

УДК 519.6

СПОСОБ КОРРЕКЦИИ ЛАГРАНЖЕВОЙ СЧЕТНОЙ СЕТКИ МЕТОДОМ НАЛОЖЕНИЯ НА УЗЛЫ СЕТКИ ДИФФЕРЕНЦИРУЕМЫХ СВЯЗЕЙ

А. И. Панов, И. Г. Новиков, С. С. Соколов
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Проведение сложных газодинамических расчетов в лагранжевых координатах невозможно без использования специальных процедур, отвечающих за поддержание приемлемой счетной сетки без переклестов. Предлагается корректировку счетных ячеек производить при помощи наложения на узлы сетки связей, задаваемых в виде неравенств с использованием определенных дифференцируемых функций. Функции, входящие в неравенства, выбираются так, чтобы импульс и момент импульса соответствующих сил реакции равнялись нулю. Показано, что если наложенные связи не противоречивы, можно найти такие силы реакции, которые не только обеспечивают выполнение всех соответствующих неравенств, но и не производят работу. Приводится способ определения таких сил реакции.

Как известно, для всех многомерных лагранжевых методик одна из проблем — это поддержание приемлемой счетной сетки. Во многих счетных методах для аппроксимации уравнений газовой динамики используются выпуклые ячейки. Например, в двумерной методике ДМК [1] для поддержания ячеек нерегулярной сетки несамопересекающимися используется метод *упругого удара*, который корректирует скорости узлов таким образом, чтобы все многоугольные ячейки на протяжении всего расчета оставались выпуклыми. В [2, 3] описан метод использования голономных связей для поддержания качества лагранжевых регулярных сеток. В этом методе накладываемые связи не являются упругими и поэтому могут производить работу. Для достижения консервативности метода приходится менять распределение внутренней энергии, что зачастую нежелательно.

Наложение единственного ограничения на ячейки — их несамопересечение — обеспечивает не только безаварийность расчетов, но и расширение возможностей программы расчета начальной сетки и программы локальной, а также структурной перестройки ячеек в процессе расчета задачи за счет снятия лишних ограничений на форму допустимых ячеек. Кроме того, например, в окрестности изломов внешней границы, нарушающих выпуклость счетной области, невыпуклые ячейки, повторяющие форму границы, будут более правильно моделировать течение, чем ячейки выпуклые.

Описываемый в статье метод основан на том, что на узлы сетки с целью придания ячейкам определенных свойств накладываются связи в виде некоторых функциональных неравенств $\varphi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \geq 0$, $s = 1, \dots, k$. Когда какие-то из перечисленных неравенств не выполняются или близки к тому, на узлы счетной сетки действуют силы реакции соответствующих связей. Результирующая сила реакции определяется так, чтобы приращение всех критических связей за текущий счетный шаг было положительным, а работа сил реакции равнялась нулю. Последнее равносильно тому, что изменение полной кинетической энергии в результате наложения связей будет равно работе сил реакции внешней границы. В частности, если внешняя граница неподвижна, то кинетическая энергия задачи не меняется. На каждом счетном шаге реакции всех критических связей действуют мгновенно, в один и тот же момент времени — на середине шага. Значения связывающих функций при этом не обязаны быть нулевыми. Связи, имеющие общие узлы воздействия, зависят друг от друга. Поэтому для нахождения результирующей силы реакций связей формируется и решается система линейных уравнений. Матрица этой системы является симметричной и неотрицательно определенной.

Список критических связей из-за воздействия связей друг на друга может пополняться. При этом наложения уже измененных связей добавленные связывающие функции могли возрасти. В итоге производные по времени связывающих функций до момента наложения связей могут иметь любой знак. Описываемый способ корректировки осуществим всегда при условии, что рассматриваемые связи не противоречат друг другу.

Основные положения метода

Пусть n — количество, а $R = (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$ — набор радиусов-векторов всех узлов счетной сетки. Выражение

$$\varphi = \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \varphi(R) \geq 0$$

с дифференцируемой функцией $\varphi = \varphi(R)$ будем называть дифференцируемой связью, наложенной на узлы сетки. Выражение

$$\frac{\partial \varphi}{\partial R} = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \vec{r}_1}, \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{r}_2}, \dots, \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{r}_n} \right)$$

будем называть градиентом связи φ .

