УДК 519.6

РЕАЛИЗАЦИИ КРИТЕРИЯ АДАПТАЦИИ В АЛГОРИТМЕ ПОСТРОЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ СЕТОК

О. В. Ушакова (ИММ УрО РАН, г. Екатеринбург)

Для алгоритма построения оптимальных сеток, удовлетворяющих двум критериям оптимальности — близости сеток к равномерным и ортогональным, предлагаются численные реализации третьего критерия — адаптации к заданной функции. Алгоритм построения оптимальных сеток используется при численном моделировании многокомпонентных сред для построения трехмерных структурированных сеток в областях геометрически сложной формы: объемах вращения, деформированных объемах вращения, а также в объемах, ограниченных поверхностями вращения с параллельными осями вращения.

Ключевые слова: адаптивные сетки, оптимальные сетки, структурированные сетки.

Введение

Статья является продолжением цикла работ по созданию технологии построения трехмерных структурированных сеток в областях геометрически сложной формы [1]. Технология начала свое развитие с разработки алгоритмов построения сеток для объемов вращения [2—5]. Затем были сконструированы алгоритмы для объемов, ограниченных поверхностями с параллельными осями врацения [6], и деформированных объемов вращения [7, 8]. Создаваемая технология предназначается для численного моделирования процессов многокомпонентной гидродинамики [9]. Она развивается в рамках вариационного подхода построения оптимальных сеток [10], удовлетворяющих: 1) близости сеток к равномерным по расстояниям между узлами (критерий равномерности); 2) близости сеток к ортогональным (критерий ортогональности); 3) адаптируемости к заданной функции (критерий адаптации). Ранее критерий адаптации в данном подходе был реализован только для одномерного и двумерного случаев [10, 11]. В настоящей работе предлагаются две численные реализации критерия адаптации сетки к заданной функции в трехмерном случае.

В разд. 1 приведены дискретные функционалы качества сеток, используемые в алгоритме. Это функционалы равномерности, ортогональности и адаптации. В разд. 2 описан алгоритм минимизации общего функционала, формализующего одновременно все три критерия оптимальности. В разд. 3 описаны две различные численные реализации критерия адаптации. В разд. 4 приведены примеры расчетов сеток для различных реализаций.

1. Функционалы оптимальности

В трехмерной области геометрически сложной формы (в данном случае деформированном теле вращения) G строится трехмерная структурированная сетка. Сетка строится по алгоритму из [8, 12], разработанному на основе алгоритмов [2—7, 13, 14] для тел вращения, и состоит из шестигранных линейчатых ячеек [9, 15]. Построение сетки осуществляется в нестационарном процессе [8, 12] вариационным методом [10, 13]: на каждой итерации сетка деформируется, а затем она оптимизируется с учетом коррекции к поверхностям вращения [2, 3, 6, 7] или подвергается перестройке [4, 5] с целью улучшения ее качества [15—19]. Начальная сетка для исходного тела вращения, которое подвергается деформации, строится геометрическим методом [14], затем сетка оптимизируется также по алгоритмам [4, 5].

Общий подход к построению сеток — это подход, согласно которому построение структурированной сетки в области сложной формы G осуществляется с помощью непрерывного отображения $\mathbf{x} : P \to G$ прямоугольного параллеленинеда $P = \boldsymbol{\xi} = \{\xi_1, \xi_2, \xi_3 : 0 \le \xi_l \le I_l, l = 1, 2, 3\}$, длины сторон которого I_l — целые числа, задающие число узлов сетки по каждому из координатных направлений. Прямоугольный параллеленинед P называется вычислительной областью или пространством параметров, а область G, в которой строится сетка, — физической областью. Значения отображения $\mathbf{x} : P \to G$, $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \left(x(\xi_1, \xi_2, \xi_3), y(\xi_1, \xi_2, \xi_3), z(\xi_1, \xi_2, \xi_3)\right)$, при целочисленных значениях $\xi_l = i_l, l = 1, 2, 3, i_l = 0, 1, \ldots, I_l$, определяют координаты узлов трехмерной сетки $\mathbf{x}_{i_1, i_2, i_3} = \mathbf{x}(i_1, i_2, i_3)$ с соответствующими значениями индексов. Будем также использовать для индексов и координатных направлений обозначения i, j, k, а для числа узлов — $N = I_1, M = I_2, L = I_3$.

Физическая область G при таком способе построения сеток представляется в виде криволинейного шестигранника.

Обозначим узел сетки через $H_{ijk} = (x_{ijk}, y_{ijk}, z_{ijk})$ (рис. 1). Пусть $r_{i\pm 1,j,k} = |\overrightarrow{H_{ijk}H_{i\pm 1,j,k}}| = |\mathbf{h}_{i\pm 1}|^1$. Аналогично введем $r_{i,j\pm 1,k}$, $r_{i,j,k\pm 1}$; $\mathbf{h}_{j\pm 1}$, $\mathbf{h}_{k\pm 1}$. Обозначим через φ_{ij}^l углы между векторами $\mathbf{h}_{i\pm 1}$ и $\mathbf{h}_{j\pm 1}$ (l = 1, 2, 3, 4).

Рассмотрим дискретные функционалы

$$D_{\rm P} = \sum_{i,j,k} \left[(r_{i+1,j,k} - r_{i-1,j,k})^2 \left(\frac{1}{r_{i+1,j,k}^2} + \frac{1}{r_{i-1,j,k}^2} \right) + + (r_{i,j+1,k} - r_{i,j-1,k})^2 \left(\frac{1}{r_{i,j+1,k}^2} + \frac{1}{r_{i,j-1,k}^2} \right) + H_{i-1,j,k} \right] + H_{i-1,j,k} + (r_{i,j,k+1} - r_{i,j,k-1})^2 \left(\frac{1}{r_{i,j,k+1}^2} + \frac{1}{r_{i,j,k-1}^2} \right) \right]; H_{i,j-1,k} + H_{i,j-1,k$$



Рис. 1. Узлы сетки, расстояния между узлами, углы между координатными линиями

Функционалы $D_{\rm P}$ и $D_{\rm O}$ формализуют критерии близости сеток соответственно к равномерным и ортогональным. Постоянная $A_{\rm O}$ — положительный весовой коэффициент, определяющий вклад функционала $D_{\rm O}$ в построение сетки.

