ПОСТРОЕНИЕ СЕТОК ДЕФОРМАЦИЕЙ ОБЪЕМОВ ВРАЩЕНИЯ

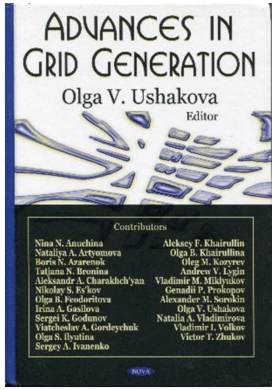
О. В. Ушакова[1,2] , Н. А. Артемова[1]

[1]*Институт математики и механики им Н.Н. Красовского Уральское отделение РАН, Екатеринбург*

[2]*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина*

Описывается алгоритм построения структурированных сеток в деформированных объемах вращения для случаев деформации объемами, образованными поверхностями вращения с параллельными осями вращения (называемыми обобщениями объемов вращения).

Алгоритм предназначен для моделирования процессов многокомпонентной гидродинамики.



Anuchina N.N., Volkov V.I., Gordeychuk V.A., Es'kov N.S., Ilyutina O.S., and Kozyrev O.M. Numerical simulation of 3D multi-component vortex flows by MAH-3 code. Advances in Grid Generation. ed by Ushakova O.V. Novascience Publishers. 2007.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА АЛГОРИТМА

- Является нестационарным алгоритмом построения сеток в областях с подвижными границами. Относится к подходу морфинга сеток (когда сетка строится в процессе изменения области): на каждой итерации меняется (деформируется) форма области, строится сетка для нее, затем сетка оптимизируется в соответствии с критериями оптимальности. Итерации повторяются до тех пор, пока деформация объема не достигнет требуемой формы.

- Ранее был разработан для случаев деформации объема вращения другим объемом вращения.

- Позволяет строить сетки в одно-блочных областях очень сложной геометрии, при этом не нужно задавать границу области, достаточно описать объем вращения, деформирующий объем и указать параметры деформации.

- Разработан в рамках вариационного подхода построения оптимальных сеток.

- Создан в рамках единой технологии и предназначен для моделирования процессов многокомпонентной гидродинамики.

ТРЕБОВАНИЯ К СЕТКАМ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССОВ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ

- Динамика многокомпонентных сред – важная сфера исследований во многих научных областях, таких, как физика материи и энергии высокой плотности (термоядерный синтез, взрывные процессы), астрофизика (зарождение и эволюция звезд, сверхновые звезды), физика атмосферы и гидросферы Земли.

- Физические процессы характеризуются гидродинамической неустойчивостью, возникновением вихревых и потоковых течений, потерей первоначальной топологической структуры, а также сильными деформациями границ областей.

- Математическое моделирование гидродинамических течений в таких средах представляет собой сложную проблему и требует сеток особого качества.

- Разностные методы с использованием структурированных сеток просты в реализации для таких задач и позволяют описывать как границы, так и детали течения. Для моделирования требовались генераторы структурированных (регулярных) сеток[1] , близких к равномерным и ортогональным (особой структуры), состоящих из шестигранных линейчатых ячеек.

[1] **В вычислительной гидродинамике, когда это возможно, предпочитаются структурированные сетки. Они используются как стандарт для эталона качества численного решения.**

ПОСТРОЕНИЕ ТРЕХМЕРНЫХ РЕГУЛЯРНЫХ (СТРУКТУРИРОВАННЫХ) СЕТОК

Построение сеток в области G геометрически сложной формы, называемой физической областью, осуществляется с помощью невырожденного отображения $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{\xi})$ области P более простой формы, называемой параметрической областью.

В трехмерном случае параметрическая область P – это прямоугольный параллелепипед $P = \boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \xi_2, \xi_3\colon\ 0 \leq \xi_l \ \leq I_l, l = 1{,}2{,}3\}$.

Значения отображения

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{\xi}) = \left(x_1(\xi), x_2(\xi), x_3(\xi)\right) = \left(x_1(\xi_1, \xi_2, \xi_3), x_2(\xi_1, \xi_2, \xi_3), x_3(\xi_1, \xi_2, \xi_3)\right)$$

при целочисленных значениях $\xi_l = i_l, i_l = 0{,}1, \dots, I_l$ задают координаты узлов сетки с числом узлов I_l по каждому из направлений $l = 1, 2, 3.$ Далее $I_1 = N, I_2 = M, I_3 = L, i_1 = i, i_2 = j, i_3 = k$.

Соответственно физическая область G представляется в виде криволинейного шестигранника. Способ представления физической области в виде криволинейного шестигранника определяет конфигурацию области.

УСЛОВИЯ НА ОТОБРАЖЕНИЕ

- Отображение **x**: *P* —> *G* находится в узлах равномерной ортогональной сетки в прямоугольном параллелепипеде *P*. В остальных точках отображение восполняется с помощью трилинейных отображений единичных кубов сетки в *P*.

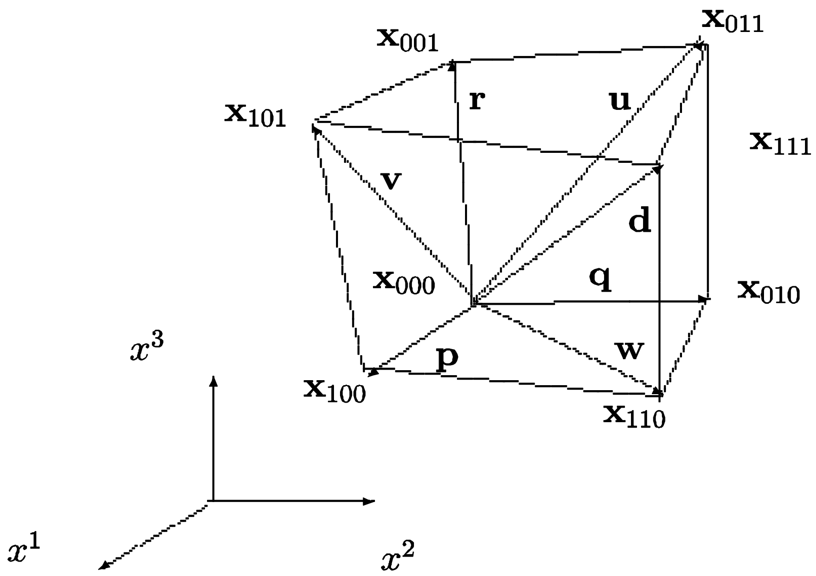
- Узлы криволинейной сетки находятся минимизацией специальных функционалов.

- Отображение задает невырожденную сетку внутри области и на ее границе: отображение “на”, взаимно однозначное (гомеоморфизм), имеет положительный якобиан внутри области *P*.

О. В. Ушакова. О невырожденности трехмерных сеток, Труды института математики и механики, Т.12, N 1. 2004. С 78-100.

М. Ф. Прохорова. Проблемы гомеоморфизма, возникающие в теории построения сеток. Труды института математики и механики, 2008. Т.14. N 1. С.112-129.

ШЕСТИГРАННАЯ ЛИНЕЙЧАТАЯ ЯЧЕЙКА



Отображение

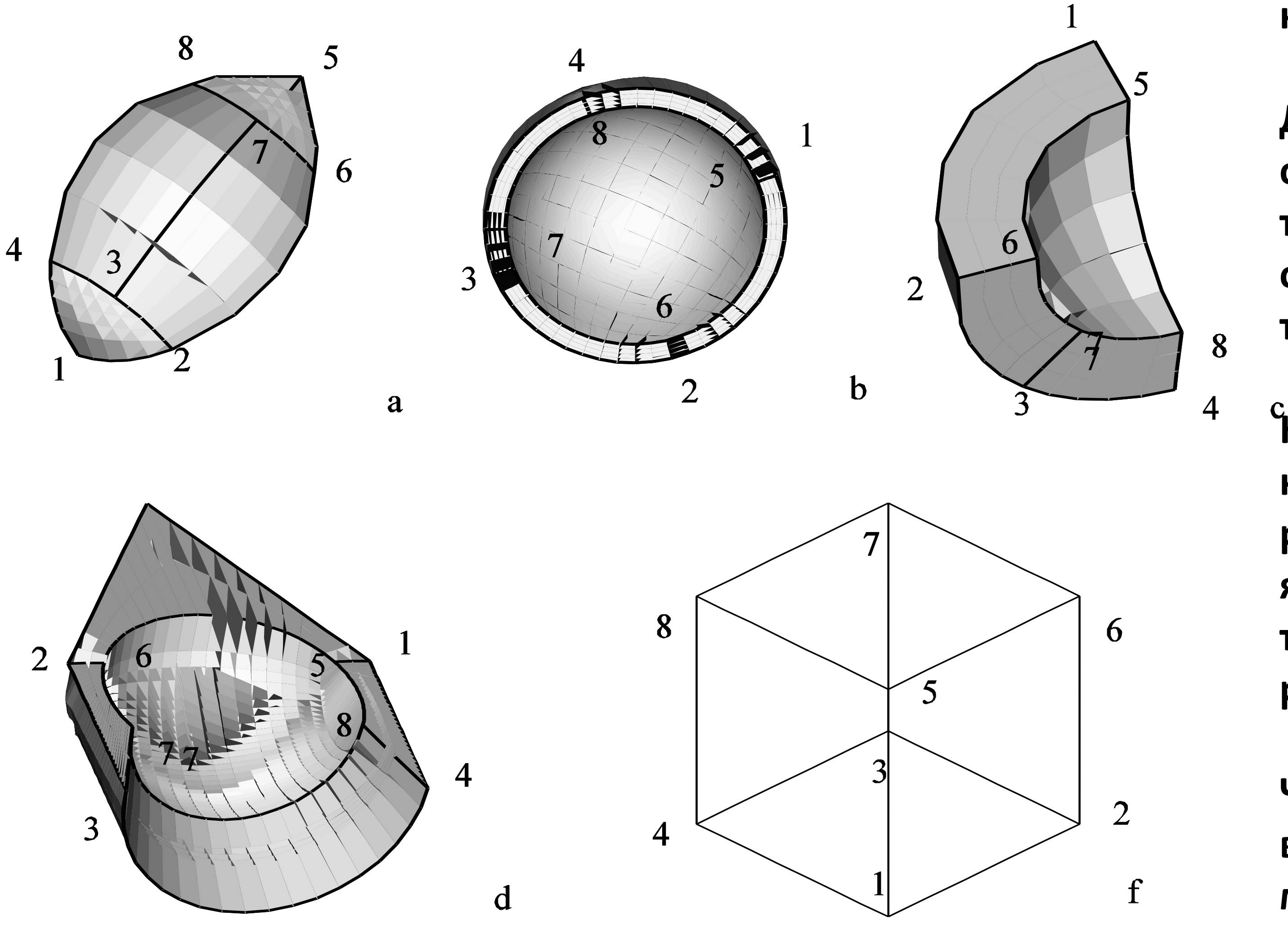
$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_{000}(1-\xi_1)(1-\xi_2)(1-\xi_3) + \mathbf{x}_{001}(1-\xi_1)(1-\xi_2)\xi_3$$
$$+\mathbf{x}_{010}(1-\xi_1)\xi_2(1-\xi_3) + \mathbf{x}_{011}(1-\xi_1)\xi_2\xi_3 + \mathbf{x}_{100}\xi_1(1-\xi_2)(1-\xi_3)$$
$$+\mathbf{x}_{101}\xi_1(1-\xi_2)\xi_3 + \mathbf{x}_{110}\xi_1\xi_2(1-\xi_3) + \mathbf{x}_{111}\xi_1\xi_2\xi_3$$

кубической ячейки $P = \{\xi = (\xi^1, \xi^2, \xi^3) : 0 \le \xi^l \le 1,\ l = 1, 2, 3\}$ определяет линейчатую ячейку с вершинами $\mathbf{x}_{i_1 i_2 i_3} = \mathbf{x}(i_1, i_2, i_3),\ i_1, i_2, i_3 = 0, 1$. Преобразование является трилинейным.

Ячейка невырождена, ясли якобиан J отображения $\mathbf{x}$ положителен.

ОСОБЕННОСТИ КОНФИГУРАЦИЙ ОБЛАСТЕЙ *G*

Конфигурация (способ представления области в виде криволинейного шестигранника) определяется отображением **x** из *P* в *G*.



Требовались одно-блочные сетки особой конфигурации.

Две грани криволинейного шестигранника образованы наборами поверхностей вращения (в том числе и с параллельными осями вращения), а остальные либо лежат в одной плоскости, либо тоже являются поверхностями вращения.

Конфигурации должны обеспечивать построение невырожденных внутри области ячеек, а вдоль ребер стыковки плоских граней шестигранные ячейки будут вырождаться в призмы с треугольным основанием, но другого типа, чем у ротационных сеток.