Для учета границы счетной сетки используются два линейных оператора — Tang: $\Lambda \rightarrow \Lambda$ и Norm: $\Lambda \rightarrow \Lambda$, где

$$\text{Tang}(A) = (\text{Tang}(\vec{a}_1), \dots, \text{Tang}(\vec{a}_n)),$$

$$\text{Tang}(\vec{a}_i) = \begin{cases} \vec{a}_i, & i - \text{внутренний узел;} \\ (\vec{a}_i, \vec{\tau}_i) \vec{\tau}_i, & i - \text{граничный узел, } \vec{\tau}_i - \text{касательный вектор в узле } i; \end{cases}$$

$$\text{Norm} = I - \text{Tang}.$$

Легко получить, что

$$\text{Norm}(A) = (\text{Norm}(\vec{a}_1), \dots, \text{Norm}(\vec{a}_n)),$$

где

$$\text{Norm}(\vec{a}_i) = \begin{cases} \vec{0}, & i - \text{внутренний узел;} \\ \vec{a}_i - (\vec{a}_i, \vec{\tau}_i) \vec{\tau}_i, & i - \text{граничный узел, } \vec{\tau}_i - \text{касательный вектор в узле } i. \end{cases}$$

Пусть на узлы сетки наложено одновременно k связей:

$$\varphi_s = \varphi_s(R) \geq 0, \quad s = 1, \dots, k.$$

Будем говорить, что набор $\Phi = (\vec{\Phi}_1, \vec{\Phi}_2, \dots, \vec{\Phi}_k)$ является силой реакции k связей $\varphi_s = \varphi_s(R) \geq 0, s = 1, \dots, k$, если

$$\Phi = \sum_{s=1}^k \lambda_s \frac{\partial \varphi_s}{\partial R},$$

где λ_s — вещественные числа.

Если все функции $\varphi_s = \varphi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n), s = 1, \dots, k$, не меняют своего значения при произвольном перемещении счетной сетки как твердого тела, то одновременное наложение связей $\varphi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \geq 0, s = 1, \dots, k$, не меняет количества движения и момента количества движения узлов сетки.

Обозначим силу реакции внешней границы как

$$R_\Gamma = -\text{Norm}(\Phi) = -\sum_{s=1}^k \lambda_s \text{Norm} \left(\frac{\partial \varphi_s}{\partial R} \right)$$

и введем наборы

$$E_s = \text{Tang} \left(\frac{\partial \varphi_s}{\partial R} \right), \quad s = 1, \dots, k.$$

Тогда корректирующая сила

$$F = \Phi + R_\Gamma = \Phi - \text{Norm}(\Phi) = \text{Tang}(\Phi) = \text{Tang} \left(\sum_{s=1}^k \lambda_s \frac{\partial \varphi_s}{\partial R} \right) = \sum_{s=1}^k \lambda_s E_s,$$

а закон изменения импульса запишется в виде

$$mU^+ - mU^- = F = \sum_{s=1}^k \lambda_s E_s.$$

В результате одновременного наложения k связей производная каждой связывающей функции получает следующее приращение:

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi_i^+}{dt} - \frac{d\varphi_i^-}{dt} &= \left\langle \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}, U^+ - U^- \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}, m(U^+ - U^-) \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}, F \right\rangle = \sum_j \left\langle \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}, E_j \right\rangle \lambda_j = \\ &= \sum_j \left\langle \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}, \text{Tang} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial R} \right) \right\rangle \lambda_j = \sum_j \left\langle \text{Tang} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial R} \right), \text{Tang} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial R} \right) \right\rangle \lambda_j = \sum_j \langle E_i, E_j \rangle \lambda_j. \end{aligned}$$

Следовательно, по заданным приращениям производных связывающих функций $\frac{d\varphi_i^+}{dt} - \frac{d\varphi_i^-}{dt}$, $i = 1, \dots, k$, можно определить корректирующую силу F , вызывающую данные приращения производных. Для этого относительно неизвестных λ_j , $j = 1, \dots, k$, надо решить систему линейных уравнений

$$\sum_{j=1}^k a_{ij} \lambda_j = b_i, \quad i = 1, \dots, k \quad (1)$$

с симметричной неотрицательно определенной матрицей

$$A = \begin{pmatrix} \langle E_1, E_1 \rangle & \langle E_1, E_2 \rangle & \dots & \langle E_1, E_k \rangle \\ \langle E_2, E_1 \rangle & \langle E_2, E_2 \rangle & \dots & \langle E_2, E_k \rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \langle E_k, E_1 \rangle & \langle E_k, E_2 \rangle & \dots & \langle E_k, E_k \rangle \end{pmatrix}$$

