N_{nod}^{ik_1} + 1, \quad l = N_{nod}^{ik_1}, \quad N_v^{ik_1 l} = j.$$

3.1.2. Если уже существуют точки пересечения  $\mathcal{L}_{on}^i$  с текущей стороной треугольника  $\Delta_n^{l_1}$ , тогда действуем в зависимости от того сколько уже есть точек.

3.1.2.1. Если это одна точка  $S$  (см. рис. 4.6в), т.е.  $N_{nod}^{ik}=1$ , то заносим  $Q$  в список вершин  $P^i$ .

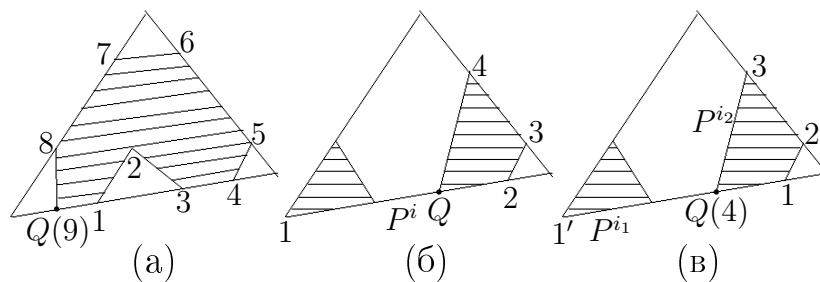


Рис. 4.11.

3.1.2.2. Если существует несколько точек, т.е.  $N_{nod}^{ik} > 1$ , необходимо проверить следует ли продолжать формировать текущий многоугольник  $P^i$  или начать строить новый. Например, на рис. 4.11а все построенные точки 1, 3, 4 на текущей стороне треугольника лежат в направлении вершины  $R^1$  относительно  $Q$  (поскольку здесь  $N_{nod}^{ik}=3$ , то достаточно проверять только первую  $j=N_v^{ik1}=1$  и последнюю  $j=N_v^{ik3}=4$  точки на стороне). Поэтому  $Q$  заносится в список вершин под номером 9. На рис. 4.11б показан пример, когда точка  $Q$  находится между двумя ранее построенными точками 1 и 2. Левый многоугольник еще не сформирован, и точка 1 пока находится в списке вершин текущего  $P^i$ . Поскольку точка 2 лежит от  $Q$  по направлению к вершине  $R^1$ , текущий многоугольник делится на два:  $P^{i1}$  с вершиной  $1'$  и  $P^{i2}$  с вершинами 1234, как показано на рис. 4.11в.

3.2. На грани  $\Delta_n^{l_1}$  существует два многоугольника. Здесь в дополнение к описанным выше случаям может возникнуть необходимость объединения двух многоугольников в один. В примере, показанном на рис. 4.12а,

на грани формируются два многоугольника: текущий  $P^{i_2}$  с построенными вершинами 1234 и начавшийся формироваться ранее  $P^{i_1}$  с вершинами 1'2'. Точка  $Q$  принадлежит  $P^{i_2}$ . Вместе с тем точка 2' лежит по направлению к вершине  $R^1$  от  $Q$ , и окрестность точки 2' отрезка  $[Q2']$  находится внутри старой ячейки  $\Omega_o$ . Следовательно, точки  $Q$  и 2' принадлежат одному и тому же многоугольнику. Необходимо объединить  $P^{i_1}$  и  $P^{i_2}$  в один  $P^{i_1}$ , а текущий многоугольник  $P^{i_2}$  исключить из списка (см. рис. 4.12б). Отметим, что в окончательном варианте точки  $Q, 1$  могут и не быть соседними вершинами  $P^{i_1}$  (или даже не принадлежать одному многоугольнику), но это выяснится при дальнейшем формировании точек пересечения  $\mathcal{L}_{on}^i$  и сторон  $\Delta_n^{l_1}$ .

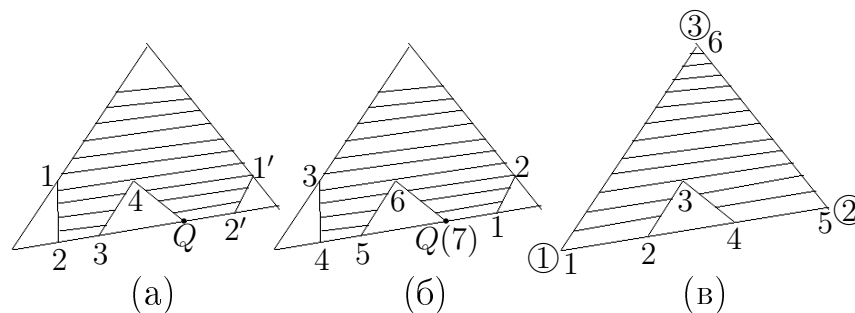


Рис. 4.12.

Возможен также случай, изображенный на рис. 4.12в. Здесь линия  $\mathcal{L}_{on}^i$  пересекает только одну сторону треугольника 12. Тогда в список вершин  $P^i$  будут занесены только точки 1, 2, 3, 4, 5, а последняя шестая вершина  $P^i$ , совпадающая с вершиной 3 треугольника, не будет. Чтобы избежать ошибки, после построения фигуры пересечения  $\Omega_{on}$  необходимо проверить все грани ячейки  $\Omega_n$ . В случае если выполнены следующие условия:

- 1) на грани  $\Delta_n^{l_1}$  существует хотя бы один многоугольник  $P^i$ ;
- 2) две вершины треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  (на рис. 4.12в это вершины 1 и 2) лежат внутри старой ячейки  $\Omega_o$ ;
- 3) на двух сторонах треугольника, примыкающих к третьей вершине, находится только по одной точке пересечения с линией  $\mathcal{L}_{on}^i$  (для

изображенного рис. 4.12 в примера переменные  $N_{nod}^{i2}=1$ ,  $N_{nod}^{i3}=1$ , так как вершины треугольника 1 и 2, занесенные в список вершин  $P^i$  под номерами 1 и 5, лежат также и на сторонах треугольника 13 и 23),

то в этом случае третья вершина грани  $\Delta_n^{l_1}$  также заносится в список вершин  $P^i$ .

Отметим, что даже если пара граней  $\Delta_n^{l_1}$  и  $\Delta_o^{l_2}$  не пересекается, может оказаться, что грань новой ячейки  $\Delta_n^{l_1}$  целиком лежит внутри  $\Omega_o$ . Тогда она целиком является частью границы фигуры  $\Omega_{on}$ .

Таким образом, описаны основные случаи формирования многоугольников на гранях ячейки  $\Omega_n$ . Все остальные случаи получаются как результат их комбинации. Аналогично рассматривается формирование многоугольников на гранях ячейки  $\Omega_o$ .

После того как проведены все линии пересечения  $\mathcal{L}_{on}^i$  и построены все многоугольники  $P^i$  на гранях ячеек  $\Omega_n$  и  $\Omega_o$ , необходимо проверить, чтобы нумерация вершин в каждом  $P^i$  указывала на направление внешней нормали к поверхности фигуры  $\Omega_{on}$ . Для этого нужно взять сторону грани ячейки, где расположены не менее двух вершин многоугольника  $P^i$  (указателем служит переменная  $N_{nod}^{ik} \geq 2$ ) и посмотреть совпадают ли на этой стороне направления обхода вершин 1, 2, 3 в треугольнике  $\Delta_n^{l_1}$  с направлением обхода вершин  $P^i$ . Если нет, то следует поменять нумерацию вершин  $P^i$  на противоположную. Например, на рис. 4.8б можно рассмотреть сторону 23 треугольника и вершины 4, 5 многоугольника  $P^{i_1}$ . Длина стороны треугольника равна сумме длин отрезков [24], [45] и [53] (здесь 2, 3 – вершины треугольника), и направления обхода совпадают. Если рассмотреть сторону 12 треугольника и вершины 3', 4' многоугольника  $P^{i_2}$ , то сумма длин отрезков [13'], [3'4'] и [4'2] уже не равна длине стороны треугольника, и направления обхода противоположны.

Возможен, однако, вариант когда все вершины  $P^i$  лежат внутри грани  $\Delta_n^{l_1}$  (см. рис. 4.13а). Тогда проверка нумерации вершин  $P^i$  осуществляется следующим образом. Предположив что  $P^i$  является областью звезд-

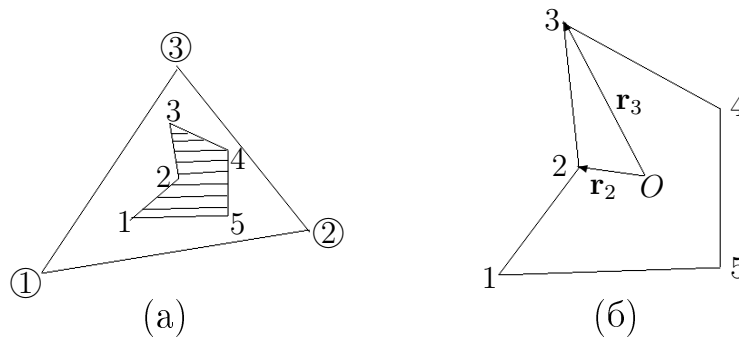


Рис. 4.13.

ного типа, берем некоторую ее центральную точку  $O$  (другое название – полюс области). Луч, проведенный из точки  $O$  в любом направлении, пересекает многоугольник  $P^i$  в единственной точке. Соединив точку  $O$  с парой последовательных вершин  $P^i$ , например 2 и 3, как показано на рис. 4.13б, получим два вектора  $\mathbf{r}_2$  и  $\mathbf{r}_3$ . Если векторное произведение  $\mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_3$  указывает на направление внешнего вектора нормали к грани  $\Delta_n^{l_1}$ , то нумерация вершин  $P^i$  также как и у треугольника  $\Delta_n^{l_1}$  задает обход против часовой стрелки. В противном случае следует поменять нумерацию вершин  $P^i$  на противоположную. Численные эксперименты показали, что в качестве центральной точки  $O$  области может быть взята точка с координатами

$$\mathbf{r}_o = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \mathbf{r}_m ,$$

где  $\mathbf{r}_m = (x_m, y_m, z_m)$  – координаты  $m$ -й вершины  $P^i$ ,  $M = N_{tot}^i$  – число вершин  $P^i$ .

#### 4.5 Этап III. Вычисление объема и массы $\Omega_{on}$

Объем фигуры пересечения ячеек  $\Omega_{on}$  находится с помощью вычисления поверхностного интеграла по формуле (4.4). Необходимо вычислить интеграл (4.4) по всем многоугольным поверхностям  $P^i$ , формирующим границу  $\Omega_{on}$ . Вклад в объем фигуры  $\Omega_{on}$  от многоугольной поверхности вычисляется с помощью формулы (4.5), дающей вклад в объем от

треугольной поверхности. Следовательно, необходимо прежде разбить многоугольник на треугольники, как это показано на рис. 4.14. Вклад в

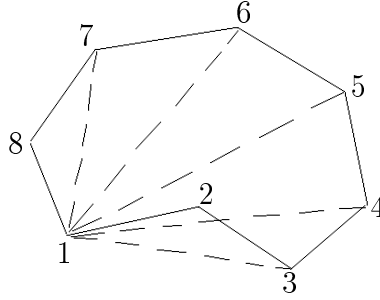


Рис. 4.14.

объем  $\Omega_{on}$  от приведенной на рис. 4.14 многоугольной поверхности есть

$$V_{12\dots 8} = V_{123} + V_{134} + V_{145} + V_{156} + V_{167} + V_{178}.$$

Поскольку каждая гексаэдральная ячейка, новая и старая, заменяются на два 12-гранника, то следует находить объемы  $V^{kl}$ , а следовательно и массы  $m_{on}^{kl}$  четырех фигур пересечения  $\Omega_{on}^{kl}$ ,  $k, l=1, 2$ . Здесь  $\Omega_{on}^{kl}$  – пересечение  $k$ -го 12-гранника новой гексаэдральной ячейки и  $l$ -го 12-гранника старой гексаэдральной ячейки. После нахождения четырех объемов  $V^{kl}$  определяем часть массы  $q$ -й старой линейчатой ячейки, которая содержится в текущей новой гексаэдральной ячейке

$$\tilde{m}_{on}^q = \frac{1}{4} \sum_{k,l=1}^2 m_{on}^{kl} = \frac{1}{4} \rho_o^q \sum_{k,l=1}^2 V^{kl},$$

где  $\rho_o^q$  – значение плотности в  $q$ -й старой линейчатой ячейке. Далее необходимо найти множество старых ячеек  $\Omega_o^q$ , которые пересекаются с ячейкой  $\Omega_n$ .

#### 4.6 Этап IV. Алгоритм перебора ячеек сетки

Для расчета массы и плотности в новой ячейке  $\Omega_n$  необходимо найти все старые ячейки  $\Omega_o^q$ ,  $q=1, \dots, q_{max}$ , которые имеют в пересечении с  $\Omega_n$



непустое множество. Множество таких старых ячеек назовем окружением ячейки  $\Omega_n$  (см. пример двумерных сеток на рис. 4.15). Если проверять все ячейки сетки  $\omega_o$ , то время расчета становится неоправданно большим. Рассмотрим оптимальный алгоритм перебора ячеек сетки  $\omega_o$ , когда рассматриваются только ячейки окружения  $\Omega_n$  [4,10,94] (Азаренок, 2003,2006, Azarenok, 2005).

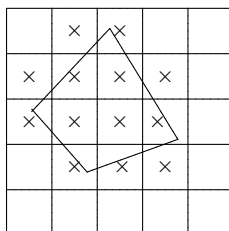


Рис. 4.15. Помеченные “ $\times$ ” старые ячейки образуют окружение  $\Omega_n$ .

Для нахождения окружения ячейки  $\Omega_n$  используется алгоритм перебора ячеек  $\omega_o$  в виде дерева. Он состоит в следующем. Пусть для  $\Omega_n$  известна старая ячейка  $\Omega_o^{i_c j_c k_c}$  (здесь используется глобальная нумерация ячеек) такая, что

$$\Omega_n \cap \Omega_o^{i_c j_c k_c} \neq \emptyset, \quad (4.23)$$

т.е. их пересечение является непустым множеством. Ячейку  $\Omega_o^{i_c j_c k_c}$  назовем центром окружения ячейки  $\Omega_n$ . Центром окружения может быть любая ячейка сетки  $\omega_o$ , удовлетворяющая условию (4.23).

В первом 12-граннике двум треугольным граням 567 и 578 соответствует направление возрастания индекса  $k$ , обозначаемое  $k+$  (см. рис. 4.16), а граням 124 и 234 – направление убывания  $k$ , обозначаемое  $k-$ . Такое соответствие заимствовано у исходной линейчатой ячейки с гранями 1234 и 5678. Аналогично граням 347 и 487 соответствует направление  $j+$ , а граням 125 и 265 направление  $j-$ . Наконец граням 237 и 276 соответствует направление  $i+$ , а 145 и 548 направление  $i-$ . Итак, попарно объединенные грани соответствуют шести направлениям изменения индексов  $i, j, k$  (см. табл. 4.1)

При построении фигуры пересечения  $\Omega_{on}$  определяем грани ячей-

Таблица 4.1.