Численное моделирование допускает такие вырожденные ячейки. Для этих ячеек применяется модификация численного алгоритма решения задачи.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

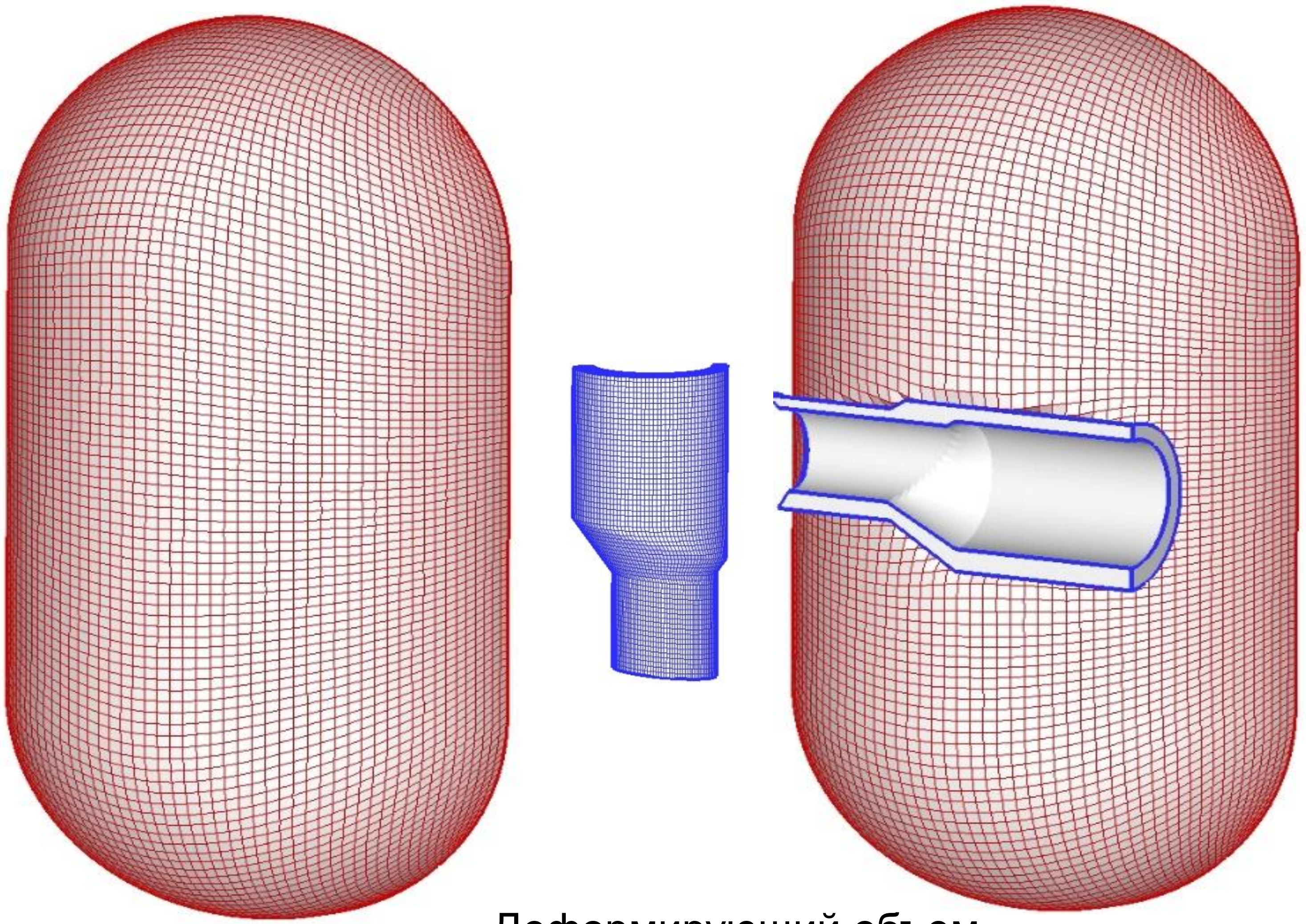
Для постановки задачи требуется

- описать основной объем[1],
- вспомогательный объем[1] ,
- задать параметры деформации.

[1] Геометрия различных видов объемов задается с помощью AutoCAD системы путем описания образующих. На основе нее в технологии формируются единообразные текстовые файлы с параметрами для построения сетки: числа узлов, конфигурации, при этом выделяются ее различные виды, называемые фигурами, и другие параметры.

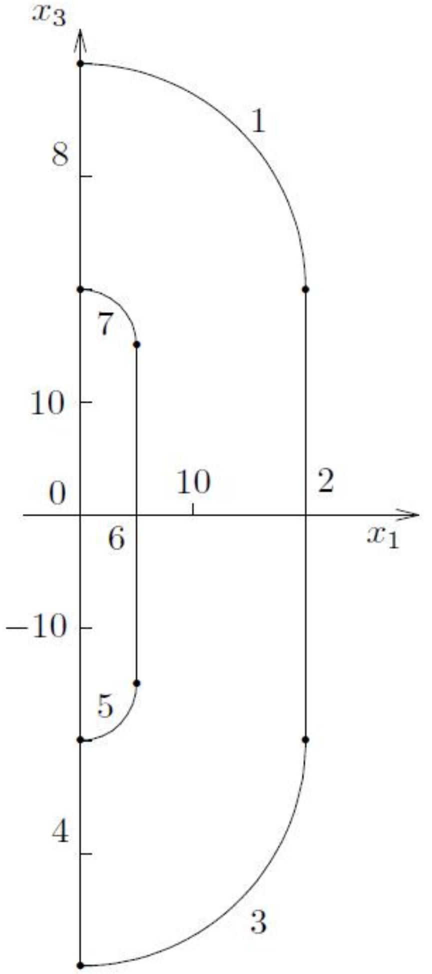
Основной объем

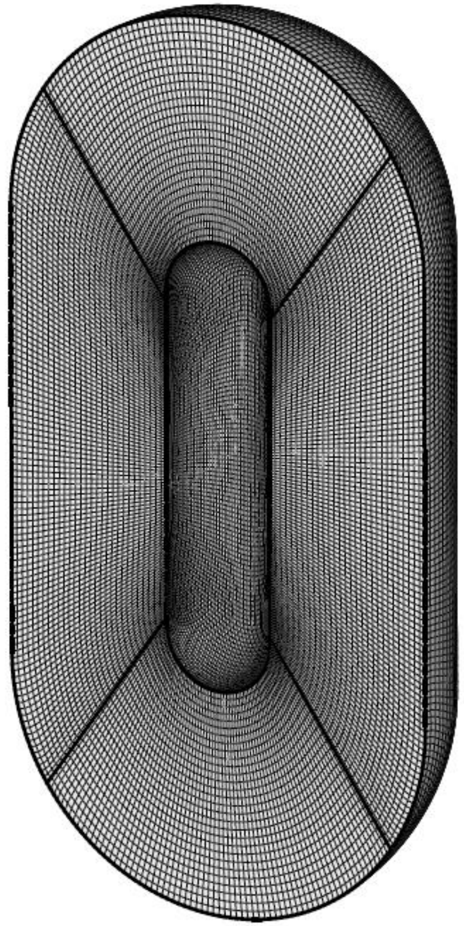
Параметры деформации



Деформирующий объем (вспомогательный).

ОСНОВНОЙ ОБЪЕМ – это объем вращения. Он задается в декартовой системе координат $\boldsymbol{X}$, называемой основной. В этой системе координат на плоскости x^1, x^3 задается замкнутая кривая $\boldsymbol{\partial U}$, ограничивающая односвязную двумерную область $\boldsymbol{U}$. Кривая $\boldsymbol{\partial U}$ состоит из отрезков прямых и дуг окружностей, называемых элементами (номера элементов обозначены цифрами), и выполняет роль образующей: при повороте на угол $\varphi = \pi$ вокруг оси x^3 она образует объем вращения $\boldsymbol{G_X}$ с границей $\boldsymbol{\partial G_X}$. С помощью точек на образующей задается конфигурация области.



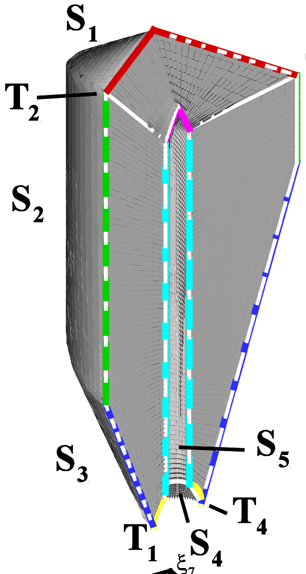


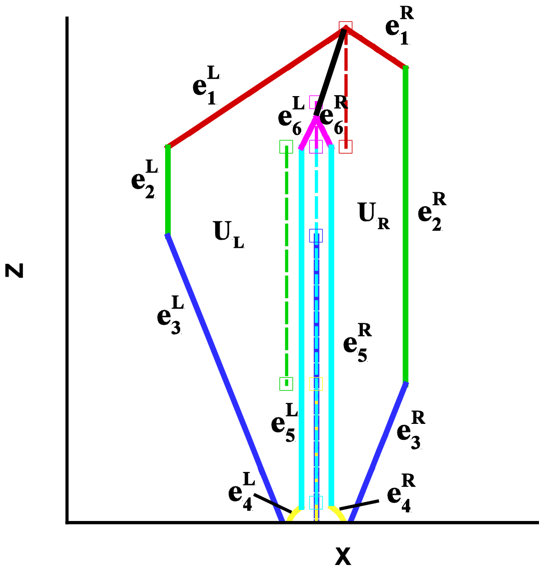
Образующая и оптимальная сетка для основного (деформируемого) тела

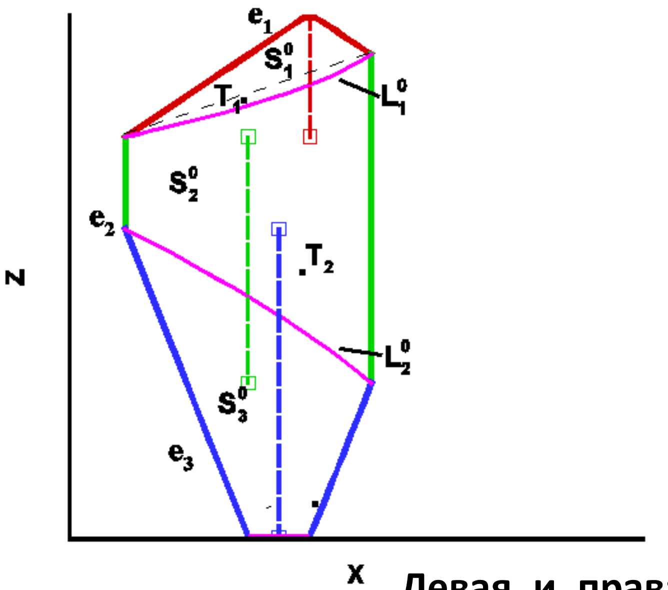
ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЙ ОБЪЕМ – это обобщение объема вращения.

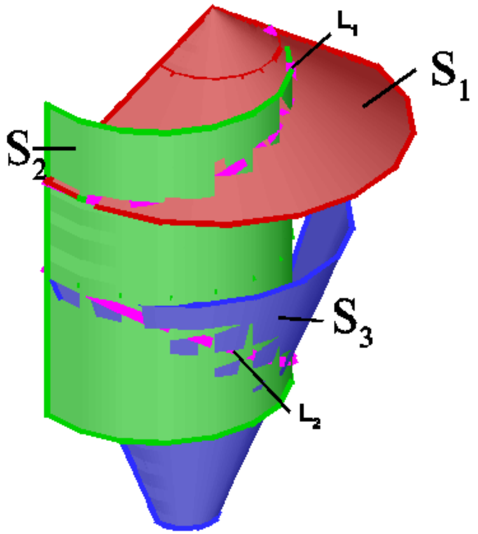
(Технология для построения сеток в обобщениях объемов вращения - объемах, образованных поверхностями вращения с параллельными осями вращения создана Т.Н.Брониной, О.В.Ушаковой.)

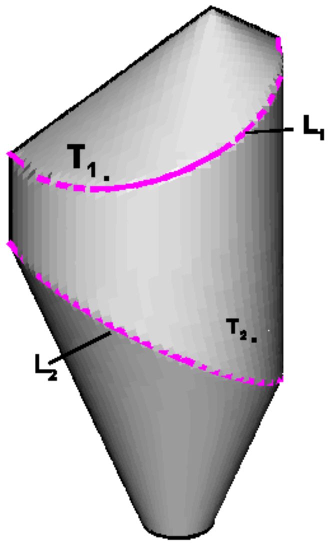
Объем образуется гранями криволинейного шестигранника, состоящими из поверхностей вращения, и двумя, тремя, или четырьмя гранями, лежащими в плоскости задания образующих. Для задания объема во вспомогательной системе координат $\boldsymbol{\Xi}$ (оси ξ^1, ξ^2, ξ^3) задаются левая $\boldsymbol{U_L}$ и правая $\boldsymbol{U_R}$ образующие, состоящие из элементов, и набор параллельных осей к ним.