и правой частью

$$b_i = \frac{d\varphi_i^+}{dt} - \frac{d\varphi_i^-}{dt}, \quad i = 1, \dots, k.$$

Матрица A невырождена тогда и только тогда, когда система векторов E_i , $i = 1, \dots, k$, является линейно независимой.

Если наложенные на узлы счетной сетки связи независимы (система векторов E_i , $i = 1, \dots, k$, линейно независима), то корректировка скоростей узлов всегда осуществима.

Численное решение системы линейных уравнений (1) осуществляется итерационным методом сопряженных градиентов с предобуславливателем.

Искомое решение системы (1) ищется как линейная комбинация $\lambda = \lambda^0 + \mu_0 \lambda^1$ решений, полученных после решения систем уравнений $A\lambda^0 = b^0$ и $A\lambda^1 = b^1$ с правыми частями $b^0 =$

$$= - \left(\frac{d\varphi_1^-}{dt}, \dots, \frac{d\varphi_k^-}{dt} \right)^T, \quad b^1 = \left(\mu_1 \frac{d\varphi_1^-}{dt}, \dots, \mu_k \frac{d\varphi_k^-}{dt} \right)^T, \quad \text{где } \mu_k = \text{sign} \left(\frac{d\varphi_k^-}{dt} \right), \quad \mu_0 = \sqrt{\frac{- \sum_{i=1}^k \lambda_i^0 \frac{d\varphi_i^-}{dt}}{\sum_{i=1}^k \mu_i \lambda_i^1 \frac{d\varphi_i^-}{dt}}}.$$

В качестве предобуславливателя выбран предобуславливатель в форме Якоби, т. е. $M^{-1}Ax = M^{-1}b$, где $M = \text{diag } A$.

Типы связывающих функций

В качестве первого типа функций для наложения связей на узлы счетной сетки с целью обеспечения ячеек без самопересечений в трехмерном случае взята функция объема каждого тетраэдра для каждой ячейки K области, образованного векторами $\vec{r}_i - \vec{r}_{cf}^j$, $\vec{r}_{i+1} - \vec{r}_{cf}^j$, $\vec{r}_c - \vec{r}_{cf}^j$ ячейки K (рис. 1, а), где \vec{r}_1, \vec{r}_2 — последовательные узлы j -й грани ячейки K ; \vec{r}_{cf} — центр рассматриваемой грани; \vec{r}_c — центр K -й ячейки. Тогда связывающая функция будет выглядеть следующим образом:

$$\varphi = (\vec{r}_1 - \vec{r}_{cf}, \vec{r}_2 - \vec{r}_{cf}, \vec{r}_c - \vec{r}_{cf}).$$

В двумерном случае будем оценивать функцию площади каждого треугольника каждой ячейки, образованного двумя последовательными узлами ячейки и ее центром (рис. 1, б). Связывающая функция имеет вид

$$\varphi = [\vec{r}_1 - \vec{r}_c, \vec{r}_2 - \vec{r}_c].$$

Наложение связей с использованием таких функций обеспечит поддержание ячеек в состоянии без самопересечений, т. е. в состоянии *звездности*.

В качестве второго типа функций для наложения связей на узлы счетной сетки с целью поддержания многогранных углов ячеек счетной сетки меньше 2π в трехмерном случае выбран объем тетраэдра, показанного на рис. 2, а, образованного центром ячейки и четырьмя узлами этой ячейки,