направление $l$	1	2	3	4	5	6
изменение индекса	$k-$	$k+$	$j-$	$j+$	$i-$	$i+$

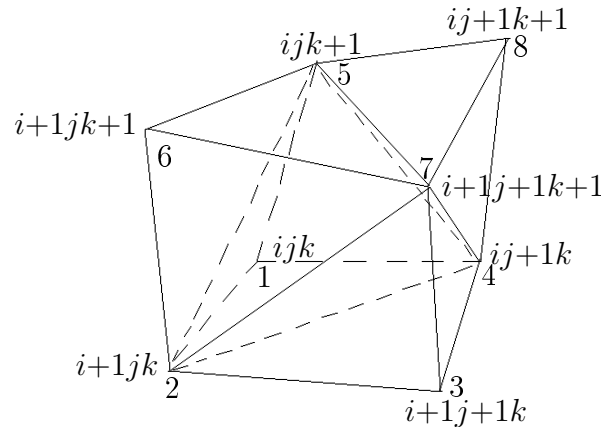


Рис. 4.16. Глобальная и локальная нумерация вершин ячейки.

ки  $\Omega_o^{i_c j_c k_c}$ , пересекающие грани  $\Omega_n$ , и, следовательно, направления перебора ячеек сетки  $\omega_o$ . Запишем найденные направления в массив  $INTERS(i_c, j_c, k_c, l)$ . Здесь индекс  $l$  указывает направление перебора ячеек сетки  $\omega_o$  (см. рис. 4.17). Значение  $INTERS(i_c, j_c, k_c, l)=0$  указывает, что в направлении  $l$  перебирать ячейки не нужно (грани ячейки  $\Omega_o^{i_c j_c k_c}$  в направлении  $l$  не пересекают грани ячейки  $\Omega_n$ ), значение  $INTERS(i_c, j_c, k_c, l)=1$  указывает, что в направлении  $l$  следует перебирать старые ячейки. Существует, однако, одно исключение. Эти две треугольные грани ячейки  $\Omega_o^{i_c j_c k_c}$  могут не пересекать грани ячейки  $\Omega_n$ , но целиком лежать внутри нее. Поэтому даже если  $INTERS(i_c, j_c, k_c, l)=0$  осуществляем следующую проверку:

- (\*) Проверяем лежит ли какая-нибудь одна из четырех вершин этих двух граней  $\Omega_o^{i_c j_c k_c}$  внутри ячейки  $\Omega_n$ . Если лежит, то присваиваем  $INTERS(i_c, j_c, k_c, l)=1$  и в направлении  $l$  следует перебирать старые ячейки.

Введем массивы  $INDIC(i, j, k)$  и  $INCREM(i, j, k)$ . Первый указы-

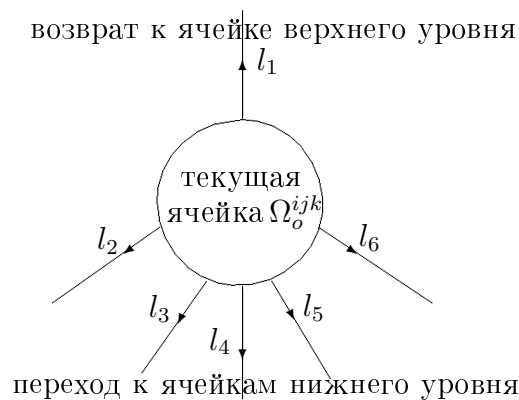


Рис. 4.17. Для текущей ячейки  $\Omega_o^{ijk}$  индекс  $l$  указывает на шесть направлений изменения индексов  $i, j, k$ . Здесь  $l_1 = INCREM(i, j, k)$  – направление возврата на более высокий уровень дерева,  $l_2, \dots, l_6$  – направления перехода в соседние пять ячеек нижнего уровня дерева.

вадет проверялась ли текущая ячейка  $\Omega_o^{ijk}$  на пересечение с  $\Omega_n$  (значение 1) или еще нет (значение 0). Переменная  $INCREM(i, j, k)$  указывает по какому направлению следует возвращаться на более высокий уровень дерева, т.е. в ячейку, из которой совершался переход в текущую ячейку  $\Omega_o^{ijk}$  (на рис. 4.17 это направление  $l_1$ ). Например, если переход из ячейки более высокого уровня в текущую ячейку осуществляется в направлении  $l=3$ , то возвращаться назад следует в направлении  $l=4$ . Из текущей старой ячейки следует возвращаться в ячейку верхнего уровня дерева если

1.  $INTERS(i, j, k, l)=0$  для пяти направлений  $l$  (на рис. 4.17 это направления  $l_2, \dots, l_6$ ); здесь также необходимо проводить проверку (\*) для вершин граней всех пяти направлений текущей ячейки  $\Omega_o^{ijk}$ ; или

2. Все пять ячеек нижнего уровня дерева были уже проверены на пересечение. Иными словами, когда во всех этих пяти ячейках переменная  $INDIC(i, j, k)=1$ .

Если к тому же текущая ячейка  $\Omega_o^{ijk}$  является центром окружения, т.е. ячейкой  $\Omega_o^{i_c j_c k_c}$ , то это значит, что найдены все ячейки старой сетки, удовлетворяющие условию (4.23), и, следовательно, найдено окружение ячейки  $\Omega_n$ .

При рассмотрении текущей ячейки  $\Omega_o^{ijk}$  проверяем пересекают ли ее грани любую из двух треугольных граней новой ячейки, указывающих на направление перебора новых ячеек, через которые происходит переход к следующей новой ячейке. Если да, то ячейка  $\Omega_o^{ijk}$  будет центром окружения для следующей новой ячейки, и для следующей  $\Omega_n$  полагаем  $i_c=i$ ,  $j_c=j$ ,  $k_c=k$ . Таких старых ячеек может быть несколько. Запоминается номер последней.

Если ни одна из двух треугольных граней  $\Omega_n$ , указывающих на направление перебора новых ячеек, не имеет пересечений со старыми ячейками, в качестве центра окружения берется старая ячейка, внутри которой находится любая из четырех вершин этих двух треугольных граней ячейки  $\Omega_n$ .

Если ячейка  $\Omega_n$  целиком лежит внутри старой, то индексы  $i_c, j_c, k_c$  останутся неизменными для следующей  $\Omega_n$ .

Благодаря проверке (\*), описанный алгоритм будет также проверять старые ячейки целиком лежащие внутри  $\Omega_n$  (см. пример на рис. 4.15 для двумерного случая).

Такой метод определения окружения ячейки  $\Omega_n$  требует, чтобы осуществлялся последовательный перебор ячеек сетки  $\omega_n$ , например, как показано для  $i$ -го нечетного слоя на рис. 4.18. Переход с  $i$ -го слоя ячеек на  $i+1$ -й должен осуществляться через угловую ячейку  $\Omega_n^{iJK}$ . В  $i+1$ -м четном слое перебор ячеек  $\Omega_n$  проводится в обратном порядке.

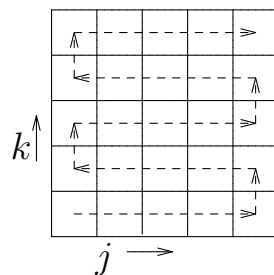


Рис. 4.18. Порядок перебора ячеек  $\Omega_n$  в  $i$ -м нечетном слое сетки  $\omega_n$ .

Найденное окружение для первой (из двух) 12-гранной ячейки  $\Omega_n$ , состоящее из первых 12-гранных ячеек  $\Omega_o^q$ , используется также для других

трех комбинаций: первая  $\Omega_n$  и вторые  $\Omega_o^q$ , и т.д.

#### 4.7 Этап V. Расчет массы, заключенной в новой ячейке, и значения плотности в ней

Масса новой линейчатой ячейки  $m_n$  определяется суммированием по всем ячейкам окружения

$$m_n = \sum_{q=1}^{q_{max}} \tilde{m}_{on}^q.$$

Плотность в новой гексаэдральной ячейке равна

$$\rho_n = \frac{m_n}{V_n}.$$

#### 4.8 Построение слоев фиктивных ячеек

Ячейки, грани и ребра ячеек сеток  $\omega_o$  и  $\omega_n$  не должны совпадать. В противном случае задача определения линии пересечения совпадающих граней ячеек будет 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  $\omega_n$ ) относительно другой на  $\Delta \mathbf{r} = (\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ . Поскольку при сдвиге граничные ячейки сетки  $\omega_n$  выйдут за расчетную область  $\Theta$ , вводится дополнительный внешний слой фиктивных ячеек для старой сетки  $\omega_o$  по всей границе области с экстраполяцией в них значений плотности [126](Dukowich, Radial, 1991), [3,4,94](Азаренок, 2002,2003, Azarenok, 2005). Такую расширенную сетку будем обозначать  $\omega_o^{ext}$ . Теперь ячейки сетки  $\omega_n$  будут целиком лежать внутри области, занимаемой ячейками  $\omega_o^{ext}$ , и потери массы после интерполяции не происходит.

Как правило, построение  $\omega_o^{ext}$  является несложной задачей. В параметрическом пространстве  $\mathbb{R}^3$ , где область суть прямоугольный параллелепипед и все ячейки – единичные кубы, с каждой из шести сторон

области добавляется еще по одному слою ячеек. Рассмотрим трилинейное отображение единичного куба в гексаэдральную ячейку (4.1). Для левой границы по направлению  $\xi$  координаты четырех вершин фиктивной ячейки определяются из (4.1) при  $\xi=-1$  и  $\eta, \zeta=0, 1$ . Тогда для фиктивного узла  $(0, j, k)$  имеем

$$\mathbf{r}_{0jk} = 2\mathbf{r}_{1jk} - \mathbf{r}_{2jk} = \mathbf{r}_{1jk} + p_i^l(\mathbf{r}_{1jk} - \mathbf{r}_{2jk}), \quad (4.24)$$

где  $p_i^l=1$  – экстраполяционный параметр для левой границы. Соответственно на правой границе по  $\xi$  координаты слоя фиктивных узлов  $\mathbf{r}_{I+2,j,k}$  вычисляются с использованием экстраполяционного параметра  $p_i^r=1$ , а также для других четырех граничных поверхностей области при значениях параметров  $p_j^l=p_j^r=p_k^l=p_k^r=1$ .

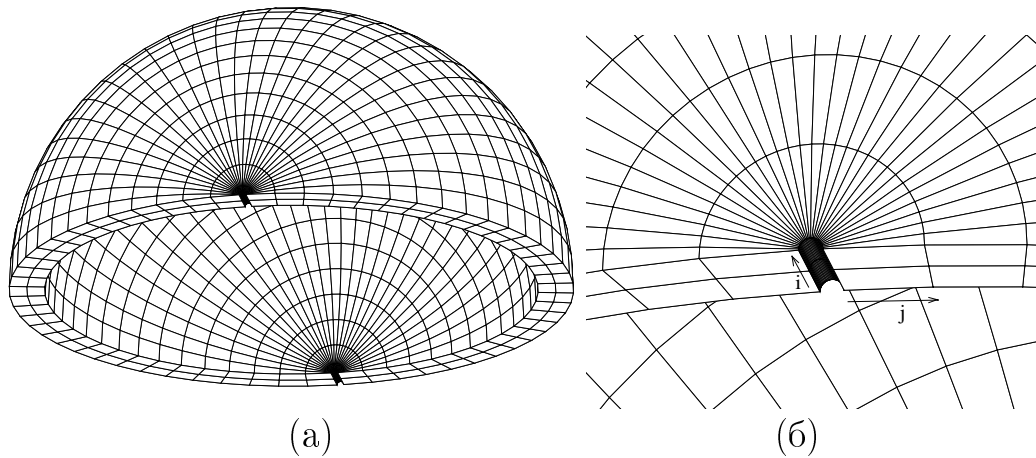


Рис. 4.19. Исходная сетка  $\omega_o : 3 \times 31 \times 31$  (а) и ее фрагмент (б).

Однако, существуют случаи когда экстраполяционные параметры по некоторым направлениям приходится брать существенно меньшими 1. На рис. 4.19а приведена сетка  $\omega_o : 3 \times 31 \times 31$  цилиндрического типа. Построение слоев фиктивных ячеек по формулам вида (4.24), когда все экстраполяционные параметры равны 1, даст расширенную сетку  $\omega_o^{ext} : 5 \times 33 \times 33$  (см. рис. 4.20), у которой фиктивные ячейки в слоях  $j=0$  и  $j=J+1=31$  вырождены. Очевидно, что параметр  $p_j^l$  ( $p_j^r$ ) следует задавать так, чтобы фиктивный узел  $\mathbf{r}_{i0k}$  (и соответственно  $\mathbf{r}_{i,J+2,k}$ ) лежал между узлом  $\mathbf{r}_{i1k}$  ( $\mathbf{r}_{i,J+1,k}$ ) и осью симметрии, а не левее (правее) оси симметрии как изображено на рис. 4.20б. Для этого были заданы  $p_j^l=p_j^r=0.05$

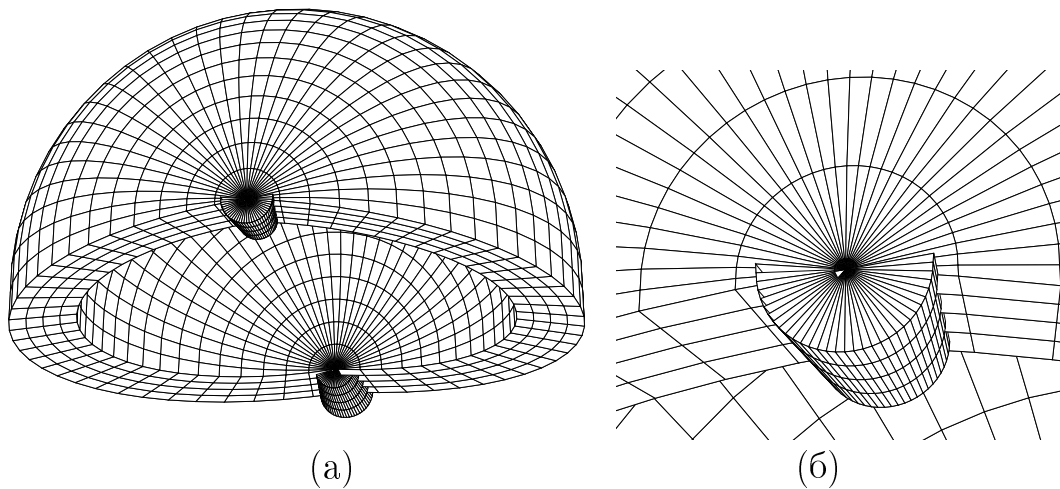


Рис. 4.20. Расширенная вырожденная сетка  $\omega_o^{ext} : 5 \times 33 \times 33$ .