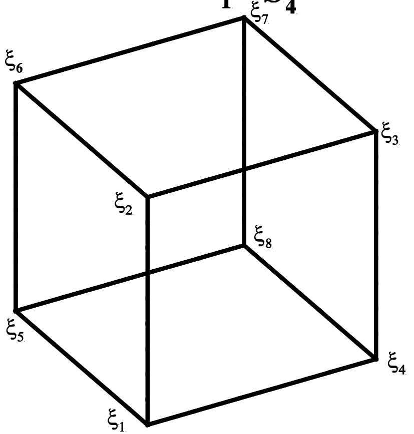








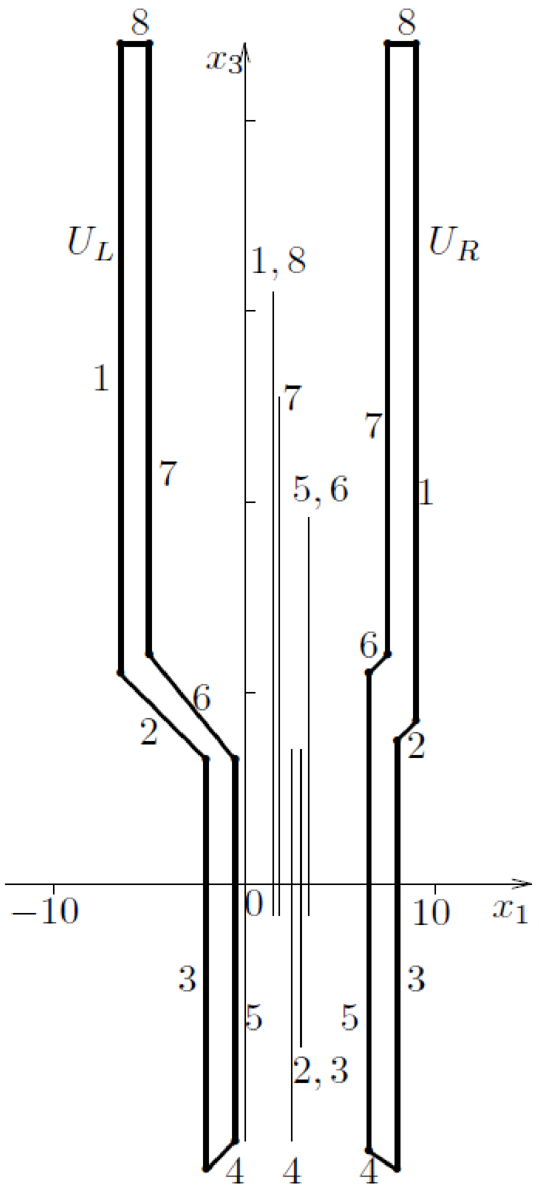


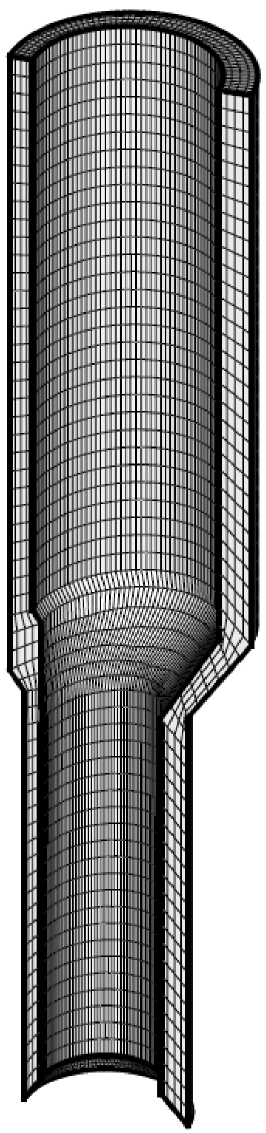


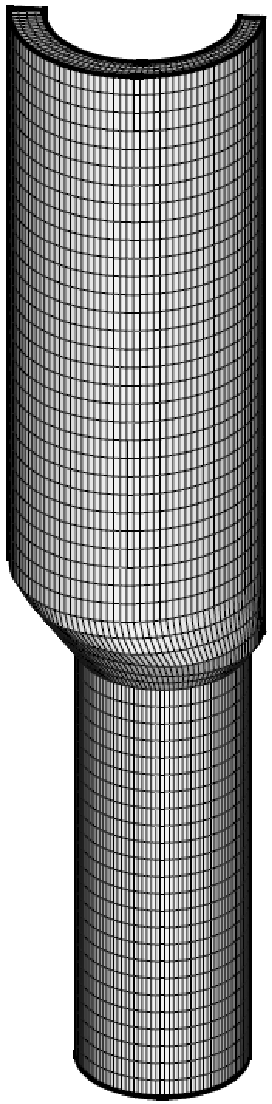
Пример: S_1 – конус, S_2 – цилиндр, S_3 – конус, S_4 – сфера, S_5 – цилиндр, S_6 -- конус

Левая и правая части образующей для каждой из двух граней, состоящих из поверхностей вращения, ограничивают замкнутую плоскую область, которая может быть поделена на подобласти ортогональными проекциями линий пересечения поверхностей вращения. Каждая из граней, *k=0, L-1,* образуется теми частями поверхностей вращения, ортогональные проекции которых совпадают с возникающими подобластями.

ПРИМЕР



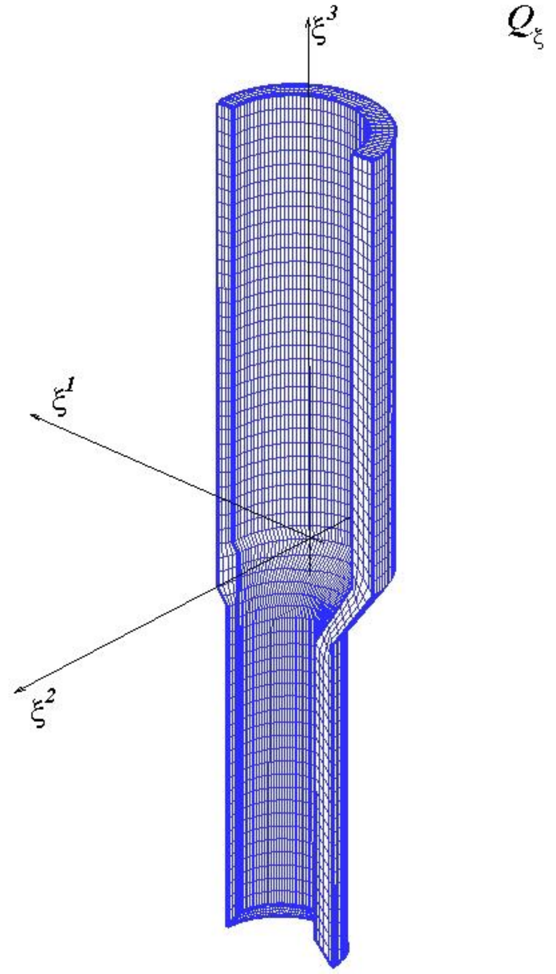




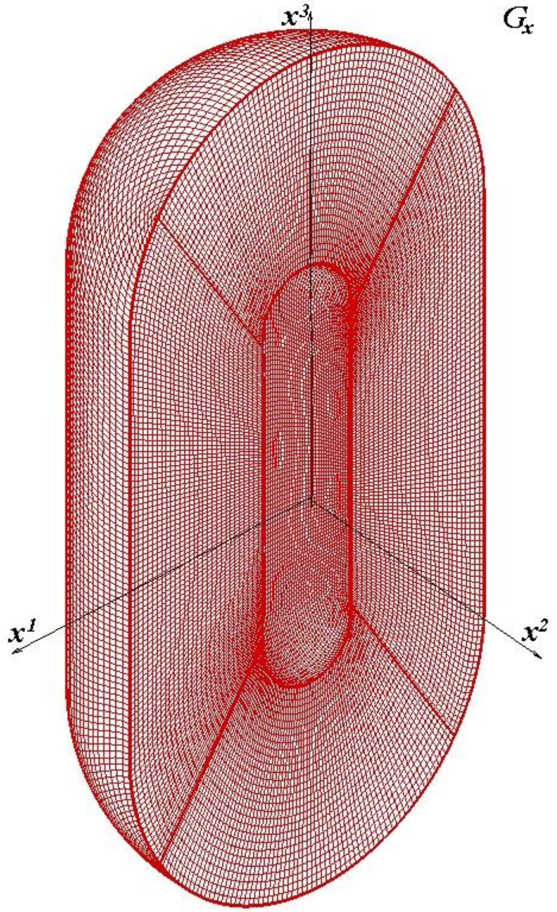
Образующая и сетка для вспомогательного (деформирующего) тела

ПАРАМЕТРЫ ДЕФОРМАЦИИ

Указываются координаты точки *O* начала координат системы $\boldsymbol{\Xi}$ в системе координат $\boldsymbol{X}$ и матрица *C* перехода от системы координат $\boldsymbol{\Xi}$ к системе координат $\boldsymbol{X}$. Столбцы матрицы *C* − координаты ортов $\boldsymbol{\xi}^1, \boldsymbol{\xi}^2, \boldsymbol{\xi}^3$ системы координат $\boldsymbol{\Xi}$ в системе координат **X.**

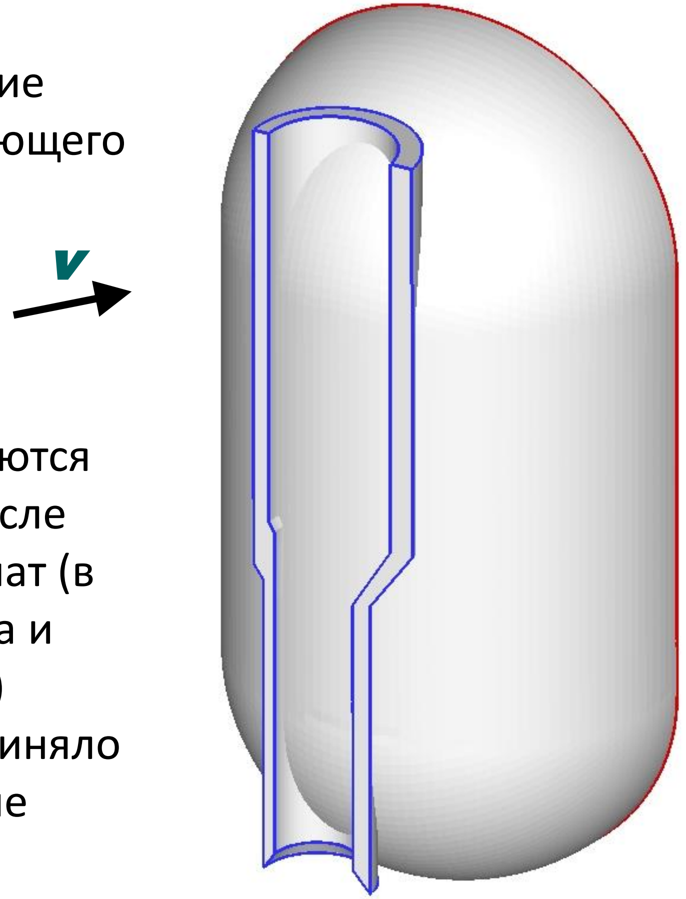


Деформирующее тело (вспомогательное тело)



Деформируемое тело (основное тело)

Задается вектор деформации ***v*** в системе координат ***X***, указывающий направление вдавливания деформирующего тела в основное.



Точка *O* и матрица *C* задаются таким образом, чтобы после преобразования координат (в общем случае − поворота и параллельного переноса) деформирующее тело приняло окончательное положение внутри основного тела.