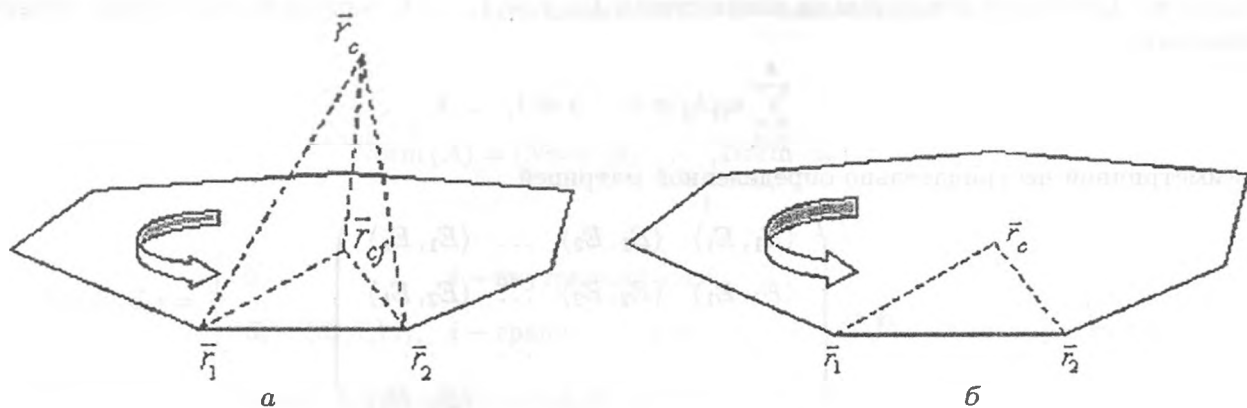


Рис. 1. Обеспечение звездности ячейки в трехмерном (а) и двумерном (б) случаях

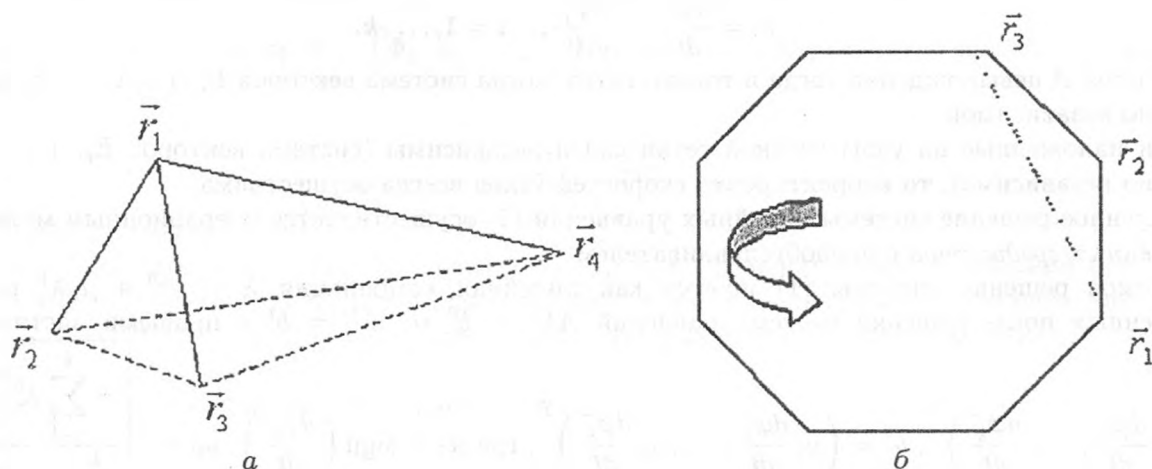


Рис. 2. Обеспечение выпуклости ячейки: а — в трехмерном случае; б — в двумерном случае

которые образуют трехгранный угол ячейки. В двумерном случае оценивается функция площади треугольника (рис 2, б), образованного тремя последовательными узлами ячейки. Соответствующие связывающие функции дают возможность проводить расчет на выпуклой счетной сетке.

Оценим объем тетраэдра, образованного векторами $\vec{r}_i - \vec{r}_1, \vec{r}_{i+1} - \vec{r}_1, \vec{r}_{i+2} - \vec{r}_1$. Если обратиться к пирамиде, показанной на рис. 2, а, то связывающая функция будет выглядеть следующим образом: $\varphi = (\vec{r}_2 - \vec{r}_1, \vec{r}_3 - \vec{r}_1, \vec{r}_4 - \vec{r}_1)$.

