

К вопросу расчёта граничных и контактных узлов в
сеточно-характеристическом методе на непериодических
тетраэдральных сетках
On the question of calculation of border and contact nodes with
grid-characteristic method on nonperiodical tetrahedral grids

Аннотация

Сеточно-характеристический метод как средство численного решения волновых уравнений механики сплошной среды был изначально предложен и успешно применяется на периодических гексагональных расчётных сетках. Позднее была предложена его адаптация для непериодических треугольных и тетраэдральных сеток, и на сегодняшний день существует уже значительный опыт таких вычислений. Однако данный подход сталкивается с определёнными трудностями при расчёте функции в точках, принадлежащих свободным и контактным границам на некоторых конфигурациях сеток в областях со сложной геометрией. В статье обсуждаются ограничения метода, вызывающие эти проблемы, и предлагаются некоторые модификации, позволяющие улучшить качество его работы.

Grid-characteristic method for numerical simulation of wave processes in continuum mechanics was initially proposed and successfully applied to periodical hexagonal computational grids. Later, its adaptation to nonperiodical triangle and tetrahedral grids was suggested, and a substantial computational experience is collected today. However, this approach faces some challenges with calculation of border and contact points when applied to various grid configurations in the areas with complex geometry. In the article, the method limitations which cause the problems are considered and some improvements to overcome them are proposed.

1 Введение

По-видимому, наиболее ранней работой, в которой была предложена идея сеточно-характеристического метода (СХМ), является [1]. Первое применение для численного решения волновых уравнений механики сплошной среды в двумерном приближении описано в [3]. С тех пор были достигнуты значительные успехи в использовании СХМ на периодических гексагональных сетках [8–10]: порядок аппроксимации по пространственным переменным достигает четвёртого, благодаря различным методам распараллеливания число расчётных узлов превышает миллиард, что позволяет проводить расчёты высокого разрешения, использование иерархических сеток позволяет моделировать неоднородности масштаба много меньшего, чем масштаб исходной задачи. Однако данный подход рассчитан на применение в областях относительно простой формы.

Идея адаптации метода к непериодическим треугольным расчётным сеткам была высказана ещё в монографии создателей СХМ [2]. Одной из первых работ, подтвердивших идею на практике, была [4]. Основное преимущество такого подхода – отсутствие ограничений на форму области интегрирования. Многие идеи реализации метода на непериодических расчётных сетках, в том числе экономичный алгоритм для граничных и контактных узлов и компактная запись аналитических формул спектрального разложения матриц системы уравнений для моделей упругости и акустики были предложены в [5]. На сегодняшний день имеется значительный опыт применения СХМ на непериодических расчётных сетках в трёхмерном пространстве [6, 7]. На практике используются второй или четвёртый порядок точности по пространственным переменным. Также, как и на гексагональных сетках, метод допускает эффективную параллельную реализацию. На многих относительно простых по меркам непериодических сеток формах областей интегрирования данный подход даёт хорошие результаты. Вместе с тем до сих пор существуют сложные конфигурации расчётных сеток, на которых наблюдаются нефизичные осцилляции решения вплоть до его неустойчивости, особенно в случае контакта двух и более областей интегрирования.

В данной статье алгоритм применения СХМ на непериодических сетках излагается с рассмотрением многих нюансов, возникающих вследствие сложной формы области интегрирования. Учёт этих особенностей при реализации метода, а именно: контроль определителя матриц

граничного корректора и согласованности начальных и граничных условий, обработка случаев нестандартного числа выпавших из области интегрирования характеристик, случайный поворот расчётного базиса на каждом шагу по времени и обработка случаев превышения курантовского шага по времени вследствие вырожденности ячеек сетки позволяет эффективно бороться с возникновением нефизичных осцилляций.

2 Система уравнений

В произвольной D -мерной области ($D = 2, 3$) решается система уравнений в частных производных гиперболического типа:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \mathbf{A}_1 \frac{\partial \vec{u}}{\partial x_1} + \dots + \mathbf{A}_D \frac{\partial \vec{u}}{\partial x_D} = 0. \quad (2.1)$$

Здесь $\{x_1, \dots, x_D\}$ – ортонормированный базис, $\vec{u} = \vec{u}(t, x_1, \dots, x_D)$ – вектор неизвестных размерности N , матрицы \mathbf{A}_i считаются постоянными по времени и пространству. Кроме того, ставятся начальные условия – значения \vec{u} во всей области интегрирования в нулевой момент времени и граничные условия – некоторое количество скалярных условий на \vec{u} на границе области интегрирования в любой момент времени.

Конкретный вид матриц и физический смысл уравнений можно не уточнять. Единственное условие – матрицы должны быть диагонализуемы с полным набором собственных векторов, и для каждого ненулевого собственного значения должно быть равное по модулю с противоположным знаком. Эти требования означают, фактически, то, что система уравнений описывает некий волновой процесс. Количество независимых скалярных граничных условий на \vec{u} равно количеству положительных (отрицательных) собственных значений матрицы \mathbf{A}_i , которое в дальнейшем обозначим за M .

Для более наглядной иллюстрации теоретических вопросов и демонстрации результатов будут использоваться волновые уравнения механики линейно-упругого тела и акустики. В виде (2.1) они выписаны в [5]. Укажем здесь лишь состав переменных и основные свойства.

При описании волновых процессов в упругом теле используются значения компонент скорости \vec{v} и тензора напряжений σ . В трёхмерном пространстве это составляет $N = 9$ независимых переменных:

$$\vec{u} = (v_x, v_y, v_z, \sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz}, \sigma_{zz})^T. \quad (2.2)$$

Число положительных (отрицательных) собственных значений матрицы \mathbf{A}_i в этом случае составляет $M = 3$, что соответствует одной продольной волне сжатия-разрежения (р-волна) и двум взаимно перпендикулярным поперечным волнам сдвига (s-волны).

