

УДК 519.6

ЯВНАЯ ПОЛНОСТЬЮ КОНСЕРВАТИВНАЯ ВАРИАЦИОННАЯ РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ В ПЕРЕМЕННЫХ ЛАГРАНЖА

А. М. Стенин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Полностью дискретным (по времени и пространству) вариационным методом получена явная консервативная разностная схема с определением всех сеточных величин на одни и те же моменты времени с целочисленными индексами. Для определенности рассматриваются трехмерные течения.

Ключевые слова: полностью дискретный вариационный метод, консервативная схема, схема типа *крест*, трехмерная газовая динамика, объем шестигранной ячейки.

Введение

В работе [1] предложен дискретный по времени и пространству вариационный метод построения разностных моделей газовой динамики. Применение метода демонстрируется на примере получения классической разностной схемы *крест* [2] для решения одномерных задач газовой динамики, разностной схемы Д [3] в двумерном случае и некоторых других схем. Позднее этот метод развивался в работах [4–6] и многих других.

Как отмечается в [1], предложенный полностью дискретный вариационный метод является естественным обобщением вариационного метода построения дифференциально-разностных схем для уравнений газовой динамики, развитого в работах В. М. Головизнина, А. А. Самарского, А. П. Фаворского и др. [7–10] (список далеко не полный).

Имеется существенное отличие вариационного подхода, предложенного в статье [1], от вариационного метода, который используется в работах [7–10]. Оно состоит в том, что в первом случае получаются разностные уравнения, определяющие конечно-разностные уравнения движения в лагранжевых координатах, а во втором — дифференциально-разностные уравнения, в которых определена пространственная аппроксимация, но производные по времени записаны в дифференциальном виде. Для получения разностной схемы в этом случае нужно еще выбрать разностную аппроксимацию производных по времени и зафиксировать из тех или иных соображений момент времени (в пределах данного счетного шага), на который вычисляются разностные производные по пространству. От этого во многом зависят свойства разностной схемы.

В работе [1] получен вариант разностной схемы *крест*, в котором из уравнения движения и уравнения для внутренней энергии следует закон сохранения полной энергии. Однако при этом кинетическая энергия определяется через произведение значений скорости на соседних слоях по времени [11]. Недостатком такого определения кинетической энергии является то, что она может принимать отрицательные значения. Кроме того, есть некоторое противоречие в том, что в разностном функционале действия кинетическая энергия определяется через квадрат скорости.

Полностью консервативные схемы с определением кинетической энергии через квадрат скорости [12], полученные в [1] с применением дискретного вариационного подхода, — это неявные схемы. В данной работе полностью дискретным вариационным методом [1] получена явная разностная схема с определением всех сеточных величин с целочисленными индексами на одни и те же моменты

времени. Эта схема обладает свойством сохранения полной энергии с определением кинетической энергии через квадрат скорости.

Чтобы в формулах для разностных операторов пространственного дифференцирования не ограничиваться записью производных от абстрактного объема ячейки сетки по координатам ее вершин, для определенности будем рассматривать трехмерную область течения. Для дискретизации задачи берется структурированная сетка с шестигранными ячейками.

Дискретизация

Рассматривается система уравнений газовой динамики

$$\frac{d\vec{R}}{dt} = \vec{U}; \quad (1)$$

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \operatorname{div} \vec{U}; \quad (2)$$

$$\frac{d\vec{U}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \operatorname{grad} P; \quad (3)$$

$$\frac{dE}{dt} = -P \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \vec{U}; \quad (4)$$

$$P = P(\rho, E) \quad (5)$$

в трехмерной области O , ограниченной поверхностью G . Приняты следующие обозначения: ρ — плотность; P — газодинамическое давление; E — удельная внутренняя энергия. Независимая переменная t — время; $\vec{R} = (x, y, z)$ — прямоугольные декартовы координаты точек пространства; вектор скорости $\vec{U} = (u, v, w)$ имеет составляющие u, v, w вдоль осей OX, OY, OZ соответственно. На границе области задано давление \tilde{P} или нормальная составляющая вектора скорости U_n .

Основное отличие вариационных методов [1] и [7–10] получения разностных схем для численного решения системы уравнений (1)–(5) обусловлено способом дискретизации и варьирования функционала действия

$$\phi = \int_{t_0}^{t_1} \Lambda(t) dt, \quad (6)$$

рассматриваемого в интервале времени (t_0, t_1) , где Λ — лагранжиан, определенный в пространственной области O :

$$\Lambda = \int_0 \rho (0,5U^2 - E) dV. \quad (7)$$

В подходе [7–10] на выбранной пространственной сетке строится разностный аналог лагранжиана (7), а функционал действия берется в виде (6). Затем вместо непосредственного варьирования функционала действия используются дифференциально-разностные условия Эйлера–Лагранжа стационарности функционала (6). В результате получаются дифференциально-разностные уравнения движения.

В отличие от этого в работе [1] строится сам разностный функционал действия Φ , являющийся пространственно-временной аппроксимацией функционала действия (6). Затем с учетом определенного вида связей между сеточными функциями непосредственно вычисляется первая вариация $\delta\Phi$ этого функционала. Приравнявая $\delta\Phi$ нулю и учитывая произвольность возмущений координат, получают разностные уравнения для скоростей, вполне однозначно определяющие пространственно-временную аппроксимацию уравнений движения (3). Эти уравнения дополняются уравнением для удельной внутренней энергии E , аппроксимирующим уравнение (4).

Для аппроксимации функционала действия (6) предположим, что в области O построена регулярная сетка с шестигранными ячейками. Предполагается, что совокупность внешних граней ячеек

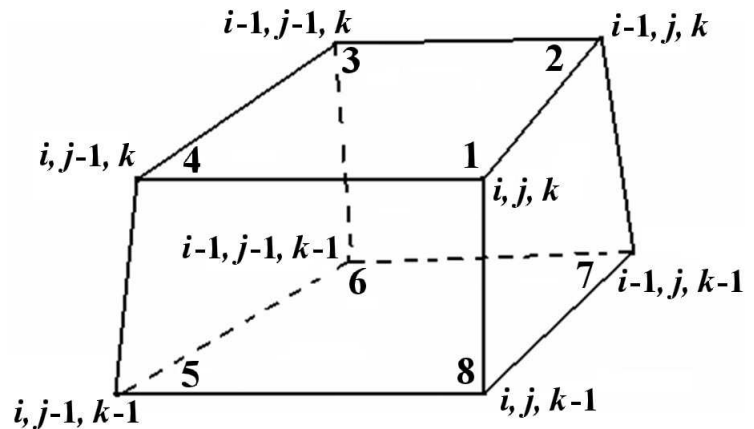
сетки \tilde{G} достаточно хорошо аппроксимируют границу G области O , а объединение ячеек заполняет область O без зазоров и перекрытий и образует счетную область \tilde{O} . На рисунке показана ячейка сетки $\Omega_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}$, $i = 2, \dots, N_i$, $j = 2, \dots, N_j$, $k = 2, \dots, N_k$. Цифрами 1—8 представлена локальная нумерация вершин ячейки, символами i, j, k ($i = 1, 2, \dots, N_i$, $j = 1, 2, \dots, N_j$, $k = 1, 2, \dots, N_k$) — глобальная индексация узлов сетки.