Конечное положение деформирующего тела

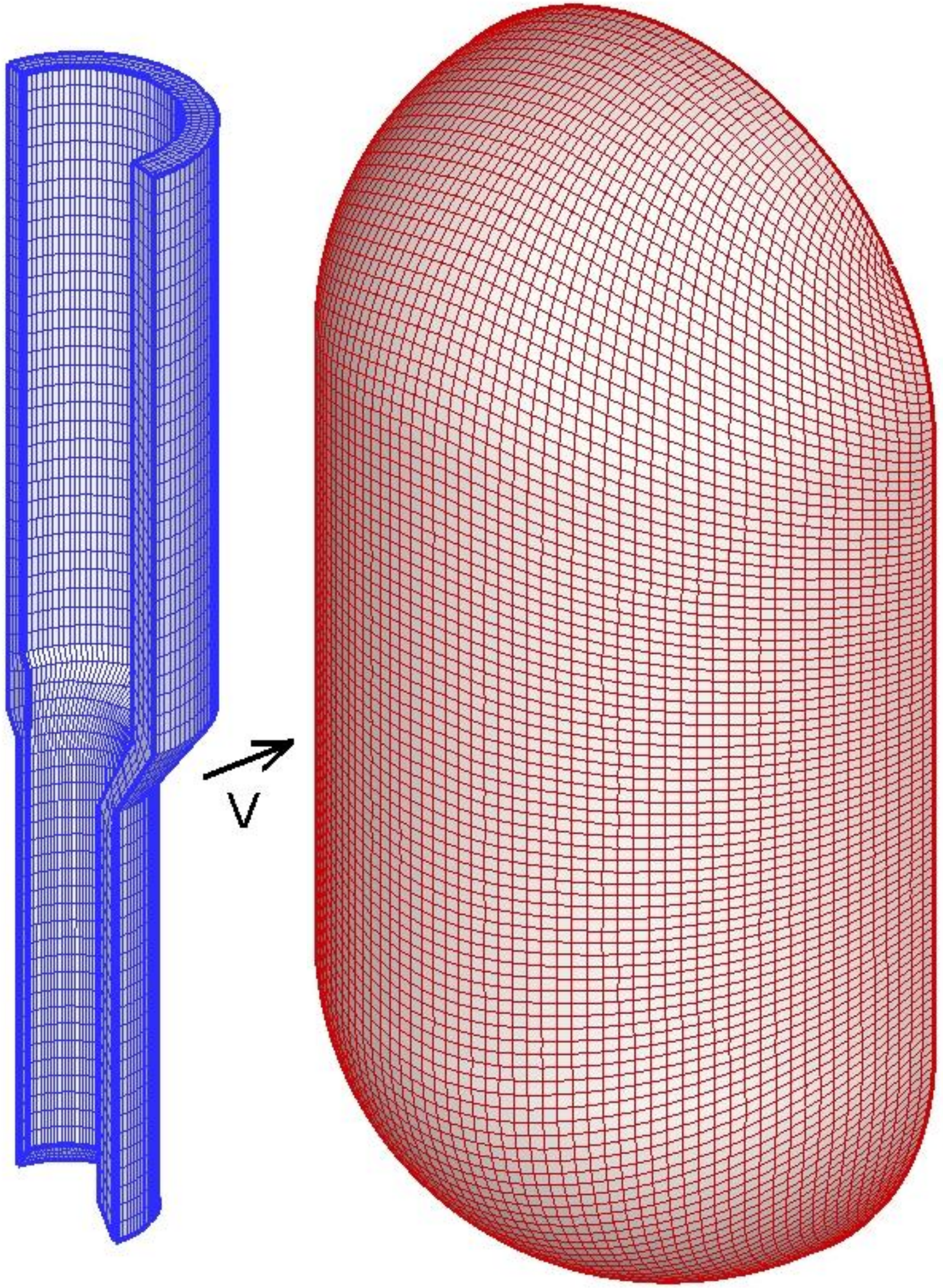
ИТЕРАЦИОННЫЙ ПРОЦЕСС (Н.А.Артемова)

1. **ПОДГОТОВИТЕЛЬНЫЙ ЭТАП.** Анализ образующей деформирующего тела.
2. **ДЕФОРМАЦИЯ СЕТКИ**

ВЫБОР ШАГА ДЕФОРМАЦИИ: Шаг равен среднему расстоянию между узлами сетки основного тела $\boldsymbol{G_X}$. Он уменьшается, если деформирующее тело пересекает приграничную окаймляющую поверхность основного тела. (Система координат деформирующего тела $\boldsymbol{\Xi}$).

СДВИГ ТЕЛА НА ШАГ ДЕФОРМАЦИИ: Основное тело сдвигается на шаг деформации. Граничная поверхность основного тела $\boldsymbol{G_X}$ проверяется на пересечение с деформирующим телом $\boldsymbol{Q_\Xi}$. Узлы $\boldsymbol{G_X}$, попавшие в $\boldsymbol{Q_\Xi}$, проецируются на поверхность $\boldsymbol{Q_\Xi}$. (Система координат $\boldsymbol{\Xi}$).

3. **ОПТИМИЗАЦИЯ СЕТКИ (ФРАГМЕНТА)** по программе Ушаковой О.В. (Система координат $\boldsymbol{X}$).
4. **ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНИЯ ДЕФОРМАЦИИ:** Основное тело сместилось на заданный вектор. (Система координат $\boldsymbol{\Xi}$).



АЛГОРИТМ ДЕФОРМАЦИИ СЕТКИ

Моделирование деформации: вспомогательное тело двигается внутрь основного тела, граничные узлы основного тела, попадающие во вспомогательное тело, проецируются на деформирующую поверхность, и основное тело и сетка для него деформируются.

ПОДГОТОВИТЕЛЬНЫЙ ЭТАП

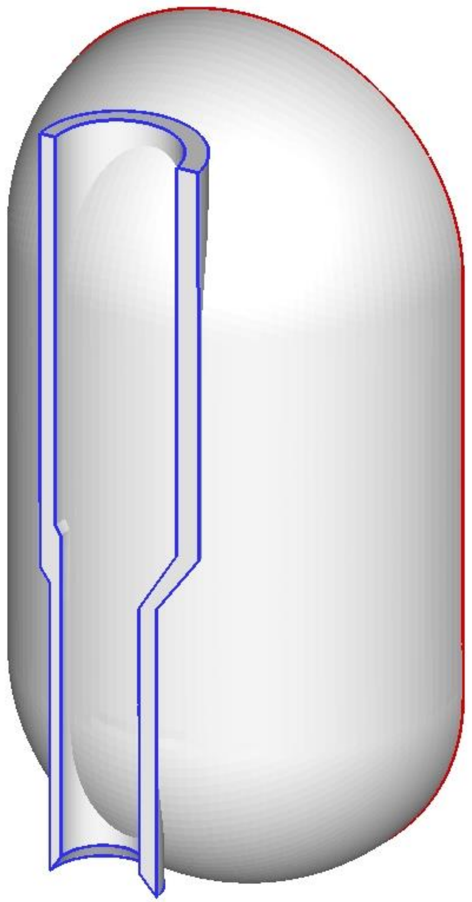
- Анализируются поверхности деформирующего тела $\boldsymbol{U_L}$ и $\boldsymbol{U_R}$ с целью определения их видов. При вращении элементов (отрезков прямых и дуг окружностей) получаются цилиндрические, конические и сферические поверхности, соответственно.
- Для случая деформации обобщениями объемов вращения нужно найти элементы, формирующие давящую поверхность, как для левой, так и для правой образующей. Чтобы воспользоваться формулами, описывающими тела вращения (конус, цилиндр, сферу), нужно все расчеты проводить в системе координат $\boldsymbol{\Xi}$, а не $\mathbf{X}$.
- Для этого деформирующее тело не должно сдвигаться в процессе деформации, вместо этого должно сдвигаться деформируемое. Поэтому начало координат O, вектор деформации $\boldsymbol{v}$, а также координаты всех узлов основной области преобразуются в систему координат $\boldsymbol{\Xi}$.

ПОДГОТОВИТЕЛЬНЫЙ ЭТАП

- В результате преобразований основное тело примет свое конечное положение (деформирующее тело окажется внутри основного).

- Далее необходимо выдвинуть основное тело так, чтобы не было пересечения (касание допускается) с деформирующим телом. Алгоритм выдвижения основного тела из деформирующего состоит в том, чтобы вычислить минимальные и максимальные координаты основного и вспомогательного тел в системе координат Ξ, затем определить минимальные перемещения координат для выдвижения основного тела из вспомогательного и все координаты основного тела изменить на найденные значения.

- После выдвижения основное тело не пересекается со вспомогательным и можно начать его деформировать.



АЛГОРИТМ ДЕФОРМАЦИИ СЕТКИ

- Определяется скорость (шаг) деформации. Шаг полагается равным среднему расстоянию между узлами основной сетки.

- Так как в системе координат $\boldsymbol{\Xi}$ основное тело движется на вспомогательное (в направлении, противоположном заданному вектору ***v***), все узлы основной сетки сдвигаются в направлении -***v*** на этот шаг, после чего проверяются условия попадания узлов приграничной поверхности основного тела внутрь деформирующего тела.

- Если для какого-то узла приграничной поверхности основного тела выполняются условия попадания во вспомогательное тело, значит, узел попал внутрь деформирующего тела, следовательно, приграничная поверхность основного тела $\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{\Xi}}$ пересекла деформирующую поверхность $\boldsymbol{\partial Q}_{\boldsymbol{\Xi}}$. В таком случае шаг делится пополам и узлы сетки пересчитываются с новым шагом.

АЛГОРИТМ ДЕФОРМАЦИИ СЕТКИ

- Когда шаг выбран (деформирующее тело не пересекает приграничную поверхность основного тела), координаты всех узлов сетки основного тела изменяются на величину выбранного шага.

- На попадание внутрь деформирующего тела проверяются узлы границы основного тела. Попавшие узлы проецируются на деформирующуюся поверхность.

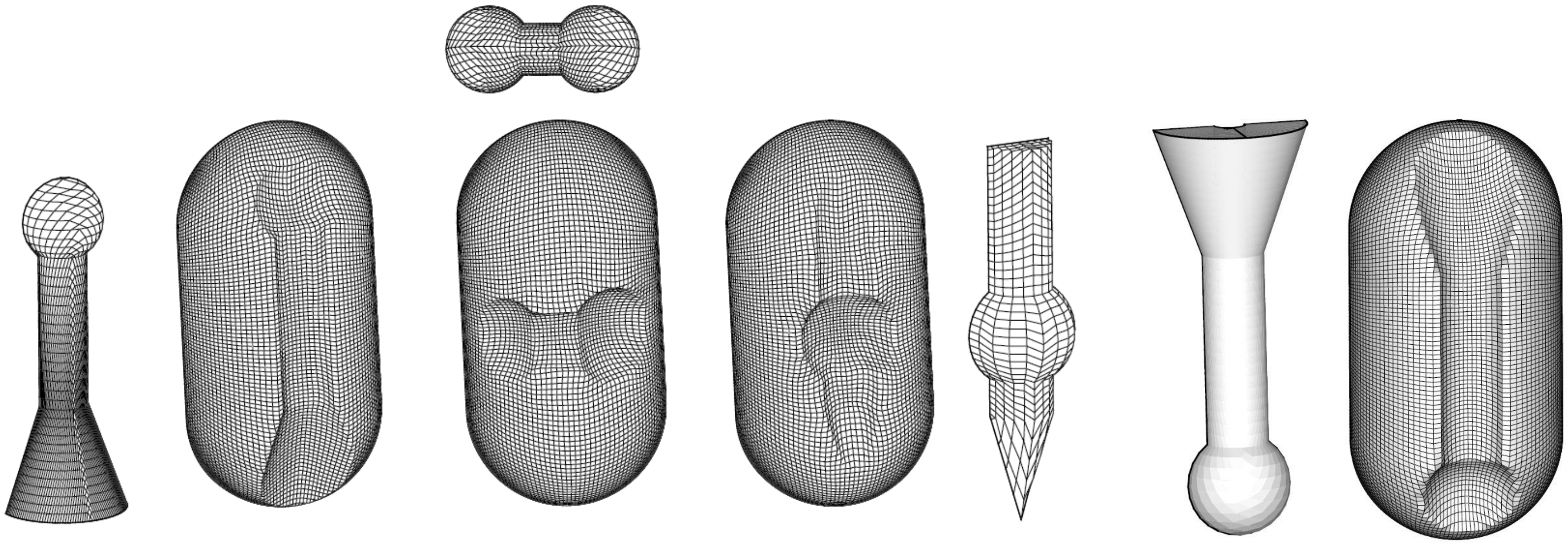
- После проецирования всех узлов, подвергшихся деформации, на деформирующую поверхность, сетка оптимизируется. При этом осуществляется обратное преобразование координат в основную систему ***X***.

- Такие итерации сдвига основного тела на вспомогательное повторяются до тех пор, пока не осуществится требуемая деформация.

ТЕХНОЛОГИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА СЕТОК В ДЕФОРМИРОВАННЫХ ОБЪЕМАХ ВРАЩЕНИЯ (Н.А.Артемова, Т.Н.Бронина, О.В.Ушакова)

- Первоначально реализована для случаев давления на объем вращения конусом, цилиндром и сферой.