Минимизацией функционала D(1) осуществляется оптимизация сетки (построение оптимальной сетки, близкой к равномерной и ортогональной, с гладкими сеточными линиями) или ее глобальная перестройка.

В алгоритме при формализации критерия адаптации будем использовать способ, предложенный в подходе [10], при котором узлы сетки должны автоматически сгущаться в зонах больших градиентов заданной функции $\Phi(\mathbf{x})$. Для простоты опишем этот способ в одномерном случае.

Рассмотрим сетку x_i , i = 0, 1, ..., N, и заданную функцию $\Phi(x)$ на отрезке [0, a] (рис. 2). Используем в качестве дискретной меры адаптации величину

$$D_{\rm A} = \sum_{i=1}^{N} \left(\Phi(x_i) - \Phi(x_{i-1}) \right)^2 h_i^2 = \sum_{i=1}^{N} w^2(x_i) h_i^2, \tag{2}$$

¹Здесь и далее сложные индексы будем разделять запятыми.

где $h_i = x_i - x_{i-1}$; $w(x_i) = |\Phi(x_i) - \Phi(x_{i-1})|$. Для исключения вырождений в алгоритмах минимизации функционалов вариации функции по абсолютной величине $|\Phi(x_i) - \Phi(x_{i-1})|$ заменяются значениями весовой функции $w(x_i) = \sqrt{(\Phi'(x_i))^2 + 1}$, большей нуля (см. [10]).

Функционал $D_{\rm A}$ представляет собой сумму квадратов площадей прямоугольников, через вершины которых проходит график кривой $f=\Phi(x)$. Минимизация $D_{\rm A}$ за счет выбора узлов x_i приводит к сгущению сетки в зонах больших градиентов функции Φ .

Обобщение функционала (2) на трехмерный случай имеет вид



Рис. 2. Конструкция функционала D_A

$$D_{A} = \sum_{i,j,k} \left[r_{i+1,j,k}^{2} \left(\Phi(H_{i+1,j,k}) - \Phi(H_{ijk}) \right)^{2} + r_{i,j+1,k}^{2} \left(\Phi(H_{i,j+1,k}) - \Phi(H_{ijk}) \right)^{2} + r_{i,j,k+1}^{2} \left(\Phi(H_{i,j,k+1}) - \Phi(H_{ijk}) \right)^{2} \right].$$

Здесь $\Phi(H_{ijk})$ — значение в узле H_{ijk} заданной функции $\Phi(x, y, z)$, к которой осуществляется адаптация. Для исключения вырождений в алгоритмах минимизации функционалов вариации функции $\Phi(x, y, z)$, как и в одномерном случае, заменяют весовой функцией w(x, y, z), большей нуля (см. [10]).

Использование функционала $D_{\rm A}$ позволяет сгустить узлы сетки, а значит, уменьшить размеры ячеек там, где значения производной заданной функции велики, а там, где они малы, — увеличить размеры ячеек.

За счет включения функционала адаптации в минимизируемый функционал (1) осуществляется адаптация сетки к заданной функции $\Phi(x, y, z)$. При этом минимизируемый функционал будет иметь вид

$$D = D_{\rm P} + A_{\rm O}D_{\rm O} + A_{\rm A}D_{\rm A},\tag{3}$$

где постоянная $A_{\rm A}$ — положительный весовой коэффициент, определяющий вклад функционала $D_{\rm A}$ в построение сетки. Суммирование производится по всем внутренним узлам сетки. Таким образом, минимизация функционала D (3) должна обеспечить построение оптимальной сетки, близкой к равномерной, ортогональной и адаптивной.

Непрерывный аналог этого функционала и описание возникающих вариационных задач для построения сеток приведены в [4, 5, 10].

Отличительной особенностью функционала D и его непрерывного аналога является специальный способ формализации критерия равномерности. Он определяет тип уравнений Эйлера для построения сеток (гиперболический в широком смысле), позволяет рассматривать различные виды краевых условий в вариационных задачах построения сеток (фиксированные, свободные узлы, условие ортогональности координатных линий и поверхностей граням) и обеспечивает хорошие вычислительные свойства сеток (см. [10]).

Функционал ортогональности D_0 также играет очень важную роль. Благодаря его конструкции целевая функция его непрерывного аналога [4] содержит якобиан от искомого преобразования в знаменателе. Поэтому функционал будет обращаться в бесконечность, если якобиан от искомого преобразования или дискретный аналог якобиана в узле сетки (в трехмерном случае объем так называемого *углового* тетраэдра ячейки, построенного на ее ребрах, выходящих из данного узла; см. коэффициенты $\alpha_{i_1i_2i_3}$ из [15]) будет обращаться в нуль. Методы построения сеток, использующие такие конструкции, называют барьерными [20, 21], обладающими "барьером" против вырожденных элементов. Кроме того, функционал ортогональности (при наличии функционала равномерности) обеспечивает построение гладких сеток, чего, как показывает опыт расчетов, нельзя достичь с использованием только одного функционала равномерности. В связи с введенным функционалом адаптации осуществлялась модификация численного алгоритма оптимизации или глобальной перестройки сетки, разработанного ранее только для двух критериев оптимальности: равномерности и ортогональности. Алгоритм оптимизации представляет собой итерационную процедуру минимизации дискретного функционала D (3). Алгоритм минимизации функционала для случая $A_{\rm A} = 0$ подробно описан в [4, 5], он осуществляется методом покоординатного спуска. Движение граничных узлов в этом алгоритме происходит по линейчатым поверхностям граней ячеек начальной сетки или сетки с предыдущей итерации. Чтобы при этом не возникало потери точности, были предложены алгоритмы коррекции сетки к поверхностям вращения, описанные в [2, 3, 6, 7]. В данной статье набор указанных алгоритмов дополняется новыми способами вычисления функционала D и построения допустимого множества для его минимизации, специальными для случаев адаптации сетки к заданной функции.