Считаем, что каждая из шести граней ячейки является линейчатой поверхностью, натянутой на соответствующие четыре вершины. Параметрическое уравнение, например, грани $\vec{R}_1 \vec{R}_2 \vec{R}_3 \vec{R}_4$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} \vec{R} &= 0,25 \left(\vec{R}_A + \vec{R}_B \alpha + \vec{R}_C \beta + \vec{R}_D \alpha \beta \right), \quad -1 \leq \alpha \leq 1, \quad -1 \leq \beta \leq 1; \quad (8) \\ \vec{R}_A &= \vec{R}_1 + \vec{R}_2 + \vec{R}_3 + \vec{R}_4; & \vec{R}_B &= \vec{R}_1 - \vec{R}_2 - \vec{R}_3 + \vec{R}_4; \\ \vec{R}_C &= \vec{R}_1 + \vec{R}_2 - \vec{R}_3 - \vec{R}_4; & \vec{R}_D &= \vec{R}_1 - \vec{R}_2 + \vec{R}_3 - \vec{R}_4. \end{aligned}$$

Аналогичные уравнения имеют место для остальных граней. При этом, конечно, все ребра шестигранника получаются прямолинейными.

Векторные величины $\vec{R}_{i,j,k}^n$, $\vec{U}_{i,j,k}^n$ считаются определенными в узлах сетки, а скалярные $\rho_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^n$, $E_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^n$, $P_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^n$ — в ячейках сетки. Верхним индексом n отмечаются значения величин на момент времени $t = t^n$, где $n = 0, 1, 2, \dots$ — номер шага по времени; $\tau^{n+1/2} = t^{n+1} - t^n$ — значение шага по времени. Кроме того, верхним индексом $n + 1/2$ отмечаются значения величин на промежуточные моменты времени $t^{n+1/2} = 0,5 (t^{n+1} + t^n)$.



Ячейка сетки $\Omega_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}$

Аппроксимируя функционал действия (6), помимо величин на момент времени $t = t^n$, будем считать определенными промежуточные значения $\rho_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1/2}$, $E_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1/2}$, а также, из уравнения состояния (5), значение $P_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1/2}$.

Если в граничных узлах счетной области, например в узлах $\vec{R}_{i,j,1}$, заданы нормальные составляющие вектора скорости, то они считаются известными на верхнем слое по времени: $(U_n)_{i,j,1}^{n+1}$. Граничные давления $\tilde{P}_{i-1/2, j-1/2, N_k}^{n+1/2}$ задаются на внешних гранях приграничных ячеек, например на гранях $G_{i-1/2, j-1/2, N_k}$, и считаются определенными на промежуточные моменты времени $t = t^{n+1/2}$.

Значения координат узлов лагранжевой пространственной сетки в промежуточные моменты времени $t = t^{n+1/2}$ свяжем с координатами и скоростями на моменты времени $t = t^n$, $t = t^{n+1}$ соотношениями

$$\vec{R}_{i,j,k}^{n+1/2} = \vec{R}_{i,j,k}^n + 0,5\tau^{n+1/2} \vec{U}_{i,j,k}^n; \quad (9)$$

$$\vec{R}_{i,j,k}^{n+1} = \vec{R}_{i,j,k}^{n+1/2} + 0,5\tau^{n+1/2} \vec{U}_{i,j,k}^{n+1}. \quad (10)$$

Объем ячейки

Из предположения о линейчатости граней однозначно вычисляется объем ячейки сетки. Имеют место следующие формулы для вычисления объема шестигранника с помощью поверхностных

интегралов:

$$V = \sum_{m=1}^6 \int_{G_m} x dy dz; \quad V = \sum_{m=1}^6 \int_{G_m} y dz dx; \quad V = \sum_{m=1}^6 \int_{G_m} z dx dy, \quad (11)$$

где G_m , $m = 1, 2, \dots, 6$, — локально перенумерованные грани ячейки $\Omega_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}$.

Пользуясь параметрическими уравнениями граней ячейки (8), вычислим поверхностные интегралы в формулах (11):

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{YZ}^{(m)} &= \int_{G_m} x dy dz = \int_{-1}^1 d\beta \int_{-1}^1 x^{(m)}(\alpha, \beta) \frac{D(y, z)}{D(\alpha, \beta)} d\alpha = x_C^{(m)} S_{YZ}^{(m)} + \\ &+ \frac{1}{12} \left[\left(x_1^{(m)} - x_3^{(m)} \right) \left(S_{YZ}^{(m)}(\Delta 124) - S_{YZ}^{(m)}(\Delta 342) \right) + \left(x_2^{(m)} - x_4^{(m)} \right) \left(S_{YZ}^{(m)}(\Delta 231) - S_{YZ}^{(m)}(\Delta 413) \right) \right]; \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{ZX}^{(m)} &= \int_{G_m} y dz dx = \int_{-1}^1 d\beta \int_{-1}^1 y^{(m)}(\alpha, \beta) \frac{D(z, x)}{D(\alpha, \beta)} d\alpha = y_C^{(m)} S_{ZX}^{(m)} + \\ &+ \frac{1}{12} \left[\left(y_1^{(m)} - y_3^{(m)} \right) \left(S_{ZX}^{(m)}(\Delta 124) - S_{ZX}^{(m)}(\Delta 342) \right) + \left(y_2^{(m)} - y_4^{(m)} \right) \left(S_{ZX}^{(m)}(\Delta 231) - S_{ZX}^{(m)}(\Delta 413) \right) \right]; \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{XY}^{(m)} &= \int_{G_m} z dx dy = \int_{-1}^1 d\beta \int_{-1}^1 z^{(m)}(\alpha, \beta) \frac{D(x, y)}{D(\alpha, \beta)} d\alpha = z_C^{(m)} S_{XY}^{(m)} + \\ &+ \frac{1}{12} \left[\left(z_1^{(m)} - z_3^{(m)} \right) \left(S_{XY}^{(m)}(\Delta 124) - S_{XY}^{(m)}(\Delta 342) \right) + \left(z_2^{(m)} - z_4^{(m)} \right) \left(S_{XY}^{(m)}(\Delta 231) - S_{XY}^{(m)}(\Delta 413) \right) \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

Формулы (12)–(14) справедливы для любой из шести граней G_m ячейки сетки при условии, что на каждой грани используется своя локальная нумерация вершин $\vec{R}_\nu^{(m)}$, $\nu = 1, 2, 3, 4$, против часовой стрелки для наблюдателя, расположенного на внешней стороне грани. Точка $\vec{R}_C^{(m)}$ в этих формулах — *центр* грани G_m , координаты которого вычисляются усреднением координат вершин грани:

$$\vec{R}_C^{(m)} = 0,25 \left(\vec{R}_1^{(m)} + \vec{R}_2^{(m)} + \vec{R}_3^{(m)} + \vec{R}_4^{(m)} \right).$$

$S_{YZ}^{(m)}$, $S_{ZX}^{(m)}$, $S_{XY}^{(m)}$ обозначают площади проекций грани G_m на координатные плоскости YOZ , ZOX , XOY соответственно. Аналогично, $S_{YZ}^{(m)}(\Delta 124)$, $S_{ZX}^{(m)}(\Delta 124)$, $S_{XY}^{(m)}(\Delta 124)$ — площади проекций на координатные плоскости треугольника $\vec{R}_1^{(m)} \vec{R}_2^{(m)} \vec{R}_4^{(m)}$, построенного на вершине $\vec{R}_1^{(m)}$ грани G_m . Тот же смысл имеют другие обозначения подобного вида в формулах (12)–(14).