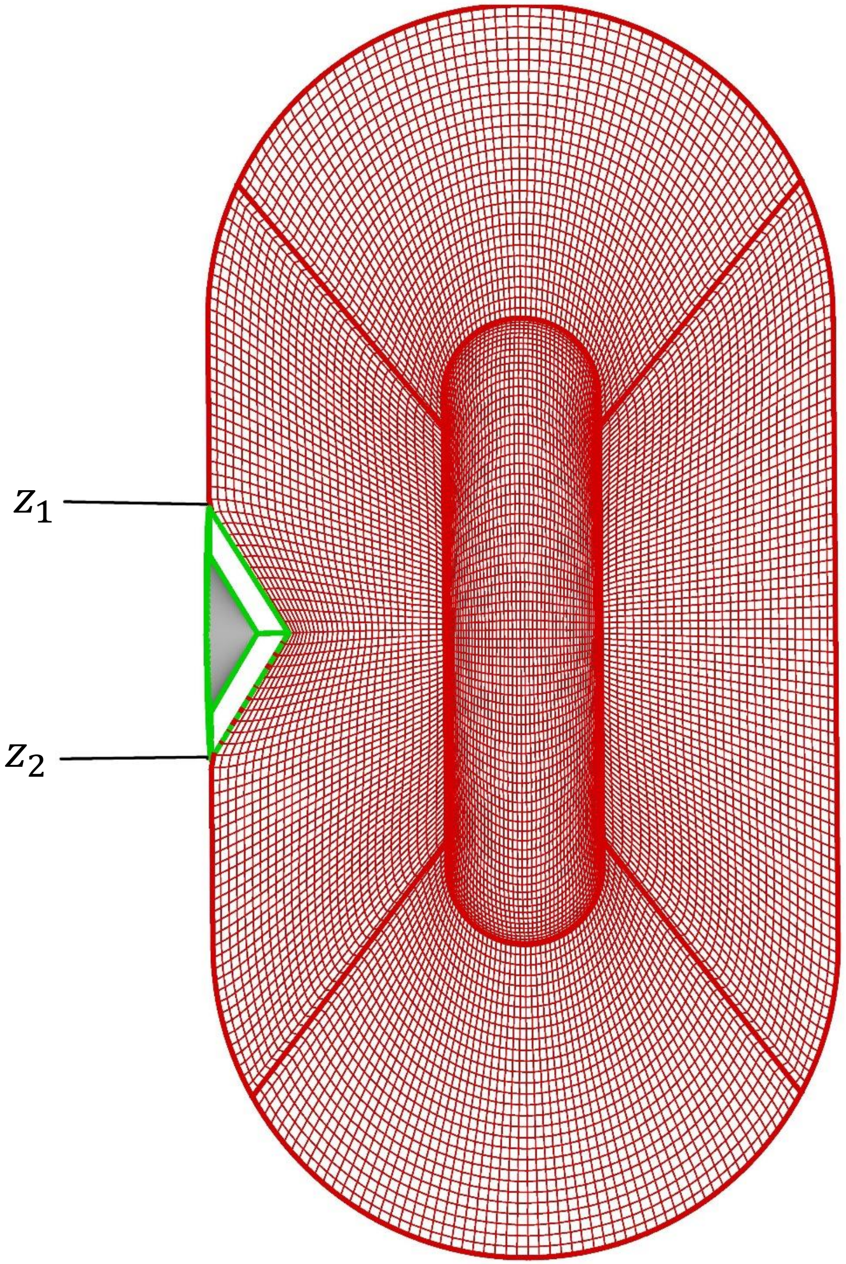
- Рассмотрение этих случаев является необходимым этапом для разработки технологии для более общего случая: давления на объем вращения объемом вращения сложного вида



и обобщением объема вращения,

так как коническая, цилиндрическая и сферическая поверхности формируют границу деформирующего тела в общем случае.

ДЕФОРМАЦИЯ КОНУСОМ, ЦИЛИНДРОМ ИЛИ СФЕРОЙ



При деформации конусом (цилиндром или сферой) все узлы граничной поверхности *k=L* основного тела в диапазоне вспомогательного тела $z_1 \leq \xi^3 \leq z_2$ проверяются на попадание внутрь конуса по формуле:

$$(\xi^1 - a)^2 + {\xi^2}^2 \leq t^2\left(\xi^3 - {\xi^3}_v\right)^2.$$

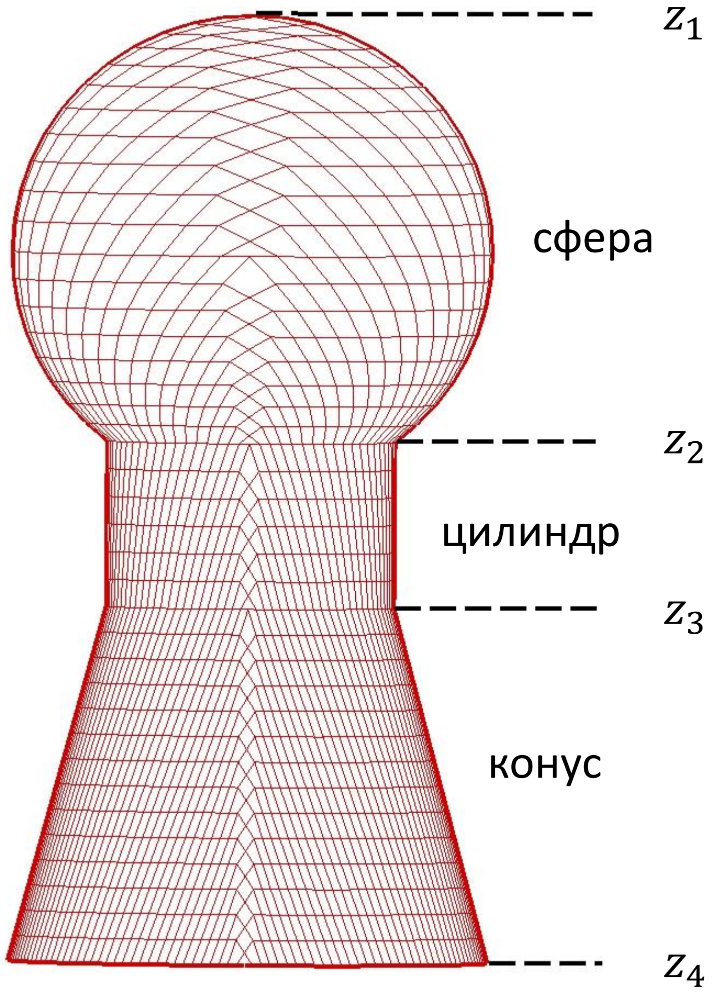
(для цилиндра $(\xi^1 - a)^2 + {\xi^2}^2 \leq R^2$,

для сферы $(\xi^1 - a)^2 + {\xi^2}^2 + (\xi^3 - \xi^3_O)^2 \leq R^2$).

Здесь a – координата ξ^1 оси вращения, R – радиус цилиндра, сферы, t–вычисляемый параметр, v–вершина конуса.

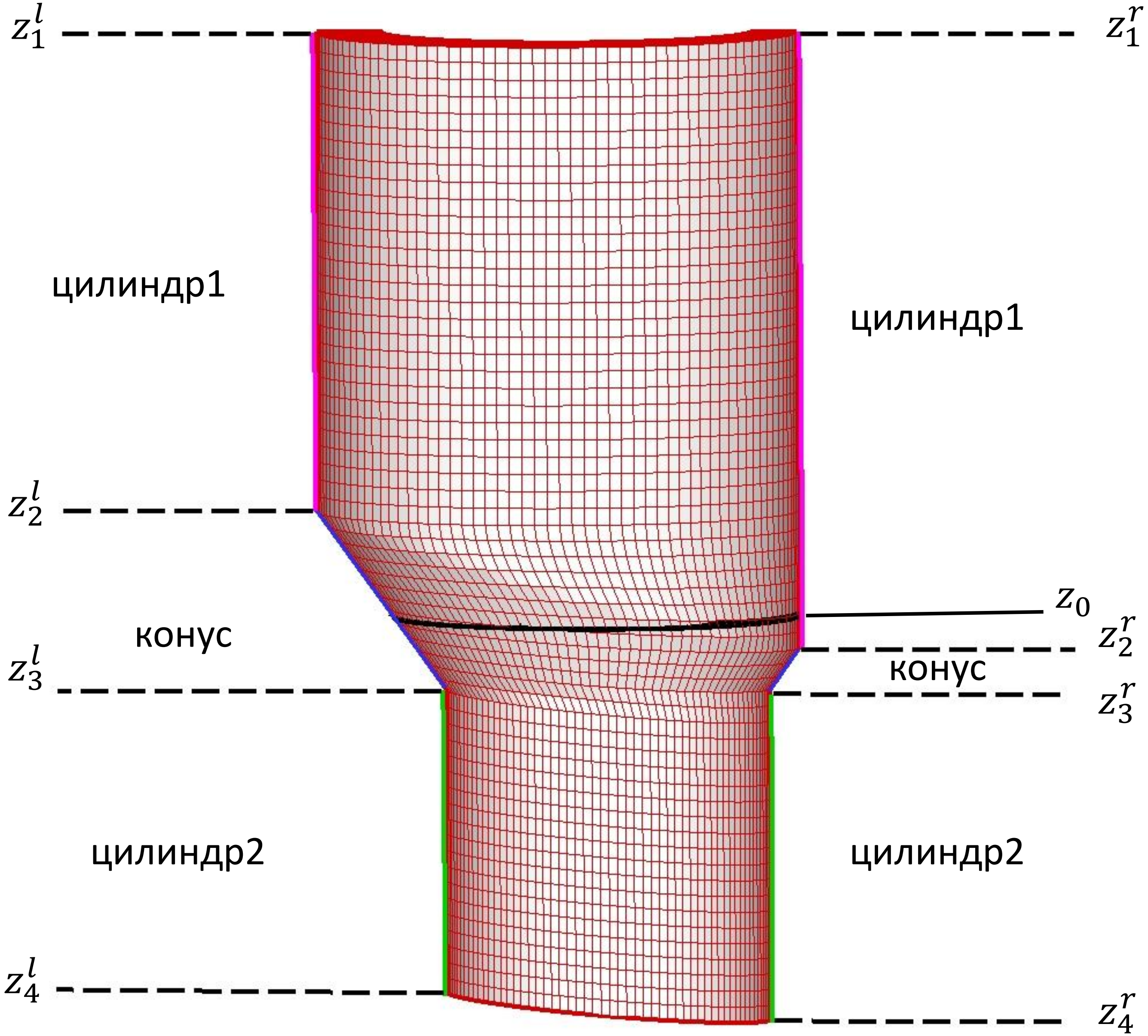
Точки, удовлетворяющие условию, проецируются на конус (цилиндр, сферу).

ДЕФОРМАЦИЯ ОБЪЕМОМ ВРАЩЕНИЯ СЛОЖНОГО ВИДА



При деформации объемом вращения сложного вида сначала проводится анализ образующей и определяются диапазоны $[z_i, z_{i+1}]$ для элементов образующей или поверхностей вращения (цилиндрической, конической, сферической) вспомогательного тела. Для узлов граничной поверхности основного тела, принадлежащих каждому из диапазонов вспомогательного тела, проверяются соответствующие условия попадания в тело.

ДЕФОРМАЦИЯ ОБОБЩЕНИЕМ ОБЪЁМА ВРАЩЕНИЯ



При деформации обобщением объёма вращения диапазоны поверхностей вращения левой и правой образующей могут не совпадать, поэтому узлы граничной поверхности основного тела с координатой $\xi^3 = z_0$ (чёрная линия на сетке) проверяются на попадание в цилиндр1 и конус. Если оба условия выполняются, то узел проецируется на ближайшую из поверхностей.

АЛГОРИТМ ОПТИМИЗАЦИИ СЕТКИ

Наиболее гибкими в построении оптимальных сеток, удовлетворяющих перечисленным выше требованиям проявили себя вариационные методы. Вариационные методы построения сеток хотя и требуют при их реализации решения довольно трудоемких задач (минимизации функционалов от функций многих переменных или решения соответствующих уравнений Эйлера − Остроградского (Э-О)), тем не менее дают возможность строить сетки, удовлетворяющие различным критериям оптимальности и с хорошими вычислительными достоинствами.

Так как требовались сетки близкие к равномерным и ортогональным (геометрически оптимальные), были выбраны следующие **критерии оптимальности.**

1. **Критерий близости сеток к равномерным (Р).** Объемы соседних элементарных ячеек сетки должны быть одного порядка. В противном случае трудно строить достаточно точные разностные аппроксимации дифференциальных уравнений. Резко ухудшается обусловленность систем разностных уравнений, аппроксимирующих на построенной сетке системы дифференциальных уравнений.

2. **Критерий близости сеток к ортогональным (О).** Координатные линии или поверхности различных семейств не должны пересекаться под углами, близкими к 0 или π. В противном случае также ухудшается обусловленность систем разностных уравнений.

