

Использование метода приближенной факторизации для построения пространственных сеток.

Введение. При численном решении уравнений с частными производными в областях произвольной формы с криволинейными границами возникает проблема построения расчетных сеток. Это связано с трудностями аппроксимации граничных условий при использовании простых равномерных сеток в таких областях. Кроме того, сетки позволяют увеличивать или уменьшать концентрацию узлов сетки как внутри области, так и на ее границе, что в некоторых случаях помогает увеличить точность численного решения.

В данной работе рассмотрено использование систем эллиптических уравнений в частных производных для построения пространственных сеток и предложен эффективный метод решения краевой задачи для системы квазилинейных уравнений второго порядка, которая при этом возникает.

Итак, пусть в декартовой системе координат x_i задана некоторая пространственная область G , в которой требуется построить расчетную сетку. Задача о построении сетки по сути является задачей о нахождении координат узлов криволинейной системы координат¹ ξ^i , связанной с границей области G . Для удобства, будем также обозначать координаты x_i как x, y, z а координаты ξ^i — как ξ, η, ζ . Система координат ξ^i строится таким образом, что в ней область G — единичный куб. Это можно также представить как отображение функциями $x_i(\xi, \eta, \zeta)$ единичного куба в системе координат ξ^i на область G . Узлы сетки будем искать как образы узлов равномерной сетки $N_1 \times N_2 \times N_3$ внутри этого куба (далее будем называть его также расчетной областью). Образами граней этого куба на области G будут некоторые криволинейные пространственные четырехугольники, которые мы для простоты будем называть гранями G , аналогично образы ребер куба будем называть ребрами G . Прежде чем строить отображение, потребуем в качестве исходных данных указание ребер области G , так как именно выбором ребер задается желаемый вид криволинейной системы координат внутри G . Например, с помощью соответствующего задания ребер внутри цилиндра можно построить как цилиндрическую, так и близкую к декартовой системы координат.

Итак, исходными данными для задачи о построении трехмерной сетки в области G будут уравнение границ этой области в декартовой системе координат x_i и распределение точек на ребрах G , соответствующее распределению точек равномерной сетки на ребрах расчетной области.

Строить искомую сетку будем следующим образом: сначала построим двумерные сетки на криволинейных поверхностях, которыми являются грани G , используя известные распределения точек на ребрах, как граничные условия; после чего построим сетку внутри G , используя полученные на предыдущем шаге двумерные сетки, как граничные условия.

¹ Общие проблемы построения сеток с помощью криволинейных систем координат рассмотрены в [1].

Основные уравнения. Обзор современных подходов к построению разностных сеток читатель может найти в [2]. В настоящее время для построения сеток наиболее широко используется одна из простейших систем эллиптических уравнений

$$\nabla^2 \xi^i = P^i, i = 1, 2, 3, \quad (1)$$

где ξ^i – криволинейные координаты в физической области, а функции P^i используются для регулирования шага сетки. Граничные условия отражают соответствие между границами физической и расчетной области.

Основания для выбора именно такой системы уравнений подробно изложены в [3]. В частности, принцип максимума, применимый для таких уравнений, если P^i не меняет знак внутри области, может служить гарантией взаимной однозначности отображения между физической и расчетной областью. Из принципа максимума также следует то, что экстремумы криволинейных координат будут достигаться на границах физической области, а не внутри ее. Помимо принципа максимума, свойством эллиптических уравнений, важным для построения с их помощью систем координат, является «врожденная» гладкость их решений. Нарушения гладкости условий на границе не переходят внутрь области. Есть и другие преимущества в использовании систем эллиптических уравнений для данной задачи.