В двумерном случае будем оценивать площадь каждого из треугольников следующей функцией (для треугольника, показанного на рис. 2, б):

$$\varphi = [\vec{r}_3 - \vec{r}_2, \vec{r}_1 - \vec{r}_2].$$

Количество связывающих функций в дальнейшем может быть увеличено в зависимости от поставленных задач и условий ограничения на форму счетных ячеек.

Тестовые расчеты

Задача 1 о сильном взрыве на нерегулярной сетке в двумерном случае. Для данного теста была выбрана нерегулярная многоугольная сетка. На начальный момент времени $t = 0$ плотность вещества равнялась 1,0, а в центральной ячейке была задана внутренняя энергия, равная 25. Уравнение состояния — для идеального газа с $\gamma = 1,4$. Начальная геометрия задачи показана на рис. 3.

На рис. 4 изображены графики распределения плотностей вещества на момент времени $t = 20$ при расчете задачи на нерегулярной многоугольной сетке с числом ячеек 3948. Здесь первый расчет был проведен с использованием связей, обеспечивающих звездность ячеек, второй — с использованием связей, обеспечивающих выпуклость ячеек. Для большей наглядности на рис. 4 выделен фрагмент графика распределения плотности на интервале $[1,8; 2,05]$.

Методика дифференцируемых связей позволяет проводить расчеты задач с сильными деформациями счетных ячеек на сетках с различными свойствами и обеспечивает сохранение симметричности сетки, что видно из рис. 5, а, б.

Задача 2 о сильном взрыве на шестигранной сетке в трехмерном случае. Рассмотрим задачу о сильном взрыве в области $\{0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq 1; 0 \leq z \leq 1\}$, ограниченной жесткими стенками, непроницаемыми для газа. Для этого теста была выбрана симметричная шестигранная сетка

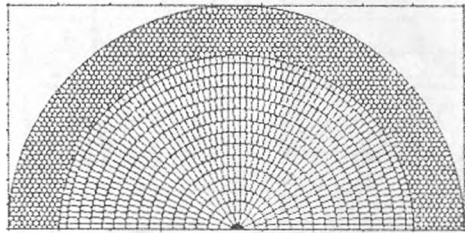


Рис. 3. Начальная геометрия задачи 1

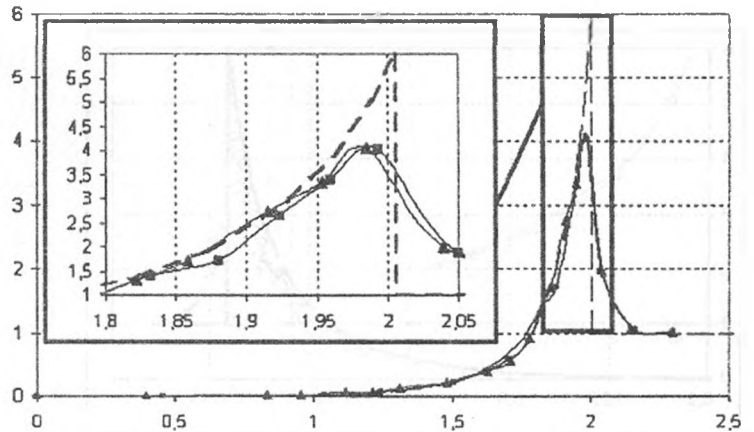


Рис. 4. Задача 1. Распределение плотности вещества, $t = 20$: - - - - аналитическое [4] решение; -▲- — расчет с обеспечением звездности ячеек; -■- — расчет с обеспечением выпуклости ячеек

