

Сеточно-характеристический метод на неструктурированных расчётных сетках

1 Система уравнений

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

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \mathbf{A}_1 \frac{\partial \vec{u}}{\partial x_1} + \dots + \mathbf{A}_D \frac{\partial \vec{u}}{\partial x_D} = 0. \quad (1.1)$$

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 (1.1) они выписаны в [3]. 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:

$$\vec{u} = (v_x, v_y, v_z, \sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz}, \sigma_{zz})^T. \quad (1.2)$$

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 $N = 5$:

$$\vec{u} = (v_x, v_y, \sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{yy})^T, \quad (1.3)$$

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

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

$$\vec{u} = (v_1, \dots, v_D, p)^T. \quad (1.4)$$

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

2 Численный метод

В наиболее общей постановке и с иллюстрацией множества приложений сеточно-характеристический метод (СХМ) изложен его создателями в [1]. К волновым уравнениям механики упругого тела СХМ впервые применён в [2]. Основная идея реализации метода на неструктурированных расчётных сетках предложена в [1]. Экономичная реализация граничных и контактных условий, а также компактная запись аналитических формул спектрального разложения матриц \mathbf{A}_i для моделей упругости и акустики предложены в [3].

2.1 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 библиотек CGAL [4] и Ani3D [5]. 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.

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

2.2 Расщепление по направлениям

Поскольку классический СХМ рассматривает зависимость только от одной пространственной переменной, для численного решения (1.1) необходимо перейти к решению одномерных систем уравнений – так называемое расщепление по направлениям:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \mathbf{A}_i \frac{\partial \vec{u}}{\partial \xi_i} = 0, \quad i = 1 \dots D. \quad (2.1)$$

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 [3] экономичная по памяти и вычислительным ресурсам схема расщепления, обладающая при этом близким ко второму порядком точности по времени. Полный шаг по времени τ решения многомерного уравнения (1.1) состоит из D последовательных ступеней. Каждая последовательная i -я ступень заключается в выполнении численного шага по времени для i -го уравнения (2.1) 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.

2.3 Решение одномерного уравнения

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

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{U}. \quad (2.2)$$

Здесь \mathbf{U}^{-1} – матрица собственных векторов, $\mathbf{\Lambda}$ – диагональная матрица собственных значений, \mathbf{U} – матрица собственных строк. Умножив (2.1) слева на \mathbf{U} , внося постоянную матрицу \mathbf{U} под знак дифференциала и обозначая

$\vec{r} = \mathbf{U}\vec{u}$ – инварианты Римана, получаем:

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} + \mathbf{\Lambda} \frac{\partial \vec{r}}{\partial x} = 0. \quad (2.3)$$

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 1.

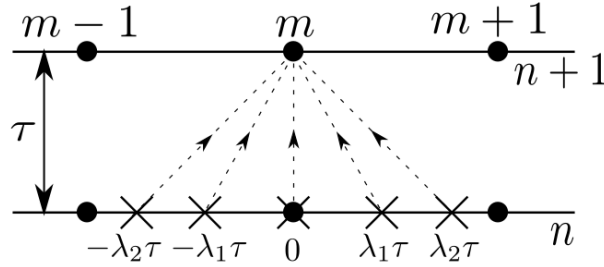


Рис. 1. Основная идея сеточно-характеристического метода

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 2.

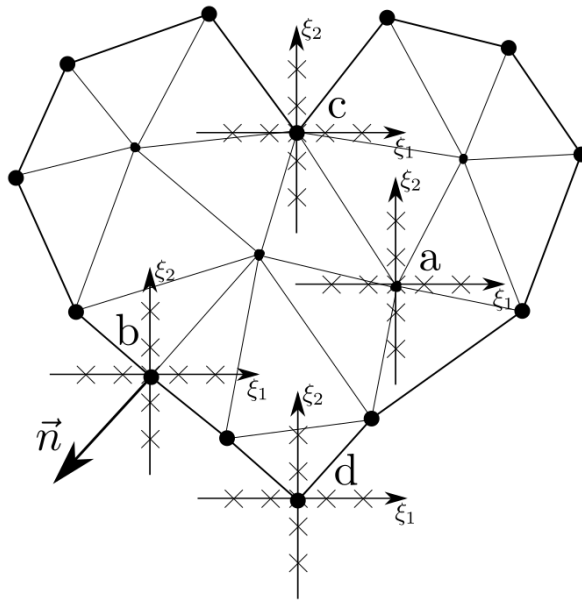


Рис. 2. Иллюстрация сеточно-характеристического метода на треугольной расчётной сетке

2.4 Метод на границе области интегрирования

Описанный выше алгоритм пригоден для внутренних узлов, когда все выброшенные из узла характеристики пересекают предыдущий временной слой внутри области интегрирования, что соответствует случаю а) на рисунке 2.