Для того чтобы представить новую модификацию алгоритма [4, 5], необходимо кратко описать процедуру минимизации функционала *D* и предложенные способы построения допустимых множеств. В трехмерном случае рассматриваемый алгоритм разработан на основе его эффективного аналога для двумерного случая [11] и представляет собой алгоритм прямой геометрической минимизации дискретного функционала *D*.

2. Процедура минимизации функционала D

Минимизация дискретного функционала осуществляется методом покоординатного спуска. Процедура является итерационной. Итерации начинаются от некоторой невырожденной начальной сетки. Как исключение допускаются начальные сетки, содержащие вырожденные ячейки обычно на границе области G. Возможные случаи перечислены в [4].

На каждой итерации для каждого внутреннего узла H_{ijk}^n осуществляется локальная оптимизация сетки, основанная на геометрических принципах. Положение нового узла H_{ijk}^{n+1} ищется из условий минимума функционала и невырожденности сетки. При этом в качестве узлов, влияющих на положение нового узла, рассматриваются вершины восьми шестигранных ячеек, имеющих общую вершину H_{ijk}^n . Такие узлы образуют 27-точечный шаблон (рис. 3). Внешние узлы этих восьми шестигранников фиксируются, и двигается только внутренний узел H_{ijk}^n . Для граничных узлов шаблон строится аналогично.

Отметим основные особенности численного алгоритма.

Так как оптимизация осуществляется локально, смещение любого узла не изменяет геометрию шаблонов узлов, не являющихся соседями с данным узлом. Следовательно, не меняются отображение, задающее сетку, и его якобиан в узлах, не являющихся соседними с данным, а, значит, и качество сетки в этих узлах.



Рис. 3. Шаблон узлов

На очередной итерации n при выборе смещения $\overline{H_{ijk}^n H_{ijk}^{n+1}}$ узла H_{ijk}^n , минимизирующего функционал и сохраняющего невырожденность сетки, можно руководствоваться различными стратегиями. Ранее (в [4, 5]), при реализации только двух критериев оптимальности, множество для минимизации функционала строилось только на основе критерия равномерности. При добавлении адаптации это множество будет строиться на основе критерия адаптации.

Допустимым множеством (обеспечивающим невырожденность) на основе того и другого критерия в большинстве случаев будет восьмигранник Γ (с плоскими треугольными гранями) с вершинами в точках $I_m = H_{i-1,j,k}^n$, $I_p = H_{i+1,j,k}^n$, $J_m = H_{i,j-1,k}^n$, $J_p = H_{i,j+1,k}^n$, $K_m = H_{i,j,k-1}^n$, $K_p = H_{i,j,k+1}^n$, если этот восьмигранник выпуклый (рис. 4, *a*).

Так как целевая функция (см. [4, 5]) содержит якобиан от искомого преобразования в качестве знаменателя, то D будет обращаться в бесконечность, если дискретный аналог якобиана в узле сетки



Рис. 4. Выпуклый (а) и невыпуклые (б) восьмигранники

будет обращаться в нуль. В алгоритме осуществляется контроль за тем, чтобы барьерные свойства функционала сохранялись при численной реализации алгоритма (см. [4]). Кроме того, на каждой итерации осуществляется дополнительный контроль за невырожденностью ячеек (также см. [4]), что тоже предотвращает возникновение вырожденных сеток.

Итерационный процесс прекращается, когда значения минимизируемого функционала стабилизируются или меняются незначительно от итерации к итерации.

3. Оптимизация положения внутренних узлов

Как и в двумерном случае [11], положение узла находится из условия невырожденности сетки и условия минимума функционала D на специальном множестве точек H_+ или H_- .

Множества точек для минимизации функционала D. Множества H_+ , H_- строятся с помощью специальных точек C_+ , C_- . При нахождении точек при оптимизации сеток без учета критерия адаптации определяющим является критерий близости сетки к равномерной по расстояниям между соседними узлами (см. [4]). Если же критерий адаптации к заданной функции учитывается, то при оптимизации сеток определяющим будет он. В том и другом случае при построении множества рассматриваются одни и те же многогранники.

Рассматривается восьмигранник Γ (см. рис. 4). Если Γ — выпуклый, то в случае отсутствия критерия адаптации задается точка C_+ , определяемая соотношением²

$$C_{+} = \frac{1}{6}(I_{m} + I_{p} + J_{m} + J_{p} + K_{m} + K_{p})$$
(4)

и совпадающая с центром масс данного восьмигранника (центр масс трех его диагоналей). Точка C_{-} задается, если Γ не является выпуклым. В этом случае она определяется как центр масс одной из внутренних диагоналей (для определенности будем считать, что это $[I_m, I_p])^3$

$$C_{-} = \frac{1}{2}(I_m + I_p)$$
(5)

²Здесь и далее имеются в виду радиусы-векторы (координаты) точек.

³Здесь и далее формулы записываются для выбранной одной из трех диагоналей или одной из трех пар диагоналей многогранника. Для двух других диагоналей (пар диагоналей) формулы аналогичны.

либо как центр масс двух внутренних диагоналей (пусть это будут $[I_m, I_p]$ и $[J_m, J_p]$):

$$C_{-} = \frac{1}{4}(I_m + I_p + J_m + J_p).$$
(6)

Для выпуклых многогранников (см. рис. 4, *a*) функционал *D* минимизируется на множестве H_+ , для невыпуклых (см. рис. 4, δ) — на множестве H_- . Множества H_+ , H_- суть множества точек $H_{iik}^{n+1}(m)$ таких, что

$$\overrightarrow{H_{ijk}^n H_{ijk}^{n+1}(m)} = \frac{m}{3} \overrightarrow{H_{ijk}^n C}, \quad m = 0, 1, 2, 3,$$

где C совпадает соответственно с C_+ , C_- (с C_{w+} , C_{w-} в случае наличия критерия адаптации — см. далее).