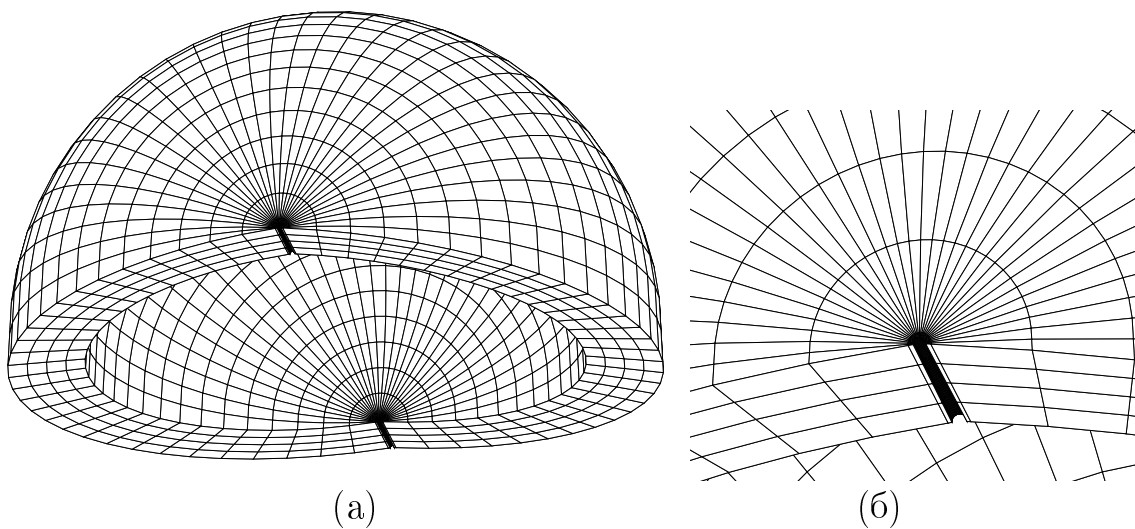


Рис. 4.21. Невырожденная сетка  $\omega_o^{ext} : 5 \times 33 \times 33$  при  $p_j^l = p_j^r = 0.05$ .

(см. рис. 4.21). Отметим, что если взять параметры  $p$  слишком малыми, существует опасность того, что сдвинутая сетка  $\omega_n$  выйдет за область расширенной сетки  $\omega_o^{ext}$ , что приведет к дополнительным ошибкам интерполяции.

В некоторых случаях следует применять другие экстраполяционные формулы. Рассмотрим сетку  $\omega_o : 61 \times 61 \times 6$ , изображенную на рис. 4.22 и построенную Т.Н.Брониной. Ячейки, примыкающие к граничным ребрам  $i, j=1$  и  $i, j=61$ , имеют форму призмы, поскольку две смежные грани гексаэдральной ячейки лежат в одной плоскости. Использование формул вида (4.24) для построения фиктивных ячеек приведет к результату, по-

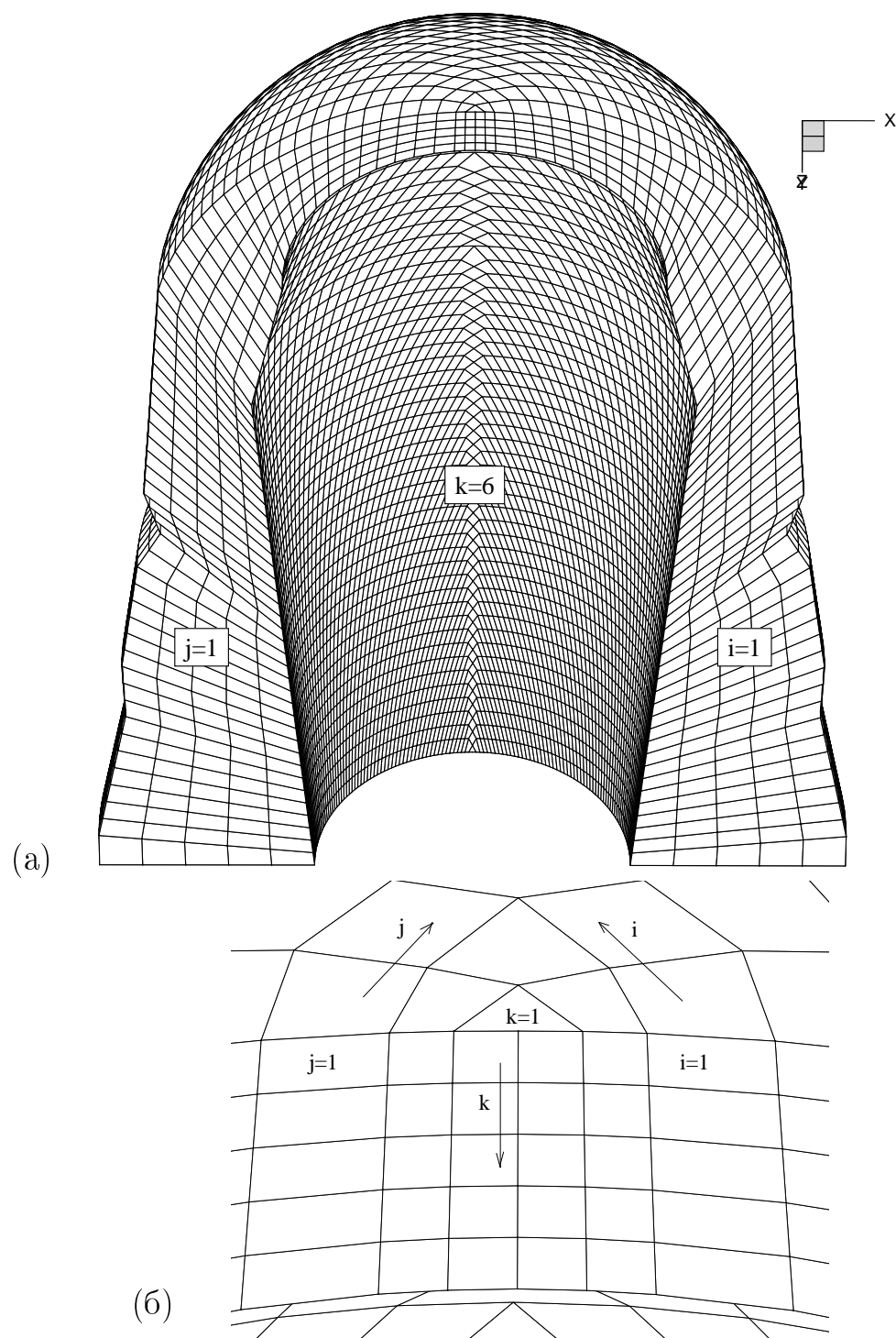


Рис. 4.22. Старая многоблочная сетка  $\omega_o : 61 \times 61 \times 6$  (а) и ее фрагмент (б) в окрестности ребра  $i, j=1$ .



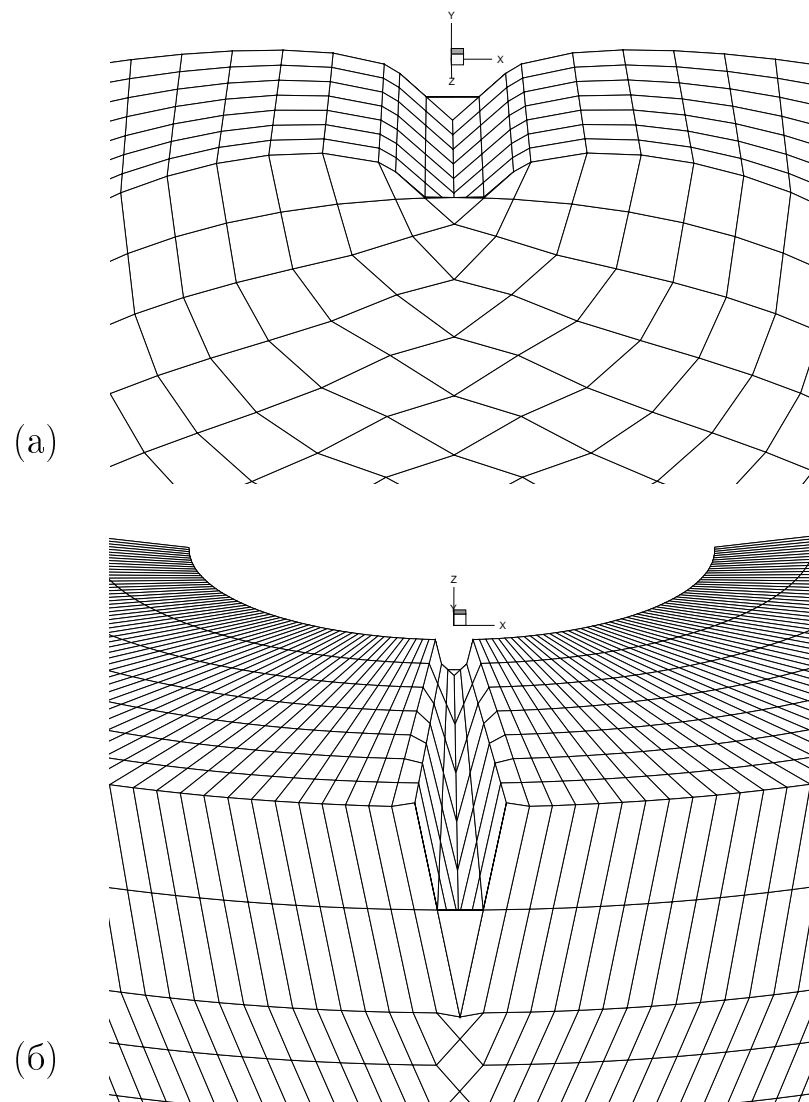


Рис. 4.23. Фрагменты вырожденной сетки  $\omega_o^{ext} : 63 \times 63 \times 8$  в окрестности ребер  $i, j=1$  (а) и  $i, j=63$  (б).

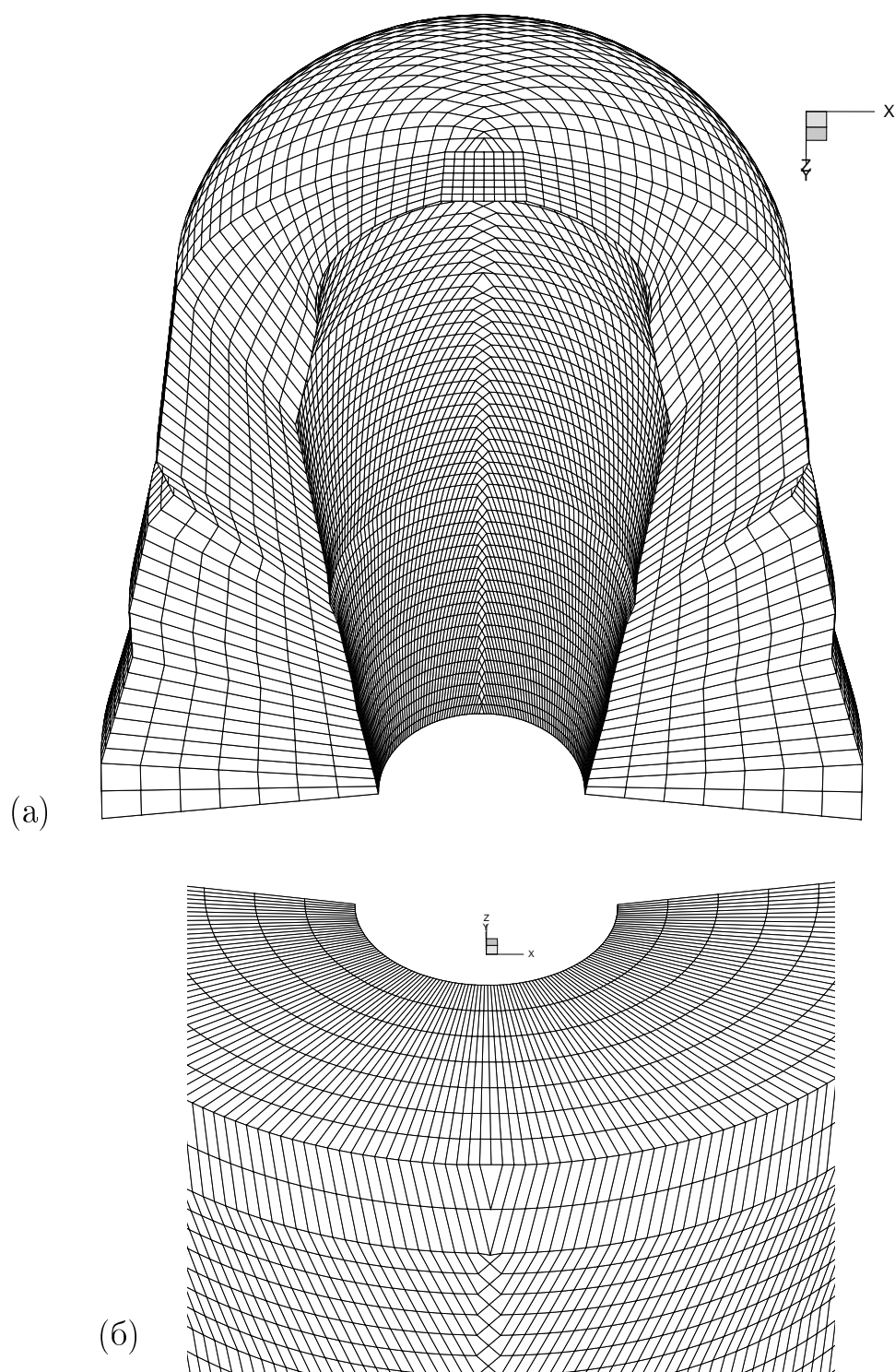


Рис. 4.24. Невырожденная сетка  $\omega_o^{ext} : 63 \times 63 \times 8$  (а) и ее фрагмент (б) в окрестности ребра  $i, j=63$ .

казанному на рис. 4.23. В окрестности ребер  $i, j=1$  и  $i, j=63$  ячейки вырождены (границы ячейки имеют самопересечения).

Для того чтобы избежать вырождения фиктивных ячеек, координаты узлов нескольких фиктивных ячеек сетки  $\omega_o^{ext}$ , примыкающих к угловому узлу  $\mathbf{r}_{11k}$  (здесь и далее индекс  $k$  зафиксирован), следует скорректировать по формуле

$$\mathbf{r}_{ijk} = \mathbf{r}_{i_1 1k} + \frac{i_0 - i + j}{i_0 + j_0} (\mathbf{r}_{1j_1 k} - \mathbf{r}_{i_1 1k}). \quad (4.25)$$

Здесь  $i_0, j_0$  – число ячеек по  $i$  и  $j$  направлениям, где необходимо скорректировать положение узлов (обычно полагают  $i_0=j_0$ ),  $i_1=i_0+1$ ,  $j_1=j_0+1$ . В формуле (4.25) при варьировании индекса  $i=1, \dots, i_0$  индекс  $j=1$ , и наоборот при варьировании  $j=1, \dots, j_0$  индекс  $i=1$ , т.е. корректируются координаты точек  $\mathbf{r}_{11k}, \mathbf{r}_{21k}, \dots, \mathbf{r}_{i_0 1k}$  и  $\mathbf{r}_{12k}, \mathbf{r}_{13k}, \dots, \mathbf{r}_{1j_0 k}$ .