В двумерном приближении число независимых переменных сокращается до $N = 5$:

$$\vec{u} = (v_x, v_y, \sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{yy})^T, \quad (2.3)$$

а $M = 2$ – одна р-волна и одна s-волна.

При описании волновых процессов в модели акустики в пространства размерности D число переменных в уравнении $N = D + 1$:

$$\vec{u} = (v_1, \dots, v_D, p)^T. \quad (2.4)$$

Здесь p – давление, и $M = 1$ – поперечные волны отсутствуют.

3 Численный метод

3.1 Неструктурированная расчётная сетка

Для возможности применения метода к областям произвольной формы используются треугольные и тетраэдральные неструктурированные расчётные сетки. Их построение осуществляется в основном с использованием библиотеки CGAL [14]. Значения искомой функции хранятся в узлах сетки.

Подразумевается, что внутри каждой области интегрирования матрицы \mathbf{A}_i постоянны. Для моделирования неоднородностей явно выделяются дополнительные области интегрирования, между которыми рассчитывается контакт – взаимозависимые граничные условия для каждой из контактирующих областей.

3.2 Расщепление по направлениям

Поскольку классический СХМ [2] рассматривает зависимость только от одной пространственной переменной, для численного решения (2.1) необходимо перейти к решению одномерных систем уравнений – так называемое расщепление по направлениям:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \mathbf{A}_i \frac{\partial \vec{u}}{\partial \xi_i} = 0, \quad i = 1 \dots D. \quad (3.1)$$

Здесь под $\{\xi_i\}$ подразумевается произвольный ортонормированный базис, не обязательно совпадающий с $\{x_i\}$ (вид матриц \mathbf{A}_i , конечно, меняется при смене базиса).

В данной работе используется предложенная в [5] экономичная по памяти и вычислительным ресурсам схема расщепления, обладающая при этом близким ко второму порядку точности по времени. Полный шаг по времени τ решения многомерного уравнения (2.1) состоит из D последовательных ступеней. Каждая последовательная i -я ступень заключается в выполнении численного шага по времени для i -го уравнения (3.1) на то же время τ . В качестве значений старого временного слоя для i -й ступени берётся результат выполнения $(i - 1)$ -й, а результат выполнения последней ступени является решением многомерного уравнения на новом временном слое.

3.3 Решение одномерного уравнения

По условию матрицы \mathbf{A}_i диагонализуются с полным набором собственных векторов:

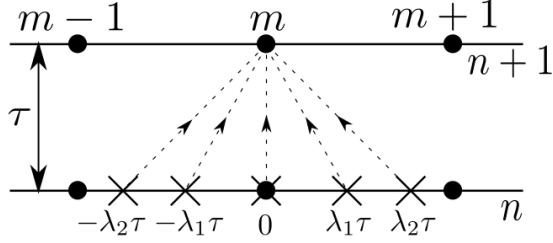
$$\mathbf{A} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{U}. \quad (3.2)$$

Здесь \mathbf{U}^{-1} – матрица собственных векторов, $\mathbf{\Lambda}$ – диагональная матрица собственных значений, \mathbf{U} – матрица собственных строк. Умножив (3.1) слева на \mathbf{U} , внося постоянную матрицу \mathbf{U} под знак дифференциала и обозначая $\vec{r} = \mathbf{U} \vec{u}$ – инварианты Римана, получаем:

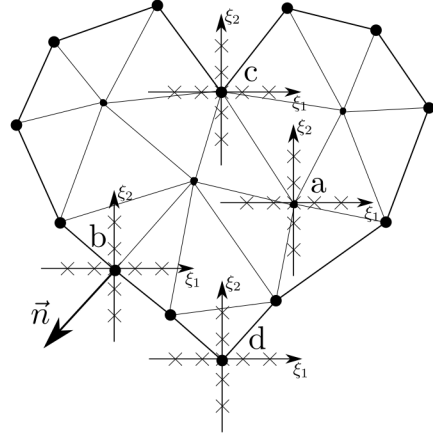
$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} + \mathbf{\Lambda} \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} = 0. \quad (3.3)$$

В новых переменных система распалась на независимые уравнения переноса. Их численное решение заключается в интерполяции значения функции на предыдущем временном слое в точке, где характеристика из узла на новом временном слое пересекает предыдущий. После переноса инвариантов с предыдущего временного слоя на новый производится обратная замена переменных $\vec{u} = \mathbf{U}^{-1} \vec{r}$.

Для полностью одномерного случая сказанное проиллюстрировано на рисунке 1а.



(a) Одномерный случай



(b) Треугольная сетка (2D)

Рис. 1. Основная идея СХМ

Для многомерной (для наглядности $D = 2$) неструктурированной расчётной сетки идея расщепления по направлениям и переноса значений инвариантов Римана из точек пересечения их характеристик со старым временным слоем проиллюстрирована на рисунке 1b.

Схемы интерполяции высоких порядков на треугольных неперiodических сетках были предложены в [4], в настоящее время обобщены на тетраэдральные сетки. В данной работе используется альтернативная схема интерполяции второго порядка точности, предложенная в [13].

3.4 Метод на границе области интегрирования

Описанный выше алгоритм пригоден для внутренних узлов, когда все выходящие из узла на новом временном слое характеристики пересекают предыдущий временной слой внутри области интегрирования, что соответствует случаю а) на рисунке 1b.

Для граничных и контактных узлов возможна ситуация, когда часть выпущенных из узла характеристик являются внешними, то есть пересекают предыдущий временной слой вне области интегрирования – случаи b), c) и d) на рисунке 1b. В таких случаях применяется модификация алгоритма, называемая коррекцией внешними волнами, впервые предложенная в [5].

Поскольку часть характеристик выпадает за пределы области интегрирования и значения соответствующих им инвариантов Римана не могут быть интерполированы и перенесены с предыдущего временного слоя, происходит, фактически, потеря информации. Однако в большинстве случаев эта информация может и должна быть восполнена из заданных граничных и контактных условий.