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 2. При контакте двух областей интегрирования характеристика из узла одной области может попадать в другую область. Тогда она также считается внешней для своей области. В таких случаях применяется модификация алгоритма, называемая коррекцией внешними волнами.

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 .

2.4.1 Граница области интегрирования

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

$$\mathbf{B} \cdot \vec{u} = \vec{b}. \quad (2.4)$$

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:

$$\sigma \cdot \vec{n} = \vec{f}. \quad (2.5)$$

Примем для упрощения формул, что значение \vec{f} указано в глобальном базисе, тогда (2.5) в форме (2.4) для трёхмерного случая запишется в виде:

$$\vec{b} = \vec{f}, \quad (2.6)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & n_x & n_y & n_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & n_x & 0 & n_y & n_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & n_x & 0 & n_y & n_z \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

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

$$\vec{b} = (v_n), \quad (2.8)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \vec{n}^T, & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

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 (2.4):

$$\mathbf{B} \cdot (\vec{u}^{inner} + \mathbf{\Omega} \cdot \vec{\alpha}) = \vec{b}. \quad (2.10)$$

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 :

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ \frac{\lambda+2\mu}{c_p} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\mu}{c_s} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\mu}{c_s} \\ \frac{\lambda}{c_p} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\lambda}{c_p} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Здесь первый столбец – 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:

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} \vec{l} \\ c\rho \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Для определения $\vec{\alpha}$ необходимо решить СЛАУ с матрицей $\mathbf{B}\mathbf{\Omega}$ размерно-

стью $M \times M$:

$$\mathbf{B}\boldsymbol{\Omega} \cdot \vec{\alpha} = \vec{b} - \mathbf{B} \cdot \vec{u}^{inner}. \quad (2.13)$$

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

$$\vec{u}^{n+1} = \vec{u}^{inner} + \boldsymbol{\Omega} \cdot \vec{\alpha} \quad (2.14)$$

2.4.2 Контакт двух областей интегрирования

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

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{1A} \cdot \vec{u}_A &= \mathbf{B}_{1B} \cdot \vec{u}_B, \\ \mathbf{B}_{2A} \cdot \vec{u}_A &= \mathbf{B}_{2B} \cdot \vec{u}_B. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Здесь обозначения те же, что и в (2.4).

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

$$\vec{v}_A = \vec{v}_B \quad (2.16)$$

и равенство сил, действующих на контактную поверхность:

$$\sigma_A \cdot \vec{n} = \sigma_B \cdot \vec{n}, \quad (2.17)$$

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 (2.7), 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:

$$\vec{v}_A \cdot \vec{n} = \vec{v}_B \cdot \vec{n} \quad (2.18)$$

и равенство давлений:

$$p_A = p_B. \quad (2.19)$$

Здесь также в качестве матриц \mathbf{B} из (2.15) используются матрицы для линейных граничных условий, в том числе (2.9).

Алгоритм расчёта контактных узлов 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 (2.15).

Распишем сообразно сказанному условие (2.15):

$$\mathbf{B}_{1A} \cdot (\vec{u}_A^{inner} + \mathbf{\Omega}_A \cdot \vec{\alpha}_A) = \mathbf{B}_{1B} \cdot (\vec{u}_B^{inner} + \mathbf{\Omega}_B \cdot \vec{\alpha}_B), \quad (2.20)$$

$$\mathbf{B}_{2A} \cdot (\vec{u}_A^{inner} + \mathbf{\Omega}_A \cdot \vec{\alpha}_A) = \mathbf{B}_{2B} \cdot (\vec{u}_B^{inner} + \mathbf{\Omega}_B \cdot \vec{\alpha}_B). \quad (2.21)$$

Раскроем скобки:

$$(\mathbf{B}_{1A} \mathbf{\Omega}_A) \cdot \vec{\alpha}_A = \mathbf{B}_{1B} \cdot \vec{u}_B^{inner} - \mathbf{B}_{1A} \cdot \vec{u}_A^{inner} + (\mathbf{B}_{1B} \mathbf{\Omega}_B) \cdot \vec{\alpha}_B \quad (2.22)$$