Координаты узлов нескольких фиктивных ячеек, расположенных около ребра  $i=I+3, j=J+3$  (напомним что  $I, J$  – число ячеек  $\omega_o$  по направлениям  $i$  и  $j$  соответственно) корректируются по формуле

$$\mathbf{r}_{ijk} = \mathbf{r}_{i', J+3, k} + \frac{i_0 + i - I - j + J}{i_0 + j_0} (\mathbf{r}_{I+3, j', k} - \mathbf{r}_{i', J+3, k}), \quad (4.26)$$

где  $i'=I+3-i_0$ ,  $j'=J+3-j_0$ . В (4.26) как и выше при изменении индекса  $i=i', \dots, I+3$  индекс  $j$  фиксирован и  $j=J+3$ , и наоборот при изменении  $j=j', \dots, J+3$  фиксирован индекс  $i=I+3$ .

Приведем формулы корректировки координат узлов фиктивных ячеек, примыкающих к двум другим ребрам области:  $i=I+3, j=1$  и  $i=1, j=J+3$ . Для ребра  $i=I+3, j=1$  формулы пересчета имеют вид

$$\mathbf{r}_{ijk} = \mathbf{r}_{i' 1k} + \frac{j_0 + j + i - I - 4}{i_0 + j_0} (\mathbf{r}_{I+3, j_0, k} - \mathbf{r}_{i' 1k}). \quad (4.27)$$

Здесь при изменении индекса  $i=i', \dots, I+3$  индекс  $j$  фиксирован и  $j=1$ , и наоборот при изменении  $j=1, \dots, j_0$  индекс  $i=I+3$ . Для ребра  $i=1, j=J+3$  формулы пересчета имеют вид

$$\mathbf{r}_{ijk} = \mathbf{r}_{1j' k} + \frac{i_0 + i + j - J - 4}{i_0 + j_0} (\mathbf{r}_{i_0, J+3, k} - \mathbf{r}_{1j' k}). \quad (4.28)$$

Здесь при изменении индекса  $i=1, \dots, i_0$  индекс  $j$  фиксирован и  $j=J+3$ , и наоборот при изменении  $j=j', \dots, J+3$  фиксирован индекс  $i=1$ .

Для сетки  $\omega_o$ , изображенной на рис. 4.22, расширенная сетка  $\omega_o^{ext}$  :  $63 \times 63 \times 8$ , полученная с корректировкой координат узлов по формулам (4.25), (4.26), приведена на рис. 4.24. Здесь задавались следующие параметры:

$$i_0 = 4, \quad j_0 = 4, \quad p_i^l = p_i^r = p_j^l = p_j^r = p_k^l = p_k^r = 1$$

и корректировались координаты узлов фиктивных ячеек только для ребер  $i=1, j=1$  и  $i=I+3, j=J+3$ .

Приведенные примеры показывают, что не существует общего алгоритма построения слоев фиктивных ячеек. В некоторых специальных случаях формулы (4.24) следует корректировать исходя из конкретной ситуации.

## 4.9 Ошибка интерполяции

Ошибка интерполяции складывается из ошибок двух типов. Первая связана с ошибками округлений при вычислениях. При увеличении разрядной сетки компьютера (т.е. числа значащих цифр, хранимых в памяти ЭВМ), эта ошибка стремится к 0. Вторая, систематическая ошибка, связана с тем, что сетка  $\omega_n$  сдвинута относительно  $\omega_o$  на  $\Delta \mathbf{r}$ . Пусть  $\Theta_n, \Theta_o \subset \mathbb{R}^3$  обозначают области, занимаемые соответственно сетками  $\omega_n, \omega_o$ , где  $\Theta_o$  совпадает с исходной областью  $\Theta$ . Чтобы понять причину возникновения систематической ошибки рассмотрим пример интерполяции с прямоугольной сетки  $\omega_o$ , с шагами  $h_x, h_y, h_z$  по направлениям  $x, y, z$  соответственно, на эту же сетку  $\omega_n$ , сдвинутую относительно старой на  $\Delta \mathbf{r}$ . Здесь модуль сдвига  $|\Delta \mathbf{r}| \ll h_x, h_y, h_z$ . Пусть для определенности компоненты вектора сдвига  $\Delta x, \Delta y, \Delta z > 0$ . Если в ячейке сетки  $\omega_o$  значение

плотности есть  $\rho_{ijk}$ , тогда масса области  $\Theta_o$  равна

$$m_o = h_x h_y h_z \sum_{i,j,k=1}^{I,J,K} \rho_{ijk}.$$

Масса области  $\Theta_n$  складывается из массы области пересечения  $\Theta_{on} = \Theta_o \cup \Theta_n$

$$\begin{aligned} m_{on} = m_o - h_x h_y \Delta z \sum_{i,j=2}^{I,J} \rho_{ij1} - h_x h_z \Delta y \sum_{i,k=2}^{I,K} \rho_{i1k} - h_y h_z \Delta x \sum_{j,k=2}^{J,K} \rho_{1jk} - \\ - h_x \Delta y \Delta z \sum_{i=2}^I \rho_{i11} - h_y \Delta x \Delta z \sum_{j=2}^J \rho_{1j1} - h_z \Delta x \Delta y \sum_{k=2}^K \rho_{11k} - \Delta x \Delta y \Delta z \rho_{111} \end{aligned}$$

и массы дополнительной области  $\Theta' = \Theta_n \setminus \Theta_{on}$ , которая образовалась из-за сдвига  $\omega_n$  относительно  $\omega_o$ ,

$$\begin{aligned} m' = h_x h_y \Delta z \sum_{i,j=2}^{I,J} \rho_{i,j,K+1} + h_x h_z \Delta y \sum_{i,k=2}^{I,K} \rho_{i,J+1,k} + h_y h_z \Delta x \sum_{j,k=2}^{J,K} \rho_{I+1,j,k} + \\ + h_x \Delta y \Delta z \sum_{i=2}^I \rho_{i,J+1,K+1} + h_y \Delta x \Delta z \sum_{j=2}^J \rho_{I+1,j,K+1} + h_z \Delta x \Delta y \sum_{k=2}^K \rho_{I+1,J+1,k} + \\ + \Delta x \Delta y \Delta z \rho_{I+1,J+1,K+1}. \end{aligned}$$

Здесь  $\rho_{I+1,j,k}$ ,  $\rho_{i,J+1,k}$ ,  $\rho_{i,j,K+1}$  – значения плотности в крайних справа слоях фиктивных ячеек сетки  $\omega_o$ . Складывая  $m_{on}$  и  $m'$  получим  $m_n$ , массу области  $\Theta_n$ . Изменение массы после интерполяции, т.е. систематическая ошибка  $\Delta m$ , составит

$$\begin{aligned} \Delta m = m_n - m_o = h_x h_y \Delta z \sum_{i,j=2}^{I,J} (\rho_{i,j,K+1} - \rho_{ij1}) + h_x h_z \Delta y \sum_{i,k=2}^{I,K} (\rho_{i,J+1,k} - \rho_{i1k}) + \\ + h_y h_z \Delta x \sum_{j,k=2}^{J,K} (\rho_{I+1,j,k} - \rho_{1jk}) + h_x \Delta y \Delta z \sum_{i=2}^I (\rho_{i,J+1,K+1} - \rho_{i11}) + \\ + h_y \Delta x \Delta z \sum_{j=2}^J (\rho_{I+1,j,K+1} - \rho_{1j1}) + h_z \Delta x \Delta y \sum_{k=2}^K (\rho_{I+1,J+1,k} - \rho_{11k}) + \\ + \Delta x \Delta y \Delta z (\rho_{I+1,J+1,K+1} - \rho_{111}). \end{aligned}$$

От того как будут экстраполированы значения  $\rho$  в фиктивных ячейках зависит ошибка  $\Delta m$ . Из физических соображений необходимо проводить гладкую экстраполяцию. Скажем, задавать  $\rho$  равным значению в соседней ячейке сетки  $\omega_o$ , например,  $\rho_{I+1,j,k} = \rho_{Ijk}$ . Если значения  $\rho$  в первом и последнем слоях исходной сетки  $\omega_o$  по каждому из направлений в соответствующих ячейках равны, например,  $\rho_{1jk} = \rho_{Ijk}$ , тогда систематическая ошибка равна нулю и полная ошибка определяется ошибкой интерполяции объема, т.е. ошибкой округлений, поскольку объем области, занимаемой сеткой, равен массе области если  $\rho \equiv 1$ .

Допустим, что для  $\omega_o$  значения  $\rho_{i1k} = \rho_{iJk}$  и  $\rho_{ij1} = \rho_{ijK}$ . Тогда относительная систематическая ошибка оценивается по формуле

$$\varepsilon_s = \frac{\Delta m}{m_o} \approx \frac{h_y h_z \Delta x \sum_{j,k=2}^{J,K} (\rho_{I+1jk} - \rho_{1jk})}{h_x h_y h_z \sum_{ijk=1}^{I,J,K} \rho_{ijk}} = O\left(\frac{\Delta x}{h_x}\right) \quad (4.29)$$

и, следовательно, пропорциональна величине относительного сдвига  $\omega_n$  по  $x$ . В общем случае  $\varepsilon_s$  складывается из относительных систематических ошибок по трем координатным направлениям.

Можно задать значения  $\rho$  в фиктивных крайних справа ячейках равными значениям  $\rho$  в крайних слева ячейках по каждому направлению. Например, по направлению  $i$  положить  $\rho_{I+1,j,k} = \rho_{1jk}$ . Но если значения плотности в первой и последней ячейках по направлению  $i$  не равны, т.е.  $\rho_{1jk} \neq \rho_{Ijk}$ , то поддерживая глобальную консервативность процесса интерполяции, получим локальное нарушение гладкости распределения  $\rho$  в крайнем правом слое ячеек сетки  $\omega_n$ . Итак, можно говорить о локальной консервативности процесса интерполяции только в области  $\Theta_{on}$ . Нарушение глобальной консервативности (изменение массы области  $\Theta_n$  по сравнению с массой  $\Theta_o$ ) происходит из-за того, что при сдвиге  $\omega_n$  на  $\Delta \mathbf{r}$  от области  $\Theta_n$  слева (по  $i, j, k$  направлениям) отрезаются небольшие объемы имеющие одну плотность, а справа добавляются те же объемы, но уже с другой плотностью. Похожая ситуация возникает и на криво-

линейных сетках.

Если в ячейках старой сетки  $\rho_o(\mathbf{r}) \equiv 1$ , то после интерполяции плотности на новую сетку должно получиться  $\rho_n(\mathbf{r}) \equiv 1$ . Этот критерий был предложен в [126](Dukowich, Radial, 1991) для контроля за процессом интерполяции. Его можно использовать следующим образом. Параллельно вычислению  $\rho_n$  в гексаэдральной ячейке определяем контрольное значение  $\rho'_n$  (для которой  $\rho'_o(\mathbf{r}) \equiv 1$ ). Если условие

$$|\rho'_n - 1| < \varepsilon,$$

где  $\varepsilon > 0$  достаточно малая величина, не выполняется, тогда эту ячейку можно слегка сдвинуть и осуществить интерполяцию в ней снова.

## 4.10 Численные примеры

**4.10.1 Прямоугольная область.** Рассмотрим интерполяцию с криволинейной сетки  $\omega_o : 29 \times 29 \times 49$  (см. рис. 4.25а) на прямоугольную  $\omega_n : 31 \times 31 \times 51$  (см. рис. 4.25б). Часть сетки  $\omega_o$  в области ограниченной поверхностями

$$x = 0, \quad x = 1, \quad y = 0, \quad y = 1, \quad z = 0, \quad z = z_b = 2 + 0.6 \cos(2\pi xy)$$

с числом узлов  $15 \times 15 \times 25$  была построена О.В. Ушаковой с использованием алгоритма из [21](Брони́на и др., 2003). Верхняя часть сетки, где  $z_b \leq z \leq 4$ , дополняет область до прямоугольного параллелепипеда  $0 \leq x, y \leq 1, 0 \leq z \leq 4$ . Затем симметричным отображением относительно плоскостей  $x=0, y=0$  область дополняется до параллелепипеда  $-1 \leq x, y \leq 1, 0 \leq z \leq 4$ . Значение плотности в ячейках задается в виде

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

где  $\rho_b=1, \rho_t=100, \alpha=4$ . На рис. 4.26 представлена плотность на оси  $z$ .

Интерполяция проводится для двух случаев. В первом значения плотности в фиктивных ячейках экстраполированы гладко. Например, в

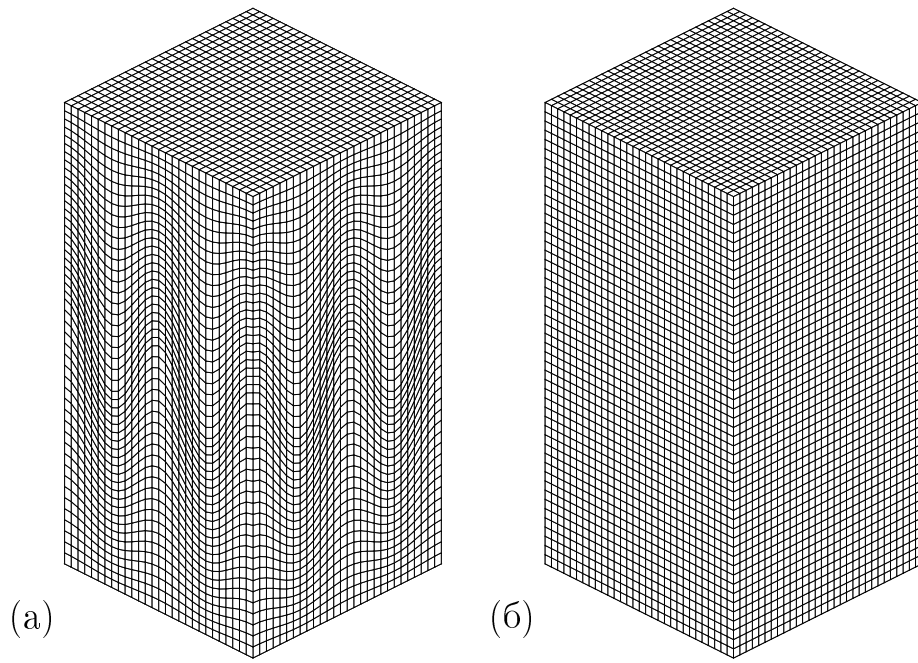


Рис. 4.25. Криволинейная сетка  $\omega_o: 29 \times 29 \times 49$  (а), прямоугольная равномерная сетка  $\omega_n: 31 \times 31 \times 51$  (б).