Рассмотрим сначала случай b), когда число внешних характеристик равно числу независимых скалярных граничных условий M .

3.4.1 Граница области интегрирования

3.4.1.1 Общая форма записи граничного условия. Произвольное линейное граничное условие для произвольной модели в общем виде записывается:

$$\mathbf{B} \cdot \vec{u} = \vec{b}. \quad (3.4)$$

Здесь \mathbf{B} – матрица размерности $M \times N$, \vec{b} – вектор размерности M , определяющие собой конкретный вид граничного условия.

Рассмотрим для примера условие фиксированного напряжения \vec{f} , приложенного к полупространству с внешней нормалью \vec{n} в модели упругого тела:

$$\sigma \cdot \vec{n} = \vec{f}. \quad (3.5)$$

Примем для упрощения формул, что значение \vec{f} указано в глобальном базисе, тогда (3.5) в форме (3.4) для трёхмерного случая запишется в виде:

$$\vec{b} = \vec{f}, \quad (3.6)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & n_x & n_y & n_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & n_x & 0 & n_y & n_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & n_x & 0 & n_y & n_z \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Другой пример – условие фиксированной нормальной скорости v_n в модели акустики:

$$\vec{b} = (v_n), \quad (3.8)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \vec{n}^T & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

3.4.1.2 Алгоритм расчёта граничных узлов. На первом этапе делается расчёт граничных узлов по алгоритму для внутренних, при этом все инварианты Римана, соответствующие внешним характеристикам, приравниваются к нулю. Получается \vec{u}^{inner} . Затем выполняется граничная коррекция – добавление к результату такой линейной комбинации внешних волн, которая обеспечит выполнение граничного условия (3.4):

$$\mathbf{B} \cdot (\vec{u}^{inner} + \mathbf{\Omega} \cdot \vec{\alpha}) = \vec{b}. \quad (3.10)$$

Здесь $\mathbf{\Omega}$ – матрица размерности $N \times M$, в столбцах которой стоят собственные векторы матрицы \mathbf{A} , соответствующие внешним характеристикам. По физическому смыслу эти столбцы можно назвать внешними волнами, то есть фиктивными волнами, как бы пришедшими извне области интегрирования. Вектор $\vec{\alpha}$ размерности M – это вектор коэффициентов линейной комбинации, которые нужно определить.

К примеру, если направление расчёта вдоль оси x , то для трёхмерной модели упругого тела матрица $\mathbf{\Omega}$ – это три однонаправленных волны вдоль оси x :

$$\mathbf{\Omega}^T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & \frac{\lambda+2\mu}{c_p} & 0 & 0 & \frac{\lambda}{c_p} & 0 & \frac{\lambda}{c_p} \\ 0 & -1 & 0 & 0 & \frac{\mu}{c_s} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & \frac{\mu}{c_s} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Здесь первая строка (столбец матрицы $\mathbf{\Omega}$) – р-волна, далее – две s-волны, λ, μ – параметры Ламе, $c_p = \sqrt{\frac{\lambda+2\mu}{\rho}}$, $c_s = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$ – скорости продольной и поперечной волн.

Другой пример: для модели акустики матрица $\mathbf{\Omega}$ состоит всего из одного столбца – продольной волны вдоль направления расчёта. Если ввести обозначения \vec{l} – единичный вектор вдоль направления расчёта, c – скорость продольной волны, ρ – плотность, то она запишется:

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} \vec{l} \\ c\rho \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Для определения $\vec{\alpha}$ необходимо решить СЛАУ с матрицей $\mathbf{B}\mathbf{\Omega}$ размерностью $M \times M$:

$$\mathbf{B}\mathbf{\Omega} \cdot \vec{\alpha} = \vec{b} - \mathbf{B} \cdot \vec{u}^{inner}. \quad (3.13)$$

После определения коэффициентов линейной комбинации производится собственно коррекция, обеспечивающая выполнение граничных условий:

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^{inner} + \mathbf{\Omega} \cdot \vec{\alpha} \quad (3.14)$$

Стоит отметить, что предложенный метод не закладывается на топологию ячейки сетки, то есть может быть применён, к примеру, и к октаэдральным расчётным сеткам.

3.4.2 Контакт двух областей интегрирования

3.4.2.1 Общая форма записи контактного условия. Запись произвольного линейного контактного условия для произвольных моделей:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{1A} \cdot \vec{u}_A &= \mathbf{B}_{1B} \cdot \vec{u}_B, \\ \mathbf{B}_{2A} \cdot \vec{u}_A &= \mathbf{B}_{2B} \cdot \vec{u}_B. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Здесь обозначения те же, что и в (3.4).

Для примера рассмотрим контактное условие полного слияния двух упругих тел. Оно означает в точке контакта равенство скоростей:

$$\vec{v}_A = \vec{v}_B \quad (3.16)$$

и равенство сил, действующих на контактную поверхность:

$$\sigma_A \cdot \vec{n} = \sigma_B \cdot \vec{n}, \quad (3.17)$$

где \vec{n} – нормаль к поверхности контакта. Все формулы записываются в глобальном базисе. Это означает, что в качестве \mathbf{B}_{2A} и \mathbf{B}_{2B} нужно взять матрицы для граничного условия фиксированного напряжения в глобальном базисе (3.7), а в качестве \mathbf{B}_{1A} и \mathbf{B}_{1B} – матрицы для граничного условия фиксированной скорости в глобальном базисе, которые здесь для краткости приводить не будем.

Другой пример – скольжение двух тел в модели акустики – означает равенство компонент скорости вдоль направления контакта:

$$\vec{v}_A \cdot \vec{n} = \vec{v}_B \cdot \vec{n} \quad (3.18)$$

и равенство давлений:

$$p_A = p_B. \quad (3.19)$$

Здесь также в качестве матриц \mathbf{B} из (3.15) используются матрицы для линейных граничных условий, в том числе (3.9).

