

К вопросу расчёта граничных и контактных узлов в сеточно-характеристическом методе на непериодических тетраэдральных сетках

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 со значительными проблемами при расчёте граничных и контактных точек 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 substantial computational experience is collected today. However, this approach faces considerable challenges with calculation of border and contact points when applied to some grid configurations in 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 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 тетраэдralные 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.

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 диагонализуемы с полным набором собственных векторов:

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

Здесь \mathbf{U}^{-1} – матрица собственных векторов, $\boldsymbol{\Lambda}$ – диагональная матрица собственных значений, \mathbf{U} – матрица собственных строк. Умножив (2.1) слева на \mathbf{U} , внеся постоянную матрицу \mathbf{U} под знак дифференциала и обозначая $\vec{r} = \mathbf{U}\vec{u}$ – инварианты Римана, получаем:

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

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.

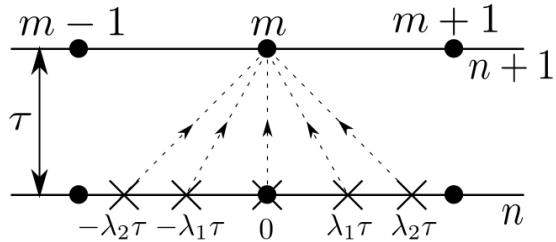


Рис. 1. Основная идея сеточно-характеристического метода

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.

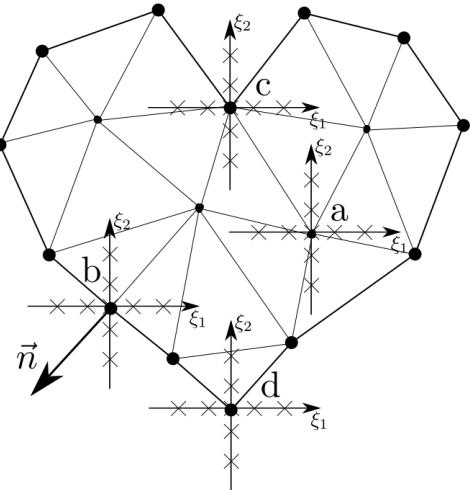


Рис. 2. Иллюстрация сеточно-характеристического метода на треугольной расчётной сетке

2.4 Метод на границе области интегрирования

Описанный выше алгоритм пригоден для внутренних узлов, когда все выходящие из узла на новом временном слое 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 б), с) и д) на рисунке 2. В таких случаях применяется модификация алгоритма, называемая коррекцией внешними волнами, впервые предложенная в [3].

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 б), когда число внешних характеристик равно числу независимых скалярных граничных условий M .

2.4.1 Граница области интегрирования

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

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

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:

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

$$\mathbf{B} = \left(\begin{array}{cc} \vec{n}^T & 0 \end{array} \right). \quad (2.9)$$

2.4.1.2 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 (2.4):

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

Здесь Ω – 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 Ω – это три однонаправленных волны вдоль оси x :

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

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 Ω 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:

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

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

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

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

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

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

2.4.2 Контакт двух областей интегрирования

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

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

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

Для примера рассмотрим контактное условие полного слипания 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).

2.4.2.2 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 (2.15).

Распишем сообразно сказанному условие (2.15):

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

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

Раскроем скобки:

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

Сделаем переобозначения:

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

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

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

Тогда:

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

Подставим в (2.21):

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

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 2.4.1.2 требует решения СЛАУ 2.13, расчёт контактных узлов по алгоритму 2.4.2.2 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:

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

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

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

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

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

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 смысла, но, тем не менее, необходимо отсечь 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 односторонние 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 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 слову. 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 3 приведённые 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 2.34. 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.