Критерий равномерности. Центр масс ячейки. Для равномерной и ортогональной сетки (выпуклые восьмигранники Γ) вклад центра масс восьмигранника ($H_{ijk}^{n+1} = C$) в функционал $D_{\rm P}$ минимален (равен нулю). Для невыпуклых восьмигранников нулевым является вклад центра масс внутренней диагонали в функционал $D_{\rm P}$ для направления, соответствующего данной диагонали. Необходимость рассматривать выпуклые и невыпуклые восьмигранники Γ вызвана сложными конфигурациями рассматриваемых областей с качеством начальной сетки, допускающей такие Γ . Отметим, что невыпуклые восьмигранники могут возникать как на невырожденных сетках, так и на сетках, содержащих отдельные вырожденные ячейки (см. [4]). В случае выпуклого восьмигранника Γ новое положение H_{ijk}^{n+1} узла H_{ijk}^n в любой точке на отрезке $H_{ijk}^n C$ не изменит его ориентации по отношению к граням восьмигранника (узел будет находиться внутри восьмигранника). А значит, не изменятся знаки объемов *угловых* тетраэдров ячеек (с вершиной H_{ijk}^{n+1} и основаниями — гранями восьмигранника), отвечающих за невырожденность сетки. Таким образом, узел сетки $H_{ijk}^{n+1} = d_{ijk}$ дет удовлетворять необходимым условиям невырожденности, а при малых смещениях $\overline{H_{ijk}^n} = d_{ijk}$

В двумерном случае [11] вместо восьмигранника Г рассматривался четырехугольник, а в качестве точки C — центр масс его внутренних диагоналей, если четырехугольник выпуклый, или одной внутренней диагонали, если четырехугольник невыпуклый.

Проверка восьмигранника Г на выпуклость осуществляется на основе одного из определений выпуклости многогранников (с плоскими гранями), а именно следующего: для любой грани многогранника все его вершины, за исключением вершин выбранной грани, расположены по одну сторону от плоскости грани. Численно этот факт проверяется с помощью условий положительности объемов специальных тетраэдров [4]. В случае, если восьмигранник невыпуклый, в результате этой проверки можно определить, какие его диагонали являются внутренними, а какие — нет.

можно определить, какие его диагонали являются внутренними, а какие — нет. Если для всех шаблонов восьмигранники Γ выпуклые и $H_{ijk}^{n+1} = C = C_+$, то такая вычислительная процедура эквивалентна (см. [4]) численному решению системы уравнений Лапласа вида

$$\mathbf{x}_{\xi_1\xi_1} + \mathbf{x}_{\xi_2\xi_2} + \mathbf{x}_{\xi_3\xi_3} = 0.$$

Численная процедура в рассматриваемом случае — это явная схема (4) для решения вспомогательной нестационарной задачи для этих уравнений. Однако она не будет эффективной даже для простых конфигураций областей, так как порождает вырожденные ячейки, особенно для областей с негладкой границей, имеющей острые углы или резкие перегибы (см. примеры из [17, 24]).

Уравнения Лапласа не гарантируют невырожденности решения, задающего искомое отображение (обсуждение данного вопроса см., например, в [22—24]), а значит, в методах, основанных на их численном решении, возможны вырождения сетки. Данный недостаток особенно проявляется при невыпуклых восьмигранниках. Поэтому для таковых схема модифицируется (см. (5) и (6)) путем исключения одного или двух направлений или слагаемых в каждом из уравнений системы в зависимости от числа внутренних диагоналей восьмигранника. В этом случае $C = C_{-}$. Такая модификация не позволяет избавиться от вырожденности, присущей начальной сетке в связи с особенностями конфигурации области (см. [4]). Поэтому если начальная сетка имеет призматические ячейки с треугольным основанием [19, 25] (они возникают обычно на границе), то в этом же месте области G оптимальная сетка также содержит призматические ячейки. Однако если невырожденность не связана с особенностями конфигурации области, а характеризует только начальную сетку, то, как показывают эксперименты, алгоритм позволяет избавиться от вырожденных шестигранных ячеек перечисленных выше типов (см. вырожденную начальную сетку, построенную в [17] с помощью случайных чисел). Практика вычислений показывает, что предлагаемый алгоритм может улучшить начальную сетку, состоящую из невырожденных шестигранных ячеек и вырожденных шестигранных ячеек, являющихся несамопересекающимися многогранниками (либо невырожденными ячейками других видов [19, 25]).

Когда точка C найдена, организуется локальная оптимизационная процедура для функционала D на множестве точек H_+ или H_- . В качестве нового узла выбирается точка из указанных выше множеств, дающая функционалу D его минимальное значение (подробности см. в [4]). Когда новый узел найден, старый узел заменяется новым и осуществляется переход к новому шаблону.

Опишем теперь два способа нахождения точки C при минимизации функционала в случае учета критерия адаптации.

Способ 1. Центр масс с весами. В случае построения адаптивных сеток часто (см. [26]) движение узлов осуществляют к центру масс (тяжести) C = (x, y, z) системы материальных точек $Q_i = (x_i, y_i, z_i)$ с массами $m_i, i = 1, 2, ..., n$ (см. [27]):

$$C = \frac{\sum Q_i m_i}{\sum m_i} \quad \Big(x = \frac{\sum x_i m_i}{\sum m_i}, \ y = \frac{\sum y_i m_i}{\sum m_i}, \ z = \frac{\sum z_i m_i}{\sum m_i} \Big),$$

где полагают в качестве координат материальных точек координаты узлов сетки, в качестве масс — значения весовой функции w = w(x, y, z) в них. Применив эту формулу к восьмиграннику Γ , получим аналоги формул (4)—(6).

Если восьмигранник выпуклый, то

$$C = C_{w+} = \frac{I_m w(I_m) + I_p w(I_p) + J_m w(J_m) + J_p w(J_p) + K_m w(K_m) + K_p w(K_p)}{w(I_m) + w(I_p) + w(J_m) + w(J_p) + w(K_m) + w(K_p)}.$$
(7)

Если восьмигранник невыпуклый и внутренней является только диагональ $[I_m, I_p]$, то

$$C = C_{w-} = \frac{I_m w(I_m) + I_p w(I_p)}{w(I_m) + w(I_p)}.$$
(8)

В случае невыпуклого восьмигранника и двух внутренних диагоналей $[I_m, I_p]$ и $[J_m, J_p]$

$$C = C_{w-} = \frac{I_m w(I_m) + I_p w(I_p) + J_m w(J_m) + J_p w(J_p)}{w(I_m) + w(I_p) + w(J_m) + w(J_p)}.$$
(9)

В случае учета критерия адаптации $(A_A > 0)$ множества H_+ и H_- могут строиться с помощью формул (7)—(9), если адаптация осуществляется в физическом пространстве.