3.4.2.2 Алгоритм расчёта контактных узлов. При контакте двух областей интегрирования характеристика из узла одной области может попадать в другую область. Тогда она также считается внешней для своей области. Все действия аналогичны расчёту граничных узлов. Сначала делается расчёт контактных узлов в обоих телах по алгоритму для внутренних. Получается \vec{u}_A^{inner} и \vec{u}_B^{inner} . Затем выполняется контактная коррекция – добавление в обоих узлах такой линейной комбинации внешних волн, которая обеспечит выполнение контактного условия (3.15).

Распишем сообразно сказанному условие (3.15):

$$\mathbf{B}_{1A} \cdot (\vec{u}_A^{inner} + \mathbf{\Omega}_A \cdot \vec{\alpha}_A) = \mathbf{B}_{1B} \cdot (\vec{u}_B^{inner} + \mathbf{\Omega}_B \cdot \vec{\alpha}_B), \quad (3.20)$$

$$\mathbf{B}_{2A} \cdot (\vec{u}_A^{inner} + \mathbf{\Omega}_A \cdot \vec{\alpha}_A) = \mathbf{B}_{2B} \cdot (\vec{u}_B^{inner} + \mathbf{\Omega}_B \cdot \vec{\alpha}_B). \quad (3.21)$$

Раскроем скобки и сделаем переобозначения:

$$\mathbf{R} = (\mathbf{B}_{1A}\mathbf{\Omega}_A)^{-1}, \quad (3.22)$$

$$\vec{p} = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{B}_{1B} \cdot \vec{u}_B^{inner} - \mathbf{B}_{1A} \cdot \vec{u}_A^{inner}), \quad (3.23)$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{B}_{1B}\mathbf{\Omega}_B). \quad (3.24)$$

Тогда:

$$\vec{\alpha}_A = \vec{p} + \mathbf{Q} \cdot \vec{\alpha}_B, \quad (3.25)$$

$$\mathbf{B}_{2A} \cdot \vec{u}_A^{inner} + (\mathbf{B}_{2A}\mathbf{\Omega}_A) \cdot \vec{p} + (\mathbf{B}_{2A}\mathbf{\Omega}_A) \cdot \mathbf{Q} \cdot \vec{\alpha}_B = \mathbf{B}_{2B} \cdot \vec{u}_B^{inner} + (\mathbf{B}_{2B}\mathbf{\Omega}_B) \cdot \vec{\alpha}_B. \quad (3.26)$$

Получим СЛАУ на $\vec{\alpha}_B$:

$$\left[(\mathbf{B}_{2B}\mathbf{\Omega}_B) - (\mathbf{B}_{2A}\mathbf{\Omega}_A) \cdot \mathbf{Q} \right] \cdot \vec{\alpha}_B = (\mathbf{B}_{2A}\mathbf{\Omega}_A) \cdot \vec{p} + \mathbf{B}_{2A} \cdot \vec{u}_A^{inner} - \mathbf{B}_{2B} \cdot \vec{u}_B^{inner}. \quad (3.27)$$

Решив систему на $\vec{\alpha}_B$, находим $\vec{\alpha}_A$ из (3.25). После чего производится собственно коррекция, обеспечивающая выполнение контактных условий:

$$\vec{u}_A^{n+1} = \vec{u}_A^{inner} + \mathbf{\Omega}_A \cdot \vec{\alpha}_A, \quad (3.28)$$

$$\vec{u}_B^{n+1} = \vec{u}_B^{inner} + \mathbf{\Omega}_B \cdot \vec{\alpha}_B \quad (3.29)$$

3.5 Вырождение матриц СЛАУ граничного и контактного корректора

3.5.1 Описание проблемы

Итак, расчёт граничных узлов по алгоритму 3.4.1.2 требует решения СЛАУ 3.13, расчёт контактных узлов по алгоритму 3.4.2.2 требует решения СЛАУ 3.27 и обращения матрицы 3.22. Размерность матриц во все трёх случаях равна $M \times M$, то есть относительно небольшая: для уравнений упругости в D -мерном пространстве размерность $D \times D$, что даёт возможность использовать правило Крамера и другие аналитические формулы, для уравнений акустики размерность 1×1 .

Однако это не снимает вопрос о возможности вырождения этих матриц. Для иллюстрации рассмотрим расчёт граничного узла в трёхмерной модели упругого тела при условии фиксированного напряжения на границе. Все матрицы, необходимые для расчёта по формуле 3.13, уже выписаны: матрица \mathbf{B} в 3.7 и матрица $\mathbf{\Omega}$ в 3.11. Остаётся их перемножить:

$$\mathbf{B}\mathbf{\Omega} = \frac{1}{c_1 c_2} \begin{pmatrix} (\lambda + 2\mu)n_x c_2 & \mu n_y c_1 & \mu n_z c_1 \\ \lambda n_y c_2 & \mu n_x c_1 & 0 \\ \lambda n_z c_2 & 0 & \mu n_x c_1 \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

и взять определитель:

$$\det(\mathbf{B}\mathbf{\Omega}) = \frac{\mu^2}{c_1 c_2^2} \cdot n_x \cdot (2(\lambda + \mu)n_x^2 - \lambda). \quad (3.31)$$

Введя обозначение ν – коэффициент Пуассона, из условия $\det(\mathbf{B}\mathbf{\Omega}) = 0$ получаем:

$$\begin{cases} n_x = 0 \\ n_x^2 = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)} \equiv \nu < \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (3.32)$$

Здесь направление расчёта выбиралось вдоль оси x , в то время как нормаль к границе была произвольной. Очевидно, что для обобщения условия вырождения для произвольного направления

расчёта \vec{l} нужно n_x заменить на $(\vec{n} \cdot \vec{l})$.