верхнем  $K+1$ -м слое (где  $K=48$ ) полагаем  $\rho_{i,j,K+1}=\rho_{ijK}$ , а в нижнем слое  $\rho_{ij0}=\rho_{ij1}$ . По  $i$  и  $j$  направлениям благодаря симметрии задачи плотность также экстраполируется гладко. Вектор сдвига  $\omega_n$  относительно  $\omega_o$  равен

$$\Delta \mathbf{r} = h_{sc}(\Delta x, \Delta y, \Delta z) = h_{sc}(-0.006, -0.005, -0.007),$$

где  $h_{sc}=0.0714$  – характерный размер ячейки сетки  $\omega_n$ . Проекции координатных поверхностей  $j=7, 1$  на плоскость  $x, z$  показаны на рис. 4.27а, 4.28а соответственно. На рис. 4.27б, 4.28б показаны изолинии плотности в слоях  $j=7, 1$  сетки  $\omega_o$ , а на рис. 4.27в, 4.28в в слоях  $j=7, 1$  сетки  $\omega_n$ . Относительное изменение массы и объема составило

$$\varepsilon_m = \frac{|\Delta m|}{m_o} = 2.464 \cdot 10^{-4}, \quad \varepsilon_v = \frac{|\Delta V|}{V_o} = 1.518 \cdot 10^{-6},$$

где  $m_o, V_o$  – масса и объем области  $\Theta_o$ . Напомним, что  $\varepsilon_v = \varepsilon_m$ , когда  $\rho \equiv 1$ .

Во втором случае для исключения систематической ошибки значения  $\rho$  задаются соответственно  $\rho_{i,j,K+1}=\rho_{ij1}$ ,  $\rho_{ij0}=\rho_{ijK}$ . Здесь относительная ошибка для массы равна

$$\varepsilon_m = 2.802 \cdot 10^{-6}.$$



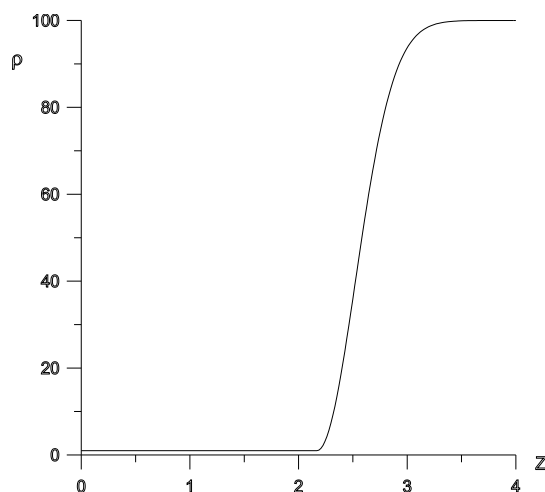


Рис. 4.26. Плотность на оси  $z$  для сетки  $\omega_o$ .

Можно видеть что наличие систематической ошибки в первом случае приводит к увеличению полной ошибки интерполяции почти в 100 раз. Но, с другой стороны, во втором случае значения плотности в нижнем слое ячеек  $\omega_n$  стали равными 1.618 вместо 1 как это было на  $\omega_o$  (см. значения  $\rho$  на рис. 4.26 при  $z=0$ ). Таким образом, сохранение глобальной консервативности привело к нефизическим значениям  $\rho$  в ячейках нижнего слоя  $\omega_n$ .

Распределение  $\rho$  на  $\omega_o$  симметрично относительно плоскостей  $x=0$  и  $y=0$ . Поскольку ячейки нижнего и верхнего слоя  $\omega_o$  (по направлению  $z$ ) близки к прямоугольным равномерным, можно надеяться, что для систематической ошибки справедлива оценка (4.29). Для проверки выполнения зависимости (4.29) были проведены еще два расчета при варьировании компоненты сдвига  $\Delta z$  и неизменных  $\Delta x, \Delta y$ . Плотность экстраполирована гладко. Результаты всех трех расчетов приведены ниже в табл. 4.2, где представлена зависимость относительных ошибок  $\varepsilon_m, \varepsilon_v$  от компоненты сдвига  $\Delta z$ .

В первых двух случаях при практически неизменной  $\varepsilon_v$  ошибка  $\varepsilon_m$  в соответствии с (4.29) изменяется вдвое. В третьем случае в 20 раз увеличивается  $\varepsilon_v$ , что происходит из-за резкого увеличения ошибки округлений. Причина заключается в том, что у некоторых пар новой и старой

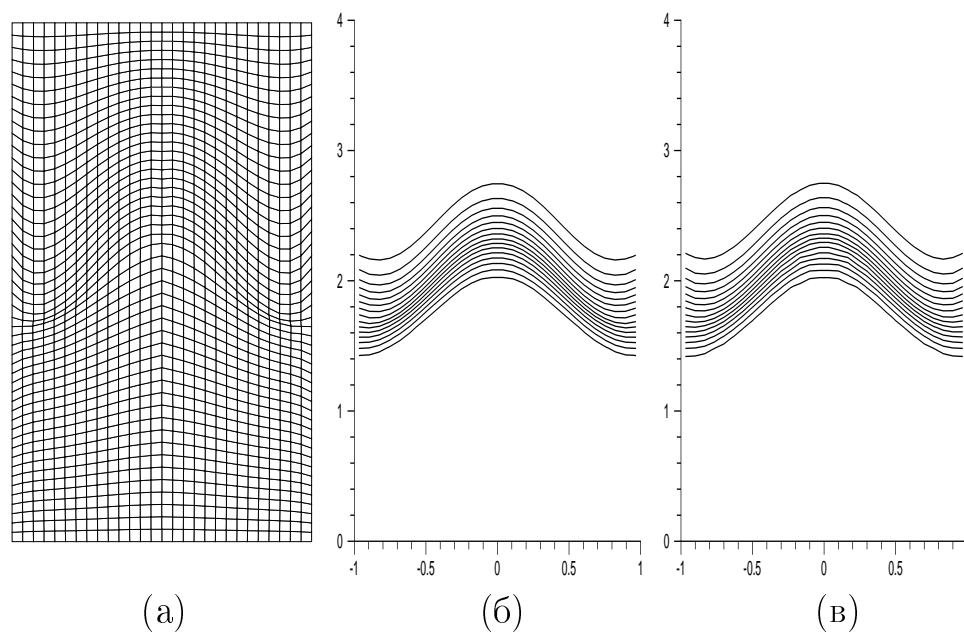


Рис. 4.27. Проекция координатной поверхности  $j=7$  сетки  $\omega_o$  на плоскость  $x, z$  (а); изолинии  $\rho$  в слое  $j=7$  сетки  $\omega_o$  (б) и сетки  $\omega_n$  (в).

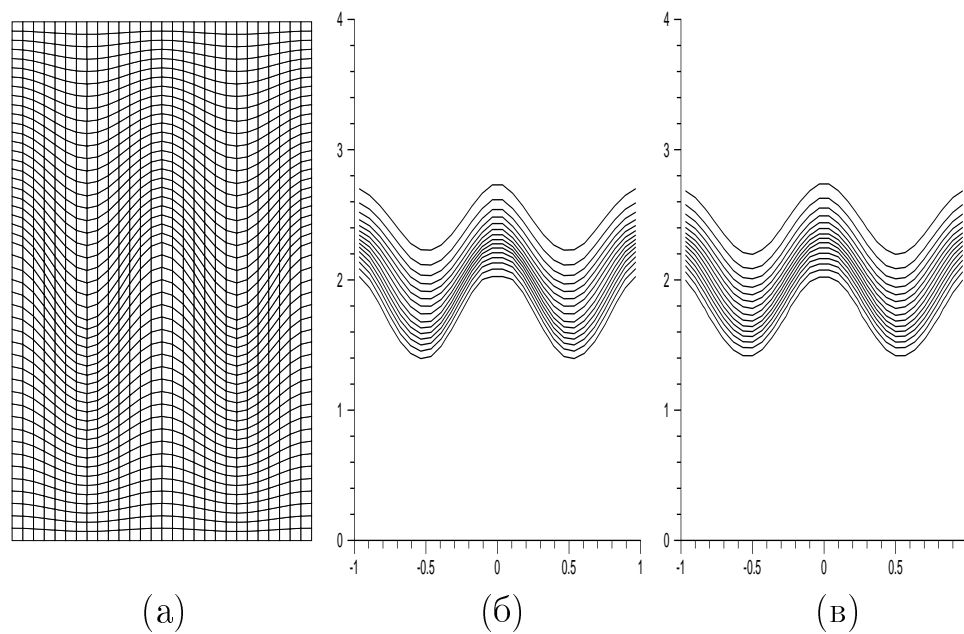


Рис. 4.28. Проекция координатной поверхности  $j=1$  сетки  $\omega_o$  на плоскость  $x, z$  (а); изолинии  $\rho$  в слое  $j=1$  сетки  $\omega_o$  (б) и сетки  $\omega_n$  (в).

Таблица 4.2.

$\Delta z/h_{sc}$	$\varepsilon_m$	$\varepsilon_v$
-0.0035	$1.161 \cdot 10^{-4}$	$1.569 \cdot 10^{-6}$
-0.0070	$2.464 \cdot 10^{-4}$	$1.518 \cdot 10^{-6}$
-0.0140	$5.685 \cdot 10^{-4}$	$3.198 \cdot 10^{-5}$

12-гранных ячеек есть пересекающиеся треугольные грани, которые почти параллельны. Эта ошибка округлений имеет случайный характер и зависит от расположения старой и новой ячеек относительно друг друга. Тем не менее зависимость (4.29) практически сохраняется.  $\varepsilon_m$  выросла немногим более чем в 2 раза, поскольку, как показал первый расчет, здесь систематическая ошибка на два порядка превышает ошибку округлений. Геометрия криволинейной сетки  $\omega_o$  так же искажает зависимость (4.29).

**4.10.2 Оболочка.** Проводится интерполяция со старой многоблочной сетки  $\omega_o:61 \times 61 \times 6$ , изображенной на рис. 4.22, на новую  $\omega_n:61 \times 61 \times 6$  (см. рис. 4.29). Сетка  $\omega_n$  построена О.В.Ушаковой. Плотность  $\rho$  в ячейках сетки  $\omega_o$  задается следующим образом:

$$\rho = \rho_l + (\rho_r - \rho_l) \exp(-\alpha \sin^2 \pi \beta x y z),$$

где  $\rho_l=1$ ,  $\rho_r=2$ ,  $\alpha=4$ ,  $\beta=0.002$ .

Изолинии  $\rho$  в слоях  $k=1$  и  $k=6, i=1, j=1$  сетки  $\omega_o$  изображены на рис. 4.30а и рис. 4.31а соответственно. Параметры расширенной сетки  $\omega_o^{ext}:63 \times 63 \times 8$  и способ ее построения описаны в разделе 4.8 (см. рис. 4.24). Значения плотности в фиктивных ячейках сетки  $\omega_o^{ext}$  экстраполируются гладко, т.е., например, по координатному направлению  $i$

$$\rho_{0jk} = \rho_{1jk} , \quad \rho_{I+2,j,k} = \rho_{I+1,j,k}$$

и точно также по двум другим координатным направлениям  $j$  и  $k$ .

Изолинии  $\rho$  после интерполяции в слоях  $k=1$  и  $k=6, i=1, j=1$  сетки  $\omega_n$  изображены на рис. 4.30б и рис. 4.31б соответственно. Относительные изменения массы и объема составили

$$\varepsilon_m = 8.344 \cdot 10^{-4}, \quad \varepsilon_v = 8.75 \cdot 10^{-6}.$$

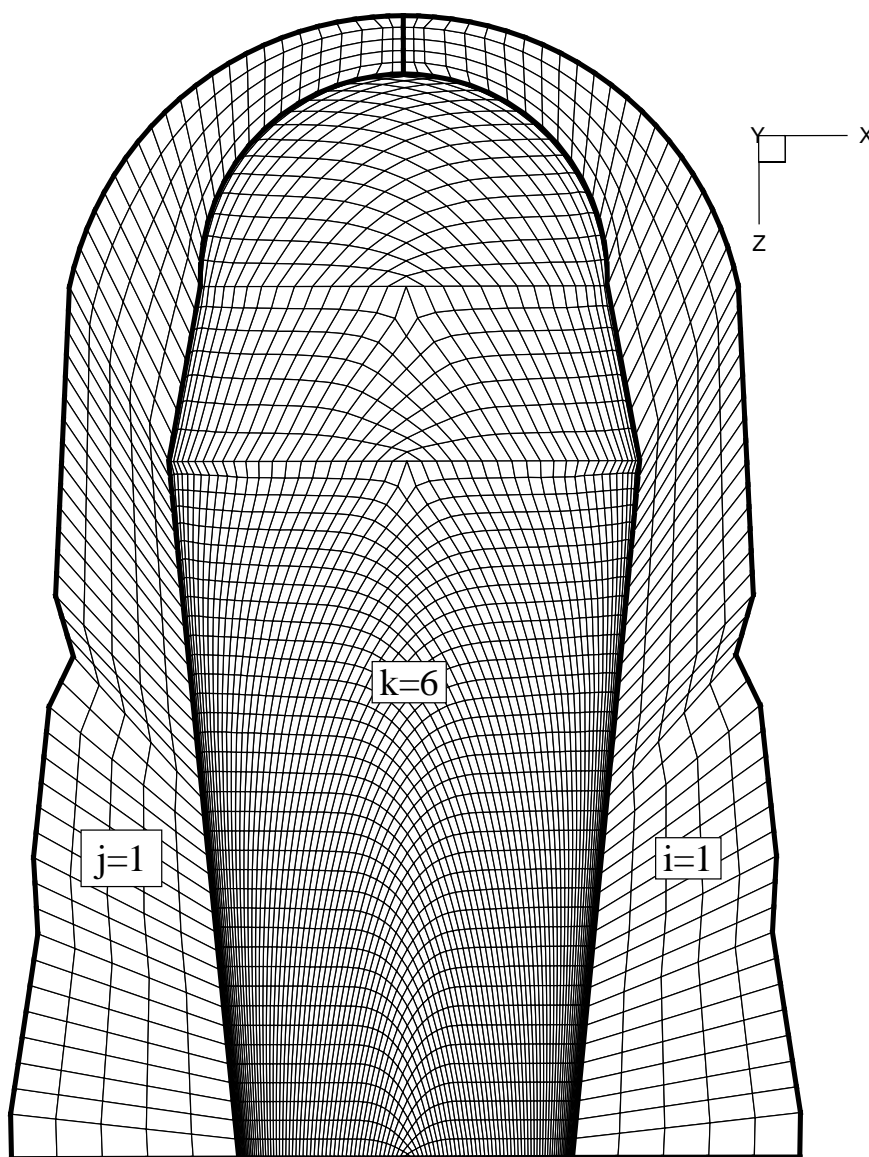


Рис. 4.29. Новая многоблочная сетка  $\omega_n : 61 \times 61 \times 6$ .

Разработанный алгоритм реализован в виде комплекса программ и внедрен в заинтересованную организацию, что позволило провести численное моделирование ряда задач многокомпонентной гидродинамики.