Система (1) часто используется в следующем виде:

$$\nabla^2 \xi^i = P^i \left(\xi^i, \frac{\partial \xi^i}{\partial x_k}, x_k \right), \quad (2)$$

где x_i – декартовы, а ξ^i – криволинейные координаты; i, j, k принимают значения 1, 2, 3. Согласно [4], эту систему можно переписать в координатах ξ^i :

$$\sum_{i=1}^3 \left(\sum_{j=1}^3 g^{ij} \frac{\partial x_k}{\partial \xi^i} + P^i \frac{\partial x_k}{\partial \xi^i} \right) = 0, k = 1, 2, 3, \quad (3)$$

где

$$g^{ij} = \frac{1}{g} (g_{km} g_{ln} - g_{kn} g_{lm}), \quad (4)$$

$$g_{ij} = \vec{r}_{\xi^i} \cdot \vec{r}_{\xi^j}, \quad (5)$$

$$g = \left(\vec{r}_{\xi^1} \cdot \left(\vec{r}_{\xi^2} \times \vec{r}_{\xi^3} \right) \right)^2. \quad (6)$$

В формуле (4) (i, k, l) и (j, m, n) – тройки, принимающие значения (1, 2, 3), (2, 3, 1) и (3, 1, 2). $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$ – вектор позиции точки в декартовых координатах.

В данной работе рассматривается только случай $P^i = 0$. Получаем

$$\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 g^{ij} \vec{r}_{\xi^i \xi^j} = 0. \quad (7)$$

Построение разностной сетки на криволинейной пространственной поверхности. Рассмотрим поверхность $\zeta = const$ и предположим, что координатные линии ζ , выходящие из этой поверхности, нормальны к ней, то есть

$$\vec{r}_{\xi} \cdot \vec{r}_{\zeta} = \vec{r}_{\eta} \cdot \vec{r}_{\zeta} = 0. \quad (8)$$

И пусть эта поверхность задана как $z = f(x, y)$. Тогда, как показано в [3], уравнение (3) можно свести к системе

$$\begin{cases} \mathbf{D}x + J^2 f_x G_0 = 0 \\ \mathbf{D}y + J^2 f_y G_0 = 0 \end{cases} \quad (9)$$

где

$$\mathbf{D} = |\bar{r}_\eta|^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + P^1 \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + |\bar{r}_\xi|^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + P^2 \frac{\partial}{\partial \eta} \right) - 2(\bar{r}_\xi \cdot \bar{r}_\eta) \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \eta},$$

$$G_0 = \frac{(1+f_y^2)f_{xx} + (1+f_x^2)f_{yy} - 2f_x f_y f_{xy}}{1+f_x^2+f_y^2},$$

$$J = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi$$

$$|\bar{r}_\eta|^2 = (1+f_x^2)x_\eta^2 + (1+f_y^2)y_\eta^2 + 2f_x f_y x_\eta y_\eta,$$

$$|\bar{r}_\xi|^2 = (1+f_x^2)x_\xi^2 + (1+f_y^2)y_\xi^2 + 2f_x f_y x_\xi y_\xi,$$

$$\bar{r}_\xi \cdot \bar{r}_\eta = (1+f_x^2)x_\xi x_\eta + (1+f_y^2)y_\xi y_\eta + f_x f_y (x_\xi y_\eta + x_\eta y_\xi).$$

Необходимо заметить, что при таком построении у метода есть ограничение: уравнение криволинейной поверхности должно быть задано как $z = f(x, y)$. Поэтому для каждой грани G решать систему (9) приходится в своей декартовой системе координат, а уравнение границы G в исходных данных на самом деле должно представлять собой совокупность пар "система координат, уравнение вида $z = f(x, y)$ в этой системе координат" для каждой грани.

Постановка задачи. Итак, задача о построении сетки в пространственной области G распадается на две подзадачи:

1. Построение сеток на гранях области G . Для каждой из шести граней численно решается система (9). Эта система решается в единичном квадрате, которым является соответствующая грань расчетной области. Граничными условиями дифференциальной задачи являются отображения ребер расчетной области; граничными условиями разностной задачи является заданное отображение распределения точек на ребрах расчетной области.
2. Построение трехмерной сетки внутри G . Уравнение (7) численно решается в единичном кубе $0 \leq \xi^i \leq 1, i = 1, 2, 3$ (во всей расчетной области). Граничными условиями дифференциальной задачи являются отображения граней расчетной области; граничными условиями разностной задачи являются полученные на предыдущем шаге сетки на гранях G .