Формулы

$$V = \sum_{m=1}^6 \mathcal{J}_{YZ}^{(m)}, \quad V = \sum_{m=1}^6 \mathcal{J}_{ZX}^{(m)}, \quad V = \sum_{m=1}^6 \mathcal{J}_{XY}^{(m)} \quad (15)$$

по-разному выражают один и тот же объем шестигранной ячейки сетки $\Omega_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}$. Очень простое выражение для объема ячейки получается после усреднения правых частей (15). Нетрудно показать, что сумма вторых слагаемых в правых частях (12)–(14) равна нулю. Тогда

$$V = \frac{1}{3} \sum_{m=1}^6 \left(x_C^{(m)} S_{YZ}^{(m)} + y_C^{(m)} S_{ZX}^{(m)} + z_C^{(m)} S_{XY}^{(m)} \right). \quad (16)$$

Отметим, что аналогичная формула приводится в работе [10]. Там она записывается эмпирически как аппроксимация объема некоего "криволинейного шестигранника". Существует множество

других выражений для объема шестигранника более или менее четко описанной формы, эквивалентных (16). Формула (16) точно выражает объем шестигранника с линейчатыми гранями через координаты его вершин и привлекает своей простотой.

Разностный функционал действия и его вариация

Разностный функционал действия Φ построим на основе континуального функционала (6), (7). Заменяя интегралы конечными суммами, запишем

$$\Phi = \sum_{n=0}^{N_t} \tau^{n+1/2} \left\{ \sum_{i,j,k=1}^{N_i, N_j, N_k} \frac{1}{2} M_{i,j,k} \left[\frac{1}{2} \left((u_{i,j,k}^{n+1})^2 + (u_{i,j,k}^n)^2 \right) + \frac{1}{2} \left((v_{i,j,k}^{n+1})^2 + (v_{i,j,k}^n)^2 \right) + \frac{1}{2} \left((w_{i,j,k}^{n+1})^2 + (w_{i,j,k}^n)^2 \right) \right] - \sum_{i,j,k=2}^{N_i, N_j, N_k} M_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} E_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1/2} \right\}. \quad (17)$$

Здесь

$$M_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} = \rho_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} V_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} \quad (18)$$

— масса ячейки сетки, постоянная по времени; $M_{i,j,k}$ — масса в узле сетки, например,

$$M_{i,j,k} = 0,125 \left(M_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} + M_{i+1/2, j-1/2, k-1/2} + M_{i+1/2, j+1/2, k-1/2} + M_{i-1/2, j+1/2, k-1/2} + M_{i-1/2, j-1/2, k+1/2} + M_{i+1/2, j-1/2, k+1/2} + M_{i+1/2, j+1/2, k+1/2} + M_{i-1/2, j+1/2, k+1/2} \right).$$

При вычислении первой вариации $\delta\Phi$ функционала (17) учтем, что $\delta M_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} = 0$, $\delta M_{i,j,k} = 0$. Как обычно, предполагается, что малые возмущения удельной внутренней энергии и удельного объема $\eta = 1/\rho$ связаны соотношением $\delta E = -P\delta\eta$. То есть с учетом (18)

$$M_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} \delta E_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1/2} = -P_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1/2} \delta V_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1/2}.$$

Кроме того, из формул (9), (10) выразим возмущения скоростей через возмущения координат в виде

$$\begin{aligned} \delta u_{i,j,k}^{n+1} &= 2 \frac{\delta x_{i,j,k}^{n+1} - \delta x_{i,j,k}^{n+1/2}}{\tau^{n+1/2}}; & \delta v_{i,j,k}^{n+1} &= 2 \frac{\delta y_{i,j,k}^{n+1} - \delta y_{i,j,k}^{n+1/2}}{\tau^{n+1/2}}; & \delta w_{i,j,k}^{n+1} &= 2 \frac{\delta z_{i,j,k}^{n+1} - \delta z_{i,j,k}^{n+1/2}}{\tau^{n+1/2}}; \\ \delta u_{i,j,k}^n &= 2 \frac{\delta x_{i,j,k}^{n+1/2} - \delta x_{i,j,k}^n}{\tau^{n+1/2}}; & \delta v_{i,j,k}^n &= 2 \frac{\delta y_{i,j,k}^{n+1/2} - \delta y_{i,j,k}^n}{\tau^{n+1/2}}; & \delta w_{i,j,k}^n &= 2 \frac{\delta z_{i,j,k}^{n+1/2} - \delta z_{i,j,k}^n}{\tau^{n+1/2}}. \end{aligned} \quad (19)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \delta\Phi &= \sum_{n=0}^{N_t} \sum_{i,j,k=1}^{N_i, N_j, N_k} M_{i,j,k} \left(u_{i,j,k}^{n+1} \delta x_{i,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^n \delta x_{i,j,k}^n + v_{i,j,k}^{n+1} \delta y_{i,j,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^n \delta y_{i,j,k}^n + w_{i,j,k}^{n+1} \delta z_{i,j,k}^{n+1} - w_{i,j,k}^n \delta z_{i,j,k}^n \right) - \\ &- \sum_{n=0}^{N_t} \sum_{i,j,k=1}^{N_i, N_j, N_k} M_{i,j,k} \left[\left(u_{i,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^n \right) \delta x_{i,j,k}^{n+1/2} + \left(v_{i,j,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^n \right) \delta y_{i,j,k}^{n+1/2} + \left(w_{i,j,k}^{n+1} - w_{i,j,k}^n \right) \delta z_{i,j,k}^{n+1/2} \right] + \\ &+ \sum_{n=0}^{N_t} \tau^{n+1/2} \sum_{i,j,k=2}^{N_i, N_j, N_k} P_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1/2} \delta V_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1/2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Благодаря наличию связей (19) первая сумма в правой части (20) равна нулю, поскольку ее слагаемые последовательно сокращаются на каждом двух соседних шагах по времени, и выражение для $\delta\Phi$ существенно упрощается.

В случае, когда на границе \tilde{G} области \tilde{O} или на ее части, например на гранях $G_{i-1/2, k-1/2, N_k}$, заданы граничные давления $\tilde{P}_{i-1/2, k-1/2, N_k}^{n+1/2}$, к первой вариации $\delta\Phi$ функционала действия нужно добавить работу сил граничного давления на виртуальных перемещениях (подробнее об этом см. [4]). То есть в этом случае

$$\begin{aligned} \overline{\delta\Phi} = & - \sum_{n=0}^{N_t} \sum_{i, j, k=1}^{N_i, N_j, N_k} M_{i, j, k} \left[\left(u_{i, j, k}^{n+1} - u_{i, j, k}^n \right) \delta x_{i, j, k}^{n+1/2} + \left(v_{i, j, k}^{n+1} - v_{i, j, k}^n \right) \delta y_{i, j, k}^{n+1/2} + \left(w_{i, j, k}^{n+1} - w_{i, j, k}^n \right) \delta z_{i, j, k}^{n+1/2} \right] + \\ & + \sum_{n=0}^{N_t} \tau^{n+1/2} \sum_{i, j, k=2}^{N_i, N_j, N_k} P_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1/2} \delta V_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1/2} + \\ & + \sum_{n=0}^{N_t} \tau^{n+1/2} \sum_{i, j=2}^{N_i, N_j} \tilde{P}_{i-1/2, j-1/2, N_k}^{n+1/2} \left(\delta_X (\mathfrak{I}_{YZ})_{i-1/2, j-1/2, N_k}^{n+1/2} + \right. \\ & \left. + \delta_Y (\mathfrak{I}_{ZX})_{i-1/2, j-1/2, N_k}^{n+1/2} + \delta_Z (\mathfrak{I}_{XY})_{i-1/2, j-1/2, N_k}^{n+1/2} \right), \end{aligned} \quad (21)$$

где $\delta_X (\mathfrak{I}_{YZ})$, $\delta_Y (\mathfrak{I}_{ZX})$, $\delta_Z (\mathfrak{I}_{XY})$ — вариации поверхностных интегралов \mathfrak{I}_{YZ} , \mathfrak{I}_{ZX} , \mathfrak{I}_{XY} (12)–(14) при виртуальных перемещениях вдоль осей OX , OY , OZ соответственно.