Сделаем переобозначения:

$$\mathbf{R} = (\mathbf{B}_{1A} \mathbf{\Omega}_A)^{-1}, \quad (2.23)$$

$$\vec{p} = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{B}_{1B} \cdot \vec{u}_B^{inner} - \mathbf{B}_{1A} \cdot \vec{u}_A^{inner}), \quad (2.24)$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{B}_{1B} \mathbf{\Omega}_B). \quad (2.25)$$

Тогда:

$$\vec{\alpha}_A = \vec{p} + \mathbf{Q} \cdot \vec{\alpha}_B. \quad (2.26)$$

Подставим в (2.21):

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{2A} \cdot \vec{u}_A^{inner} + (\mathbf{B}_{2A} \mathbf{\Omega}_A) \cdot \vec{p} + (\mathbf{B}_{2A} \mathbf{\Omega}_A) \cdot \mathbf{Q} \cdot \vec{\alpha}_B = \\ = \mathbf{B}_{2B} \cdot \vec{u}_B^{inner} + (\mathbf{B}_{2B} \mathbf{\Omega}_B) \cdot \vec{\alpha}_B. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Получим СЛАУ на $\vec{\alpha}_B$:

$$\begin{aligned} & \left[(\mathbf{B}_{2B}\boldsymbol{\Omega}_B) - (\mathbf{B}_{2A}\boldsymbol{\Omega}_A) \cdot \mathbf{Q} \right] \cdot \vec{\alpha}_B = \\ & = (\mathbf{B}_{2A}\boldsymbol{\Omega}_A) \cdot \vec{p} + \mathbf{B}_{2A} \cdot \vec{u}_A^{inner} - \mathbf{B}_{2B} \cdot \vec{u}_B^{inner}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Решив систему на $\vec{\alpha}_B$, находим $\vec{\alpha}_A$ из (2.26).

После чего производится собственно коррекция, обеспечивающая выполнение контактных условий:

$$\vec{u}_A^{n+1} = \vec{u}_A^{inner} + \boldsymbol{\Omega}_A \cdot \vec{\alpha}_A, \quad (2.29)$$

$$\vec{u}_B^{n+1} = \vec{u}_B^{inner} + \boldsymbol{\Omega}_B \cdot \vec{\alpha}_B \quad (2.30)$$

2.5 Вырождение матриц СЛАУ граничного и контактного корректора

2.5.1 Описание проблемы

Итак, расчёт граничных узлов по алгоритму 2.4.1 требует решения СЛАУ 2.13, расчёт контактных узлов по алгоритму 2.4.2 требует решения СЛАУ 2.28 и обращения матрицы 2.23. 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 2.13, уже выписаны: матрица \mathbf{B} в 2.7 и матрица $\boldsymbol{\Omega}$ в 2.11. Остаётся их перемножить:

$$\mathbf{B}\boldsymbol{\Omega} = \frac{1}{c_1 c_2} \begin{pmatrix} (\lambda + 2\mu)n_x c_2 & \mu n_y c_1 & \mu n_z c_1 \\ \lambda n_y c_2 & \mu n_x c_1 & 0 \\ \lambda n_z c_2 & 0 & \mu n_x c_1 \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

и взять определитель:

$$\det(\mathbf{B}\mathbf{\Omega}) = \frac{\mu^2}{c_1 c_2^2} \cdot n_x \cdot (2(\lambda + \mu)n_x^2 - \lambda). \quad (2.32)$$

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

$$\begin{cases} n_x = 0 \\ n_x^2 = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)} \equiv \nu < \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (2.33)$$

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 2.9 и 2.12 получаем:

$$\det(\mathbf{B}\mathbf{\Omega}) = \mathbf{B}\mathbf{\Omega} = (\vec{n} \cdot \vec{l}). \quad (2.34)$$

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

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

График на рисунке 3 показывает рассчитанные значения определителя и числа обусловленности в случаях фиксированного напряжения для трёхмерных уравнений упругости и фиксированной нормальной скорости для урав-

нений акустики.

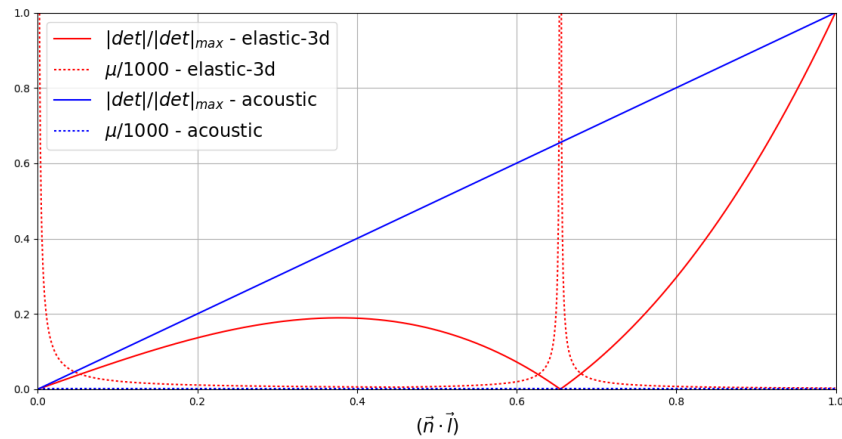


Рис. 3. К вопросу вырождения матриц граничного корректора

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.