МИНИМИЗИРУЕМЫЙ ФУНКЦИОНАЛ

Построение сетки осуществляется минимизацией функционала, представляющего собой сумму дискретных мер уклонения сетки от требуемых качеств:

$$D = D_P + A_O D_O \ ,$$

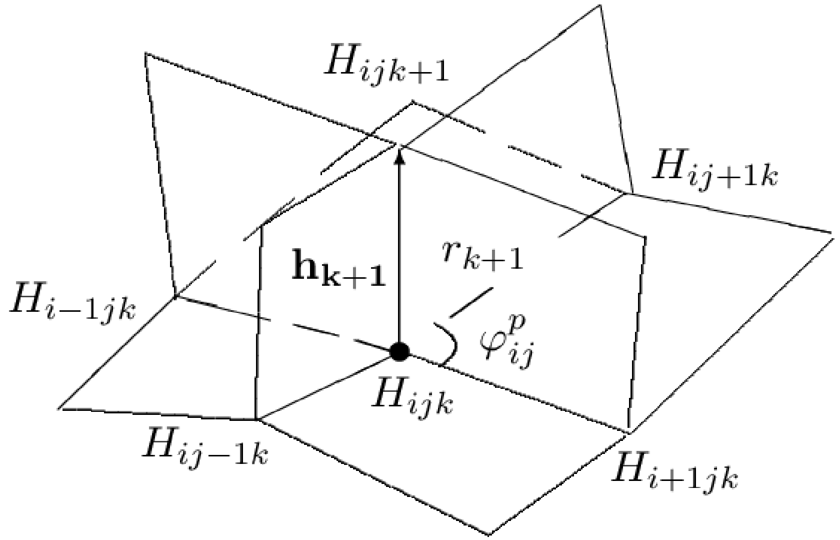
D_P – функционал равномерности (мера равномерности сетки),

D_O – функционал ортогональности (мера ортогональности сетки),

$A_O > 0$ – весовой коэффициент.

ДИСКРЕТНЫЕ ФУНКЦИОНАЛЫ ОПИМАЛЬНОСТИ СЕТКИ

$$D_{\mathrm{P}} = \sum_{ijk}\Big\{(r_{i+1jk} - r_{i-1jk})^2\left(\frac{1}{r_{i+1jk}^2} + \frac{1}{r_{i-1jk}^2}\right) + (r_{ij+1k} - r_{ij-1k})^2\left(\frac{1}{r_{ij+1k}^2} + \frac{1}{r_{ij-1k}^2}\right) +$$
$$(r_{ijk+1} - r_{ijk-1})^2\left(\frac{1}{r_{ijk+1}^2} + \frac{1}{r_{ijk-1}^2}\right)\Big\},$$



$$D_{\mathrm{O}} = \sum_{ijk}\sum_{p=1}^{4}\left(\frac{1}{\sin^2\varphi_{ij}^p} + \frac{1}{\sin^2\varphi_{jk}^p} + \frac{1}{\sin^2\varphi_{ik}^p}\right),$$

Здесь $r_{i\pm1jk} = r_{i\pm1} = \left|\overrightarrow{H_{ijk}H_{i\pm1jk}}\right| = \left|\mathbf{h}_{i\pm1}\right|, r_{ij\pm1k} = r_{j\pm1} = \left|\mathbf{h}_{j\pm1}\right|, r_{ijk\pm1} = r_{k\pm1} = \left|\mathbf{h}_{k\pm1}\right|.$
Значения $\varphi_{ij}^p, p = 1, 2, 3, 4$ обозначают углы между векторами $\mathbf{h}_{i\pm1}$ и $\mathbf{h}_{j\pm1}$.

НЕПРЕРЫВНЫЕ ФУНКЦИОНАЛЫ ОПТИМАЛЬНОСТИ

$$I = I_U + A_O I_O,$$

$$I_{\mathsf{U}} = \iiint\limits_P \sum_{i=1}^{3} \left(\frac{\partial}{\partial \xi_i} \ln \sqrt{g_{ii}} \right)^2 d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3,$$

$$I_{\mathsf{O}} = \iiint\limits_P \frac{1}{J^2} \sum_{k=1, i, j \neq k}^{3} \frac{g_{ii} g_{jj}}{g^{kk}} d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3,$$

$$g_{ii} = \sum_{k=1}^{3} \left(\frac{\partial x_k}{\partial \xi_i} \right)^2, \quad J = \det \left\{ \frac{\partial x_i}{\partial \xi_k} \right\}, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial \xi_i} = \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \frac{\partial x_j}{\partial \xi_i},$$

$$g^{kk} = (g_{ii} g_{jj} - g_{ij}^2)/J^2, \quad k \neq i, j, \quad g_{ij} = \sum_{m=1}^{3} \frac{\partial x_m}{\partial \xi_i} \frac{\partial x_m}{\partial \xi_j}.$$

ОСОБЕННОСТЬ ПОДХОДА

состоит в специальном способе формализации критерия (P), приводящем к нелинейному непрерывному вариационному функционалу, в который входят как первые, так и вторые частные производные функций, реализующих отображение.

- Непрерывный функционал появляется естественным образом после рассмотрения дискретного функционала, минимизирующего меру относительной погрешности неравномерной сетки по сравнению с равномерной[3]. Такая формализация приводит к системе уравнений Э-О четвертого порядка[4], гиперболической в широком смысле.

- Это позволяет рассматривать различные типы краевых условий, а также разработать эффективные алгоритмы и программы построения сеток для весьма сложных областей.

- Процедура расчета сеток осуществляется прямым геометрическим способом минимизации дискретного функционала, формализующего критерии оптимальности.

[3]Функционал I_P называется в книге Лисейкина В.Д. функционалом эксцентриситета и является мерой эксцентриситета сетки. Величина $\left(\frac{\partial}{\partial \xi_i} \ln \sqrt{g_{ii}}\right)^2$ **является относительной мерой эксцентриситета сетки вдоль *i*-го координатного направления, характеризующей изменение расстояний между узлами (ребер ячеек, шагов сетки) вдоль указанного координатного направления. Если она равна 0, расстояние между узлами не меняется в данном направлении. Liseikin V.D. Grid generation methods. Berlin: Springer, 1999.**

[4]В подавляющем большинстве случаев в интегральные вариационные функционалы, формализующие критерии оптимальности, входят первые частные производные функций, осуществляющих отображение. Уравнения Э-О для них – система уравнений в частных производных второго порядка, как правило, эллиптического типа.

АЛГОРИТМ ОПТИМИЗАЦИИ используется для оптимизации начальной сетки и деформированной сетки. Построение сетки осуществляется минимизацией дискретного функционала качества сетки

$$D=D_P+A_O D_O.$$

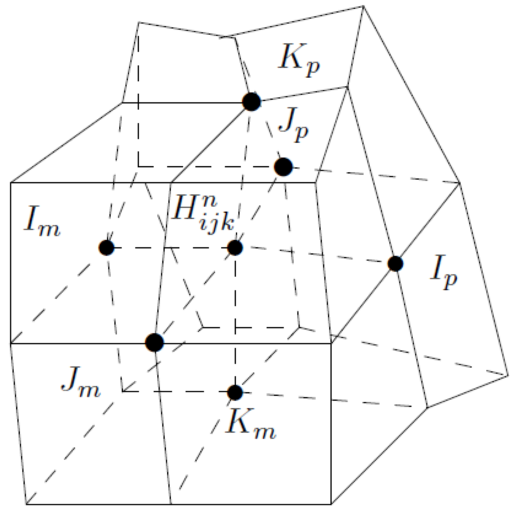
Итерационная процедура. Минимизация функционала ***D*** осуществляется аналогом метода покоординатного спуска, где в качестве одного из направлений минимизации выступает один узел сетки. На каждой итерации n для нахождения каждого внутреннего узла H_{ijk}^n осуществляется локальная оптимизация сетки, основанная на геометрических принципах. Положение нового узла H_{ijk}^{n+1} ищется из условия минимума функционала

$$D(\mathbf{x}_{000}^n, \mathbf{x}_{001}^n, \ldots, \mathbf{x}_{ijk}^{n+1}, \ldots, \mathbf{x}_{N-1,L-1,K-1}^n) = \min_{\mathbf{x}_{ijk} \in H} D(\mathbf{x}_{000}^n, \mathbf{x}_{001}^n, \ldots, \mathbf{x}_{ijk}, \ldots, \mathbf{x}_{N-1,L-1,K-1}^n)$$

на специально построенном множестве H и из условия невырожденности сетки.

- Локальная минимизация осуществляется на шаблоне из восьми ячеек сетки, содержащих узел H_{ijk}^{n} в качестве вершины.

- Внешние узлы шаблона фиксируются. Смещение любого узла не изменяет геометрию шаблонов узлов, не являющихся соседями с данным узлом, следовательно, оно не может изменить значения отображения, задающего сетку, и его якобиана в узлах, не являющихся соседними с данным, а значит, и качество сетки в этих узлах. Допустимым множеством (обеспечивающим невырожденность) в большой части случаев будет восьмигранник с плоскими гранями, с вершинами в точках I_m, I_p, J_m, J_p, K_m, K_p, если этот восьмигранник выпуклый.

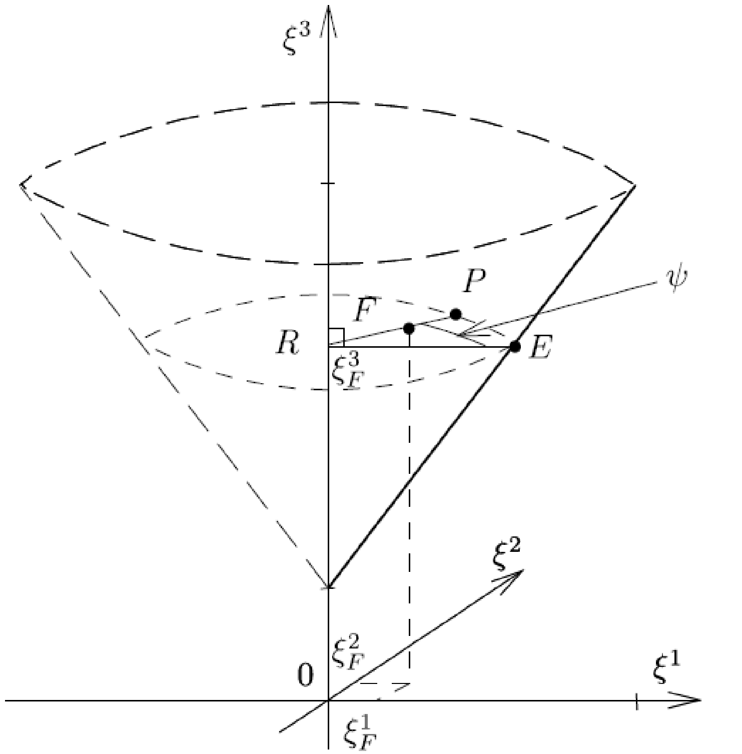


- После того как очередной узел найден, его координаты заменяются на новые. Пересчет узлов осуществляется в циклах по возрастанию индексов узлов на четных итерациях и из соображений симметрии на нечетных итерациях − по убыванию индексов.

- Деформации подвергается незначительная часть основной области, поэтому оптимизировать сетку во всей области на каждом шаге деформации нецелесообразно, достаточно оптимизировать фрагмент сетки, подвергшийся деформации (при условии, что начальная сетка оптимальна).

СВОЙСТВО КОНСЕРВАТИВНОСТИ СЕТКИ – свойство сохранять объем области как локально внутри ячеек, так и области в целом.

Недостатком алгоритма оптимизации являлось то, что движение узлов на границе областей вращения осуществлялось по линейчатым поверхностям граней начальной сетки. В результате граничные узлы могли лежать вблизи поверхностей вращения, но не принадлежать им, что могло приводить к потере точности при аппроксимации краевых условий и потере объема, поэтому был разработан алгоритм коррекции узлов сетки к поверхностям вращения.



Идея алгоритма. Граничные узлы (не лежащие на плоских гранях) проецируются лучом, идущим в радиальном к оси вращения направлении, на соответствующую поверхность вращения. Какая поверхность вращения выбирается для проецирования узла, определяется третьей координатой узла, соответствующей оси вращения. Каждый элемент образующей кривой имеет свой диапазон изменения третьей координаты. Для каждой грани, формируемой поверхностями вращения, определяются номера элементов, формирующих грань. Интервал, который включает в себя третью координату узла, определяет номер элемента, порождающего соответствующую поверхность вращения. Благодаря этому алгоритму движение узлов осуществляется вдоль поверхностей вращения, и алгоритм оптимизации становится консервативным.

Ушакова О.В. Алгоритм коррекции сетки к области вращения. Вопр. Атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов. 2016. Вып. 1. С. 16-27.

Ушакова О.В. Применение алгоритма коррекции сетки к области вращения. Вопр. атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов. 2016. Вып. 2. С. 31-37.