Предположим, что на всех остальных граничных гранях счетной области заданы нулевые давления. Выразив вариации объемов и поверхностных интегралов через производные от координат вершин и перейдя во втором и третьем слагаемых правой части (21) к суммированию по узлам сетки, получим

$$\begin{aligned} \overline{\delta\Phi} = & - \sum_{n=0}^{N_t} \sum_{i, j, k=1}^{N_i, N_j, N_k} M_{i, j, k} \left[\left(u_{i, j, k}^{n+1} - u_{i, j, k}^n \right) \delta x_{i, j, k}^{n+1/2} + \left(v_{i, j, k}^{n+1} - v_{i, j, k}^n \right) \delta y_{i, j, k}^{n+1/2} + \left(w_{i, j, k}^{n+1} - w_{i, j, k}^n \right) \delta z_{i, j, k}^{n+1/2} \right] + \\ & + \sum_{n=0}^{N_t} \tau^{n+1/2} \sum_{i, j, k=1}^{N_i, N_j, N_k} \left(F x_{i, j, k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) \delta x_{i, j, k}^{n+1/2} + F y_{i, j, k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) \delta y_{i, j, k}^{n+1/2} + \right. \\ & \left. + F z_{i, j, k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) \delta z_{i, j, k}^{n+1/2} \right) + \sum_{n=0}^{N_t} \tau^{n+1/2} \sum_{i, j=1}^{N_i, N_j} \left(F x_{i, j, N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right) \delta x_{i, j, N_k}^{n+1/2} + \right. \\ & \left. + F y_{i, j, N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right) \delta y_{i, j, N_k}^{n+1/2} + F z_{i, j, N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right) \delta z_{i, j, N_k}^{n+1/2} \right). \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь приняты следующие обозначения:

$$F x_{i, j, k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) = - \sum_{\nu \in N(i, j, k)} P_{\nu}^{n+1/2} \frac{\partial V_{\nu}^{n+1/2}}{\partial x_{i, j, k}^{n+1/2}}; \quad (23)$$

$$F y_{i, j, k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) = - \sum_{\nu \in N(i, j, k)} P_{\nu}^{n+1/2} \frac{\partial V_{\nu}^{n+1/2}}{\partial y_{i, j, k}^{n+1/2}}; \quad (24)$$

$$F z_{i, j, k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) = - \sum_{\nu \in N(i, j, k)} P_{\nu}^{n+1/2} \frac{\partial V_{\nu}^{n+1/2}}{\partial z_{i, j, k}^{n+1/2}}. \quad (25)$$

Суммирование ведется по восьми ячейкам $\Omega_{i\pm 1/2, j\pm 1/2, k\pm 1/2}$, для которых узел сетки $\vec{R}_{i, j, k}$ является общей вершиной. Совокупность тройных индексов этих ячеек обозначена через $N(i, j, k) = \{i \pm 1/2, j \pm 1/2, k \pm 1/2\}$.

Для граничных граней, на которых заданы давления,

$$Fx_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right) = \sum_{\nu \in N(i,j,N_k)} \tilde{P}_\nu^{n+1/2} \frac{\partial (\mathcal{J}_{YZ})_\nu^{n+1/2}}{\partial x_{i,j,N_k}^{n+1/2}}; \quad (26)$$

$$Fy_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right) = \sum_{\nu \in N(i,j,N_k)} \tilde{P}_\nu^{n+1/2} \frac{\partial (\mathcal{J}_{ZX})_\nu^{n+1/2}}{\partial x_{i,j,N_k}^{n+1/2}}; \quad (27)$$

$$Fz_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right) = \sum_{\nu \in N(i,j,N_k)} \tilde{P}_\nu^{n+1/2} \frac{\partial (\mathcal{J}_{XY})_\nu^{n+1/2}}{\partial x_{i,j,N_k}^{n+1/2}}. \quad (28)$$

Здесь суммирование ведется по четырем граничным граням $G_{i\pm 1/2, k\pm 1/2, N_k}$, для которых узел \vec{R}_{i,j,N_k} является общей вершиной. Совокупность индексов этих граней обозначена через $N(i, j, N_k) = \{i \pm 1/2, j \pm 1/2, N_k\}$.

Величины, относящиеся к ячейкам сетки и к граничным граням с индексами $i < 2, i > N_i; j < 2, j > N_j; k < 2, k > N_k$ в формулах (23)–(28) полагаются равными нулю.

Для выполнения условия $\delta \bar{\Phi} = 0$ на произвольных возмущениях координат в правой части (22) нужно приравнять нулю коэффициенты при $\delta x_{i,j,k}^{n+1/2}, \delta y_{i,j,k}^{n+1/2}, \delta z_{i,j,k}^{n+1/2}$. В результате в узлах сетки получим разностные уравнения движения вида

$$\vec{U}_{i,j,k}^{n+1} - \vec{U}_{i,j,k}^n = -\tau^{n+1/2} \text{GRAD}_{i,j,k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right). \quad (29)$$

Оператор $\text{GRAD}_{i,j,k}^{n+1/2} = \left(\text{GRAD } x_{i,j,k}^{n+1/2}, \text{GRAD } y_{i,j,k}^{n+1/2}, \text{GRAD } z_{i,j,k}^{n+1/2} \right)$, являющийся разностным аналогом дифференциального оператора $(1/\rho) \text{grad}$, во внутренних узлах сетки определяется равенством

$$\text{GRAD}_{i,j,k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) = \frac{1}{M_{i,j,k}} \vec{F}_{i,j,k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right). \quad (30)$$

Компоненты вектора

$$\vec{F}_{i,j,k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) = \left(Fx_{i,j,k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right), Fy_{i,j,k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right), Fz_{i,j,k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) \right)$$

вычисляются по формулам (23)–(25). В граничных узлах сетки с индексом $k = N_k$, где заданы давления, добавляются силовые вклады от граничных давлений

$$\text{GRAD}_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) = \frac{1}{M_{i,j,N_k}} \left(\vec{F}_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) + \vec{F}_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right) \right). \quad (31)$$

Здесь вектор

$$\vec{F}_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right) = \left(Fx_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right), Fy_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right), Fz_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right) \right)$$

определяется формулами (26)–(28).