Если адаптацию проводить в параметрическом пространстве, то в формулах (7)—(9) весовую функцию нужно вычислять непосредственно в параметрическом пространстве: $w(I_m) = \bar{w}(i-1,j,k)$, $w(I_p) = \bar{w}(i+1,j,k), w(J_m) = \bar{w}(i,j-1,k), w(J_p) = \bar{w}(i,j+1,k), w(K_m) = \bar{w}(i,j,k-1), w(K_p) =$ $= \bar{w}(i,j,k+1)$, задавая функцию, к которой осуществляется адаптация, в виде $f = \bar{\Phi}(\xi_1,\xi_2,\xi_3) =$ $= \Phi(x(\xi_1,\xi_2,\xi_3), y(\xi_1,\xi_2,\xi_3), z(\xi_1,\xi_2,\xi_3))$ (см. разд. 4) и используя дискретный функционал

$$D_{A} = \sum_{i,j,k} \left[r_{i+1,j,k}^{2} \left(\Phi(H_{i+1,j,k}) - \Phi(H_{ijk}) \right)^{2} + r_{i,j+1,k}^{2} \left(\Phi(H_{i,j+1,k}) - \Phi(H_{ijk}) \right)^{2} + r_{i,j,k+1}^{2} \left(\Phi(H_{i,j,k+1}) - \Phi(H_{ijk}) \right)^{2} \right] = \sum_{i,j,k} \left[r_{i+1,j,k}^{2} \left(\bar{\Phi}(i+1,j,k) - \bar{\Phi}(ijk) \right)^{2} + r_{i,j,k+1}^{2} \left(\bar{\Phi}(i,j+1,k) - \bar{\Phi}(ijk) \right)^{2} + r_{i,j,k+1}^{2} \left(\bar{\Phi}(i,j+1,k) - \bar{\Phi}(ijk) \right)^{2} \right].$$

В данном варианте управлять адаптацией можно в зависимости от функции, заданной при значениях индексов узлов. Этот вариант адаптации можно использовать, если нужно сгустить узлы ближе к какой-либо граничной поверхности, например внутренней (ближней к оси вращения).

Отметим, что если адаптация будет осуществляться к функции $\Phi(x, y, z) = \text{const}$, то формулы (7)—(9) будут совпадать с формулами (4)—(6), а центр масс с весами будет совпадать с центром масс ячейки, т. е. со случаем без адаптации.

Способ 2. Равнораспределение весовой функции w. Численное решение краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений показало, что погрешность решения существенно может быть уменьшена (см. [26]), если узлы сетки распределить так, чтобы некоторая весовая функция w(x) (зависящая от решения) была равнораспределена

$$h_i w_i = \text{const}, \quad w_i = w(x_i)$$
 (10)

по всей области решения задачи, в рассматриваемом одномерном случае — на отрезке [0, a].

Реализация этого принципа приводит к сгущению шагов сетки там, где велики w_i .

Минимизация функционала D_A в одномерном случае (2) эквивалентна равнораспределению весовой функции w(x) (см. [10, 26]). Действительно, равенство x'w = const дает формулировку принципа равнораспределения в непрерывном случае. Непрерывный аналог функционала D_A имеет вид

$$I_{\rm A} = \int_{0}^{N} \Phi'^{2}(x(p)) x'^{4}(p) dp$$
(11)

для функции узлов $x = x(p), p \in [0, N]$, где N задает число шагов (N + 1 узлов) сетки.

Два краевых условия для функции x(p) очевидны:

$$x(0) = 0; \quad x(N) = a.$$
 (12)

Иногда знак равенства в (10) заменяют знаком "<", и, таким образом, рассматривают суб-равнораспределение весовой функции. Весовая функция может задаваться разным образом.

При Ф'≢0 для функционала (11) с краевыми условиями (12) решение уравнения Эйлера можно найти в неявной форме (см. [10])

$$p(x) = \frac{N \int_{0}^{x} \sqrt[4]{{\Phi'}^{2}(\xi)d\xi}}{\int_{0}^{a} \sqrt[4]{{\Phi'}^{2}(\xi)d\xi}} = \frac{N \int_{0}^{x} w(\xi)d\xi}{\int_{0}^{a} w(\xi)d\xi}.$$
(13)

Оптимальные сетки для функционала (11), определяемые обратным отображением (13) при краевых условиях (12), реализуют принцип равнораспределения с весовой функцией

$$w(x(p)) = \sqrt[4]{\Phi'^2}(x(p)).$$

Так как w(x) содержится в знаменателе дроби, очевидно, что в общем для значений Φ' случае для исключения вырождения в (13) весовая функция w(x) должна быть больше нуля.

При конструировании допустимого множества для минимизации функционала будем реализовывать принцип равнораспределения весовой функции по координатным направлениям, находя искомое прямое отображение с помощью обратной линейной интерполяции.

Найдем точку C_I , удовлетворяющую принципу равнораспределения весовой функции w(x, y, z) на отрезке $[I_m, I_p]$. При этом на отрезке координатного направления *i* будем строить сетку узлов

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(0); \quad \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}(1); \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}(2); \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}(p); \quad p \in [0, 2]; \quad \mathbf{r}(0) = I_m; \quad \mathbf{r}(2) = I_p$$

с помощью одномерной сетки

$$r_0 = x(0) = x_0; \ r_1 = x(1) = x_1; \ r_2 = x(2) = x_2; \ x = x(p), \ p \in [0, 2]; \ x(0) = 0; \ x(2) = |I_m I_p|,$$
(14)

для которой выполняется принцип равнораспределения (10). Тогда для координатного направления i точка C_I совпадает с точкой

$$\mathbf{r}_1 = I_m + r_1 \overrightarrow{I_m I_p} / |I_m I_p|. \tag{15}$$

Для конструирования такой сетки узлов необходимо найти отображение x = x(p) (14), обратное к которому совпадает с (13). Будем находить его численно методом обратной линейной интерполяции.