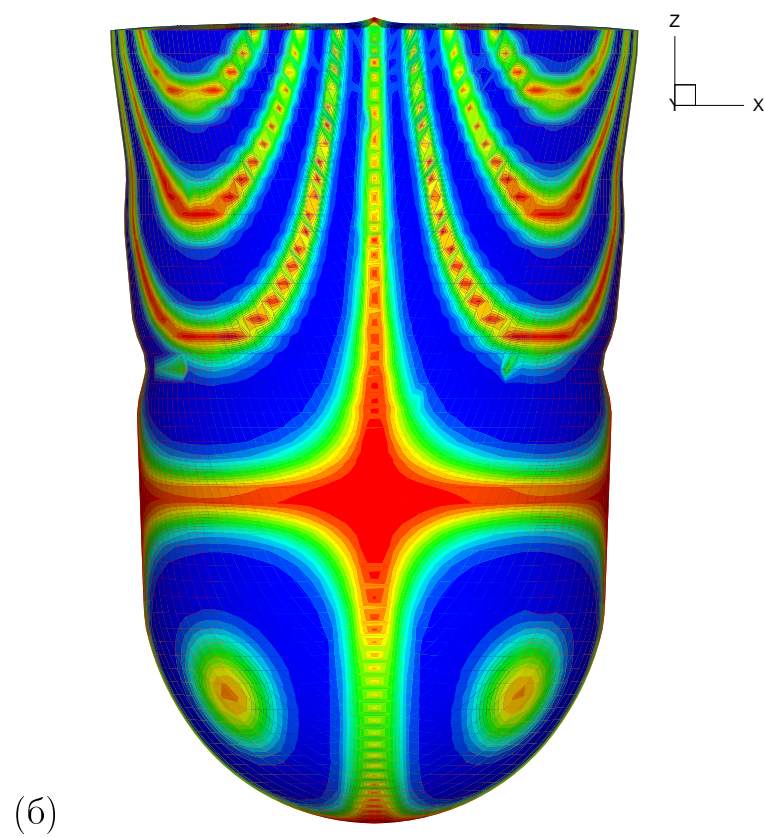
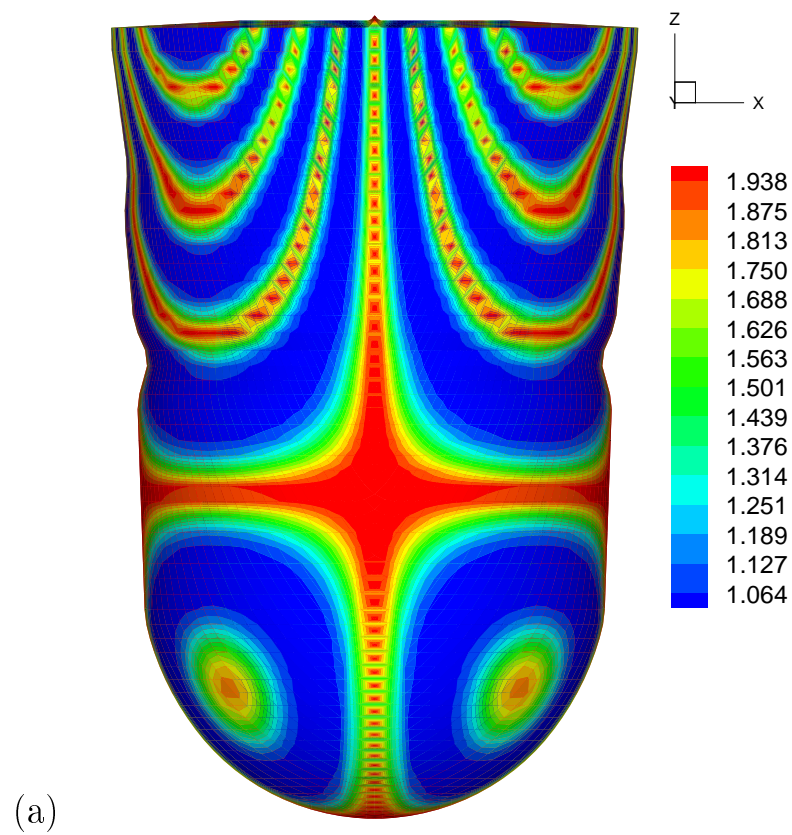


Рис. 4.30. Изолинии  $\rho$  в слое ячеек  $k=1$  сеток  $\omega_o$ (а) и  $\omega_n$ (б).

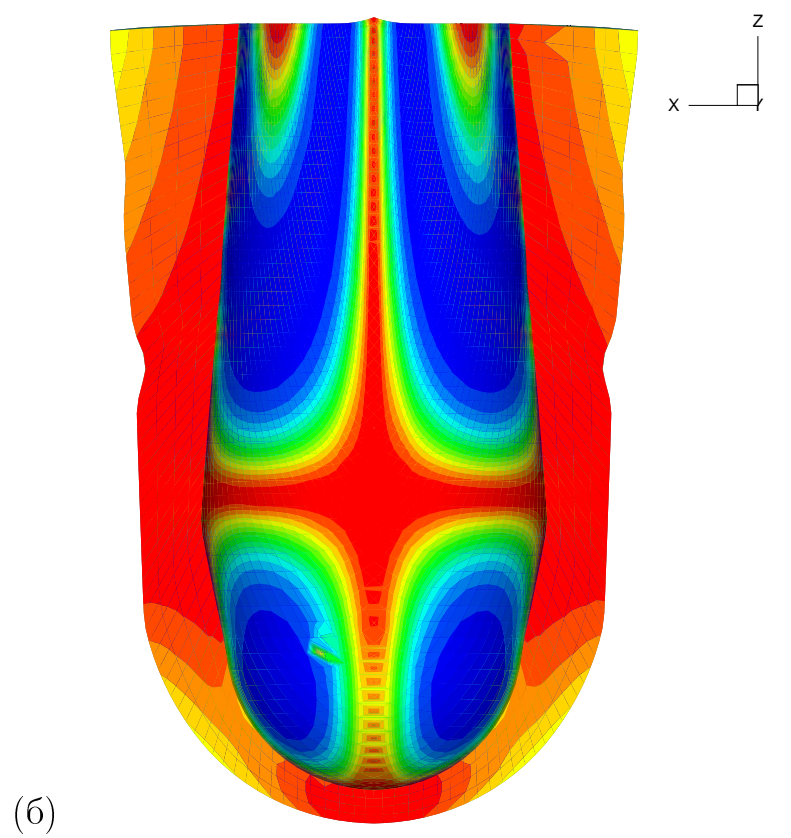
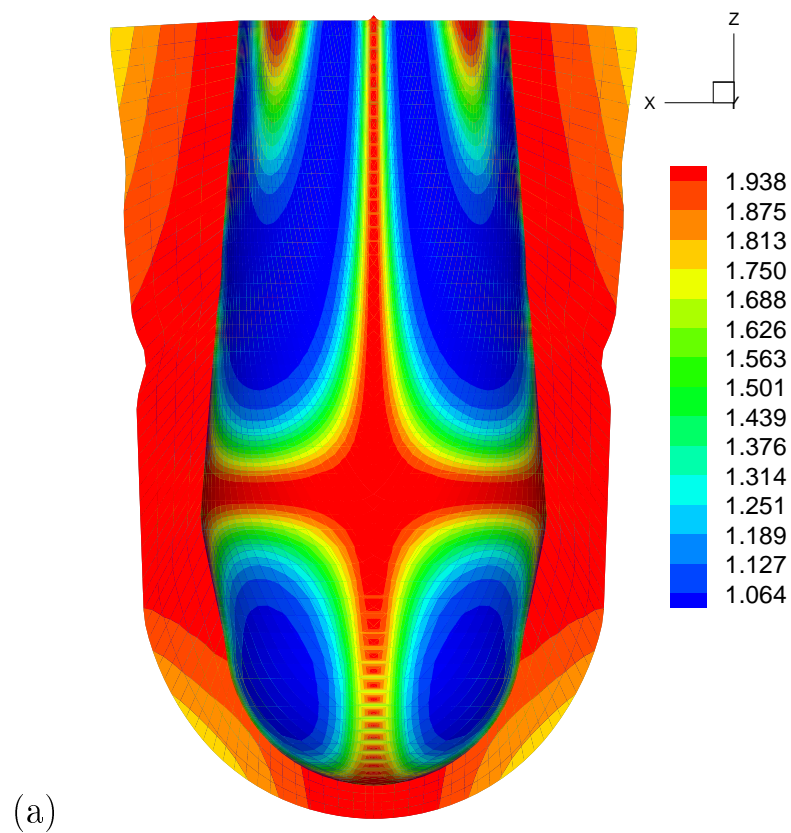


Рис. 4.31. Изолинии  $\rho$  в слоях ячеек  $k=6, i=1, j=1$  сеток  $\omega_o$ (а) и  $\omega_n$ (б).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В диссертации предложены вариационные методы построения гексаэдральных регулярных сеток и адаптивных подвижных сеток в областях со сложной реальной геометрией для математического моделирования физических процессов. Сетка строится с помощью реализации гомеоморфного кусочно-гладкого отображения, являющегося склейкой гомеоморфных гладких отображений каждой ячейки из параметрической области в соответствующую ячейку из физической области. Использование топологических теорем позволило сформулировать условия невырожденности сетки через условия невырожденности для каждой из ее ячеек. Барьерное свойство дискретного функционала обеспечивает невырожденность сетки в процессе минимизации, что позволяет автоматизировать алгоритм, сводя к минимуму ручное управление пользователем процесса построения сетки. Использование управляющей метрики позволяет получить произвольную заданную невырожденную сетку, т.е. осуществлять дополнительный контроль за формой ячеек сетки. В частности строить ортогональные сетки в окрестности границы со сгущением координатных поверхностей. При конструировании многоблочных сеток, он позволяет гладко сопрягать координатные линии сеток соседних блоков.

Метод построения адаптивных сеток является эффективным вычислительным инструментом при моделировании физических явлений, позволяя значительно повысить точность численного решения в локальных областях резкого изменения физических величин без увеличения ресурсов ЭВМ, памяти и быстродействия. Эффективность адаптивных сеток продемонстрирована на примере решения ряда задач о двумерном течении невязкого газа, в том числе при наличии выделения химической энергии, приводящего к возникновению детонационных волн. Для решения такого ряда задач был разработан численный метод расчета на подвижных сетках.

Разработан алгоритм консервативной интерполяции на гексаэдраль-

ных сетках, который, например, может использоваться при решении задач гидродинамики, когда требуется перейти от использования одной разностной сетки к другой. Алгоритм реализован в виде комплекса программ и внедрен в заинтересованную организацию, что позволило провести численное моделирование ряда задач многокомпонентной гидродинамики.

### **Основные результаты диссертации:**

1) Разработан новый вариационный метод построения структурированных сеток в пространственных областях со сложной геометрией.

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 мониторной функции. Анализ показал необходимость замораживания производных от мониторной 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.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Азаренок Б.Н. Об одной реализации схемы С.К.Годунова высокого порядка аппроксимации. М.: ВЦ РАН. 1997. 22 С.
2. 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.
3. Азаренок Б.Н. Описание алгоритма консервативной интерполяции газодинамических полей на гексаэдральных сетках, Итоговый Отчет о НИР "Разработка алгоритмов и программ построения регулярных трехмерных сеток и интерполяции газодинамических полей", Ин-т Математики и Механики УрО РАН, Екатеринбург, 2002. Гл. 4. С. 71–108.
4. Азаренок Б.Н. Алгоритм консервативной интерполяции газодинамических полей на гексаэдральных сетках, Итоговый Отчет о НИР "Расширение возможностей алгоритмов и программ построения регулярных трехмерных сеток и интерполяции газодинамических полей", Ин-т Математики и Механики УрО РАН, Екатеринбург, 2003. Гл. 4. С. 56–78.
5. Азаренок Б.Н. Расчет задачи о взрыве на подвижной адаптивной сетке//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. № 6. С. 856–865.
6. 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.
7. Азаренок Б.Н. О расчете течений газа с детонационными волнами на подвижных адаптивных сетках. Тр. всероссийской конф. "Прикладная геометрия, построение расчетных сеток и высокопроизводительные вычисления". М.: ВЦ РАН. 2004. Т. 1. С. 87–96.
8. 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.

9. Азаренок Б.Н. Об одном вариационном методе построения пространственных сеток. М.: ВЦ РАН. 2006. 51 с.
10. Азаренок Б.Н. Алгоритм консервативной интерполяции на гексаэдральных сетках. М.: ВЦ РАН. 2006. 58 С.
11. Азаренок Б.Н. К вопросу о построении гексаэдральных сеток// Тр. Всероссийской конф. "Численная геометрия, построение расчетных сеток и высокопроизводительные вычисления". М.: ВЦ РАН. 4–7 июля 2006г. С. 100–107.
12. Азаренок Б.Н. О построении подвижных адаптивных пространственных сеток. М.: ВЦ РАН. 2007. 50 с.
13. Азаренок Б.Н. Об одном методе консервативной интерполяции на гексаэдральных сетках//Мат. Моделирование. 2008. Т. 20. № 2. С. 59–75.
14. Азаренок Б.Н. Вариационный метод построения пространственных адаптивных сеток//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2008. Т. 48. № 5. С. 100–119.
15. Азаренок Б.Н. Вариационный метод построения гексаэдральных сеток с управляющей метрикой//Матем. моделирование. 2008. Т. 20. № 9. С. 3–22.
16. 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.
17. Бахвалов Н.С. К оптимизации методов решения краевых задач при наличии пограничного слоя//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1969. Т. 9. № 4. С. 841–859.
18. Белинский П.П., Годунов С.К., Иванов Ю.Б., Яненко И.К. Применение одного класса квазиконформных отображений для построения разностных сеток в областях с криволинейными границами//Журнал вычисл. матем. и матем. физ. 1975. Т. 15. №6. С. 1499–1511.