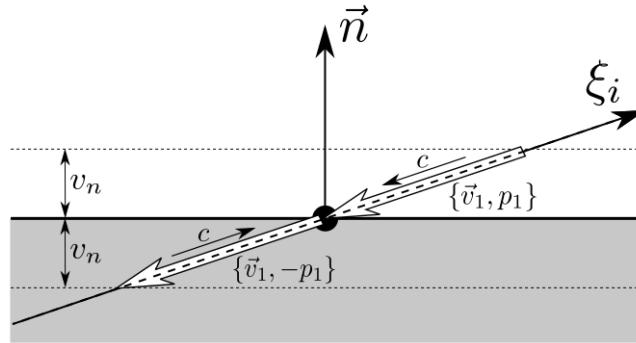


Рис. 3. К пояснению возможности влияния волн вдоль направления расчёта на выполнение граничных условий

2.6 Сложные случаи на границе областей интегрирования

В случае б) на рисунке 2 количество внешних характеристик для граничного узла равняется количеству независимых скалярных граничных условий. Это означает, с одной стороны, что вся потеряянная в результате выпада характеристика 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 д) существенно отличаются от б) тем, что в с) отсутствуют внешние волны, с помощью которых была бы возможна граничная коррекция, а в д), напротив, число внешних волн превышает число граничных условий, что приводит к неизбежной потери 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 д) 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 неструктурных 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 черезсчур 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.

2.7 Некурантовский шаг по времени

2.7.1 Необходимость расчёта с шагом больше курантовского в 3D

На графиках на рисунке 4 представлены распределения значений высот треугольников в двумерных и тетраэдров в трёхмерных типичных неструктурных сетках. Можно видеть принципиальное различие, заключающееся в том, что для треугольной сетки минимальная высота составляет примерно половину средней высоты, в то время как для тетраэдальной сетки различие минимальной и средних высот составляет несколько порядков, причём вырожденные ячейки представляют собой не единичные выбросы, а вполне систематическое явление.

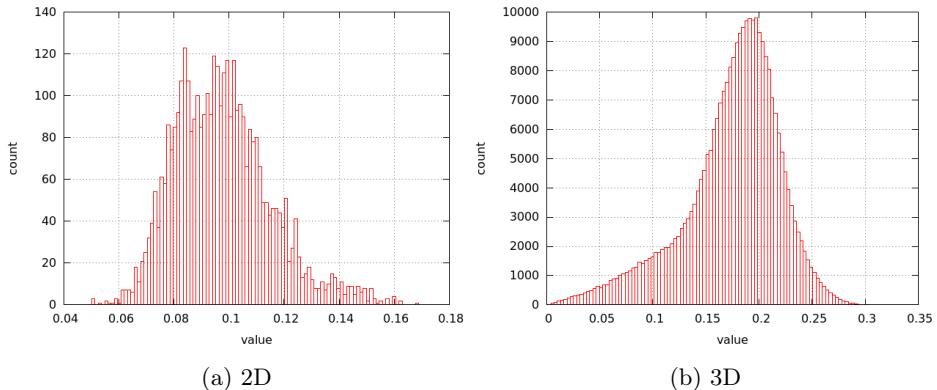


Рис. 4. Гистограммы значений высот ячеек типичных неструктурных сеток

По аналогии с численными методами на регулярных расчётных сетках для неструктурных 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 4 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
- Применение для построения расчётных сеток специальных алгоритмов генерации, которые обеспечивают 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

Первые три подхода автором подробно не исследовалась, вместе с тем очевидно, что на путях 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.

2.7.2 Возникающие в связи с этим сложности

Однако при всей простоте у выбранного подхода существует очевидная проблема.

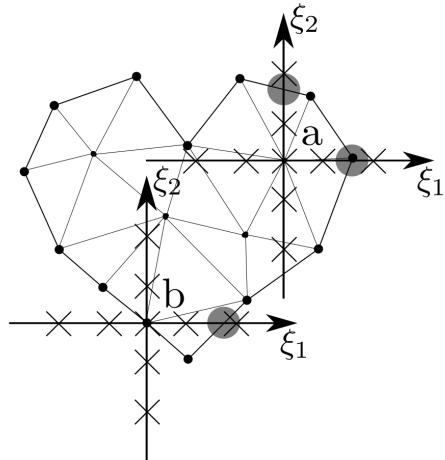


Рис. 5. Выпадения внутренних характеристик из области интегрирования отмечены серым

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 5).