Если на границе счетной области, например в узлах сетки $\vec{R}_{i,j,1}$, задана нормальная составляющая вектора скорости $(U_n)_{i,j,1}^{n+1}$, то в формуле (22) независимыми являются возмущения координат, параллельные касательной плоскости. Нормальные возмущения координат полагаются равными нулю: $\delta (R_n)_{i,j,1}^{n+1/2} = 0$ [4]. Это приводит к следующему известному алгоритму нахождения скорости $\vec{U}_{i,j,1}^{n+1}$ в граничных узлах сетки: проекция на касательную плоскость вектора скорости, вычисленного по формуле (29), складывается с заданной нормальной составляющей вектора скорости, и в итоге получается искомое векторное значение скорости.

Разностный оператор дивергенции

Разностный оператор DIV, аппроксимирующий дифференциальный оператор $(1/\rho) \operatorname{div}$, строится как оператор, формально сопряженный оператору $(-\operatorname{GRAD})$ (30) в линейных пространствах сеточных функций.

Пусть $H_{i,j,k}$ — пространство сеточных функций с векторными значениями (типа скорости), определенными в узлах сетки, которое состоит из векторов вида $\bar{U} = \{\bar{U}_{i,j,k}\} = \{(u_{i,j,k}, v_{i,j,k}, w_{i,j,k})\}$, $i = 1, 2, \dots, N_i, j = 1, 2, \dots, N_j, k = 1, 2, \dots, N_k$, со скалярным произведением

$$\langle \bar{U}^{(1)}, \bar{U}^{(2)} \rangle_R = \sum_{i,j,k=1}^{N_i, N_j, N_k} M_{i,j,k} \left(u_{i,j,k}^{(1)} u_{i,j,k}^{(2)} + v_{i,j,k}^{(1)} v_{i,j,k}^{(2)} + w_{i,j,k}^{(1)} w_{i,j,k}^{(2)} \right), \quad \bar{U}^{(1)}, \bar{U}^{(2)} \in H_{i,j,k}. \quad (32)$$

Кроме того, $H_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}$ — пространство сеточных функций со скалярными значениями, определенными в ячейках сетки, состоящее из векторов $\bar{P} = \{P_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}\}$, $i = 2, \dots, N_i, j = 2, \dots, N_j, k = 2, \dots, N_k$, со скалярным произведением

$$\langle \bar{P}^{(1)}, \bar{P}^{(2)} \rangle_\Omega = \sum_{i,j,k=2}^{N_i, N_j, N_k} M_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} P_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{(1)} P_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{(2)}, \quad \bar{P}^{(1)}, \bar{P}^{(2)} \in H_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}. \quad (33)$$

Разностный оператор DIV: $H_{i,j,k} \rightarrow H_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}$ строится как линейный оператор, сопряженный линейному разностному оператору $(-\operatorname{GRAD})$: $H_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} \rightarrow H_{i,j,k}$ (30) в смысле скалярных произведений (32), (33). То есть это такой оператор, что $\forall \bar{P} \in H_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}$ и $\forall \bar{U} \in H_{i,j,k}$ выполняется равенство $\langle \bar{U}, -\overline{\operatorname{GRAD}(P)} \rangle_R = \langle \bar{P}, \overline{\operatorname{DIV}(U)} \rangle_\Omega$.

Учитывая определение (30), записываем скалярное произведение

$$\langle \bar{U}, -\overline{\operatorname{GRAD}(P)} \rangle_R = \sum_{i,j,k=1}^{N_i, N_j, N_k} \left[u_{i,j,k} \left(-Fx_{i,j,k}(P) \right) + v_{i,j,k} \left(-Fy_{i,j,k}(P) \right) + w_{i,j,k} \left(-Fz_{i,j,k}(P) \right) \right].$$

Теперь, учитывая формулы (23)–(25) и переходя к суммированию по ячейкам, получаем

$$\begin{aligned} \langle \bar{U}, -\overline{\operatorname{GRAD}(P)} \rangle_R &= \sum_{i,j,k=2}^{N_i, N_j, N_k} M_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} P_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} \operatorname{DIV}_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} (\vec{U}) = \\ &= \langle \bar{P}, \overline{\operatorname{DIV}(\vec{U})} \rangle_\Omega. \end{aligned}$$

Вектор $\overline{\operatorname{DIV}(\vec{U})} \in H_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}$ состоит из элементов

$$\operatorname{DIV}_\mathbb{Я}(\vec{U}) = \frac{1}{M_\mathbb{Я}} \left(\sum_{\nu=1}^8 \frac{\partial V_\mathbb{Я}}{\partial x_\nu} u_\nu + \sum_{\nu=1}^8 \frac{\partial V_\mathbb{Я}}{\partial y_\nu} v_\nu + \sum_{\nu=1}^8 \frac{\partial V_\mathbb{Я}}{\partial z_\nu} w_\nu \right). \quad (34)$$

Здесь и далее для краткости записи нижний индекс «Я» обозначает ячейку с индексами $i - 1/2, j - 1/2, k - 1/2$; $\nu = 1, \dots, 8$ — локальная нумерация вершин ячейки $\Omega_\mathbb{Я}$ (см. рисунок).

Формулой (34) и определяется разностный оператор DIV со значениями в ячейках сетки.

Формулы для разностных операторов

Разностный оператор градиента GRAD (30) в уравнении движения (29) определяется в общем виде через производные от объемов ячейки (16) по координатам их вершин (23)–(25). На границе области, где задано давление, добавляются силовые вклады от граничных давлений (31), которые выражаются через производные (26)–(28) от поверхностных интегралов (12)–(14), взятых по граням ячеек, расположенных на границе области. Разностный оператор дивергенции DIV (34) также записан через производные от объема ячейки. Для того чтобы получить формулы, пригодные для программной реализации разностной схемы, нужно вычислить указанные производные и подставить их в формулы (30), (31) для GRAD и в формулу (34) для DIV.

После несложных вычислений получаются следующие формулы для производных от объема $V_{\text{Я}}$ (16) шестигранной ячейки сетки $\Omega_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}$ по координатам ее вершины с локальным номером $\nu = 1$ (см. рисунок):

$$\frac{\partial V_{\text{Я}}}{\partial x_1} = \frac{1}{6} (S_{YZ1234} + S_{YZ1872} + S_{YZ1458} + S_{YZ248}); \quad (35)$$

$$\frac{\partial V_{\text{Я}}}{\partial y_1} = \frac{1}{6} (S_{ZX1234} + S_{ZX1872} + S_{ZX1458} + S_{ZX248}); \quad (36)$$

$$\frac{\partial V_{\text{Я}}}{\partial z_1} = \frac{1}{6} (S_{XY1234} + S_{XY1872} + S_{XY1458} + S_{XY248}). \quad (37)$$

Последовательности цифр в нижних индексах при обозначении площадей проекций на координатные плоскости в правых частях этих формул обозначают ориентированные пространственные фигуры с пронумерованными, как указано на рисунке, вершинами. При этом последовательность из четырех цифр обозначает четырехугольник, а последовательность из трех цифр — треугольник. Например, S_{YZ1234} обозначает площадь проекции на плоскость YOZ четырехугольника $\vec{R}_1\vec{R}_2\vec{R}_3\vec{R}_4$, а S_{YZ248} — площадь проекции треугольника $\vec{R}_2\vec{R}_4\vec{R}_8$.