Сначала для отрезка $[0, x_2]$ вычисляем значения $p(x_i)$ на равномерной сетке 0, $x_1 = 0,5x_2, x_2$, вычисляя интегралы в (13) численно по составной формуле трапеций. Введем обозначения $h_1 = x_1 - x_0$; $h_2 = h_1 = x_2 - x_1$; $w_0 = w(I_m)$; $w_1 = w\left(\frac{I_m + I_p}{2}\right)$; $w_2 = w(I_p)$. Так как N = 2, получим табл. 1 значений отображения $p(x_i)$ для равномерного распределения по x, где $\bar{w}(\xi) = w\left(I_m + \xi \overrightarrow{I_m I_p}/|I_m I_p|\right), \xi \in [0, |I_m I_p|]$.

Используя табл. 1, обратной линейной интерполяцией можно найти табл. 2 значений x = x(p) для равномерного распределения по p: $p_j = j$, j = 0, 1, 2, где r_1 из этой таблицы будет находиться по следующему алгоритму.

Если для значений из табл. 1 $j = 1 \in \left[0, p\left(\frac{h_1 + h_2}{2}\right)\right]$, то, аппроксимируя x = x(p) линейной функцией вида x = x(p) = ap + b, получаем $a \cdot 0 + b = b = 0$ при p = 0 и $ap_1 + 0 = x_1$, $a = x_1/p_1$ при $p = p_1$. Тогда, имея $x = x_1/p_1p$ и полагая p = 1, получаем, что новый узел r_1 выражается через старое значение следующим образом: $r_1 = 0.5(h_1 + h_2)/p_1 = x_1/p_1$, где p_1 , x_1 взяты из табл. 1.

Если для значений из табл. 1 $j = 1 \in \left[p\left(\frac{h_1 + h_2}{2}\right), 2\right] = \left[p(x_1), 2\right]$, то, снова аппроксимируя x = x(p) линейной функцией вида x = x(p) = ap + b, получаем $ap_1 + b = x_1$ при $p = p_1$ и $a \cdot 2 + b = x_2$ при $p = p_2 = 2$. Отсюда $a(2 - p_1) = x_2 - x_1$; $b = x_1 - ap_1$.

Далее $a = \frac{x_2 - x_1}{2 - p_1} = \frac{x_2}{2(2 - p_1)} = \frac{x_1}{2 - p_1}; b = \frac{x_1 - x_1 p_1}{2 - p_1} = \frac{2x_1(1 - p_1)}{2 - p_1},$ и окончательно имеем $r_1 = \frac{x_1}{2 - p_1} + \frac{2x_1(1 - p_1)}{2 - p_1} = \frac{x_1(3 - 2p_1)}{2 - p_1}.$ Здесь снова используются p_1, x_1 из табл. 1.

Таблица 1

Значения отображения (13)

$$\begin{aligned} x_i, i &= 0, 1, 2 & p_i = p(x_i), i = 0, 1, 2 \\ 0 & p(0) &= 0 \\ x_1 &= \frac{h_1 + h_2}{2} & p_1 = p(x_1) = \frac{2 \int_{0}^{h_1} \bar{w}(\xi) d\xi}{\int_{0}^{h_1 + h_2} \bar{w}(\xi) d\xi} = \frac{(w_0 + w_1)h_1}{\frac{w_0 + w_1}{2}h_1 + \frac{w_1 + w_2}{2}h_2} = \frac{2(w_1 + w_2)}{w_0 + 2w_1 + w_2} \\ x_2 &= h_1 + h_2 & p_2 = p(x_2) = 2 \end{aligned}$$

Значения отображения, обратного к (13)

Таблица 2

| $p_j = j, \ j = 0, 1, 2$ | $r_j = x(p_j), \ j = 0, 1, 2$ |
|--------------------------|--|
| 0 | $r_0 = 0$ |
| 1 | $r_1 = \begin{cases} \frac{1}{p_1}, & \text{если } j = 1 \in [0, p(x_1)];\\ \frac{x_1(3-2p_1)}{2-p_1}, & \text{если } j = 1 \in [p(x_1), 2] \end{cases}$ |
| 2 | $r_2 = I_m I_p $ |

Тогда, если диагональ восьмигранника $[I_m, I_p]$ внутренняя, то для нее находим свое r_1 из принципа равнораспределения, а далее по формуле (15) находим точку C_I . Повторяя аналогичную процедуру для внутренних диагоналей $[J_m, J_p]$ и $[K_m, K_p]$ многогранника, находим точки C_J , C_K . Затем для построения множеств для минимизации функционала D находим точку $C = (C_I + C_J + C_K)/3$.

Аналогично, если в многограннике только две внутренние диагонали, находим на них точки из принципа равнораспределения весовой функции w(x, y, z) и вычисляем среднее арифметическое этих точек. Так, для внутренних диагоналей $[I_m, I_p], [J_m, J_p]$ имеем по формуле (15) точку C_I ; C_J получается аналогично. Точка C будет иметь вид $C = (C_I + C_J)/2$.

Если в многограннике только одна внутренняя диагональ, например $[I_m, I_p]$, то для нее находим точку C_I , реализующую принцип равнораспределения весовой функции w(x, y, z) для внутренней диагонали, и полагаем $C = C_I$.

Отметим, что если функция, к которой осуществляется адаптация, $\Phi(x, y, z) = \text{const}$, то точка C будет совпадать с центром масс ячейки.

Далее строим множества H_+ , (H_-) для минимизации функционала D и всю процедуру его минимизации осуществляем способом, описанным выше.

Способы вычисления дискретных функционалов равномерности и ортогональности, порядок расчета узлов, алгоритмы расчета узлов на границе описаны в [4].

4. Примеры расчетов

Приведем примеры расчетов сеток, адаптированных к заданным в физическом пространстве функциям

$$f = \Phi(x) = \exp \frac{(x-5)^2}{\varepsilon}, \quad \varepsilon = 10$$
 (16)

И

$$f = \sqrt{\Phi^2(x) + 1}.$$
 (17)

Цель этих расчетов — протестировать и сравнить предложенные численные способы реализации критерия адаптации, способы задания функции.