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. Границные 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 5). Так же, как и в случаях, описанных в разделе 2.6, это приводит к потери 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 функции в точке пересечения характеристики с границей как во вспомогательном узле, расположенному 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

В качестве основного и наиболее показательного результата применения численного метода можно продемонстрировать расчёт распространения ультразвуковых волн в голове человека с явным выделением пяти видов тканей: соединительной, мышечной, костной, мозга и сосудов (см. рисунок 6а). Используются уравнения моделей линейной упругости и акустики. Волновая картина в 3D показана на рисунке 6б. Визуализация осуществляется с помощью программы Paraview [6].

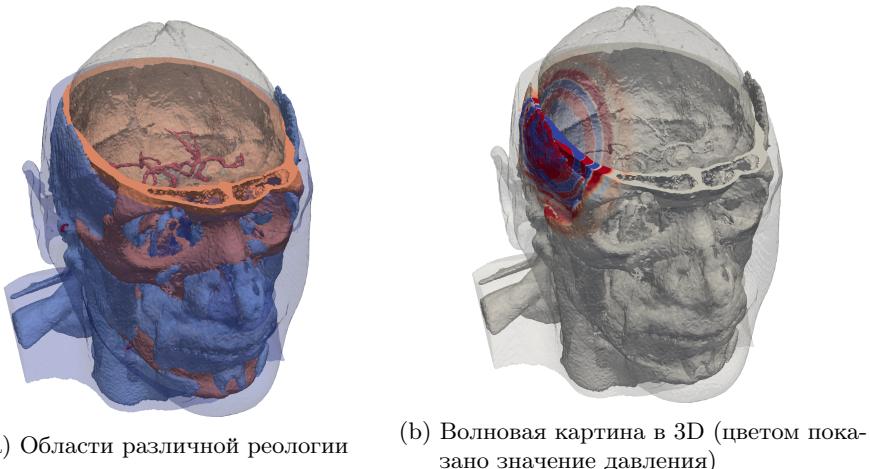


Рис. 6. Пример расчёта в гетерогенной области интегрирования сложной формы

Для проведения расчётов используется тетраэдralная расчётная сетка, построенная средствами программного комплекса ИВМ РАН "Ani3D" [5]. В наиболее подробном её варианте содержится 1.4 млн. вершин и 8.5 млн. ячеек, что позволяет разрешить крупные сосуды и смену слоёв ткани в височной области: на наиболее тонкие места приходится по 5-10 ячеек, что продемонстрировано на рисунке 7.

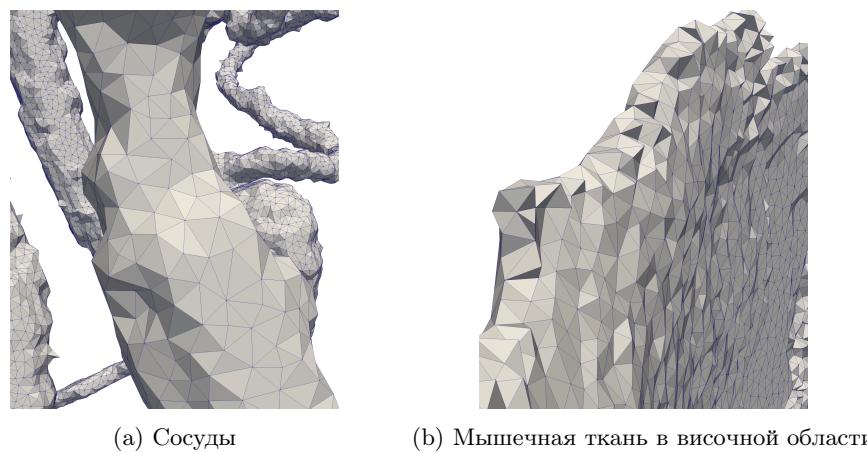


Рис. 7. Фрагменты неструктурированной расчётной сетки

Распространение волн в разрезе показано на рисунке 8.