2.5.2 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 2.5.1 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 интегри-

рования. В противовес им можно выделить “внутренние” – те, что приходят изнутри области. Также заметим, что при выкладках в 2.5.1 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 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 4 проведённые рассуждения иллюстрируются для уравне-

ний 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 2.34. Поэтому чем меньше $(\vec{n} \cdot \xi_i)$, 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.

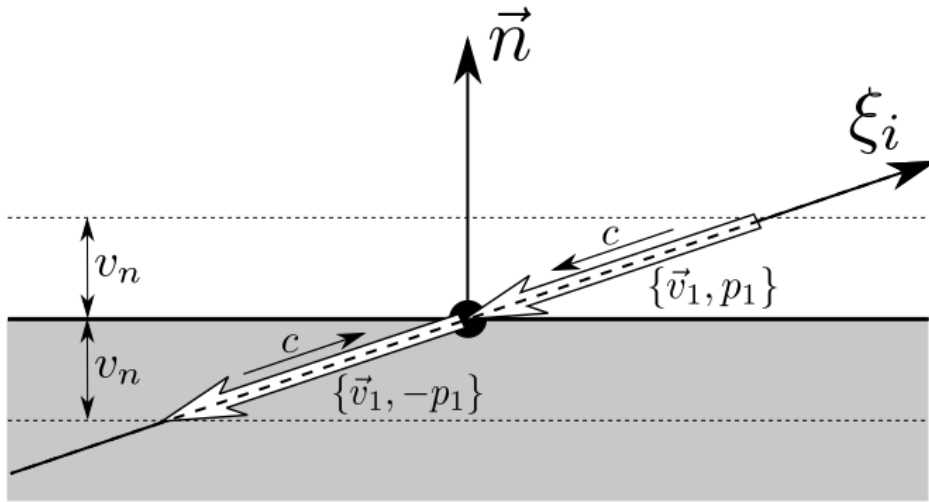


Рис. 4. К пояснению возможности влияния волн вдоль направления расчёта на выполнение граничных условий

Таким образом, возможность вырождения матриц граничного и контактного корректоров требует особого алгоритма и его тонкой настройки на предмет критических значений определителя, но не представляет неразрешимую для метода проблему.

2.5.3 Сложные случаи на границе областей интегрирования

В случае b) на рисунке 2 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 с) и d) существенно отличаются от b) тем, что в с) 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 контак-

тирующих в одном узле тел нет, прямой учёт контакта всех областей потребовал бы чересчур тяжёлого алгоритма. В качестве компромисса между сложностью и обоснованностью метода можно предложить расчёт многоконтактного узла просто как граничного для каждой контактирующей области.

2.6 Некурантовский шаг по времени

2.6.1 Необходимость расчёта с шагом больше курантовского в 3D

На графиках на рисунке 5 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.