Заметим, что в правых частях формул (35)–(37) фигурируют все три четырехугольные грани ячейки сетки $V_{\text{Я}}$ (см. рисунок), для которых данный узел сетки \vec{R}_1 является общей вершиной, и пространственный треугольник $\vec{R}_2\vec{R}_4\vec{R}_8$, образованный диагоналями этих граней, которые не содержат точки \vec{R}_1 . Вершины треугольника нумеруются против часовой стрелки для наблюдателя, расположенного в точке \vec{R}_1 .

Производные от объема ячейки сетки по координатам остальных семи ее вершин вычисляются аналогично.

Производные от поверхностных интегралов (12)–(14) по координатам, например, вершины с локальным номером $\nu = 1$ грани G_m , расположенной на границе области, можно записать в виде

$$\frac{\partial \mathcal{J}_{YZ}^{(m)}}{\partial x_1^{(m)}} = \frac{1}{6} \left(S_{YZ}^{(m)} + S_{YZ}^{(m)} (\Delta 124) \right); \quad (38)$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}_{ZX}^{(m)}}{\partial y_1^{(m)}} = \frac{1}{6} \left(S_{ZX}^{(m)} + S_{ZX}^{(m)} (\Delta 124) \right); \quad (39)$$

$$\frac{\partial \mathcal{J}_{XY}^{(m)}}{\partial z_1^{(m)}} = \frac{1}{6} \left(S_{XY}^{(m)} + S_{XY}^{(m)} (\Delta 124) \right). \quad (40)$$

Здесь приняты те же обозначения, что и в формулах (12)–(14).

Производные от поверхностных интегралов $\mathcal{J}_{YZ}^{(m)}$, $\mathcal{J}_{ZX}^{(m)}$, $\mathcal{J}_{XY}^{(m)}$ по координатам остальных трех вершин грани G_m имеют аналогичный вид.

Некоторые свойства разностной схемы

При записи разностного функционала действия (17) и вычислении его первой вариации предполагались известными промежуточные значения $\rho_{\text{Я}}^{n+1/2}$, $E_{\text{Я}}^{n+1/2}$, $P_{\text{Я}}^{n+1/2}$ в ячейках сетки. Реально они вычисляются следующим образом.

Сначала по формуле (9) вычисляются промежуточные координаты $\vec{R}_{i,j,k}^{n+1/2}$ узлов сетки. С этого и начинаются вычисления на шаге по времени. Затем из условия сохранения массы (18) вычисляются значения $\rho_{\text{Я}}^{n+1/2}$. После этого совместно с уравнением состояния (5) итерациями по методу Эйлера решается уравнение энергии

$$P_{\text{Я}}^{n+1/2} = P\left(\rho_{\text{Я}}^{n+1/2}, E_{\text{Я}}^{n+1/2}\right), \quad E_{\text{Я}}^{n+1/2} = E_{\text{Я}}^n - 0,5\tau^{n+1/2} P_{\text{Я}}^{n+1/2} \text{DIV}_{\text{Я}}^{n+1/2}\left(\vec{U}^n\right). \quad (41)$$

Для достижения приемлемой точности здесь достаточно двух-трех итераций. Для консервативности по полной энергии необходимо завершать итерации вычислением $E_{\text{Я}}^{n+1/2}$.

После вычисления промежуточных давлений из уравнений (29) вычисляются новые значения скорости $\vec{U}_{i,j,k}^{n+1}$. Далее по формуле (10) вычисляются новые координаты $\vec{R}_{i,j,k}^{n+1}$ узлов сетки, а затем из условия сохранения массы (18) — новые плотности $\rho_{\text{Я}}^{n+1}$ в ячейках сетки. После этого вычисляются новые значения удельной внутренней энергии

$$E_{\text{Я}}^{n+1} = E_{\text{Я}}^{n+1/2} - 0,5\tau^{n+1/2} P_{\text{Я}}^{n+1/2} \text{DIV}_{\text{Я}}^{n+1/2}\left(\vec{U}^{n+1}\right). \quad (42)$$

На этом вычисления на шаге по времени завершаются.

Для сквозного счета ударных волн в схему вводится искусственная вязкость, например, в виде обобщения скалярной вязкости Неймана—Рихтмайера [2]. Вопросы, связанные с искусственной вязкостью в данной работе не рассматриваются.

Заметим, что расщепление уравнения энергии, аналогичное (41), (42), используется в разностной схеме типа *крест* с разнесенными по времени сеточными функциями, предложенной в работе [13].

Эквивалентность схеме типа *крест*. Покажем, что полученная разностная схема, представленная уравнениями (9), (18), (41), (29), (10), (18), (42), эквивалентна разностной схеме типа *крест*.

В уравнении (10) уменьшим на единицу верхний индекс, из полученного уравнения и уравнения (9) исключим значения $\vec{R}_{i,j,k}^n$ — получим уравнения для координат узлов сетки

$$\vec{R}_{i,j,k}^{n+1/2} = \vec{R}_{i,j,k}^{n-1/2} + \tau^n \vec{U}_{i,j,k}^n, \quad \tau^n = 0,5\left(\tau^{n+1/2} + \tau^{n-1/2}\right). \quad (43)$$

Далее из условия сохранения массы (18) можно вычислить плотности $\rho_{\text{Я}}^{n+1/2}$ в ячейках сетки. Затем, уменьшив верхний индекс на единицу в уравнении энергии (42), исключим из полученного уравнения и из уравнений (41) значения $E_{\text{Я}}^n$ и получим уравнения

$$P_{\text{Я}}^{n+1/2} = P\left(\rho_{\text{Я}}^{n+1/2}, E_{\text{Я}}^{n+1/2}\right), \quad E_{\text{Я}}^{n+1/2} = E_{\text{Я}}^{n-1/2} - \tau^n \left(\sigma^{n+1/2} P_{\text{Я}}^{n+1/2} \text{DIV}_{\text{Я}}^{n+1/2}\left(\vec{U}^n\right) + \sigma^{n-1/2} P_{\text{Я}}^{n-1/2} \text{DIV}_{\text{Я}}^{n-1/2}\left(\vec{U}^n\right) \right). \quad (44)$$

Здесь $\sigma^{n+1/2} = \tau^{n+1/2}/(\tau^{n+1/2} + \tau^{n-1/2})$; $\sigma^{n-1/2} = \tau^{n-1/2}/(\tau^{n+1/2} + \tau^{n-1/2})$. Теперь, если к уравнениям (43), (18), (44) присоединить разностные уравнения движения (29), то получится разностная схема типа *крест* с определением всех сеточных функций, кроме скорости, на промежуточные моменты времени $t = t^{n+1/2}$. Скорость определяется на дискретные моменты с целочисленными индексами $t = t^n$.

Положим, что для $n = 0$ значения газодинамических функций $f^{n-1/2}$ равны начальным значениям, т. е. $f^{-1/2} = f^0$, а также $\tau^{-1/2} = 0$. Тогда, очевидно, значения скоростей на моменты времени

$t = t^{n+1}$, а также значения всех остальных величин на промежуточные моменты $t = t^{n+1/2}$, которые будут получены при решении задачи по схеме типа *крест* (43), (18), (44), (29), с компьютерной точностью совпадут со значениями соответствующих величин, полученными при решении той же задачи по вариационной схеме (9), (18), (41), (29), (10), (18), (42). То есть эти схемы эквивалентны.