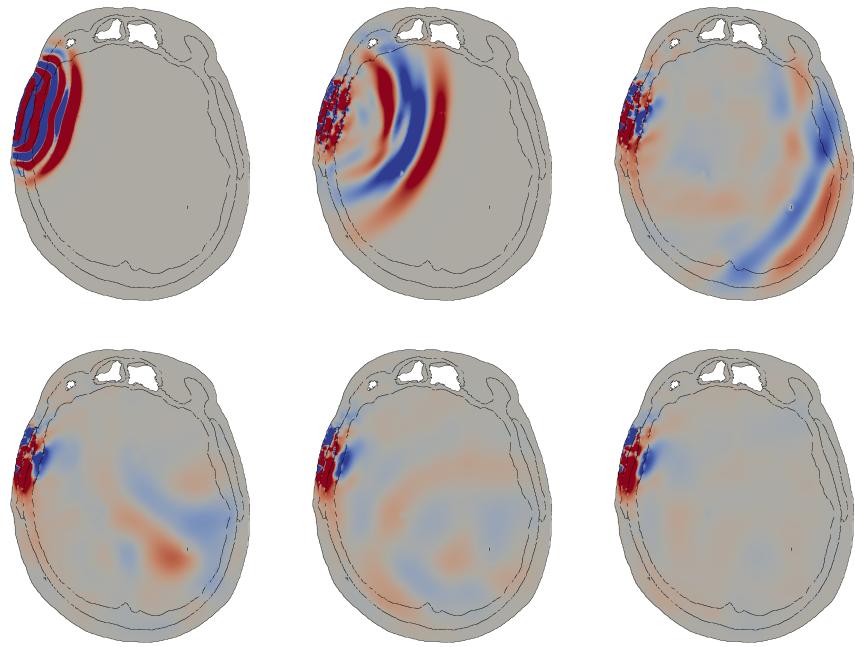


Рис. 8. Волновая картина в горизонтальном срезе в последовательные моменты времени. Цветом показано значение давления, чёрными линиями разделены области различной реологии

Как можно видеть, в местах контакта областей интегрирования образуются нефизичные незатухающие осцилляции, в увеличенном масштабе показанные на рисунке 9. По мнению автора, такие осцилляции являются следствием принципиальных ограничений численного метода, описанных в разделе 2.6 и не могут быть устранены в рамках СХМ, основанного на расщеплении по направлениям.

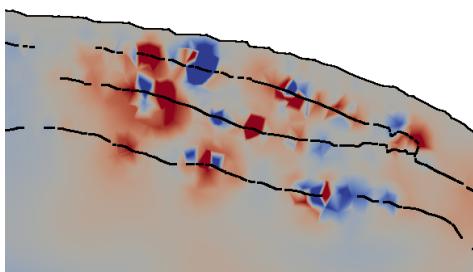


Рис. 9. Нефизичные осцилляции на контакте областей интегрирования

4 Заключение

Рассмотренные в данной работе проблемы расчёта граничных и контактных точек имеют различную значимость для разных прикладных расчётов – для одних задач проблемы совершенно не проявляются, а для других могут значительно ухудшать качество численного решения. Как показано выше, проблемы заметны при некоторых конфигурациях расчётных сеток в областях со сложной геометрией.

Это обусловлено тем, что в данном методе, во-первых, значения интегрируемой функции представляются в узлах, а не в ячейках расчётной сетки, а во-вторых, существенно используется расщепление по направлениям.

Рассмотренные в статье модификации численного метода позволяют преодолеть часть указанных проблем. Вычислительные эксперименты показывают, что при использовании адаптированной версии сеточно-характеристического метода возможно обеспечить устойчивый расчёт волновых процессов с использованием тетраэдralьных сеток в том числе в гетерогенных областях сложной геометрии. Тем не менее, на границе области интегрирования при определённых условиях могут возникать нефизичные осцилляции, борьба с которыми требует значительных усилий и ручной работы в каждом конкретном случае.

В связи с этим в дальнейшей работе по развитию сеточно-характеристического метода 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.

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] Ahrens, James, Geveci, Berk, Law, Charles, ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization, Visualization Handbook, Elsevier, 2005, ISBN-13: 978-0123875822