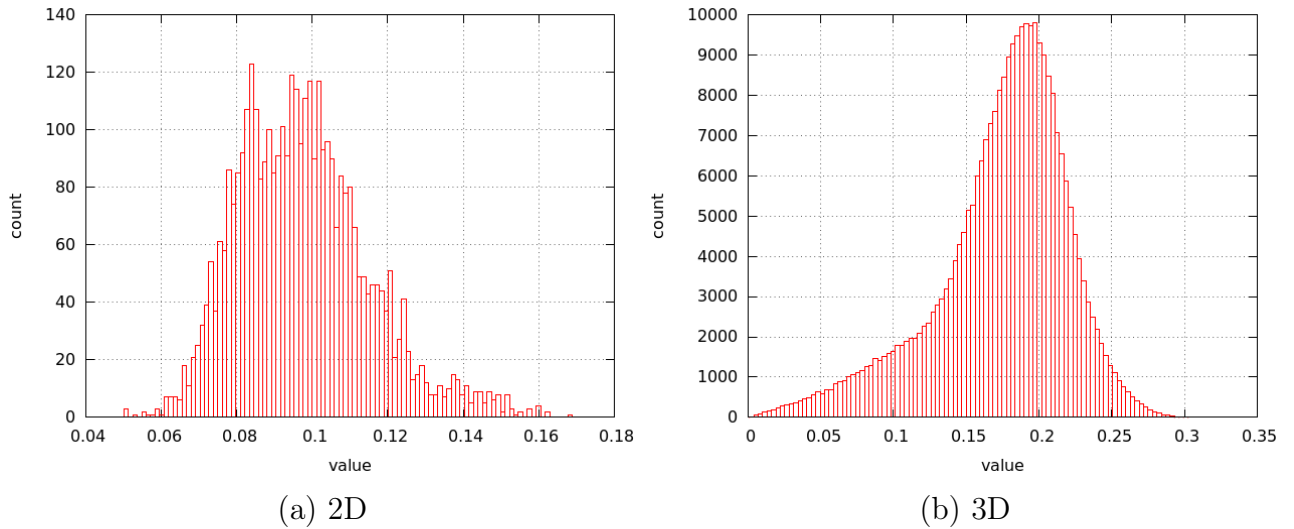


Рис. 5. Гистограммы значений высот ячеек типичных неструктурированных сеток

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

$$\frac{c_{max} \tau}{h_{min}} < 1. \quad (2.35)$$

Здесь под h_{min} понимается минимальная высота ячейки. Отметим, что все

предыдущие рассуждения велись в предположении, что это условие выполнено.

Однако из рисунка 5 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:

- 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 2.35, где в качестве h_{min} берётся не минимальная, а средняя или иная приемлемая высота ячейки

Осуществимость первых двух подходов автором подробно не исследовалась, вместе с тем очевидно, что на пути их реализации будут существенные трудности. В данной работе применяется третий подход, в котором величина шага по времени регулируется объективной 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.

2.6.2 Возникающие в связи с этим сложности

Однако при всей простоте у выбранного подхода существует очевидная проблема.

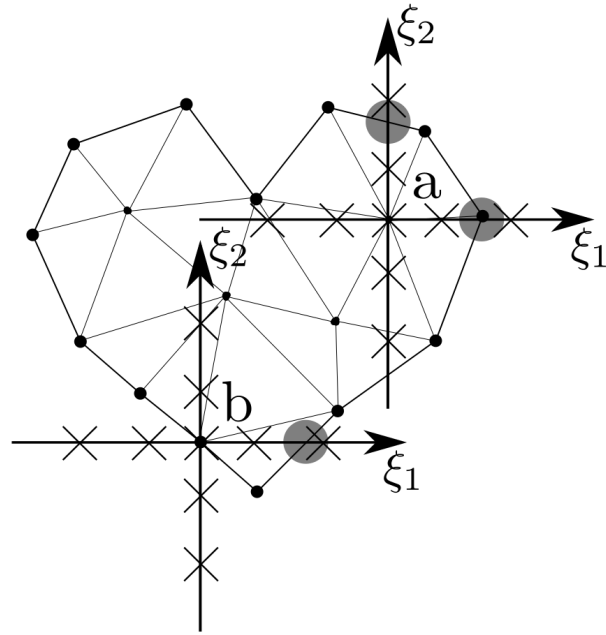


Рис. 6. Выпадения внутренних характеристик из области интегрирования отмечены серым

Расстояние между узлом и точкой, в которой производится интерполяция, превосходит минимальную высоту ячейки. Поэтому внешние характеристики могут появляться не только у граничных узлов, но и у внутренних (вариант а) на рисунке 6).

Модификация метода для внутренних узлов на такой случай была предложена ещё в [1]. 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 б) на рисунке 6). Так же, как и в случаях, описанных в разделе 2.5.3, это приводит к потере информации и нефизичным возмущениям. Применить интерполяцию 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 функ-

ции 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.

3 Результаты

Череп, данные по количеству узлов, ячеек, узлов на слой

4 Заключение

принципиальное ограничение метода Рассуждения в пользу методов с ячейками и потоками для нестр. сеток

5 Дополнения

5.1 Метод интерполяции второго порядка точности на неструктурированной сетке

Для восстановления значения функции в точке пересечения характеристики с предыдущим временным слоем в СХМ используется интерполяция, порядок которой определяет порядок метода по пространству. Большинство известных автору работ по СХМ используют метод интерполяции порядка выше первого, предложенный в [6]. Он заключается во введении на рёбрах треугольника (тетраэдра) дополнительных расчётных узлов, с помощью которых повышается порядок аппроксимации. К достоинствам этого метода следует в первую очередь отнести теоретическую возможность реализации интерполяции произвольного порядка. К недостаткам – усложнение топологии сетки. В данной работе предлагается альтернативный подход, позволяющий осуществлять интерполяцию второго (но не выше) порядка без введения вспомогательных узлов на рёбрах ячеек.