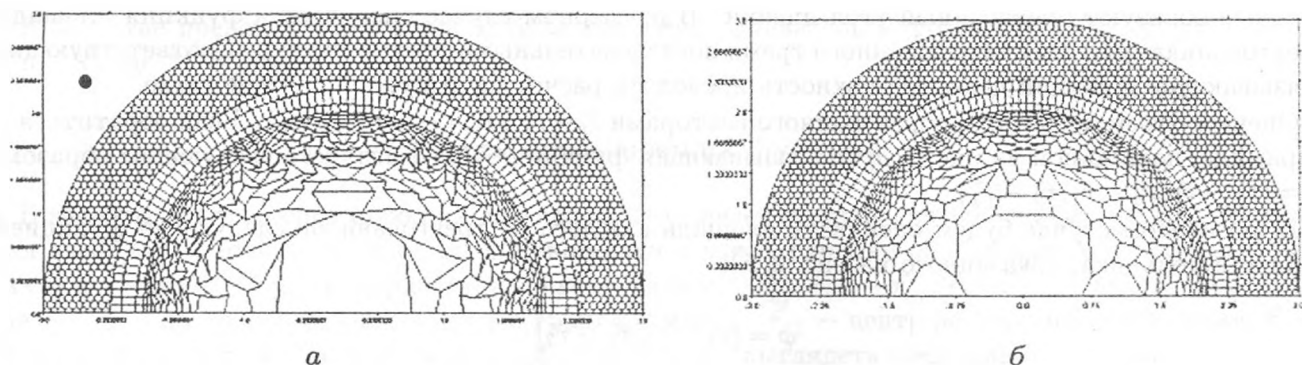


Рис. 5. Решение задачи 1, $t = 20$, счетная сетка при использовании связывающих функций, обеспечивающих: *a* — звездность ячеек; *б* — выпуклость ячеек

из кубических ячеек. Число счетных ячеек составляло 117 000. Начальная геометрия задачи приведена на рис. 6. На начальный момент времени $t = 0$ плотность вещества равнялась 1,0, а в центре области (в 27 ячейках, что соответствует радиусу, равному $\sim 0,04$) была задана внутренняя энергия, равная 50 для каждой ячейки. Уравнение состояния — для идеального газа с $\gamma = 1,4$.

На рис. 7, *a* изображено распределение плотности вещества в каждой ячейке области по радиусу от центра взрыва в сравнении с аналитическим решением [4] для того же момента времени для случая, когда условия выпуклости счетных ячеек поддерживались связывающей функцией второго типа. Видно, что численное решение хорошо согласуется с аналитическим [4].

На рис. 7, *б* изображена кривая распределения плотности вещества в ячейках вдоль оси Oz .

На рис. 8 показано распределение плотности вещества в задаче на момент времени $t = 1$ в сечении плоскостью, перпендикулярной оси Oz и проходящей через центр взрыва (точка $(0,5, 0,5, 0,5)$). Видно, что симметрия решения задачи относительно центра взрыва сохраняется.

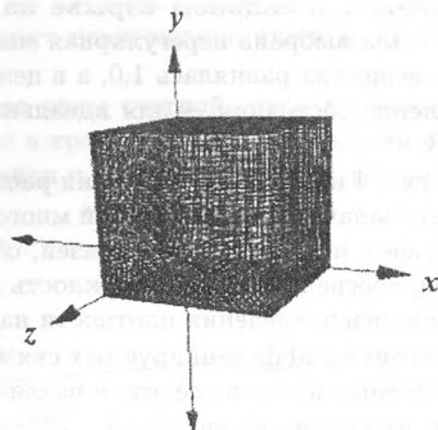


Рис. 6. Начальная геометрия задачи 2

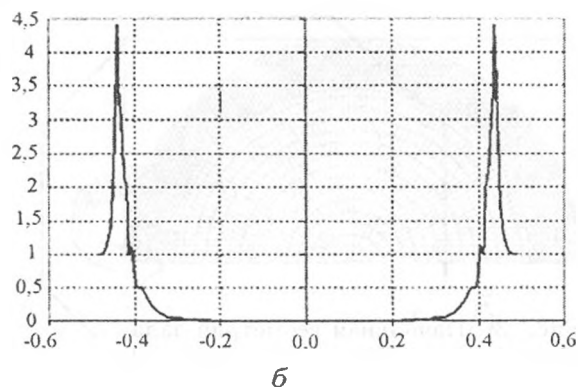
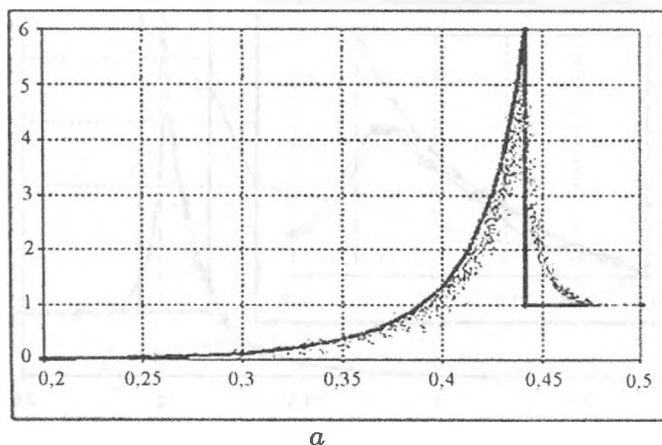