АЛГОРИТМ КОРРЕКЦИИ К ГРАНИЦЕ ОБЪЕМА, ДЕФОРМИРОВАННОГО ОБОБЩЕНИЕМ ОБЪЕМА ВРАЩЕНИЯ

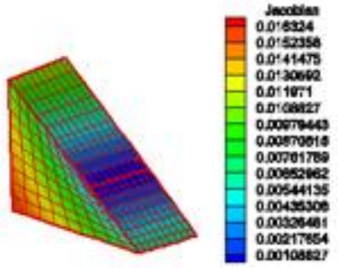
В основе лежит алгоритм коррекции сетки для объема, деформированного объемом вращения [1] , а также алгоритм коррекции сетки к границе области для обобщения объема вращения [2]. Общая схема алгоритма совпадает со схемой алгоритма [1]: недеформированные узлы (они помечаются цифрой 0) корректируются к основному объему вращения до деформации (проецируются на него), а деформированные узлы (они помечаются цифрой 1) − к вспомогательному объему, который в данном случае является обобщением объема вращения по алгоритму [2].

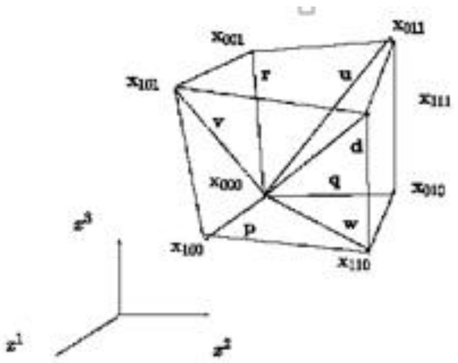
Если после деформации сетки узел находится на основном теле, то его новое положение в процессе оптимизации ищется также на основном теле. Если узел находится на вспомогательном теле, то его новое положение ищется на вспомогательном теле.

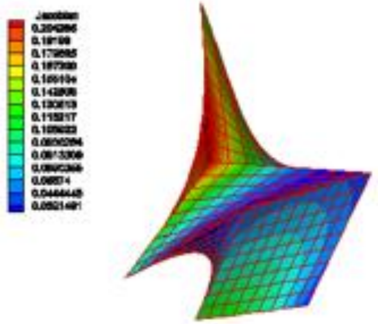
Сначала точка для построения допустимого множества для минимизации функционала ищется на линейчатых поверхностях граней ячеек сетки, затем она проецируется либо на основное, либо на вспомогательное тело в зависимости от значения признака. Проецирование точек на поверхности вращения у деформируемого тела осуществляется только на гранях $k=0$ и $k=L$, так как остальные грани являются плоскими и в процессе деформации основного тела остаются плоскими.

1. **Ушакова О.В. Алгоритм коррекции сетки к деформированной области вращения. Вопр. атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов. 2017. Вып. 2. С. 53-65.**
2. **Ушакова О.В. Алгоритм коррекции сетки к области, образованной поверхностями вращения с параллельными осями вращения. Вопр. атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов. 2018. Вып. 1. С. 30-41.**

- Шестигранные линейчатые ячейки
  - Невырожденные
    - Выкрученные
    - Невыкрученные
  - Вырожденные
    - Самопересекающиеся
    - Не-самопересекающиеся







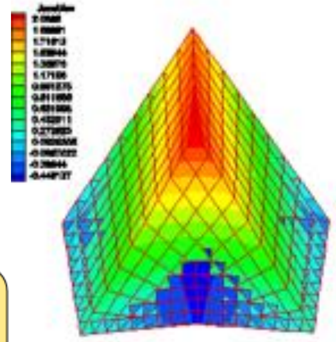
КЛАССИФИКАЦИЯ ШЕСТИГРАННЫХ ЯЧЕЕК

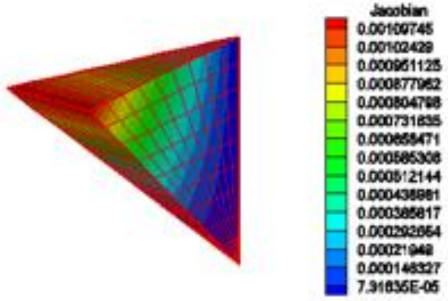
Алгоритм тестирования сетки (О.В.Ушакова)

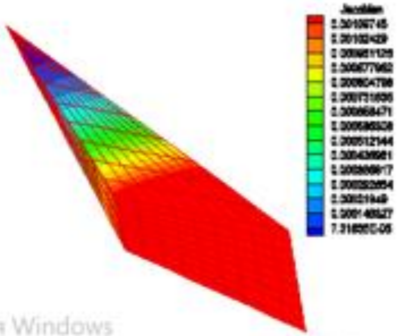
О. В. Ушакова. Классификация шестигранных ячеек. ЖВМ и МФ. 2008

O. V. Ushakova. Criteria for hexahedral cell classification. Applied Numer. Math. 127(2018)18–39.

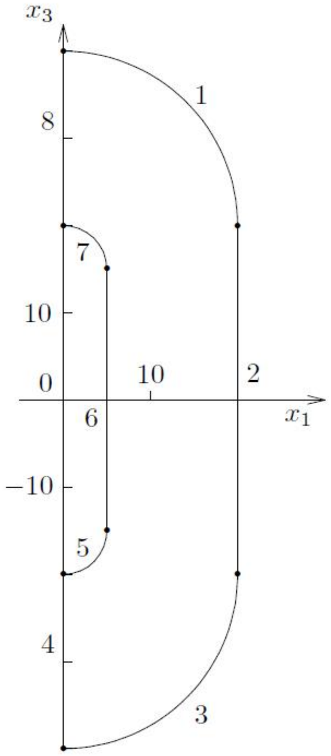
- Шестигранные ячейки, вырождающиеся в линейчатые ячейки с меньшим числом граней
  - Призма с треугольным основанием
  - Пирамида с линейчатым основанием
  - Тетраэдр