5.1.1 Интерполяция с точки зрения барицентрических координат

Введём барицентрические координаты $\lambda_i(\vec{x})$ точки \vec{x} в треугольнике с вершинами $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3$ из условия:

$$\vec{x} = \lambda_1(\vec{x})\vec{p}_1 + \lambda_2(\vec{x})\vec{p}_2 + \lambda_3(\vec{x})\vec{p}_3, \quad (5.1)$$

$$\lambda_1(\vec{x}) + \lambda_2(\vec{x}) + \lambda_3(\vec{x}) = 1. \quad (5.2)$$

Строгое определение и доказанные свойства барицентрических координат можно найти в [7].

Пусть известны значения функции $f(\vec{x})$ в вершинах треугольника $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_3$ и необходимо интерполировать её значение в некоторой точке \vec{q} внутри треугольника. Составим следующий интерполяционный многочлен:

$$P(\vec{x}) = \sum_i \lambda_i(\vec{x})f(\vec{p}_i). \quad (5.3)$$

Такой многочлен в точности воспроизводит линейную функцию: пусть

$$z(\vec{x}) = a + \vec{b} \cdot \vec{x}, \quad (5.4)$$

тогда

$$P(\vec{x}) = \sum_i \lambda_i(\vec{x})(a + \vec{b} \cdot \vec{p}_i) = a \sum_i \lambda_i(\vec{x}) + \vec{b} \cdot \sum_i \lambda_i(\vec{x})\vec{p}_i = a + \vec{b} \cdot \vec{x} = z(\vec{x}). \quad (5.5)$$

Это позволяет, вычисляя барицентрические координаты точки \vec{q} , производить интерполяцию первого порядка.

Если в вершинах треугольника \vec{p}_i известны ещё и значения градиента функции $\nabla f(\vec{x}) = \vec{g}(\vec{x})$, составим многочлен, в точности воспроизводящий квадратичную функцию, что позволит производить интерполяцию со вторым порядком точности:

$$P(\vec{x}) = \sum_i \lambda_i(\vec{x}) \left(f(\vec{p}_i) + \frac{1}{2} \vec{g}(\vec{p}_i) \cdot (\vec{x} - \vec{p}_i) \right). \quad (5.6)$$

Доказательство:

$$z(\vec{x}) = \vec{x}^T \mathbf{A} \vec{x} + \vec{b} \cdot \vec{x} + c, \quad (5.7)$$

$$g(\vec{x}) = \nabla z(\vec{x}) = 2\mathbf{A} \vec{x} + \vec{b}, \quad (5.8)$$

$$P(\vec{x}) = \sum_i \lambda_i(\vec{x}) \left(\vec{p}_i^T \mathbf{A} \vec{p}_i + \vec{b} \cdot \vec{p}_i + c + \frac{1}{2} (2\mathbf{A} \vec{p}_i + \vec{b}) \cdot (\vec{x} - \vec{p}_i) \right) = \quad (5.9)$$

$$\sum_i \lambda_i(\vec{x}) \left(\vec{p}_i^T \mathbf{A} \vec{p}_i + \vec{b} \cdot \vec{p}_i + c + \vec{x}^T \mathbf{A} \vec{p}_i + \frac{1}{2} \vec{b} \cdot \vec{x} - \vec{p}_i^T \mathbf{A} \vec{p}_i - \frac{1}{2} \vec{b} \cdot \vec{p}_i \right) = \quad (5.10)$$

$$\sum_i \lambda_i(\vec{x}) \left(\vec{x}^T \mathbf{A} \vec{p}_i + \frac{1}{2} \vec{b} \cdot \vec{p}_i + c + \frac{1}{2} \vec{b} \cdot \vec{x} \right) = \quad (5.11)$$

$$\vec{x}^T \mathbf{A} \vec{x} + \vec{b} \cdot \vec{x} + c = z(\vec{x}). \quad (5.12)$$

В предпоследнем переходе в цепочке равенств использовано свойство аффинной инвариантности барицентрических координат: $\sum_i \lambda_i(\vec{x}) \mathbf{A} \vec{p}_i = \mathbf{A} \vec{x}$. Идея построения квадратичного многочлена взята из [8]. Приведённые рассуждения обобщаются на трёхмерный случай чисто формально.