Численный метод для уравнений (9). Для численного решения уравнений (9) был использован метод приближенной факторизации, построенный в [5], где рассматривается задача решения разностных уравнений вида:

$$L(\Phi) \equiv (A\delta_{xx} + B\delta_{yy})\Phi = 0, \quad (10)$$

где δ_{xx} и δ_{yy} — операторы второй разностной производной по соответствующей переменной, например:

$$\delta_{xx}\Phi_y = \frac{\Phi_{i-1j} - 2\Phi_{ij} + \Phi_{i+1j}}{\Delta x^2}.$$

Коэффициенты A и B в общем случае полагаются переменными. Итерационную схему решения разностных уравнений (10) можно записать в виде

$$N\Delta = \sigma L(\Phi^n)$$

где $\Delta = \Phi^{n+1} - \Phi^n$ - «поправка», вычисляемая на $(n+1)$ -ой итерации, а σ - итерационный параметр. Оператор N предлагается брать в виде

$$N = A_i(\alpha - \lambda A\delta_{xx}) \frac{1}{A_1\lambda} (\alpha - \lambda B\delta_{yy})$$

где A_i, λ, α - итерационные параметры. Для обеспечения наибольшей скорости сходимости в [5] находятся следующие значения итерационных параметров: $\sigma = 2, \lambda = 1/B, A_i = B$; а также производится выбор последовательности $k(k = \overline{1, N_0})$, исходя из минимизации коэффициента среднего затухания гармоник погрешности после одного цикла перебора значений $\alpha_k, k = \overline{1, N_0}$, где N_0 - некоторое натуральное число:

$$\alpha_1 = \Delta y^2; \alpha_k = \alpha_1 \left(\frac{4}{\Delta y^2} \right)^{k-2}, k = \overline{2, N_0-1}, \alpha_{N_0} = 4,$$

где Δy - шаг по y в уравнении (10).

Численный метод для уравнений (7). Построим метод решения уравнения (7), действуя по аналогии с построением двумерного метода в статье [5]. Рассмотрим уравнение²

$$L(\Phi) = (A\delta_{xx} + B\delta_{yy} + C\delta_{zz})\Phi = 0 \quad (11)$$

Коэффициенты A, B и C в общем случае полагаются переменными. Итерационную схему решения разностного уравнения (11) можно записать в виде

$$N\Delta = \alpha^2 \sigma L(\Phi) \quad (12)$$

где $\Delta = \Phi^{n+1} - \Phi^n$ - «поправка», вычисляемая на $(n+1)$ -ой итерации, а σ и α - итерационные параметры. Возьмем оператор N в виде

$$N = \frac{1}{\lambda} (\alpha - \lambda A\delta_{xx})(\alpha - \lambda B\delta_{yy})(\alpha - \lambda C\delta_{zz}) \quad (13)$$

Для спектрального анализа устойчивости введем функцию $e^n = \Phi^n - \Phi$, описывающую погрешность решения на итерации с номером n . Тогда $\Delta = e^{n+1} - e^n$ и

$$N(e^{n+1} - e^n) = \alpha^2 \sigma L(e^n), \quad (14)$$

² Можно заметить, что вид уравнения (7) отличается от вида уравнения (11), и поэтому, строго говоря, разностная схема (12) не является аппроксимирующей для (7) даже при $\sigma = 1$, однако нас интересуют главным образом удовлетворительные результаты применения схемы к нашей задаче, которые, как оказалось, имеют место. Это можно объяснить малостью коэффициентов $g^i, i \neq j$ в системах координат, близких к ортогональным.