19. Бобылев Н.А., Иваненко С.А., Казунин А.В. О кусочно-гладких го-  
меоморфных отображениях ограниченных областей и их приложе-  
ниях к теории сеток//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43.  
№ 6. С. 808–817.
20. Богомолов К.Л., Дегтярев Л.М., Тишкин В.Ф. Вариационный ме-  
тод построения высокоаспектных регулярных адаптивных се-  
ток//Матем. Моделирование. 1999. Т. 13. № 5. С. 11–28.
21. Бронина Т.Н., Гасилова И.А., Ушакова О.В. Алгоритмы построения  
трехмерных структурированных сеток//Журнал вычисл. матем. и  
матем. физики. 2003. Т. 43. № 6. С. 875–883.
22. Бронина Т.Н., Ушакова О.В. Расчеты трехмерных структурирован-  
ных сеток в конфигурациях с особенностями//Тр. Всероссийск.  
конф. "Численная геометрия, построение расчетных сеток и вы-  
сокопроизводительные вычисления". М.: ВЦ РАН. 4–7 июля 2006г.  
С. 190–199.
23. Бураго Н.Г., Иваненко С.А. О применении уравнений нелинейной  
термоупругости к генерации адаптивных сеток//Тр. всерос. конф.  
"Прикладная геометрия, построение расчетных сеток и высокопро-  
изводительные вычисления". М.: ВЦ РАН. 2004. Т. 1. С. 107–118.
24. Вабищевич П.Н. Адаптивные сетки составного типа в задачах ма-  
тематической физики//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1989. Т.  
29. № 6. С.902–914.
25. Вабищевич П.Н. Численное решение эллиптических краевых за-  
дач на составных сетках//Матем. моделирование. 1991. Т. 3. № 8.  
С. 112–123.
26. Гаранжа В.А., Капорин И.Е. Регуляризация барьерного вариацион-  
ного метода построения разностных сеток//Ж. вычисл. матем. и  
матем. физ. 1999. Т. 39. № 9. С. 1489–1503.
27. Гильманов А.Н. Методы адаптивных сеток в задачах газовой дина-  
мики. М.: Наука. Физматлит. 2000. 248 с.

28. Глассер Ф., Китаева И.А., Лисейкин В.Д. Контролирование свойств разностных сеток с помощью мониторинной метрики//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2005. Т. 45. № 8. С. 1466–1483.
29. Годунов 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.
30. Годунов 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.
31. Годунов С.К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики//Матем. сб. 1959. Т. 47. Вып. 3. С. 271–306.
32. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.М., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука. 1976.
33. Годунов С.К., Рябенький В.С. Разностные схемы. М.: Наука, 1977.
34. Годунов С.К., Гордиенко В.М., Чумаков .Г.А. Квазиизометрическая параметризация криволинейного четырехугольника и метрика постоянной кривизны. *Siberian Advances in Mathematics*. 1995. Т. 5. № 2. С. 1–20.
35. Годунов С.К. Воспоминания о разностных схемах. Новосибирск: Научн. книга. 1997.
36. Дарьин Н.А., Мажукин В.И. Об одном подходе к построению адаптивных сеток для нестационарных задач//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1988. Т. 28. № 3. С. 454–460.
37. Дарьин Н.А., Мажукин В.И. Математическое моделирование нестационарных двумерных краевых задач на сетках с динамической адаптацией//Мат. моделирование. 1989. Т. 1. № 3. С. 29–43.

38. Дегтярев Л.М., Иванова Т.С. Метод адаптивных сеток в одномерных нестационарных задачах конвекции-диффузии//Дифф. уравнения. 1993. Т. 29. № 7. С. 1179–1192.
39. Дерюгин Ю.Н., Копышев В.П., Прошин М.М., Тихомиров Б.П. К расчету детонации по модели Forest Fire методом Годунова// Вопр. ат. науки и техн. М., 1990. Т. 1. С. 48–52.
40. Зельдович Я.Б., Компанеев А.С. Теория детонации. М.: Гостехиздат. 1955.
41. Емельянов К.В. Применение оптимальных разностных сеток к решению задач с сингулярным возмущением//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1994. Т.34. № 6. С. 936–943.
42. Иваненко С.А., Чарахчян А.А. Криволинейные сетки из выпуклых четырехугольников//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1988. Т 28. № 4. С. 503–514.
43. Иваненко С.А. Адаптивные сетки и сетки на поверхностях//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1993. Т. 33. № 9. С. 1333–1351.
44. Иваненко С.А. Адаптивно-гармонические сетки. М.: ВЦ РАН. 1997.
45. Иваненко С.А., Прокопов Г.П. Методы построения адаптивно-гармонических сеток//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1997. Т. 37. № 6. С. 643–662.
46. Иваненко С.А. Управление формой ячеек в процессе построения сеток//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2000. Т. 40. № 11. С. 1662–1684.
47. Иваненко С.А. Вариационные методы построения сеток//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. № 6. С. 830–844.
48. Иванов М.Я., Корецкий В.В., Курочкина Н.Я. Исследование свойств разностных схем сквозного счета второго порядка аппроксимации//Численные методы механики сплошной среды. 1980. Т. 11. № 2. С. 41–63.

49. Калиткин Н.Н., Альшин А.Б., Альшина Е.А., Рогов Б.В. Вычисления на квазиравномерных сетках. М.: Физматлит. 2005.
50. Колган В.П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечноразностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики//Уч. зап. ЦАГИ. 1972. Т. 3. № 6. С. 68–77.
51. Королева О.Н., Мажукин В.И. Математическое моделирование лазерного плавления и испарения многослойных материалов///Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2007. Т. 47. № 5. С. 887–901.
52. Котеров В.Н. Построение пространственных сеток в многоступенчатых турбинах с использованием вариационного барьерного метода//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2005. Т. 45. № 8. С. 1375–1383.
53. Лисейкин В.Д. О построении структурированных сеток на  $n$ -мерных поверхностях//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1991. Т. 31. № 11. С. 1670–1683.
54. Лисейкин В.Д. Обзор методов построения структурных адаптивных сеток//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1996. Т. 36. № 1. С. 3–41.
55. Мажукин В.В., Самарский А.А., Кастельянос О., Шапранов А.В. Метод динамической адаптации для нестационарных задач с большими градиентами//Матем. Моделирование. 1993. Т4. №4. С.32–56.
56. Михалин В.А. Модификация параболического генератора сеток//Вопросы атомной науки и техники, сер. Мат. модел. физ. проц. № 1-2. 1995. С. 91–94.
57. Прокопов Г.П. О расчете разностных сеток, близких к ортогональным, в областях с криволинейными границами. Препринт № 17. М.: ИПМ АН СССР. 1974.
58. Прокопов Г.П. Некоторые общие вопросы конструирования алгоритмов построения разностных сеток//Вопросы атомной науки и

- техники, сер. Методики и программы числ. реш. задач матем. физ. № 1. 1998. С. 3–13.
59. Прокопов Г.П. Об организации сравнения алгоритмов и программ построения регулярных сеток//ВАНТ, 1989. Сер. Мат. моделир. физ. процессов. Вып. 3. С. 98–108.
  60. Прокопов Г.П. Методология вариационного подхода к построению квазиортогональных сеток.//ВАНТ, 1998. Сер. Мат. моделир. физ. процессов. Вып. 1. С. 37–46.
  61. Прокопов Г.П. Универсальные вариационные функционалы для построения двумерных сеток//Препринт ИПМ РАН. 2001. № 1. 36 С.
  62. Прокопов Г.П. Реализация вариационного подхода к расчету двумерных сеток в нестационарных задачах//Препринт ИПМ РАН. 2005. № 116. 36 С.
  63. Родионов А.В. Монотонная схема второго порядка аппроксимации для сквозного расчета неравновесных течений//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1987. Т.27. № 4. С. 585–593.
  64. Сахабутдинов Ж.М., Петров Г.А., Майгурова С.В. Построение и оптимизация трехмерных криволинейных сеток//Вопр. атомной науки и техники. Сер. Матем. моделир. физических процессов. 1989. Вып. 1. С. 9–18.
  65. Сидоров А.Ф. Об одном алгоритме расчета оптимальных разностных сеток//Тр. Матем. ин-та АН СССР. М. 1966. Т. 74. С. 147–151.
  66. Сидоров А.Ф., Шабашова Т.И. Об одном методе расчета оптимальных разностных сеток для многомерных областей//Числ. методы мех. спл. среды. 1981. Т. 12. № 5. С. 106–124.
  67. Сидоров А.Ф., Ушакова О.В., Хайрулина О.Б. Вариационные методы построения оптимальных сеток//Екатеринбург. Ин-т Матем. и Мех. УрО РАН. 1997. 50 С.



68. Тихонов А.Н., Горбунов А.Д. Оценки погрешности методов Рунге-Кутты и выбор оптимальных сеток//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1964. Т 4. № 2. С.232–242.
69. Ушакова О.В. Условия невырожденности трехмерных ячеек. Формула для объема ячеек//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2001. Т. 41. № 6. С. 881–894.
70. Ушакова О.В. Метод построения трехмерных оптимальных сеток. Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Ин-т Математики и Механики УрО РАН. Екатеринбург. 2007.
71. Ушакова О.В. Классификация шестигранных ячеек//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2008. Т.48. № 8. С. 1–24.
72. Чарахчян А.А. Эллиптический сеточный генератор на базе квази-одномерных сеток//Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1999. Т. 39. № 5. С. 832–837.
73. Черкашин В.А. Численное моделирование детонационных волн//М.: ИПМатем. РАН, 1974.
74. Шокин Ю.И., Лисейкин В.Д., Лебедев А.С., Данаев Н.Т., Китаева И.А. Методы римановой геометрии в задачах построения сеток. Новосибирск: Наука. 2005.
75. Яненко Н.Н., Данаев Н.Т., Лисейкин В.Д. О вариационном методе построения сеток//Числен. методы механ. сплошн. среды. Новосибирск. 1977. Т. 8. № 4. С. 157–163.
76. Akcelik V., Jaramaz B., Ghattas O. Nearly Orthogonal Two-Dimensional Grid Generation with Aspect Ratio Control//J. Comput. Phys. 2001. V. 171. P. 805–821.
77. Advances in Grid Generation. Ushakova O.V. (Ed.), Nova Science Publishers. New York. 2007.
78. Ait-Ali-Yahia D., Habashi W.G., Tam A. A directionally adaptive methodology using an edge-based error estimate on quadrilateral

- grids//International Journal for Numerical Methods in Fluids. 1996. V. 23. P. 673-690.
79. Anderson D.A. Equidistribution schemes, Poisson generators, and adaptive grids//Appl. Math. Comput. 1987. V. 24. P. 211-227.
  80. Anderson D.A. Grid cell volume control with an adaptive grid generator//Appl. Math. Comput. 1990. V. 35. P. 209-217.
  81. Anderson D.A., Munipalli R. An adaptive grid scheme using the boundary element method//J. Comput. Phys. 1996. V. 127. P. 452-463.
  82. Ascoli E.P., Dandy D.S., Leal L.G. On distortion functions for the strong constraint method of numerically generating orthogonal coordinate grids//J. Comput. Phys. 1987. V. 72. P. 513-519.
  83. Altas I., Erhel J., Gupta M.M. High accuracy solution of three-dimensional biharmonic equations//Num. Algorithms. 2002. V. 29. P. 1-19.
  84. Azarenok B.N., Ivanenko S.A. Moving grid technology for finite volume methods in gas dynamics. 2nd Intern. Symposium on Finite Volumes for Complex Applications. Problems and Perspectives. July 19-22. Duisburg. R.Vilsmeier et al (Eds.), Hermes. 1999. P. 795-802.
  85. Azarenok B.N. Adaptive Moving Grids in Supersonic Flow Simulation, Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations. B.K.Soni, J.Haeuser, J.F.Thompson, P.Eiseman, (Eds.). Proceedings of the 7th International Conference, Whistler, British Columbia, Canada, Sept. 2000. P. 629-638.
  86. 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.
  87. 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.

88. Azarenok B.N. Adaptive moving grids in problem of gas dynamics, Grid Generation: New Trends and Applications in Real-World Simulations. Материалы минисимпозиума международной конференции OFEA-2001. 25-29 июня 2001, С.-Петерб. С. 30–44, М.: ВЦ РАН 2001.
89. 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.
90. Azarenok B.N. Application of moving adaptive meshes in hyperbolic problems of gas Dynamics. Построение Расчетных Сеток: Теория и Приложения. Тр. Семинара. 24-28 июня 2002г. М.: ВЦ РАН. С. 169–176.
91. Azarenok B.N., Ivanenko S.A. Moving Adaptive Meshes and Godunov Scheme, in: Proceedings of the 9th International Conference on Hyperbolic Problems. Theory, Numerics, and Applications. California Institute of Technology, Pasadena, California, USA. 2002. P. 169–171.
92. 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.
93. Azarenok B.N., Tang T. Second-order Godunov-type scheme for reactive flow calculations on moving meshes//Report. <http://www.math.ntnu.no/conservation/2003/043.html>
94. Azarenok B.N. First-Order Algorithm of Conservative Interpolation on Hexahedral Meshes. In: Papadopolous P., Soni B., Hauser J., Eisman P., and 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. P. 3–12.
95. 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.

96. Azarenok B.N. A variational hexahedral grid generator with control metric//J. Comp. Phys. V. 218. Issue 2. 2006. P. 720–747.
97. 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.
98. 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.
99. Azarenok B.N. A method of constructing adaptive hexahedral moving grids//J. Comp. Phys. V. 226. Issue 1. 2007. P. 1102–1121.
100. Babuska I., Rheinbold W.C. A-posteriori error estimates for the finite element method//Intern. J. Numer. Meth. Engrg. 1978. V. 12. P. 1597–1615.
101. Baines M.J. Moving Finite Elements. Clarendon Press, Oxford, 1994.
102. Baines M.J. Grid adaptation via node movement//Applied Numer. Mathem. 1998. V. 26. P. 77–96.
103. Baines M.J., Hubbard M.E., Jimack P.K. A moving mesh finite element algorithm for the adaptive solution of time-dependent partial differential equations with moving boundaries//Appl. Numer. Math. 2005. V. 54. P. 450–469.
104. Bell J.B., Shubin G.R., Stephens A.B. A segmentation approach to grid generation using biharmonics//J. Comput. Phys. 1982. V. 47. P. 463–472.
105. Ben-Artzi M. The generalized Riemann problem for reactive flows// J. Comput. Phys. 1989. V. 81. P. 70–101.
106. Bochev P., Liao G., dela Pena G. Analysis and computation of adaptive moving grids by deformation//Numerical Methods for Partial Differential Equations. 1996. V. 12. P. 489.

107. Bourlioux A., Majda A.J., Roytburd V. Theoretical and numerical structure for unstable one-dimensional detonations//SIAM J. Appl. Math. 1991. V. 51. №. 2. P. 303–343.
108. DeBoor C. Good approximation by splines with variable knots II. Conference on numerical solution of differential equations. Lecture Notes in Mathematics. 1973. N 363. Berlin. Springer-Verlag. P. 12–20.
109. Bourlioux A., Majda A.J., Roytburd V. Theoretical and numerical structure for unstable one-dimensional detonations// SIAM J. Appl. Math. 1991. V. 51. №. 2. P. 303–343.
110. Bourlioux A., Majda A.J. Theoretical and numerical structure for unstable two-dimensional detonations//Combustion and Flame. 1992. V. 90. P. 211–229.
111. Brackbill J.U., Saltzman J.S. Adaptive zoning for singular problems in two dimensions//J. Comput. Phys. 1982. V. 46. № 3. P. 342–368.
112. Brackbill J.U. An adaptive grid with directional control//J. Comp. Phys. 1993. V. 108 № 1. P. 38–50.
113. Cao W.M., Huang W.Z., Russel R.D. A study of monitor functions for two dimensional adaptive mesh generation//SIAM J. Sci. Comput. 1999. V. 20. P. 1978–1994.
114. Cao W.M., Huang W.Z., Russel R.D. A moving mesh method based on the geometric conservation law//SIAM J. Sci. Comput. 2002. V. 24. № 1. P. 118–142.
115. Castillo J.E. Discrete variational grid generation//in Mathematical Aspects of Numerical Grid Generation. (Castillo J.E. Ed.). SIAM. Philadelphia. 1991. Chapter 4. P. 35–58.
116. Chakravarty S., Anderson D. Numerical conformal mapping//Math. Comp. 1979. V. 33. P. 953–969.
117. Chen Y., Jiang S. An Optimization-Based Rezoning for ALE Methods//Commun. Comput. Phys. 2008. V. 4. №. 5. P. 1216–1244.