5.1.2 Численное дифференцирование на неструктурированной сетке

Поскольку значение градиента $\vec{g}(\vec{x}) = \nabla f(\vec{x})$ в узлах сетки чаще всего, в том числе и в случае СХМ, неизвестно, предлагается найти его численно. Реализованный в данной работе метод численного дифференцирования был, по-видимому, впервые предложен в [9]. Иллюстрация на рисунке 7. Вычисляется градиент функции в узле, обозначенном *, для этого используются значения функции в самом узле $f(\vec{x}^*) = f^*$ и в его пронумерованных по порядку узлах-соседях $f(\vec{x}_i) = f_i$. Запишем из определения градиента функции:

$$f_i - f^* = \vec{g}(\vec{x}^*) \cdot (\vec{x}_i - \vec{x}^*) + O(\|\vec{x}_i - \vec{x}^*\|^2) \quad (5.13)$$

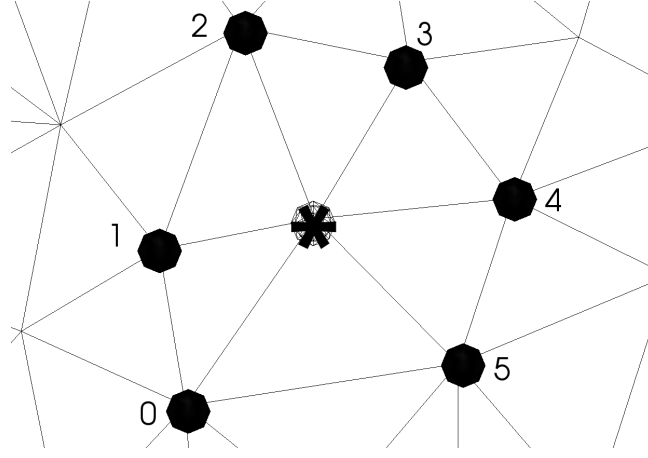


Рис. 7. К пояснению метода численного дифференцирования

Записывая это уравнение для всех узлов-соседей, получаем переобусловленную СЛАУ на значения градиента:

$$\mathbf{A}\vec{g} = \vec{b}, \quad (5.14)$$

$$\mathbf{A}_{ij} = (\vec{x}_i - \vec{x}^*)_j, \quad (5.15)$$

$$b_i = f_i - f^*. \quad (5.16)$$

СЛАУ решается методом наименьших квадратов с весами, обратными расстояниям от рассчитываемого узла до соответствующего соседа:

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{W} \mathbf{A}) \vec{g} = (\mathbf{A}^T \mathbf{W}) \vec{b}, \quad (5.17)$$

$$\mathbf{W}_{ij} = \|\vec{x}_i - \vec{x}^*\|^{-1}, \quad i = j, \quad (5.18)$$

$$\mathbf{W}_{ij} = 0, \quad i \neq j. \quad (5.19)$$

Минимальное число узлов-соседей для треугольной сетки равно двум, а для тетраэдральной – трём, так что система уравнений не может быть вырождена. Средние же количества узлов-соседей – шесть для двумерного и пятнадцать для трёхмерного случаев.

5.2 Алгоритм поиска ячейки пересечения характеристики с предыдущим временным слоем

Для того, чтобы произвести интерполяцию функции в точке на неструктурированной сетке, необходимо найти треугольник (тетраэдр), который содержит эту точку. Это одна из фундаментальных задач вычислительной геометрии, к её решению существует множество подходов: от построения спе-

циальных структур быстрого поиска до различных вариантов блужданий по триангуляции от ячейки к ячейке [10].

Поиск в kD -деревьях занимает логарифмическое время. Оценки для методов блуждания в триангуляции по умолчанию, конечно же, хуже, но при дополнительном условии хорошего выбора стартовой ячейки улучшаются до константных. Поскольку в СХМ известна не только точка для поиска, но и расчётный узел, из которого выходит характеристика, указать стартовую ячейку не представляет труда. А так как для численных методов выполняется в том или ином виде условие Куранта, число шагов, которое необходимо пройти до искомой ячейки, порядка единицы.

Из всех методов поиска блужданием по триангуляции, изложенных и протестированных в [10], для СХМ выбирается не самый оптимальный с точки зрения общих показателей метод поиска вдоль прямой линии, проиллюстрированный на рисунке 8. Причина, по которой необходимо перебирать ячейки именно вдоль прямой линии, ясна из варианта под буквой с) – в то время как характеристика пересекает границу области и должна быть рассмотрена как внешняя, при других алгоритмах блуждания (или поиске через kD -дерево) она может быть ошибочно принята за внутреннюю.