Консервативность. Сохранение массы в ячейках и узлах сетки постулируется еще на стадии построения разностного функционала действия и реализуется в разностной схеме при вычислении значений плотности как на промежуточные моменты времени $t = t^{n+1/2}$, так и на моменты времени с целочисленными индексами $t = t^{n+1}$.

Выполнение разностного аналога закона сохранения импульса следует из равенств

$$\sum_{\nu=1}^8 \frac{\partial V_{\text{Я}}}{\partial x_{\nu}} = \sum_{\nu=1}^8 \frac{\partial V_{\text{Я}}}{\partial y_{\nu}} = \sum_{\nu=1}^8 \frac{\partial V_{\text{Я}}}{\partial z_{\nu}} = 0,$$

которые нетрудно проверить, используя формулы для производных вида (35)–(37).

Разностный аналог закона сохранения полной энергии в полученной схеме выполняется в двух вариантах.

Утверждение 1. Для значений удельной внутренней энергии $E_{\text{Я}}^n$, определенных на моменты времени с целочисленными индексами, выполняется закон сохранения полной энергии с определением кинетической энергии в узлах сетки через квадрат скорости:

$$K_{i,j,k}^n = 0,5 M_{i,j,k} \left(\vec{U}_{i,j,k}^n \right)^2.$$

Утверждение 2. Для значений удельной внутренней энергии $E_{\text{Я}}^{n+1/2}$, определенных на моменты времени с полуцелыми индексами, как в схемах типа *крест* [11], выполняется закон сохранения полной энергии с определением кинетической энергии в узлах сетки через произведение значений скорости на двух соседних слоях по времени:

$$K_{i,j,k}^{n+1/2} = 0,5 M_{i,j,k} \left(\vec{U}_{i,j,k}^{n+1} \vec{U}_{i,j,k}^n \right).$$

Для доказательства первого утверждения сложим уравнения энергии (41) и (42). Получим изменение внутренней энергии в ячейке сетки за шаг по времени:

$$E_{\text{Я}}^{n+1} - E_{\text{Я}}^n = -\tau^{n+1/2} P_{\text{Я}}^{n+1/2} \text{DIV}_{\text{Я}}^{n+1/2} \left(\vec{U}^{n+1/2} \right), \quad \vec{U}^{n+1/2} = 0,5 \left(\vec{U}^{n+1} + \vec{U}^n \right). \quad (45)$$

Затем, умножив скалярно уравнение движения (29) на $M_{i,j,k} \left(\vec{U}_{ik}^{n+1/2} \right)$, получим уравнение изменения кинетической энергии узла сетки:

$$0,5 M_{i,j,k} \left(\left(\vec{U}_{i,j,k}^{n+1} \right)^2 - \left(\vec{U}_{i,j,k}^n \right)^2 \right) = -\tau^{n+1/2} M_{i,j,k} \vec{U}_{i,j,k}^{n+1/2} \text{GRAD}_{i,j,k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right). \quad (46)$$

Изменение полной энергии в счетной области складывается из суммарного изменения интегральной внутренней энергии во всех ячейках сетки и суммарного изменения кинетической энергии во всех узлах сетки. На шаге $\tau^{n+1/2}$ по дискретным моментам времени с целочисленными индексами с учетом (45), (46) получим

$$\begin{aligned} & \sum_{\text{Я}} M_{\text{Я}} \left(E_{\text{Я}}^{n+1} - E_{\text{Я}}^n \right) + \sum_{i,j,k=1}^{N_i, N_j, N_k} \frac{1}{2} M_{i,j,k} \left(\left(\vec{U}_{i,j,k}^{n+1} \right)^2 - \left(\vec{U}_{i,j,k}^n \right)^2 \right) = \\ & = -\tau^{n+1/2} \left(\sum_{\text{Я}} M_{\text{Я}} P_{\text{Я}}^{n+1/2} \text{DIV}_{\text{Я}}^{n+1/2} \left(\vec{U}^{n+1/2} \right) + \sum_{i,j,k=1}^{N_i, N_j, N_k} \vec{U}_{i,j,k}^{n+1/2} \vec{F}_{i,j,k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) \right) + \\ & + \tau^{n+1/2} \sum_{i,j=1}^{N_i, N_j} \vec{U}_{i,j,N_k}^{n+1/2} \vec{F}_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right). \end{aligned} \quad (47)$$

Здесь учтено определение разностного оператора GRAD во внутренних узлах сетки (30) и в узлах границы \vec{R}_{i,j,N_k} , на которой задано давление (31).

Для значений энергии, определенных на промежуточные моменты времени, аналогично, с учетом уравнений (44), (29), получим изменение полной энергии счетной области на шаге τ^n по дискретным моментам времени с полужелтыми индексами:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\mathcal{Y}} M_{\mathcal{Y}} \left(E_{\mathcal{Y}}^{n+1/2} - E_{\mathcal{Y}}^{n-1/2} \right) + \sum_{i,j,k=1}^{N_i, N_j, N_k} \frac{1}{2} M_{i,j,k} \left(\vec{U}_{i,j,k}^{n+1} \vec{U}_{i,j,k}^n - \vec{U}_{i,j,k}^n \vec{U}_{i,j,k}^{n-1} \right) = \\
 & = -\tau^n \left[\sigma^{n+1/2} \left(\sum_{\mathcal{Y}} M_{\mathcal{Y}} P_{\mathcal{Y}}^{n+1/2} \text{DIV}_{\mathcal{Y}}^{n+1/2} \left(\vec{U}^n \right) + \sum_{i,j,k=1}^{N_i, N_j, N_k} \vec{U}_{i,j,k}^n \vec{F}_{i,j,k}^{n+1/2} \left(P^{n+1/2} \right) \right) + \right. \\
 & \left. + \sigma^{n-1/2} \left(\sum_{\mathcal{Y}} M_{\mathcal{Y}} P_{\mathcal{Y}}^{n-1/2} \text{DIV}_{\mathcal{Y}}^{n-1/2} \left(\vec{U}^n \right) + \sum_{i,j,k=1}^{N_i, N_j, N_k} \vec{U}_{i,j,k}^n \vec{F}_{i,j,k}^{n-1/2} \left(P^{n+1/2} \right) \right) \right] + \\
 & + \tau^n \sum_{i,j=1}^{N_i, N_j} \vec{U}_{i,j,N_k}^n \left(\sigma^{n+1/2} \vec{F}_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right) + \sigma^{n-1/2} \vec{F}_{i,j,N_k}^{n-1/2} \left(\tilde{P}^{n-1/2} \right) \right). \tag{48}
 \end{aligned}$$

По построению оператора DIV (34) первые слагаемые в правых частях равенств (47), (48) обращаются в нуль. Последние слагаемые представляют собой работу, произведенную граничными давлениями на шаге по времени. Таким образом, баланс полной энергии на шаге по моментам времени с целочисленными индексами можно представить в виде

$$(\mathcal{E}^{n+1} + \mathcal{K}^{n+1}) - (\mathcal{E}^n + \mathcal{K}^n) = A_{N_k}^{n+1/2},$$

а на шаге по промежуточным моментам времени — в виде

$$\left(\mathcal{E}^{n+1/2} + \mathcal{K}^{n+1/2} \right) - \left(\mathcal{E}^{n-1/2} + \mathcal{K}^{n-1/2} \right) = A_{N_k}^n,$$

где \mathcal{E} — интегральная внутренняя энергия, а \mathcal{K} — интегральная кинетическая энергия счетной области.