Аналогично для модели акустики и граничного условия фиксированной нормальной скорости с учётом 3.9 и 3.12 получаем:

$$\det(\mathbf{B}\Omega) = \mathbf{B}\Omega = (\vec{n} \cdot \vec{l}). \quad (3.33)$$

Условия вырождения матриц СЛАУ граничного корректора для обеих моделей и двух типов граничных условий сведены в таблицу:

Модель	Фиксированная сила	Фиксированная скорость
Упругость 3D	$(\vec{n} \cdot \vec{l}) = 0$ $(\vec{n} \cdot \vec{l})^2 = \nu$	-
Упругость 2D	$(\vec{n} \cdot \vec{l})^2 = \nu$	-
Акустика	-	$(\vec{n} \cdot \vec{l}) = 0$

Можно сделать следующие выводы. Во-первых, вырождение матриц граничного и контактного корректоров возможно. Во-вторых, оно далеко не всегда связано с перпендикулярностью направления расчёта и нормали, как это могло бы показаться. В-третьих, можно отметить, что вырождение возможно только тогда, когда в запись граничного условия так или иначе входит значение нормали.

Игнорирование возможности вырождения матриц граничного и контактного корректоров приводит к неустойчивости метода: значения искомой функции \vec{u} вблизи границы области интегрирования неограниченно возрастают. Для стабилизации необходимы дополнительные усилия.

3.5.2 Контроль определителя и согласованности начальных и граничных условий

Первое очевидное действие – проверка определителя матрицы на близость к нулю. Для двумерной и трёхмерной моделей упругости приближение к нулю определителя сопровождается резким ростом числа обусловленности, и с определённого момента точность решения СЛАУ становится неприемлемой. Для модели акустики, где размерность “матрицы” 1×1 , понятие числа обусловленности теряет смысл, но, тем не менее, необходимо отсеять возможность деления на ноль.

Итак, при достаточной близости детерминанта к нулю нельзя производить коррекцию по изложенной схеме. Означает ли это, что, если в таких случаях вообще не производить коррекцию, граничные или контактные условия по итогам ступени расчёта не будут выполнены?

Когда в 3.5.1 изучается вырожденность матрицы граничного корректора, фактически ищется ответ на вопрос, насколько линейная комбинация внешних волн может повлиять на выполнение граничного условия. Заметим, что “внешние” волны – это однонаправленные волны вдоль направления расчёта, характеристики которых приходят в расчётный узел извне области интегрирования. В противовес им можно выделить “внутренние” – те, что приходят изнутри области. Также заметим, что при выкладках в 3.5.1 тот факт, что комбинация волн является именно “внешней”, а не “внутренней”, не имеет значения. Отсюда ясно, что обусловленность матрицы граничного корректора показывает не только возможность влияния комбинации внешних волн на выполнение граничного условия, но и вообще возможность любых волн вдоль этого направления изменять граничные условия данного типа.

Другими словами, если вдоль данного направления с помощью внешних волн невозможно повлиять на выполнение или невыполнение граничных условий, то и внутренние волны тоже не могут их нарушить. А значит, если граничные условия в узле уже были выполнены до внутреннего этапа расчёта, то они останутся выполненными и после него, и граничная коррекция не нужна.

Отсюда очевидна необходимая модификация метода. Перед внутренним этапом расчёта граничного узла значения вектора решения \vec{u} в нём сразу “поправляются” так, чтобы выполнялись граничные условия. Причём если граничные условия зависят от времени, то выставляются значения, соответствующие новому, а не текущему, временному слою. Это обеспечивает условие

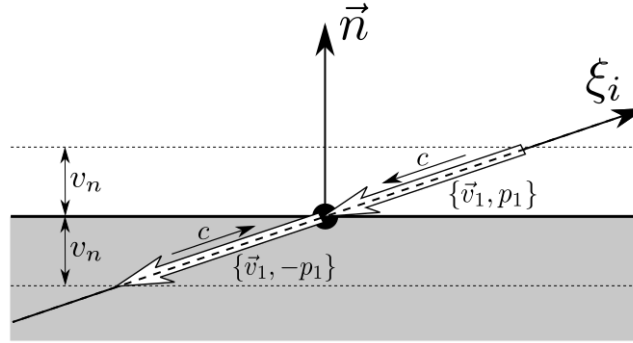


Рис. 2. К пояснению возможности влияния волн вдоль направления расчёта на выполнение граничных условий

устойчивости метода на границе: на каждой ступени расчёта граничная коррекция производится лишь в том объёме, в котором внутренний этап этой ступени мог нарушить выполнение граничных условий.

Осталось уточнить слово “поправляются”, специально использованное, чтобы отличить эту процедуру от граничной коррекции. Поскольку число независимых скалярных граничных условий на вектор решения M всегда меньше его размерности N , поменять его значения так, чтобы эти условия удовлетворялись, можно бесконечным числом способов, в том числе той же граничной коррекцией. В данном случае делается следующее. Граничные и контактные условия, как правило, определяют некоторые значения вектора решения \vec{u} в локальном базисе, связанном с граничной или контактной поверхностью. Это может быть, к примеру, нормальная к границе области компонента скорости или вектор напряжения, действующего на граничную поверхность. Поэтому наиболее логичным представляется перевести значения \vec{u} в локальный базис, после чего выставить необходимые значения согласно граничным условиям, а затем перейти обратно в глобальный базис. Из всех прочих эта процедура оказывает минимальное влияние на значения вектора решения \vec{u} .