На рис. 5, 6 показаны сетки для функции (16). При построении сетки на рис. 5 множества для минимизации функционала строились на основе центра масс ячеек с весами, а на рис. 6 — на основе принципа равнораспределения весовой функции.

На рис. 7, 8 приведены аналогичные сетки для функции (17). Сетки на этих рисунках более гладкие, чем на рис. 5, 6.

Таким образом, качество адаптивной сетки зависит от выбора функции. Число итераций во всех расчетах равно 50. В качестве начальной сетки во всех расчетах использовалась оптимальная сетка (см. рис. 9, *a* слева), построенная по алгоритму оптимизации без учета критерия адаптации ($A_{\rm A} = 0$). Число узлов в расчетах по направлениям *i*, *j*, *k*: N = 61; M = 81; L = 30.

На рис. 9 приведен пример расчета адаптивной сетки для функции, заданной в параметрическом пространстве:

$$f = f(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \left(\frac{\xi_3 - (L-1)}{L-1}\right)^6 + 1.$$
(18)



Рис. 5. Оптимальная адаптивная ($A_{\rm O} = 1$; $A_{\rm A} = 1\,000$) сетка и значения функции (16) при построении множеств для минимизации функционала на основе центра масс ячеек с весами



Рис. 6. Оптимальная адаптивная ($A_{\rm O} = 1$; $A_{\rm A} = 1\,000$) сетка и значения функции (16) при построении множеств для минимизации функционала на основе принципа равнораспределения весовой функции



Рис. 7. Оптимальная адаптивная ($A_{\rm O} = 1$; $A_{\rm A} = 1\,000$) сетка и значения функции (17) при построении множеств для минимизации функционала на основе центра масс ячеек с весами



Рис. 8. Оптимальная адаптивная ($A_{\rm O} = 1$; $A_{\rm A} = 1\,000$) сетка и значения функции (17) при построении множеств для минимизации функционала на основе принципа равнораспределения весовой функции



Рис. 9. Начальная оптимальная (слева, $A_{\rm O} = 0,1; A_{\rm A} = 0$) и оптимальная адаптивная (справа, $A_{\rm O} = 0,1; A_{\rm A} = 10$) сетки (*a*), а также значения функции (18) (*б*) при построении множеств для минимизации функционала на основе центра масс ячеек с весами

При $\xi_3 = k, k = 0$ получаем f = 2. При $\xi_3 = k, k = L - 1$ получаем f = 1. Значения функции f представлены на рис. 9, δ . Видно, что функция в большей степени начинает меняться при приближении к оси вращения. Использование адаптации к заданной функции в параметрическом пространстве позволило передвинуть узлы от поверхности k = L - 1, дальней к оси вращения, к поверхности k = 0, ближней к оси вращения.

Заключение

Оба способа численной реализации критерия адаптации показали свою работоспособность и одинаковые возможности для построения адаптивных сеток. Предложенные алгоритмы реализованы на языке C++ в комплексе программ оптимизации сеток в объемах, ограниченных поверхностями вращения [1].

Список литературы

- Anuchina A. I., Artyomova N. A., Gordeychuck V. A., Ushakova O. V. A Technology for grid generation in volumes bounded by the surfaces of revolutions // Numerical Geometry, Grid Generation and Scientific Computing / Ed. by V. A. Garanzha et al. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. 2019. Vol. 131. P. 281–292.
- Ушакова О. В. Алгоритм коррекции сетки к области вращения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2016. Вып. 1. С. 16—27. Ushakova O. V. Algoritm korrektsii setki k oblasti vrashcheniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2016. Vyp. 1. S. 16—27.
- Ушакова О. В. Применение алгоритма коррекции сетки к области вращения // Там же. Вып. 2. C. 31—37. Ushakova O. V. Primenenie algoritma korrektsii setki k oblasti vrashcheniya // Tam zhe. Vyp. 2. S. 31—37.
- Ушакова О. В. Алгоритмы оптимизации трехмерных сеток для областей вращения // Труды института математики и механики. 2008. Т. 14, № 1. С. 150—180. Ushakova O. V. Algoritmy optimizatsii trekhmernykh setok dlya oblastey vrashcheniya // Trudy instituta matematiki i mekhaniki. 2008. Т. 14, № 1. S. 150—180.
- Bronina T. N., Ushakova O. V. Application of optimal grid generation algorithms to the volumes of revolution // Advances in Grid Generation / Ed. by O. V. Ushakova. N.-Y.: Novascience Publishers, 2007. P. 283–320.
- 6. Ушакова О. В. Алгоритм коррекции сетки к области, образованной поверхностями вращения с параллельными осями вращения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2018. Вып. 1. С. 30—41. Ushakova O. V. Algoritm korrektsii setki k oblasti, obrazovannoy poverkhnostyami vrashcheniya s parallelnymi osyami vrashcheniya // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2018. Vyp. 1. S. 30—41.
- Ушакова О. В. Алгоритм коррекции сетки к деформированной области вращения // Там же. 2017. Вып. 2. С. 53—65. Ushakova O. V. Algoritm korrektsii setki k deformirovannoy oblasti vrashcheniya // Тат zhe. 2017. Vyp. 2. S. 53—65.
- 8. Артёмова Н. А. Нестационарный алгоритм построения структурированных сеток в деформированных областях // Там же. 2018. Вып. 4. С. 76—86. Artyomova N. A. Nestatsionarny algoritm postroeniya strukturirovannykh setok v deformirovannykh oblastyakh // Tam zhe. 2018. Vyp. 4. S. 76—86.