Рис. 7. Задача 2. Распределение плотности вещества, $t = 1$: *a* — в каждой ячейке по радиусу от центра взрыва (\cdots — численное решение, $---$ — аналитическое); *б* — численное решение относительно центра взрыва

Задача 3 о сильном взрыве в экспоненциальной атмосфере. Рассматривается холодная атмосфера ($p = 0$), описываемая как идеальный газ с показателем адиабаты $\gamma = 1,4$. В сферической области радиусом R с центром в начале координат происходит выделение энергии E . Плотность атмосферы изменяется по закону $\rho(x) = \rho_0 e^{-x/\Delta}$, где Δ — показатель неоднородности. Начальная геометрия задачи показана на рис. 9.

Следует отметить, что начальная трехмерная сетка получена вращением вокруг оси симметрии двумерной сетки.

На рис. 10 изображено распределение энергии в сечении плоскостью OXY , полученное по трехмерной методике, в сравнении с решением для того же момента времени ($t = 30$), полученным по двумерной методике.

На рис. 11 показан график зависимости радиуса фронта ударной волны от времени в направлении убывания плотности вещества.

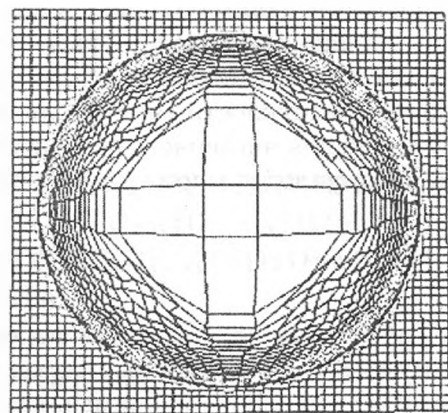


Рис. 8. Задача 3. Распределение плотности вещества в сечении плоскостью, проходящей через центр взрыва, $t = 1$

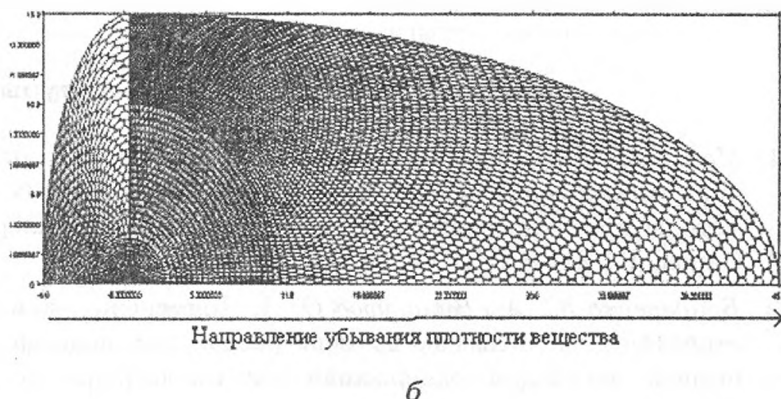
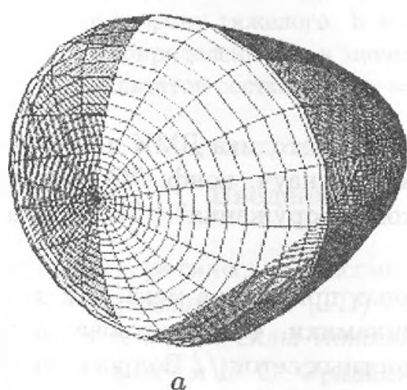