118. Chorin A.J. Random choice solution of hyperbolic systems// J. Comput. Phys. 1976. V. 22. P. 517–531.
119. Chumakov G.A., Chumakov S.G. A Method for the 2-D Quasi-Isometric Regular Grid Generation//J. Comput. Phys. 1998. V. 143. P. 1–28.
120. Clément Ph., Hagmeijer R., Sweers G. On the invertibility of mappings arising in 2D grid generation problems//Numerische Mathematik. 1996. V. 73. P. 37–51.
121. Colella P., Woodward P.R. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks//J. Comput. Phys. 1984. V. 54. № 1. P. 115–173.
122. Colella P., Majda A.J., Roytburd V. Theoretical and numerical structure for reacting shock waves//SIAM J. Sci. Statist. Comput. 1986. V. 7. P. 1059–1080.
123. De Almeida V.F. Domain Deformation Mapping: Application to Variational Mesh Generation//SIAM J. Sci. Comput. 1999. V. 20. № 4. P. 1252–1275.
124. Dukowicz J.K. Conservative rezoning (remapping) for general quadrilateral meshes//J. Comp. Phys. 1984. V. 54. P. 411–424.
125. Dukowicz J.K. Efficient volume computation for three-dimensional hexahedral cells//J. Comp. Phys. 1988. V. 74. P. 493–496.
126. Dukowicz J.K., Padial N.T. REMAP3D: A conservative three-dimensional remapping code. Los Alamos report. 1991.
127. Dulikravich G.S., Kennon S.R. Generation of computational grids using optimization//AIAA Journal. 1986. № 7. P. 1069–1073.
128. Duraiswami R., Prosperetti A. Orthogonal mapping in two dimensions//J. Comput. Phys. 1992. V. 98. P. 254–268.
129. Dvinsky A.S. Adaptive grid generation from harmonic maps on Riemannian manifolds//J. Comput. Phys. 1991. V. 95. P. 450–476.

130. Dwyer H.A., Smooke M.O., Kee R.J. Adaptive grid method for problems in fluid mechanics and heat transfer//AIAA J. 1980. V. 18. P. 1205–1212.
131. Eça L. 2D orthogonal grid generation with boundary point distribution control//J. Comput. Phys. 1996. V. 125. P. 440–453.
132. Eells J.E., Lemaire L. Another report on harmonic maps. Bulletin of the London Mathematical Society. 1988. V. 20. №. 86. P. 387–524.
133. Eiseman P.R. Grid generation for fluid mechanics computations//Ann. Rev. Fluid Mech. 1985. V. 17. P. 487–522.
134. Eiseman P.R. Adaptive grid generation//Comput. Methods in Appl. Mech. and Engineering. 1987. V. 64. P. 321–376.
135. Erpenbeck J.J. Stability of idealized one-reaction detonations//Phys. Fluids. 1964. V. 7. P. 684–696.
136. Fickett W., Wood W.W. Flow calculations for pulsating one-dimensional detonations//Phys. Fluids. 1966. V. 9. P. 903–916.
137. Fickett W., Davis W.C. Detonation. Berkeley. CA: Univ. of California Press. 1979.
138. Frey P.J., George P.L. Mesh Generation: Application to Finite Elements. Hermes. Paris. 2000.
139. Garimella R.V., Shashkov M.J., Vachal P. Untangling of 2D meshes in ALE simulations//J. Comput. Phys. 2004. V. 196. P. 627–644.
140. Godunov S.K., Zhukov V.T., Feodoritova O.V. On one class of quasi-isometric grids. In: O.V. Ushakova (Ed.). Advances in Grid Generation. Nova Science Publishers. New York. 2007. Chapter 2. P. 53–69.
141. Grandy J. Conservative remapping and regions overlays by intersecting arbitrary polyhedra//J. Comp. Phys. 1999. V. 148. P. 433–466.
142. Hagmeijer R. Grid adaptation based on modified anisotropic diffusion equations formulated in the parametric domain//J. Comput. Phys. 1994. V. 115. P. 169–183.

143. Handbook of Grid Generation (Thompson J.F., Soni B.K., Weatherill N.P. Eds.). CRC Press. Boca Raton. FL. 1999.
144. Hawken D.F., Gottlieb J.J., Hansen J.S. Review of some adaptive node-movement techniques in finite-element and finite-difference solutions of partial differential equations//J. Comput. Phys.1991.V.95. P.254–302.
145. Hansen G., Zardecki A., Greening D., Bos R. A finite element method for unstructured grid smoothing//J. Comput. Phys. 2004. V. 194. P. 611–631.
146. Hansen G., Zardecki A., Greening D., Bos R. A finite element method for three-dimensional unstructured grid smoothing//J. Comput. Phys. 2005. V. 202. P. 281–297.
147. Hwang P., Fedkiw R., Merriman B. Karagozian A.R., Osher S.J. Numerical resolution of pulsating detonation waves//Combustion Theory and Modeling. 2000. V. 4. № 3. P. 217–240.
148. 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.
149. Ivanenko S.A. Selected Chapters on Grid Generation and Applications. Dorodnicyn Computing Center of RAS. 2004.
150. Jaquotte 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.
151. Jacquotte O.-P. Grid optimization methods for quality improvement and adaptation//Chapt. 33 in: Handbook of Grid Generation. Thompson J.F. et al (Eds.). CRC Press. Boca Raton. Fl. 1999.
152. Kang I.S., Leal L.G. Orthogonal grid generation in a 2D domain via the boundary integral technique//J. Comput. Phys. 1992. V. 102. P. 78–87.
153. Kaul U.K. New boundary constraints for elliptic systems used in grid generation problems//J. Comput. Phys. 2003. V. 189. P. 476–492.



154. Knabner P., Korotov S., Summ G. Conditions for the invertibility of the isoparametric mapping for hexahedral finite elements//Finite Elements in Analysis and Design. 2003. V. 40. № 2. P. 159–172.
155. Kneser H., Lösung der Aufgabe 41, Jahresber//Deutsche Math.-Verein. 1926. V. 35. P. 123–124.
156. P. Knupp, On the invertibility of the isoparametric map, Comp. Meth. in Appl. Mech. and Engng. 78 (1990) 313–329.
157. Knupp P., Steinberg S. Fundamentals of Grid Generation. CRC Press. Boca Raton. FL. 1993.
158. Knupp P., Luczak R. Truncation error in grid generation: a case study, Numerical Methods for Partial Differential Equations. 1995. V. 11. P. 561–571.
159. Knupp P. Hexahedral and tetrahedral mesh untangling//Engineering with Computers. 2001. V. 17. № 3. P. 261–268.
160. Knupp P., Margolin L.G., Shashkov M.J. Reference Jacobian Optimization-Based Rezone Strategies for Arbitrary Lagrangian Eulerian Methods//J. Comp. Phys. 2002. V. 176. P. 93–128.
161. Knupp P. A method for hexahedral mesh shape optimization//Int. J. Meth. Engng. 2003. V. 58. P. 319–332.
162. Laugesen R.S. Injectivity can fail for higher-dimensional harmonic extensions//Complex Variables. 1996. V. 28. P. 357–369.
163. Langseth J.O., LeVeque R.J. A wave propagation method for 3D hyperbolic conservation laws//J. Comp. Phys. 2000. V. 165. P. 126–166.
164. Lee H.I., Stewart D.S. Calculation of linear detonation instability: one-dimensional instability of plane detonation//J. Fluid Mech. 1990. V. 216. P. 103–132.
165. Lee S.H., Soni B.K. The enhancement of an elliptic grid using appropriate control functions//Applied Mathematics and Computation. 2004. V. 159. P. 809–821.

166. Liao G., Liu H. A note on harmonic maps//Appl. Math. Lett. 1996. V. 9. № 4. P. 95–97.
167. Liao G., Liu F., Pena G.D., Peng D., Osher S. Level-set-based deformation method for adaptive grids//J. Comput. Phys. 2000. V. 159. P. 103–122.
168. Lipnikov K., Shashkov M. The Error-Minimization-Based Strategy for Moving Mesh Methods//Commun. Comput. Phys. 2006. V. 1. № 1. P. 53–80.
169. Liseikin V.D. Grid Generation Methods. Springer-Verlag. New York. 1999.
170. Liseikin V.D. A Computational Differential Geometry Approach to Grid Generation. Springer-Verlag. New York. 2004.
171. Mackenzie J.A., Russell R.D. and Stockie J.M. A moving mesh method for one dimensional hyperbolic conservation law//SIAM J. Sci. Comput. 2000. V. 22. P. 1791–1813.
172. Mastin C.W., Thompson J.F. Quasiconformal mappings and grid generation//SIAM J. Sci. Stat. Comput. 1984. V. 5. № 2. P. 305–310.
173. Miller K., Miller R.N. Moving finite elements. I//SIAM J. Numer. Anal. 1981. V. 18. № 6. P. 1019–1032.
174. Nakamura S. Marching grid generation using parabolic differential equations//Appl. Comput. 1982. V. 10–11. P. 775–786.
175. Nakahashi K., Deiwert G.S. Three-dimensional adaptive grid method//AIAA Journal. 1986. № 6. P. 948–954.
176. Oden J.T., Demkowicz L., Strouboulis T., Devlow P. Adaptive methods for problems in solid and fluid mechanics//in Accuracy Estimates and Adaptive Refinements in Finite Element Computations (eds. I. Babuska et al.), John Willey & Sons Ltd. 1986. P. 249–280.
177. Oran E., Boris J.P. Numerical simulation of reactive flow. New York. Elsevier. 1987.

178. Pember R.B. Numerical methods for hyperbolic conservation laws with stiff relaxation I. Spurious solutions//SIAM J. Appl. Math. 1993. V. 53. P. 1293–1330.
179. Quirk J.J. Godunov-type schemes applied to detonation flows//Combustion in High-Speed Flows. Dordrecht: Kluwer. 1994. P. 575–596.
180. Radó T. Aufgabe 41, Jahresber//Deutsche Math.-Verein. 1926. V. 35. P. 49.
181. Ramshaw J.D. Conservative resoning algorithm for generalized two-dimensional meshes//J. Comp. Phys. 1985. V. 59. P. 193–199.
182. Ryskin G., Leal L.G. Orthogonal mapping//J. Comp. Phys. 1983. V. 50. P. 71–100.
183. Russel R.D., Christiansen J. Adaptive mesh selection strategies for solving boundary value problems//SIAM J. Numer. Anal. 1978. V. 15. № 1. P. 59–80.
184. Schoen R., Yau S.T. On univalent harmonic maps between surfaces//Invent. Math. 1978. V. 44. P. 265–278.
185. Shubin G.R., Stephens A.B., Bell J.B. Three dimensional grid generation using biharmonics//in Numerical Grid Generation, Thompson J.F., ed. North-Holland. New-York. 1982. P. 761–774.
186. Spekrijse S.P. Elliptic generation systems. In Handbook of Grid Generation (Thompson J.F., Soni B.K., Weatherill N.P. Eds.). CRC Press. Boca Raton. FL. 1999. Chapter. 4. P. 4-1–4-48.
187. Sritharan S.S. Mathematical aspects of harmonic grid generation, in Mathematical Aspects of Numerical Grid Generation, J.E. Castillo (Ed.), SIAM, Philadelphia, 1991 (Chapter 10).
188. Steger J.L., Chausse D.S. Generation of body-fitted coordinates using hyperbolic partial differential equations//SIAM J. Sci. Comput. 1980. V. 1. № 4. P. 431–437.

189. Tai C.H., Yin S.L., Soong C.Y. A novel hyperbolic grid generation procedure with inherent adaptive dissipation//J. Comp. Phys. 1995. V. 116. P. 173–179.
190. Tang H.Z., Tang T. Adaptive mesh methods for one- and two-dimensional hyperbolic conservation laws//SIAM J. Numer. Anal. 2003. V. 41. P. 487–515.
191. Tang T. Moving mesh methods for computational fluid dynamics//Contemporary mathematics. 2005. V. 383. P. 141–173.
192. Thompson J.F., Mastin C.W., Thames F. Automatic numerical generation of body-fitted curvilinear coordinate system for field containing any number of arbitrary two-dimensional bodies//J. Comp. Phys. 1974. V. 15. P. 299–319.
193. Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Boundary-fitted coordinate systems for numerical solution of partial differential equations//J. Comp. Phys. 1982. V. 47. № 2. P. 1–108.
194. Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Mastin, W. Numerical Grid Generation. North-Holland, N.Y. etc. 1985. (доступна на <http://www.hpc.msstate.edu/publications/gridbook/>)
195. Thompson J.F. A general three-dimensional elliptic grid generation system on a composite block structure//Comp. Meth. in Appl. Mech. and Engin. 1987. V. 64. P. 377–411.
196. Ton V.T. Improved shock-capturing methods for multicomponent and reacting flows//J. Comput. Phys. 1996. V. 128. P. 237–253.
197. Tu Y., Thompson J.F. Three-dimensional solution-adaptive grid generation on composite configurations//AIAA Journal. 1991. V. 29. № 12. P. 2025–2026.
198. Ushakova O.V. On nondegeneracy of three-dimensional grids//Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics. Suppl. 1. 2004. P. S78–S100.

199. Villamizar V., Rojas O., Mabey J. Generation of curvilinear coordinates on multiply connected regions with boundary singularities//J. Comp. Phys. 2007. V. 223. P. 571–588.
200. White A.B. On selection of equidistributing meshes for two-point boundary-value problems//SIAM J. Numer. Anal. 1979. V. 16. №3. P. 472–502.
201. Winslow A.M. Numerical solution of the quasi-linear Poisson equation in a nonuniform triangle mesh//J. Comput. Phys. 1966. V. 1. P. 149–172.
202. Winslow A.M. Adaptive mesh zoning by the equipotential method. UCID-19062. Lawrence Livermore National Laboratories. University of California. 1981.
203. Zhang Y.X., Jia Y.F., Wang S.S.Y., 2D nearly orthogonal mesh generation with controls on distortion functions//J. Comp. Phys. 2006. V. 218. № 2. P. 549–571.
204. Zhang Y.X., Jia Y.F., Wang S.S.Y., Chan H.C. Boundary treatment for 2D elliptic mesh generation in complex geometries//J. Comp. Phys. 2008. V. 227. № 2. P. 7977–7997.
205. Zienkiewicz O.C., Morgan K. Finite elements and approximation, Wiley, 1983.