Используя определение (26)–(28) векторов $\vec{F}_{i,j,N_k}^{n+1/2} \left(\tilde{P}^{n+1/2} \right)$ и переходя к суммированию по граням, выражения для работы на границе, соответствующей индексу $k = N_k$, можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 A_{N_k}^{n+1/2} &= \tau^{n+1/2} \sum_{\Gamma} \tilde{P}_{\Gamma}^{n+1/2} \sum_{\nu=1}^4 \left(\frac{\partial (\mathcal{I}_{YZ})_{\Gamma}^{n+1/2}}{\partial x_{\nu}^{n+1/2}} u_{\nu}^{n+1/2} + \frac{\partial (\mathcal{I}_{ZX})_{\Gamma}^{n+1/2}}{\partial y_{\nu}^{n+1/2}} v_{\nu}^{n+1/2} + \frac{\partial (\mathcal{I}_{XY})_{\Gamma}^{n+1/2}}{\partial z_{\nu}^{n+1/2}} w_{\nu}^{n+1/2} \right), \\
 A_{N_k}^n &= \tau^n \left[\sigma^{n+1/2} \sum_{\Gamma} \tilde{P}_{\Gamma}^{n+1/2} \sum_{\nu=1}^4 \left(\frac{\partial (\mathcal{I}_{YZ})_{\Gamma}^{n+1/2}}{\partial x_{\nu}^{n+1/2}} u_{\nu}^n + \frac{\partial (\mathcal{I}_{ZX})_{\Gamma}^{n+1/2}}{\partial y_{\nu}^{n+1/2}} v_{\nu}^n + \frac{\partial (\mathcal{I}_{XY})_{\Gamma}^{n+1/2}}{\partial z_{\nu}^{n+1/2}} w_{\nu}^n \right) + \right. \\
 & \left. + \sigma^{n-1/2} \sum_{\Gamma} \tilde{P}_{\Gamma}^{n-1/2} \sum_{\nu=1}^4 \left(\frac{\partial (\mathcal{I}_{YZ})_{\Gamma}^{n-1/2}}{\partial x_{\nu}^{n-1/2}} u_{\nu}^n + \frac{\partial (\mathcal{I}_{ZX})_{\Gamma}^{n-1/2}}{\partial y_{\nu}^{n-1/2}} v_{\nu}^n + \frac{\partial (\mathcal{I}_{XY})_{\Gamma}^{n-1/2}}{\partial z_{\nu}^{n-1/2}} w_{\nu}^n \right) \right].
 \end{aligned}$$

Здесь нижний индекс « Γ » обозначает грань $G_{i-1/2,j-1/2,N_k}$; $\nu = 1, 2, 3, 4$ — локальная нумерация вершин грани. Все производные $\frac{\partial (\mathcal{I}_{YZ})_{\Gamma}^{n\pm 1/2}}{\partial x_{\nu}^{n\pm 1/2}}$, $\frac{\partial (\mathcal{I}_{ZX})_{\Gamma}^{n\pm 1/2}}{\partial y_{\nu}^{n\pm 1/2}}$, $\frac{\partial (\mathcal{I}_{XY})_{\Gamma}^{n\pm 1/2}}{\partial z_{\nu}^{n\pm 1/2}}$ задаются формулами вида (38)–(40).

Устойчивость. Поскольку представленная вариационная разностная схема эквивалентна схеме типа *крест*, то для нее справедливы достаточные условия устойчивости, полученные методом операторных неравенств в работе [4] в виде ограничений на шаг по времени. Там эти условия были

получены для произвольных лагранжевых сеток общего вида. В формулах присутствуют только объемы ячеек и их первые производные по координатам узлов сетки.

Заключение

Явная полностью консервативная разностная схема, полученная здесь дискретным вариационным методом, предложенным в работе [1], хорошо себя зарекомендовала в численных расчетах одномерных [14] и двумерных [15] задач, проведенных для исследования матрицы искусственных вязкостей, способствующей уменьшению *энтропийного следа* в численных расчетах.

Список литературы

1. *Бондаренко Ю. А.* Применение вариационных принципов механики для построения дискретных по времени разностных моделей газодинамики. 1. Описание метода на простейших примерах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1985. Вып. 2. С. 68—75.
2. *Von Neumann J., Richtmyer R. D.* A method for the numerical calculations of hydrodynamic shocks // J. Appl. Phys. 1950. Vol. 21, No. 3. P. 232—237.
3. *Дмитриев Н. А., Дмитриева Л. В., Малиновская Е. В., Софронов И. Д.* Методика расчета двумерных нестационарных задач газодинамики в переменных Лагранжа: Препринт № 59. Москва: ИПМ АН СССР им. М. В. Келдыша, 1976.
4. *Бондаренко Ю. А., Стенин А. М.* Применение вариационных принципов механики для построения дискретных по времени разностных моделей газодинамики. 2. Голономные связи, краевые условия и устойчивость состояния покоя в разностных схемах типа «крест» // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1986. Вып. 1. С. 14—26.
5. *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 // Там же. 1988. Вып. 2. С. 29—39.
6. *Бондаренко Ю. А.* Вариационный метод построения неоднородных разностных схем газовой динамики с разными временными шагами в соседних ячейках // Докл. АН СССР. 1989. Т. 305, № 2. С. 325—329.
7. *Головизнин В. М., Самарский А. А., Фаворский А. П.* Вариационный метод получения разностных схем для уравнений магнитной гидродинамики: Препринт № 65. Москва: ИПМ АН СССР им. М. В. Келдыша, 1976.
8. *Головизнин В. М., Самарский А. А., Фаворский А. П.* Вариационный подход к построению конечно-разностных моделей в гидродинамике // Докл. АН СССР. 1977. Т. 236, № 6. С. 1285—1288.
9. *Фаворский А. П.* Вариационно-дискретные модели уравнений гидродинамики // Дифференциальные уравнения. 1980. Т. 16, № 7. С. 1308—1321.
10. *Волкова Р. А., Иванов А. А., Михайлова Н. В. и др.* Вариационно-разностные схемы для задач трехмерной газовой динамики в лагранжевых переменных: Препринт № 112. Москва: ИПМ АН СССР им. М. В. Келдыша, 1982.
11. *Троицкий В. Е.* О дивергентности схемы «крест» численного решения уравнений газовой динамики // Числ. методы мех. спл. среды. 1970. Т. 1, № 5. С. 87—93.
12. *Попов Ю. П., Самарский А. А.* Полностью консервативные разностные схемы // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1969. Т. 9, № 4. С. 953—958.

13. *Бондаренко Ю. А.* Консервативное расщепление уравнения энергии в разностных схемах типа «крест» для лагранжевой газодинамики // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1997. Т. 37, № 8. С. 1020—1023.
14. *Стенин А. М., Соловьева Е. А.* Исследование влияния некоторых форм искусственной вязкости на характер «энтропийного следа» при численном решении уравнений газодинамики // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2008. Вып. 1. С. 30—41.
15. *Стенин А. М., Соловьева Е. А.* Матрица искусственных вязкостей для двумерной лагранжевой газодинамики, способствующая уменьшению «энтропийного следа» в численных расчетах // Там же. 2010. Вып. 1. С. 3—18.

Статья поступила в редакцию 06.04.11.