Рис. 9. Начальная геометрия задачи 3 в трехмерном (а) и двумерном (б) случаях

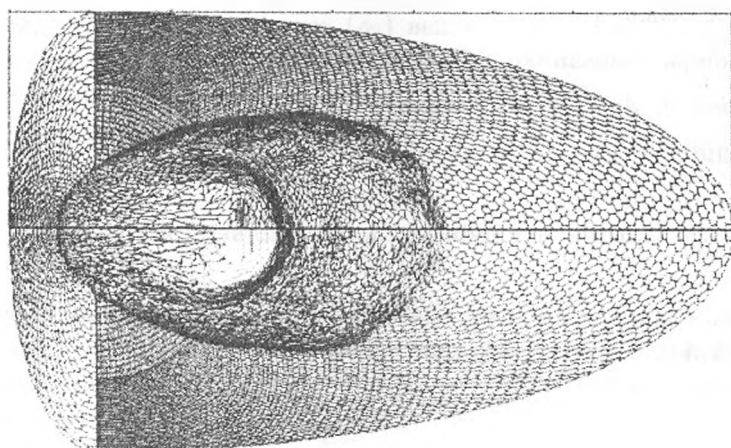


Рис. 10. Задача 3. Распределение энергии в сечении плоскостью OXY , $t = 30$: сверху — по двумерной методике; снизу — по трехмерной методике

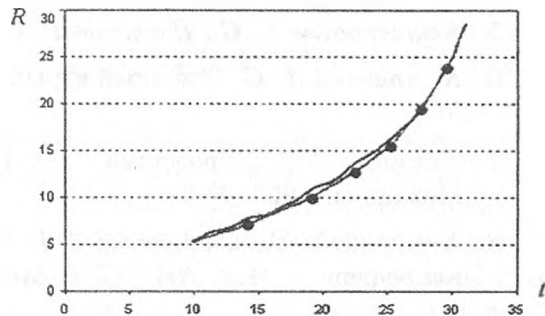


Рис. 11. Задача 3. График зависимости радиуса фронта ударной волны от времени в направлении убывания плотности: \bullet — двумерная методика; — — трехмерная методика

Полученные данные хорошо согласуются друг с другом. Подробно задача о сильном взрыве в экспоненциальной атмосфере рассмотрена в работах [5–8].

Данная задача считалась по двумерной методике с использованием дифференцируемых связей с условием выпуклости многоугольных счетных ячеек. В трехмерной методике для поддержания приемлемой для численного решения счетной сетки были выбраны одновременно оба условия (звездность и выпуклость многогранников).

Заключение

Разработан метод коррекции нерегулярной лагранжевой сетки как для двумерного, так и для трехмерного случая. Данный метод поддерживает определенные свойства ячеек в процессе всего расчета задачи, такие, например, как выпуклость, звездность, несамопересечение ячеек и т. д. При коррекции сетки используемые силы реакции связей не производят работу, что позволяет обеспечить консервативность метода без изменения распределения внутренней энергии ячеек.

При этом разработанный метод коррекции сетки не использует конкретных свойств различных счетных методик и может быть использован в любой лагранжевой счетной методике, базирующейся на сетках произвольной структуры, что делает его привлекательным для численного моделирования в лагранжевых координатах.

Список литературы

1. Мотлохов В. Н., Рассказова В. В., Шапоренко А. Н. Лагранжева методика ДМК для решения прикладных задач газовой динамики на нерегулярных сетках // I науч. конф. "Современные методы проектирования и отработки ракетно-артиллерийского вооружения". Сб. докладов. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2000.
2. Бондаренко Ю. А., Винокуров О. А. Применение вариационных принципов механики для построения дискретных по времени разностных моделей газодинамики. 4. Использование голономных связей для поддержания качества лагранжевых разностных сеток // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1988. Вып. 2.
3. Бондаренко Ю. А. Применение вариационных принципов механики для построения дискретных по времени разностных моделей газодинамики. 5. Законы сохранения импульса и момента импульса в разностных схемах с голономными связями // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1992. Вып. 1.
4. Седов Л. И. Методы подобия и размерности в механике. М.: Физматгиз, 1962.
5. Кестенбойм Х. С., Росляков Г. С., Чудов Л. А. Точечный взрыв. М.: Наука, 1971.
6. Компанеец А. С. Точечный взрыв в неоднородной атмосфере // Докл. АН СССР. 1960. Т. 130, № 5.
7. Лаумбах Д. Д., Пробстин Р. Ф. Точечный взрыв в холодной экспоненциальной атмосфере // Механика. 1969. № 3.
8. Кестенбойм Х. С., Кузина З. Н. Распространение плоских ударных волн в экспоненциальной атмосфере // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. 1971. № 5.