На рисунке 2 проведённые рассуждения иллюстрируются для уравнений акустики и граничного условия фиксированной нормальной скорости v_n . Вдоль оси ξ_i с точностью до множителя могут распространяться только два типа волн: $\{\vec{v}_1, -p_1\}$ – сонаправленная с осью ξ_i и $\{\vec{v}_1, p_1\}$ – против оси ξ_i . Возможность этих волн повлиять на нормальную компоненту скорости тем меньше, чем ближе угол между нормалью и направлением расчёта к $\pi/2$, что и отражает условие 3.33. Поэтому чем меньше $|(\vec{n} \cdot \vec{l})|$, тем большая амплитуда внешней волны требуется для удовлетворения граничного условия $(\vec{v} \cdot \vec{n}) = v_n$. С другой стороны, волна, пришедшая изнутри, влияет на граничное условие не сильнее внешней. Поэтому, если ещё до внутреннего этапа расчёта значение нормальной скорости в узле было выставлено согласно граничным условиям, то и величина граничной коррекции будет адекватна величине изменения граничного условия на внутреннем этапе расчёта.

3.6 Сложные случаи на границе областей интегрирования

В случае b) на рисунке 1b количество внешних характеристик для граничного узла равняется количеству независимых скалярных граничных условий. Это означает, с одной стороны, что вся потерянная в результате выпада характеристик из области интегрирования информация компенсируется за счёт граничных условий, а с другой, что имеется достаточное количество внешних волн для выполнения граничной коррекции. При ступени расчёта вдоль направления ξ_1 варианты c) и d) существенно отличаются от b) тем, что в c) отсутствуют внешние волны, с помощью которых была бы возможна граничная коррекция, а в d), напротив, число внешних

волн превышает число граничных условий, что приводит к неизбежной потере информации. В этих случаях имеет смысл говорить не о “внешних” и “внутренних” волнах, а о “правых” и “левых”, в зависимости от того, с какой стороны волны приходят в узел вдоль направления расчёта.

Численные эксперименты показали, что для обоих вариантов с) и d) устойчивой является следующая модификация метода. Сначала по общему для всех узлов алгоритму “подправляются” под граничные условия значения вектора решения и делается внутренний этап расчёта. Затем рассчитываются два варианта граничной коррекции: с помощью “правых” и с помощью “левых” групп волн. После чего берётся их полусумма.

Можно было бы возразить, что в варианте с) нет выпавших вне области характеристик, поэтому коррекцию вообще проводить не нужно. Однако граничное условие на внутреннем этапе расчёта могло быть нарушено, а следовательно, коррекция необходима, иначе не будут согласованы граничные и начальные условия на следующей ступени расчёта.

Аналогичные сложности и способы их преодоления существуют и при расчёте контактов двух областей.

Отметим, что предложенные решения являются на самом деле довольно искусственными, и не решают упомянутой проблемы потери информации. На практике это оборачивается тем, что на существенно неструктурированных расчётных сетках в местах, где реализуются описанные сложности, возникают нефизичные возмущения, не убывающие по времени. И это, в отличие от проблемы вырождения матриц корректоров, является принципиальным ограничением метода, связанным в первую очередь с расщеплением по направлениям.

Единственным известным автору средством сглаживания этого эффекта является использование нового базиса $\{\xi_i\}$ на каждом шагу по времени, благодаря чему в проблемных местах сетки возмущения всё же не накапливаются от шага к шагу и не нарастают экспоненциально.

Отдельную проблему представляют случаи контакта в одном узле трёх и более областей интегрирования. Поскольку ограничения на число контактирующих в одном узле тел нет, прямой учёт контакта всех областей потребовал бы чересчур тяжёлого алгоритма. В качестве компромисса между сложностью и обоснованностью подхода можно предложить расчёт многоконтактного узла просто как граничного для каждой контактирующей области.

Отметим, что для численных методов, использующих представление значений функции в ячейках, максимальное число областей, контактирующих по одной грани ячейки, равно двум.

3.7 Некурантовский шаг по времени

3.7.1 Необходимость расчёта с шагом больше курантовского в 3D

На графиках на рисунке 3 представлены распределения значений высот треугольников в двумерных и тетраэдров в трёхмерных типичных неструктурированных сетках. Можно видеть принципиальное различие, заключающееся в том, что для треугольной сетки минимальная высота составляет примерно половину средней высоты, в то время как для тетраэдральной сетки различие минимальной и средних высот составляет несколько порядков, причём вырожденные ячейки представляют собой не единичные выбросы, а вполне систематическое явление.

По аналогии с численными методами на регулярных расчётных сетках для неструктурированных сеток также можно ввести понятие условия Куранта на шаг по времени:

$$\frac{c_{max}\tau}{h_{min}} < 1. \quad (3.34)$$

Здесь под h_{min} понимается минимальная высота ячейки. Отметим, что все предыдущие рассуждения велись в предположении, что это условие выполнено.

Однако из рисунка 3 очевидно, что, в отличие от двумерных, для трёхмерных неструктурированных сеток условие Куранта в таком виде невыполнимо из-за вырожденных ячеек. Можно предложить следующие пути решения проблемы:

- Переход к неявному методу, не требующему выполнения условия Куранта

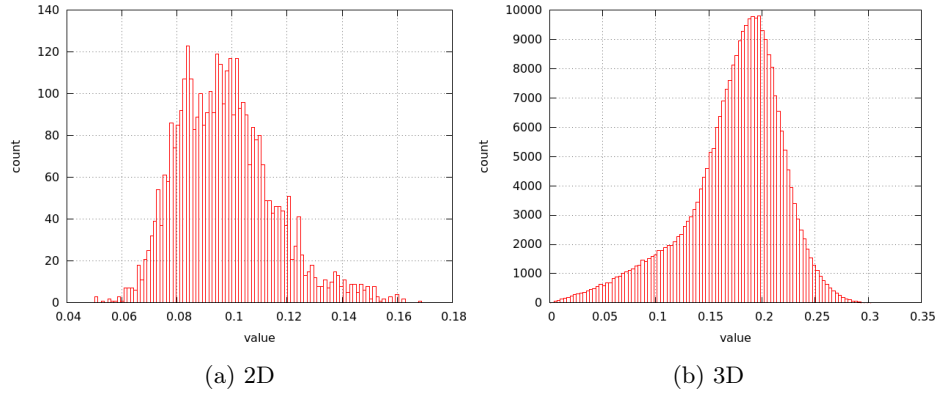


Рис. 3. Гистограммы значений высот ячеек типичных неструктурированных сеток

- Применение для построения расчётных сеток специальных алгоритмов генерации, которые обеспечат приемлемую минимальную высоту ячейки
- Применение так называемых иерархических шагов по времени, когда в местах малой высоты ячеек используется дробный до нужной малости шаг по времени
- Расчёт с шагом, определяемым 3.34, где в качестве h_{min} берётся не минимальная, а средняя или иная приемлемая высота ячейки