если предположить, что коэффициенты A, B и C вычислены с использованием точного решения Φ системы разностных уравнений $L(\Phi) = 0$. Разложение в ряд Фурье

$$e^n(x, y, z) = \sum_{p, q, r=1}^{\infty} G^n(p, q, r) \exp(ipx) \exp(iqy) \exp(irz) \quad (15)$$

подставим в уравнение (14) и рассмотрим только одну гармонику. При этом «замораживаем» коэффициенты A, B, C и λ . Выражаем коэффициент перехода $\beta = G^{n+1}/G^n$:

$$\beta = \frac{\left(\alpha^3 + 4\alpha^2\lambda(AP+BQ+CR)(1-\sigma) + 16\alpha\lambda^2(ABPQ+ACPR+BCQR) + \right.}{\left. + 64\lambda^3 ABCPQR \right)}{\left(\alpha^3 + 4\alpha^2\lambda(AP+BQ+CR) + 16\alpha\lambda^2(ABPQ+ACPR+BCQR) + \right.}{\left. + 64\lambda^3 ABCPQR \right)} \quad (16)$$

где $P = \sin^2 \frac{p\Delta x}{2}$, $Q = \sin^2 \frac{q\Delta y}{2}$, $R = \sin^2 \frac{r\Delta z}{2}$.

Перепишем это в виде:

$$\beta = 1 - \frac{\sigma(K+L+M)\delta^2}{\delta^3 + (K+L+M)\delta^2 + (KL+LM+KM)\delta + KLM}, \quad (17)$$

где $\delta = \alpha/\lambda \geq 0$, $K = 4AP$, $L = 4BQ$, $M = 4CR$, K, L и M неотрицательны и не равны нулю одновременно. Если σ и δ положительны, то $\beta \leq 1$. Найдем минимум β по δ при положительных δ . Используем формулы решения кубического уравнения. Несложно показать, что дискриминант уравнения $\beta' = 0$ неположителен. Тогда нули производной β выражаются формулами:

$$\begin{aligned} \delta_0 &= -2R_0 \cos\left(\frac{\varphi}{3}\right), \\ \delta_1 &= -2R_0 \cos\left(\frac{\varphi}{3} + \frac{2\pi}{3}\right), \\ \delta_2 &= -2R_0 \cos\left(\frac{\varphi}{3} + \frac{4\pi}{3}\right), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} R_0 &= \sqrt{\frac{KL + LM + KM}{3}}, \\ \cos \varphi &= \frac{KLM}{\left(\frac{KL + LM + KM}{3}\right)^{\frac{3}{2}}}. \end{aligned}$$

Поскольку $0 \leq \cos(\varphi) \leq 1$ (это можно проверить, используя соотношение между средними арифметическим и геометрическим), то $-\frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}$. Из

этого следует, что $\delta_0 \geq 0$, а $\delta_{1,2} \leq 0$ и нас не интересуют. Легко показать, что в точке δ_0 достигается локальный минимум β при $\delta \geq 0$. Таким образом,

$$\min = \delta_0 = 2\sqrt{\frac{KL+LM+KM}{3}} \cos \left\{ \frac{1}{3} \arccos \frac{KLM}{\left(\frac{KL+LM+KM}{3}\right)^{\frac{3}{2}}} \right\} \quad (18)$$

Трудно провести полный анализ для выбора σ из-за сложного вида $|\beta_{\min}|$. Поэтому *предположим*, что, по аналогии с двумерным случаем (см. [5]), величина $|\beta_{\min}|$ ограничена сверху значениями $\sigma - 1$ (при $KL = LM = KM = 0$) и $1 - 4/9 \sigma$ (при $K = L = M$). Поэтому максимальная величина $|\beta_{\min}|$ будет минимальной, когда значение итерационного параметра σ удовлетворяет соотношению $\sigma - 1 = 1 - 4/9 \sigma$, т.е. при $\sigma = 18/13$, что соответствует $|\beta_{\min}| = 5/13$.

Параметр δ не распадается, как в двумерном случае, на произведение части, зависящей только от частоты, и части, зависящей только от функций A , B и C . Поэтому невозможно провести оптимизацию выбора значений δ , аналогичную оптимизации выбора значений α в двумерном случае. Таким образом, для вычисления значения итерационного параметра δ надо как-то выбирать на каждом шаге значения частот p , q и r , точнее, значения P , Q и R .