- Anuchina N. N., Volkov V. I., Gordeychuk V. A., Es'kov N. S., Ilyutina O. S., Kozyrev O. M. Numerical simulation of 3D multi-component vortex flows by MAH-3 code // Advances in Grid Generation / Ed. by O. V. Ushakova. N.-Y.: Novascience Publishers, 2007. P. 337–380.
- Khairullina O. B., Sidorov A. F., Ushakova O. V. Variational methods of construction of optimal grids // Handbook of Grid Generation / Ed. by J. F. Thompson, B. K. Soni and N. P. Weatherill. Boca Raton, FL: CRC Press, 1999. P. 36-1—36-25.
- 11. Ушакова О. В. ЛАДА экономичный алгоритм и программа построения двумерных криволинейных оптимальных адаптивных сеток в односвязных областях геометрически сложной формы // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1994. Вып. 3. С. 47—56. Ushakova O. V. LADA — ekonomichny algoritm i programma postroeniya dvumernykh krivolineynykh optimalnykh adaptivnykh setok v odnosvyaznykh oblastyakh geometricheski slozhnoy formy // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 1994. Vyp. 3. S. 47—56.
- 12. Ушакова О. В., Артёмова Н. А., Бронина Т. Н., Анучина А. И., Гордейчук В. И. Построение сеток в деформированных объемах вращения // Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики 2015: Межд. конф., посвящ. 90-летию со дня рожд. акад. Г. И. Марчука. Новосибирск, 19—23 октября 2015 г. Новосибирск: Абвей, 2015. С. 782—788. Ushakova O. V., Artyomova N. A., Bronina T. N., Anuchina A. I., Gordeychuk V. I. Postroenie setok v deformirovannykh obemakh vrashcheniya // Aktualnye problemy vychislitelnoy i prikladnoy matematiki 2015: Mezhd. konf., posvyashch. 90-letiyu so dnya rozhd. akad. G. I. Marchuka. Novosibirsk, 19—23 oktyabrya 2015 g. Novosibirsk: Abvey, 2015. S. 782—788.
- 13. Бронина Т. Н., Гасилова И. А., Ушакова О. В. Алгоритмы построения трехмерных структурированных сеток // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2003. Т. 43, № 6. С. 875—883. Bronina T. N., Gasilova I. A., Ushakova O. V. Algoritmy postroeniya tryekhmernykh strukturirovannykh setok // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 2003. Т. 43, № 6. S. 875—883.
- 14. *Бронина Т. Н.* Алгоритмы построения начальных трехмерных структурированных сеток для областей вращения // Труды института математики и механики. 2008. Т. 14, № 1. С. 3—10. *Bronina T. N.* Algoritmy postroeniya nachalnykh trekhmernykh strukturirovannykh setok dlya oblastey vrashcheniya // Trudy instituta matematiki i mekhaniki. 2008. Т. 14, № 1. S. 3—10.
- 15. Ушакова О. В. Условия невырожденности трехмерных ячеек. Формула для объема ячеек // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2001. Т. 41, № 6. С. 881—894. Ushakova O. V. Usloviya nevyrozhdennosti tryekhmernykh yacheek. Formula dlya obyema yacheek // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 2001. Т. 41, № 6. S. 881—894.
- Ushakova O. V. Conditions of nondegeneracy of three-dimensional cells. A formula of a volume of cells // SIAM J. Sci. Comp. 2001. No 23. P. 1273—1289.
- Ушакова О. В. О невырожденности трехмерных сеток // Труды института математики и механики. 2004. Т. 11, № 1. С. 78—100. Ushakova O. V. O nevyrozhdennosti trekhmernykh setok // Trudy instituta matematiki i mekhaniki, 2004. Т. 11, № 1. S. 78—100.
- Ushakova O. V. Nondegeneracy tests for hexahedral cells // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2011. No 200. P. 1649–1658.
- Ушакова О. В. Классификация шестигранных ячеек // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2008. Т. 48, № 8. С. 1—24. Ushakova O. V. Klassifikatsiya shestigrannykh yacheek // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 2008. T. 48, № 8. S. 1—24.
- 20. Иваненко С. А., Чарахчьян А. А. Криволинейные сетки из выпуклых четырехугольников // Там же. 1988. Т. 28, № 4. С. 503—514.

Ivanenko S. A. Charakhchyan A. A. Krivolineynye setki iz vypuklykh chetyryekhugolnikov // Tam zhe. 1988. T. 28, № 4. S. 503–514.

- 21. Ivanenko S. A. Selected Chapters on Grid Generation and Applications. M.: Dorodnicyn Computing Centre of the Russian Academy of Sciences, 2004.
- 22. Прокопов Г. П. Некоторые общие проблемы в конструировании алгоритмов построения сеток: Препринт № 98. М.: ИПМ АН СССР, 1987. *Prokopov G. P.* Nekotorye obshchie problemy v konstruirovanii algoritmov postroeniya setok: Preprint № 98. М.: IPM AN SSSR, 1987.
- Прокопов Г. П. Выбор параметров при вариационном подходе к расчету регулярных сеток: Препринт № 14. М.: ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 2006.
 Prokopov G. P. Vybor parametrov pri variatsionnom podkhode k raschyetu regulyarnykh setok: Preprint № 14. М.: IPM im. M. V. Keldysha RAN, 2006.
- 24. Azarenok B. N. On 2D structured mesh generation by using mappings // Numerical Methods for Partial Differential Equations. 2011. Vol. 27(5). P. 1072–1091.
- Ushakova O. V. Criteria for hexahedral cell classification // Applied Numer. Math. 2018. Vol. 127. P. 18–39.
- Thomson J. F. A Survey of dynamically-adaptive grids in the numerical solution of partial differential equationas // Ibid. 1985. No 1. P. 3–27.
- Бронштейн И. Н., Семендяев К. А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. М.: Наука, 1964.
 Bronshteyn I. N., Semendyaev K. A. Spravochnik po matematike dlya inzhenerov i uchashchikhsya vtuzov. M.: Nauka, 1964.

Статья поступила в редакцию 14.05.20.

ADAPTATION CRITERION IMPLEMENTATIONS IN OPTIMAL GRID CONSTRUCTING ALGORITHM / O. V. Ushakova (IMM UB of RAS, Ekaterinburg).

For the algorithm of constructing optimal grids satisfying two criteria of optimality — closeness to uniform grids and orthogonal grids, the paper offers numerical implementations of the third one that is the criterion of adaptation to the given function. The optimal grid constructing algorithm is used in the numerical simulation of multicomponent media to construct three-dimensional structured grids for complex geometries: solids of revolution, deformed solids of revolution, as well as volumes bounded by surfaces of revolution with parallel axes of revolution.

Key words: adaptive grids, optimal grids, structured grids.