Первые три подхода автором подробно не исследовались, вместе с тем очевидно, что на пути их реализации будут существенные трудности. В данной работе применяется четвёртый подход, в котором величина шага по времени регулируется объективной средней мелкостью расчётной сетки. Интерполяция значения функции на предыдущем временном слое производится при этом, естественно, по той ячейке, в которую попала характеристика, а не по ближайшей к рассчитываемому узлу, поэтому правило Куранта – интерполяция по области зависимости решения – не нарушается, а численные эксперименты доказывают устойчивость такого метода.

3.7.2 Возникающие в связи с этим сложности

Однако при всей простоте у выбранного подхода имеется очевидная проблема. Расстояние между узлом и точкой, в которой производится интерполяция, превосходит минимальную высоту ячейки.

Следовательно, во-первых, треугольник или тетраэдр, по которому должна производиться интерполяция, может не быть инцидентным тому узлу сетки, из которого выходит характеристика. Поэтому для его поиска применяется модификация алгоритма "Straight walk in triangulation", описанного в [12].

Во-вторых, внешние характеристики могут иметь место не только у граничных узлов, но и у внутренних (вариант а) на рисунке 4).

Модификация метода для внутренних узлов на такой случай была предложена ещё в [2]. Она заключается в том, что инвариант Римана для характеристики, пересекающей границу области интегрирования, интерполируется не на предыдущем временном слое, а в пространстве-времени между двумя слоями с использованием значений в ближайших к точке пересечения граничных узлах на текущем и на новом временных слоях. Граничные узлы при таком подходе, естественно, должны быть рассчитаны до внутренних.

У граничных же узлов в достаточно выпуклых углах области интегрирования характеристики, проходя сначала через внутренность области, могут пересекать затем её границу и оказываться внешними. Поэтому у граничного узла может быть, фактически, произвольный набор внешних характеристик (вариант b) на рисунке 4). Так же, как и в случаях, описанных в разделе 3.6, это приводит к потере информации и нефизичным возмущениям. Применить интерполяцию

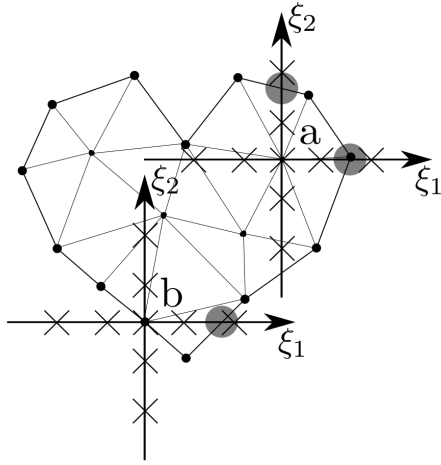


Рис. 4. Выпадения внутренних характеристик из области интегрирования отмечены серым

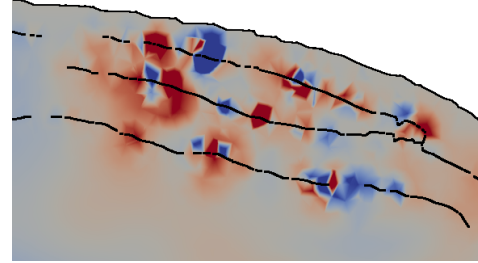


Рис. 5. Нефизичные осцилляции на контакте областей интегрирования

в пространстве-времени в данном случае нельзя, поскольку нет гарантии, что граничные узлы, по которым должна проводиться интерполяция, уже посчитаны на следующем временном слое.

Можно предложить альтернативный метод: рассчитать значение функции в точке пересечения характеристики с границей как во вспомогательном узле, расположенном между временными слоями, и посчитать затем нужное значение инварианта Римана, который переносится из этой точки в расчётный узел. Возможно, придётся применить эту процедуру рекурсивно, пока все внутренние характеристики из вспомогательных узлов не попадут внутрь области интегрирования.

4 Иллюстрация работы метода

В качестве весьма показательного результата применения численного метода можно указать трёхмерный расчёт распространения ультразвуковых волн в голове человека с явным выделением областей различных биологических тканей. Подробности расчёта можно найти в [11], здесь же продемонстрируем лишь волновую картину в двумерном срезе, иллюстрирующую описанные выше проблемы на рисунке 6.

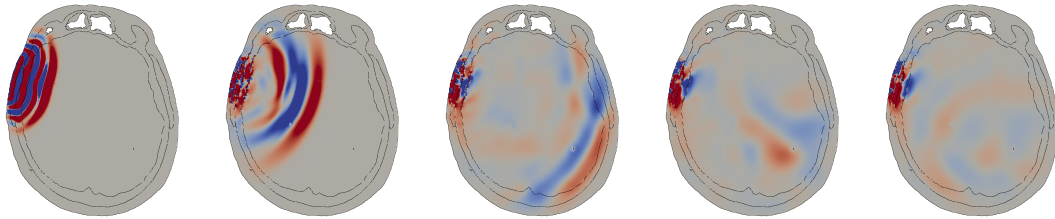


Рис. 6. Волновая картина в горизонтальном срезе в последовательные моменты времени. Цветом показано значение давления, чёрными линиями разделены области различной реологии

Как можно видеть, вблизи источника волн в местах контакта областей интегрирования образуются нефизичные осцилляции, в увеличенном масштабе показанные на рисунке 5. По мне-

нию автора, такие осцилляции являются следствием принципиальных ограничений численного метода, описанных в разделе 3.6 и не могут быть устранены в рамках СХМ, основанного на расщеплении по перпендикулярным направлениям.