В программе, реализующей этот метод, на каждой итерации в качестве P , Q и R брались случайные числа от 0 до 1. Оказалось, что при близких к нулю значениях этих параметров и далеко от решения текущего приближении сетка часто разваливается за несколько итераций (метод расходится). Особенно это заметно на первых итерациях, поскольку начальное приближение обычно довольно далеко от решения. Поэтому выбор этих параметров в программе был изменен таким образом, что с увеличением номера итерации допускаются все более близкие к нулю значения P , Q и R , что положительно сказалось на сходимости итерационного процесса.

Пример использования. Описанный метод был применен для построения пространственной сетки внутри области типа регулирующего сопла, значительно упрощенной по сравнению с реально используемыми формами сопел. Область состоит из двух частей, первая из которых представляет собой цилиндр, завершающийся полусферой, к которой, под углом ψ к оси цилиндра, прикреплена вторая часть — собственно регулирующее сопло. Вторая часть представляет собой осе симметричный канал, радиус которого описывается функцией $R = C_1 + C_2 \cos \frac{2\pi x}{l}$, где C_1 и C_2 — некоторые константы, x — координата вдоль канала, а l — длина канала.

Написать уравнения граничных поверхностей и ребер для всей этой физической области весьма сложно. Кроме того, сложно дать приемлемое первое приближение для итерационного процесса. Поэтому сначала строились две независимые сетки в каждой из частей области, после чего эти сетки

объединялись в одну и делались дополнительные итерации для сглаживания сетки в месте соединения.

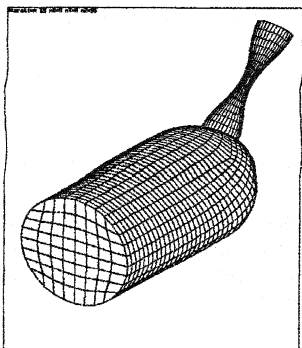


Рис 1

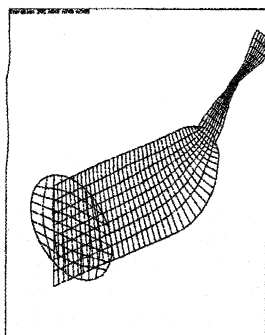


Рис. 2.

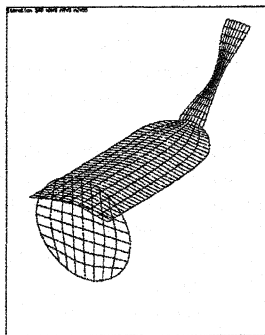


Рис. 3.

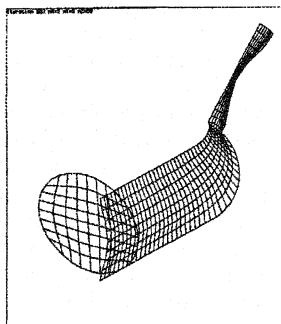


Рис. 4.

На рисунках 1-4 изображены результаты расчетов для угла $\psi = \pi/4$. Сетка, построенная на поверхности сопла, показана на рис. 1. На остальных рисунках изображены "сечения" результирующей трехмерной сетки по координате ζ (перпендикулярно оси цилиндра) и одной из координат ξ и η .

Литература

1. Thompson, J.F., "General Curvilinear Coordinate Systems," *Numerical Grid Generation*, edited by J.F. Thompson, North-Holland, 1982.
2. Томпсон Дж.Ф. Методы построения сеток в вычислительной гидродинамике. /Аэрокосмическая техника. 1985. Т. 3, N 8, С.141-171
3. Thompson, J.F., "Elliptic Grid Generation," *Numerical Grid Generation*, edited by Joe F. Thompson, North-Holland, 1982.
4. Warsi, Z.U.A., "Basic Differential Models for Coordinate Generation," *Numerical Grid Generation*, edited by J.F. Thompson, North-Holland, 1982.
5. Катеролл Д. Оптимальные разностные схемы приближенной факторизации для расчета плоских установившихся потенциальных течений. /Аэрокосмическая техника. 1983. Т. 1, N 3, С.54-63.