Алгоритм для двумерного и трёхмерного случаев предложен в [10]. Для краткости приведём лишь поиск в треугольной сетке, иллюстрация – случай а) на рисунке 8. Обозначим

$$orientation(A, B, C) = \det \begin{vmatrix} B_x - A_x & C_x - A_x \\ B_y - A_y & C_y - A_y \end{vmatrix} - \quad (5.20)$$

– ориентированную площадь треугольника A, B, C .

- Имеем узел q и точку для поиска p
- Рассматриваем все инцидентные q ячейки и выбираем среди них ту, которая содержит внутри себя луч qp . Это делается, например, с помощью анализа барицентрических координат точки p в каждой из этих ячеек
- Обозначим вершину найденной ячейки, лежащую слева от qp , как l , а вершину, лежащую справа, как r и вершину $s = q$
- Выполнено $orientation(s, r, l) > 0$
- Далее до тех пор, пока $orientation(p, r, l) < 0$, повторяем:

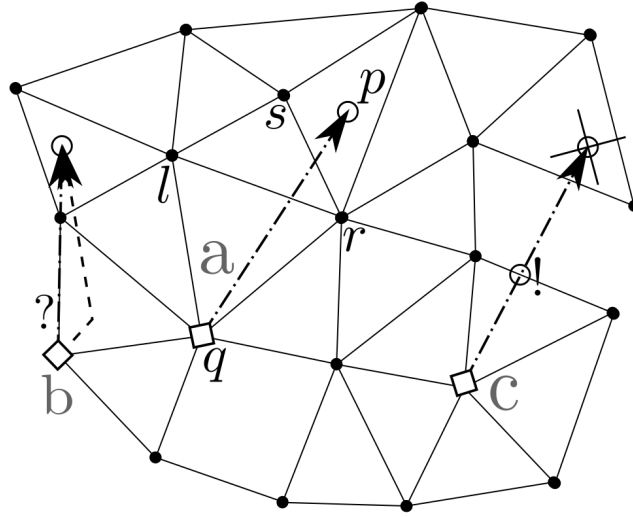


Рис. 8. К пояснению алгоритма поиска

- Переходим в ячейку, разделяющую с текущей точки r, l
- Переносим вершину s в новую ячейку на свободное от r, l место
- Если $orientation(s, q, p) < 0$, $r = s$, иначе $l = s$
- Ячейка, содержащая p , найдена

При всей простоте данный алгоритм неустойчив в случаях, подобных варианту b) на рисунке 8, поскольку значение $orientation(s, q, p)$ близко к нулю и выбор следующей ячейки неоднозначен. Это может привести к большому числу “промахов” характеристик в областях правильной формы при расчёте вдоль координатных осей.

Для борьбы с этим явлением предлагается следующая модификация метода. В случае, если поиск вдоль прямой линии из стартового узла в искомую точку не удаётся, делается небольшой отступ из узла внутрь области и производится попытка поиска вдоль новой линии, изображённой пунктиром. Это решает проблему вырожденности $orientation(s, q, p)$. На рисунке для наглядности отступ сделан значительным, на самом же деле он составляет одну тысячную от высоты ближайшей ячейки.

Список литературы

- [1] Магомедов К.М., Холодов А.С. Сеточно-характеристические численные методы. — М.: Наука, 1988, 288 с.

- [2] 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.
- [3] Челноков Ф.Б., Явное представление сеточно-характеристических схем для уравнений упругости в двумерном и трехмерном пространствах, *Матем. моделирование*, 18:6 (2006), 96–108.
- [4] CGAL, Computational Geometry Algorithms Library, <http://www.cgal.org>
- [5] 3D generator of anisotropic meshes <http://sourceforge.net/projects/ani3d>
- [6] 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.
- [7] Балк М. Б., Болтянский В. Г. Геометрия масс. — М.: Наука, 1987. — 160 с. — (Библиотечка «Квант». Вып. 61).
- [8] Julia Flötotto. 2D and Surface Function Interpolation. In CGAL User and Reference Manual. CGAL Editorial Board, 4.8 edition, 2016.
- [9] R. Sibson. A brief description of natural neighbour interpolation. In Vic Barnett, editor, *Interpreting Multivariate Data*, pages 21–36. John Wiley and Sons, Chichester, 1981.
- [10] Olivier Devillers, Sylvain Pion, Monique Teillaud. Walking in a triangulation. RR-4120, INRIA, 2001.