5 Заключение

В статье предложена версия алгоритма СХМ для непериодических треугольных и тетраэдральных сеток, в которой особое внимание уделено обработке сложных случаев на границе области интегрирования. Рассмотрение нюансов расчёта граничных и контактных точек имеет различную значимость для разных прикладных расчётов – для многих задач с относительно простой геометрией расчётной области проблемы совершенно не проявляются, а для других может наблюдаться даже потеря устойчивости численного решения.

Рассмотренные в статье модификации базового численного метода: контроль вырожденности матриц граничного и контактного корректора одновременно с поддержанием согласованности граничных и начальных условий на каждом шагу по времени, отдельная обработка случаев нестандартного числа внешних характеристик, использование случайного расчётного базиса на каждом шагу по времени и учёт возможности превышения курантовского шага по времени вследствие вырожденности ячеек расчётной сетки позволяют эффективно бороться с осцилляциями и численной неустойчивостью. Тем не менее, они не во всех случаях полностью позволяют справиться с проблемой.

По мнению автора, фундаментальная причина этого в том, что в данном методе, во-первых, значения интегрируемой функции хранятся в узлах, а не в ячейках расчётной сетки, а во-вторых, используется расщепление по ортогональным направлениям, что плохо сочетается с криволинейными границами.

В связи с этим в дальнейшей работе по развитию указанной в статье версии СХМ для областей сложной геометрии имеет смысл рассмотреть следующие подходы: разработка алгоритма расчёта без расщепления по направлениям, переход к хранению значений интегрируемой функции в ячейках сетки вместо узлов, разработка специализированных методов локального перестроения расчётной сетки в проблемных областях на границах области интегрирования. Указанные подходы потенциально позволяют полностью исключить рассмотренные первопричины проблем расчёта граничных и контактных точек, тем самым устранив необходимость ручной работы при расчёте сложной геометрии.

В качестве основного практического результата работы можно выделить устойчивый расчёт в модели линейной упругости волновых процессов в гетерогенной среде сложной геометрии с явным выделением контактов между областями, который до введения предложенных способов обработки сложных случаев на границах и контактах был невозможен в рамках изложенной версии СХМ.

6 Благодарности

Автор выражает искреннюю благодарность доктору физ.-мат. наук профессору И.Б.Петрову за научное руководство, кандидатам физ.-мат. наук А.В.Васюкову, К.А.Беклемышевой и А.С.Ермакову за многолетнюю совместную научную деятельность в данном направлении, кандидатам физ.-мат. наук А.В.Фаворской и Н.И.Хохлову за плодотворные обсуждения и консультации.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 17-07-00972 А.

Список литературы

- [1] Магомедов К.М., Холодов А.С. О построении разностных схем для уравнений гиперболического типа на основе характеристических соотношений, Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 9:2 (1969), 373–386.

- [2] Магомедов К.М., Холодов А.С. Сеточно-характеристические численные методы. — М.: Наука, 1988, 288 с.
- [3] Петров И.Б., Холодов А.С. Численное исследование некоторых динамических задач механики деформируемого твёрдого тела сеточно-характеристическим методом, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 24:5 (1984), 722–739.
- [4] Агапов П.И., Челноков Ф.Б. Сравнительный анализ разностных схем для численного решения двумерных задач механики деформируемого твердого тела: Моделирование и обработка информации: М., МФТИ, 2003, 19 - 27.
- [5] Челноков Ф.Б., Явное представление сеточно-характеристических схем для уравнений упругости в двумерном и трехмерном пространствах, *Матем. моделирование*, 18:6 (2006), 96–108.
- [6] Petrov, I. B., Favorskaya, A. V., Muratov, M. V., Biryukov, V. A., & Sannikov, A. V. (2014). Grid-characteristic method on unstructured tetrahedral grids. *Doklady Mathematics*, 90, 781–783
- [7] Beklemysheva, K. A., Danilov, A. A., Petrov, I. B., Salamatova, V. Y., Vassilevski, Y. V., & Vasyukov, A. V. (2015). Virtual blunt injury of human thorax: Age-dependent response of vascular system. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 30, 259–268
- [8] Golubev, V. I., Petrov, I. B., Khokhlov, N. I., & Shul'ts, K. I. (2015). Numerical computation of wave propagation in fractured media by applying the grid-characteristic method on hexahedral meshes. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 55, 509–518
- [9] Golubev, V. I., Petrov, I. B., & Khokhlov, N. I. (2016). Compact grid-characteristic schemes of higher orders of accuracy for a 3D linear transport equation. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 8, 577–584.
- [10] Favorskaya, A., Petrov, I., & Khokhlov, N. (2016). Numerical Modeling of Wave Processes during Shelf Seismic Exploration. In *Procedia Computer Science* (Vol. 96, pp. 920–929)
- [11] K. A. Beklemysheva, G. K. Grigoriev, N. S. Kulberg, A. O. Kazakov, I. B. Petrov, V. Yu. Salamatova, Y. V. Vassilevski, A. V. Vasyukov. (2016). Transcranial ultrasound of cerebral vessels in silico: Proof of concept // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling* 31(5)
- [12] Olivier Devillers, Sylvain Pion, Monique Teillaud. Walking in a triangulation. RR-4120, INRIA, 2001.
- [13] Julia Flötotto. 2D and Surface Function Interpolation. In *CGAL User and Reference Manual*. CGAL Editorial Board, 4.8 edition, 2016.
- [14] CGAL, Computational Geometry Algorithms Library, <http://www.cgal.org>