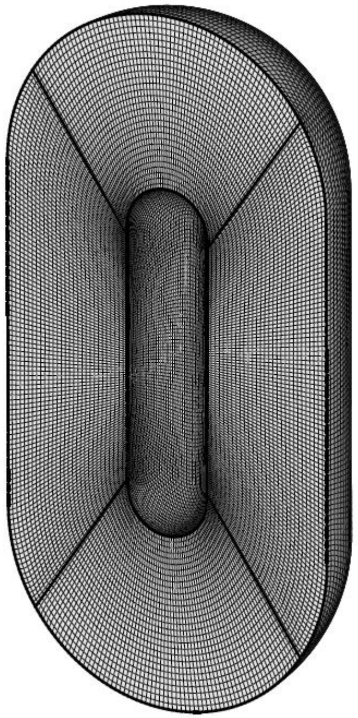


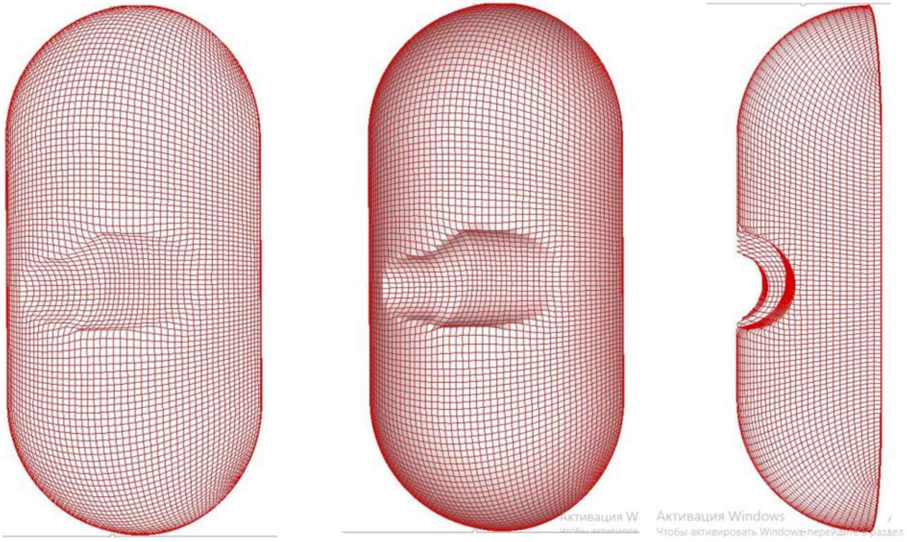


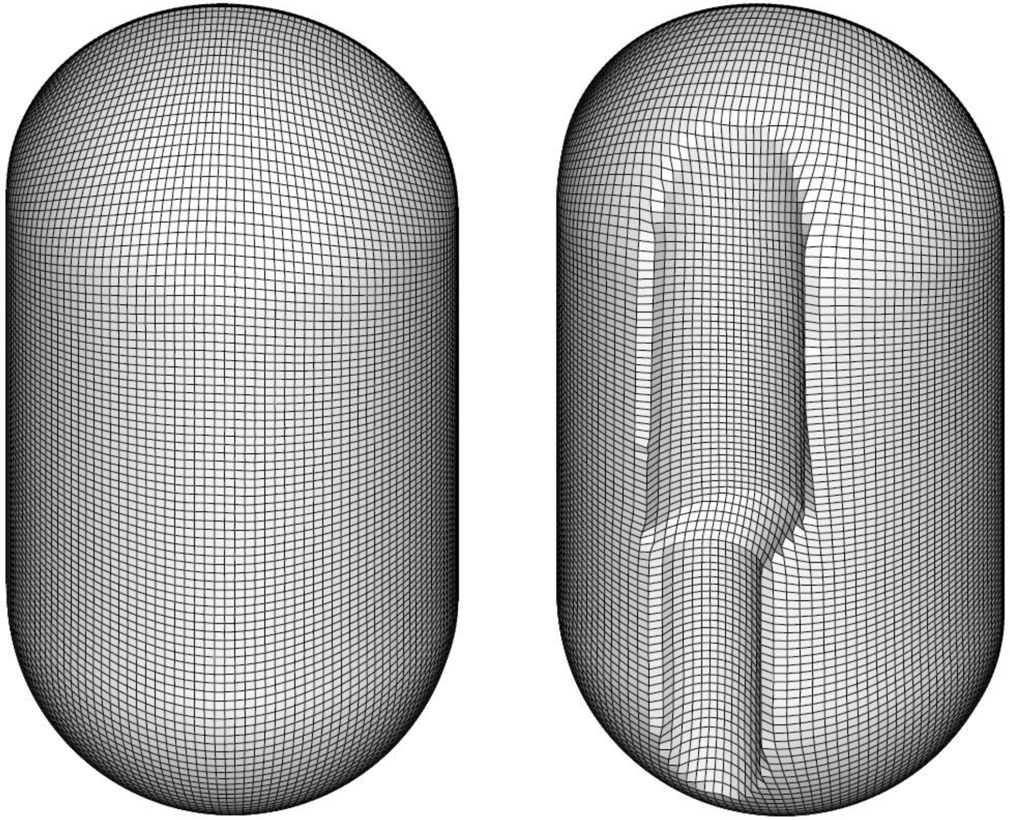


ПРИМЕРЫ РАСЧЕТОВ

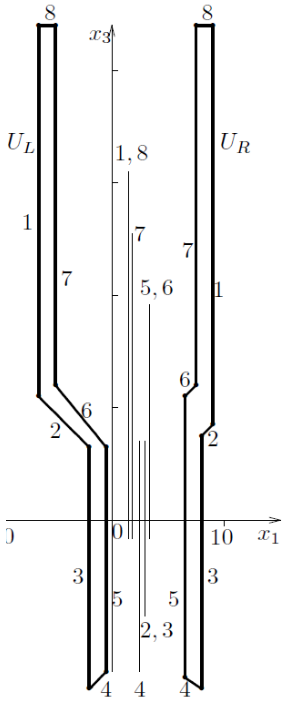


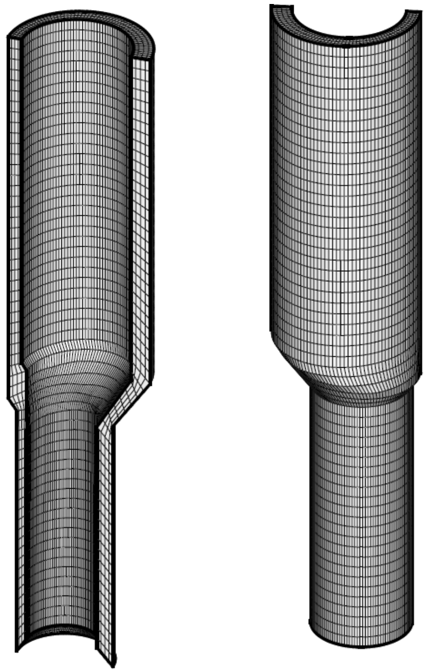




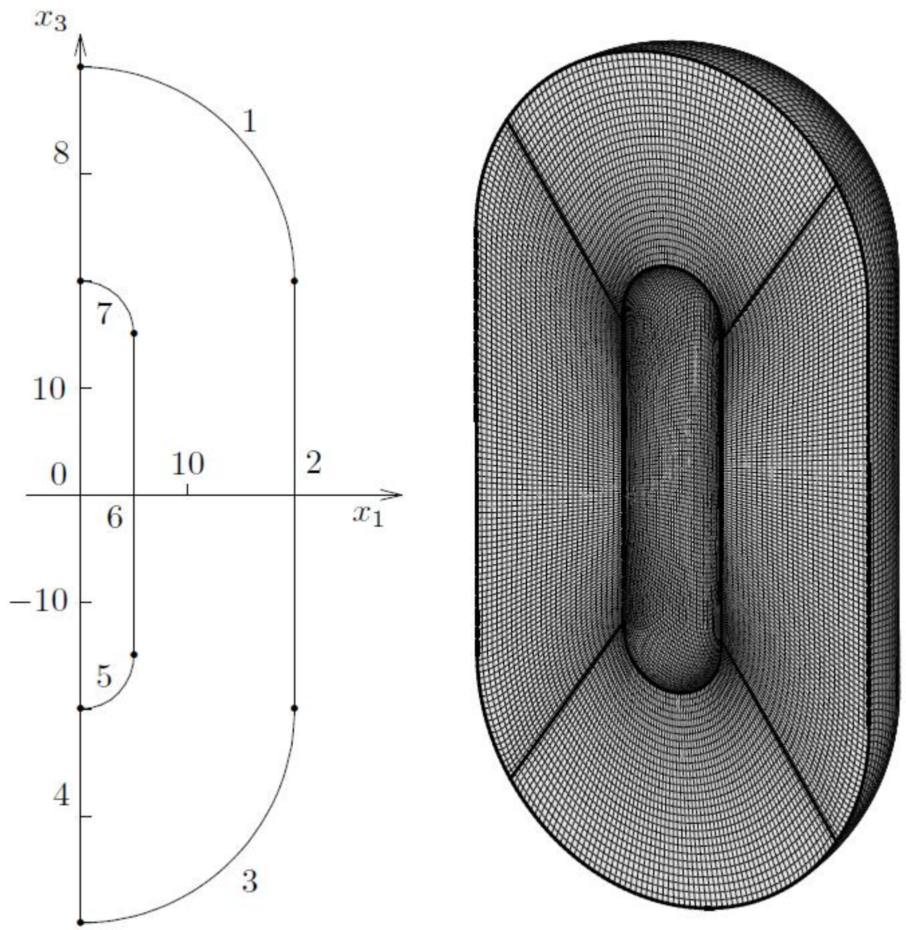


Образующая и сетка для основного (деформируемого) тела

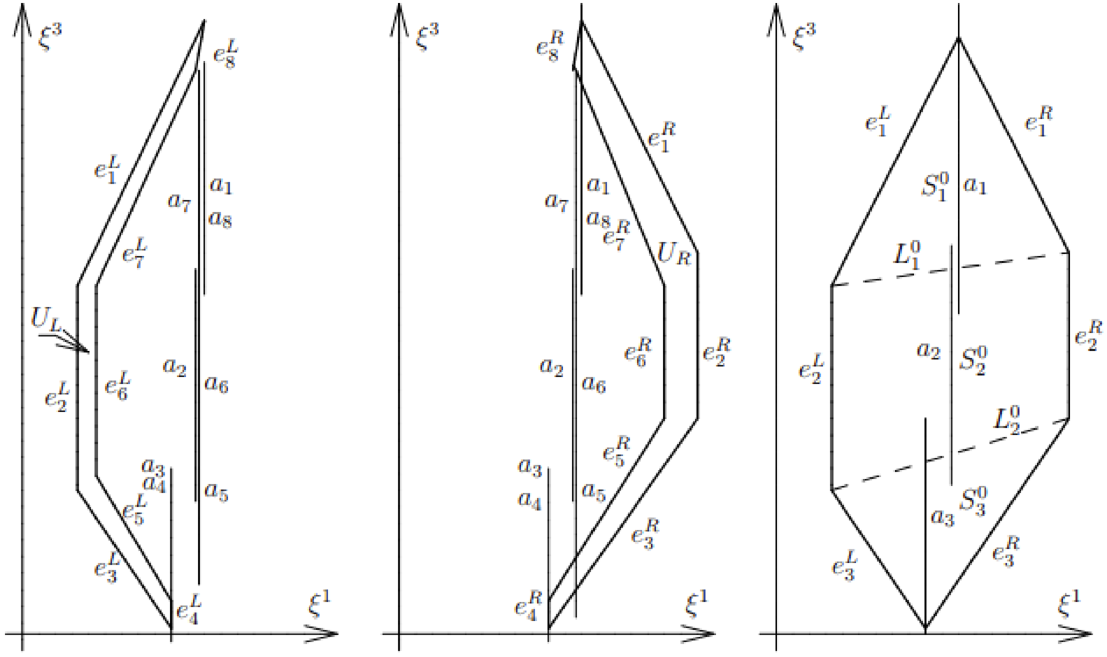


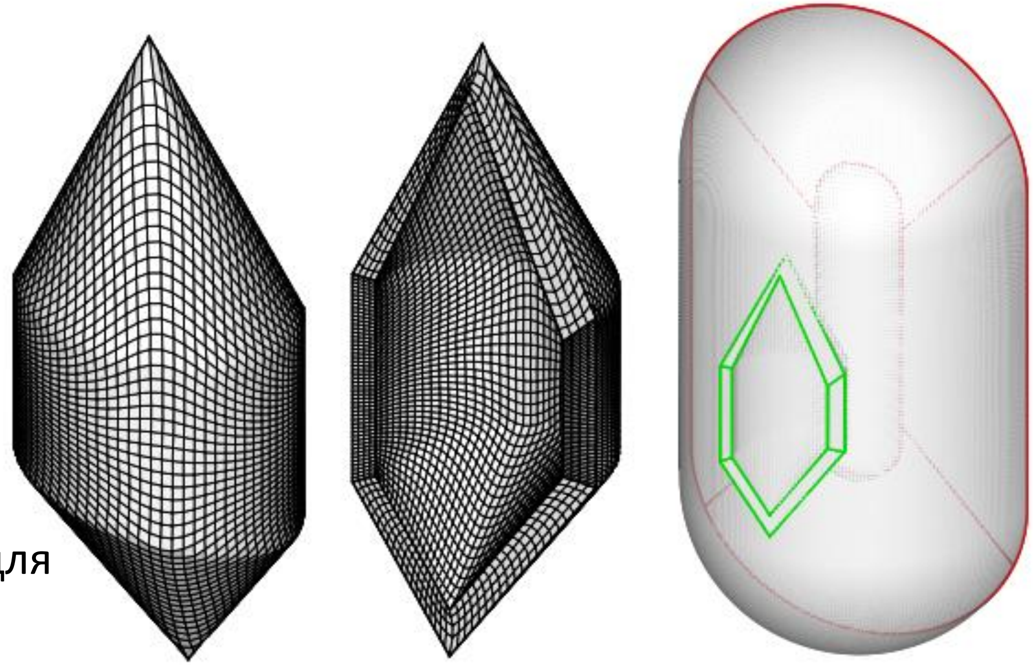


Образующая и сетка для вспомогательного (деформирующего) тела



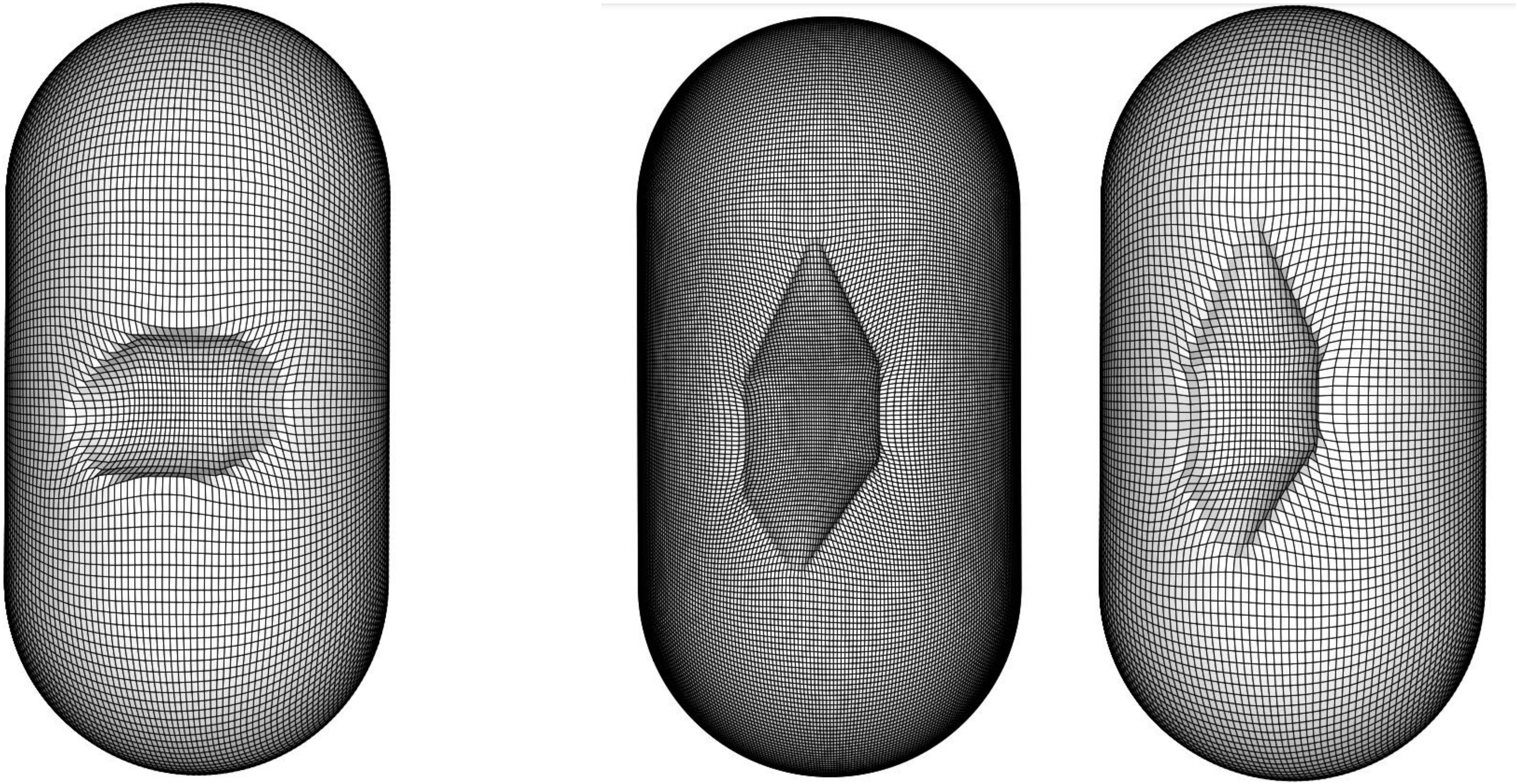
Образующая и сетка для основного (деформируемого) тела





Образующая и сетка для вспомогательного (деформирующего) тела

Q_Ξ



ОГРАНИЧЕНИЯ

1. Основное тело − объем вращения, деформирующее тело − обобщение объема вращения.

2. Начальная сетка для деформации основного тела должна соответствовать по размерам и качеству вспомогательному телу. Для этого она должна быть геометрически оптимальной и иметь число узлов, необходимое для моделирования деформации основного тела вспомогательным.

3. Ограничения на форму образующей основного тела используются в соответствии с ограничениями для объемов вращения. Рассматриваются такие образующие, у которых не более двух элементов принадлежат оси вращения, или таких элементов нет. Ограничения для образующих вспомогательного тела (обобщения объема вращения) аналогичны: рассматриваются такие образующие, у которых не более двух общих элементов (отрезков прямых) .

4. Используется определенная конфигурация для деформируемого тела. Так как построение сетки в деформированном теле осуществляется морфингом, конфигурация в процессе построения сетки сохраняется, поэтому она задается для основного тела еще до момента деформации.

5. Деформация осуществляется со стороны внешней грани.

6. Деформация ограничивается половиной от глубины основного тела.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Проведенные тестовые расчеты по созданным алгоритмам показали работоспособность программ (соответствующие программные комплексы написаны на языке С++) и целесообразность их дальнейшего развития с целью расширения класса деформирующих областей.

- Предлагаемый алгоритм, как алгоритм морфинга, позволяет строить сетки в областях очень сложной формы. Для построения сетки не нужно описывать сложную геометрию деформированной области, что не очевидно в общем случае. Достаточно описать ее для объема вращения и обобщения объема вращения путем задания образующих кривых для них, что существенно проще. Не нужно задавать конфигурацию сетки в области. Конфигурация задается для объема вращения. Такой подход позволяет исключить другие этапы традиционной генерации сеток, например такой, как построение начальной сетки для области геометрически сложной формы − деформированного тела. Этот этап также не очевиден.

- Аналогичный алгоритм может быть разработан и для построения неструктурированных сеток.

- Дальнейшие направления исследований связаны с усложнением деформирующего тела и рассмотрением других направлений деформации, а также оптимизации алгоритмов и программных комплексов с целью улучшения качества сеток и повышения их эффективности.