

Алгоритмы построения трехмерных структурированных сеток ¹

Т.Н.Брони́на, И.А.Га́силова, О.В.Уша́кова

Институт математики и механики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: btn@imm.uran.ru, gia@imm.uran.ru, uov@imm.uran.ru

Аннотация

Описываются алгоритмы построения трехмерных структурированных сеток в трехмерных областях геометрически сложной формы.

Введение

Вариационный подход к построению оптимальных сеток в областях геометрически сложной формы развивается в течении уже более тридцати лет [1, 2]. Он был предложен А.Ф.Сидоровым в конце пятидесятых. Тогда была создана первая программа автоматического выбора расчетной сетки и предложена методика МОПС (массовые оптимальные сетки) для построения оптимальных одномерных сеток [3] близких к равномерным с заданными значениями граничных интервалов. Описание алгоритма было опубликовано в 1966 г. Методика МОПС до сих пор используется при решении задач энерговыделения в Российских федеральных ядерных центрах в г. Сарове и г. Снежинске [4]. Она обеспечивает автоматический расчет сетки при задании ориентировочного числа интервалов в областях и допустимого перепада масс на их границах. Предложенный подход к построению сеток развивался под идеологическим руководством А.Ф.Сидорова до его смерти (31 марта 1999 г.). Были созданы двумерные методики и программы построения сеток. В частности, программа МОПС-2 (многомерные оптимальные сетки) и ее версии для параллельного расчета геометрически оптимальных структурированных и блочно-структурированных сеток в односвязных и многосвязных областях геометрически сложной формы со сложной топологией (О.Б.Хайруллина, А.Ф.Хайруллин, Н.В.Артемова, [5, 6]), программа ЛАДА для построения двумерных оптимальных адаптивных сеток (О.В.Ушакова, [7, 8]). Были разработаны алгоритмы и программы для построения невырожденных начальных сеток, используемых в качестве начальных приближений для итерационных процедур расчета сеток, на основе R-функций — для двумерных областей звездного типа

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 02-01-00236, 00-15-96042.

(И.А.Гасилова, [9]), и на основе геометрического подхода — для трехмерных областей (А.Ф.Сидоров, Т.Н.Бронина, [10]). Двумерные оптимальные сетки использовались О.Б.Хайруллиной для решения различных задач математической физики, в частности, для моделирования вихревых течений газа в каналах сложных геометрий [11]. Работы [5, 11] были только частью большого цикла исследований по разработке эффективных методов моделирования газодинамических и акустических процессов в камерах сгорания твердотопливных ракетных двигателей, за которые А.Ф.Сидорову, О.Б.Хайруллиной и большой группе других ученых была присуждена государственная премия Российской Федерации в области науки и техники. Это не полный перечень разработок, выполненных в рамках подхода [1]. В данной работе мы описываем наш первый опыт в применении идей А.Ф.Сидорова для построения трехмерных структурированных сеток в задачах многокомпонентной гидродинамики и для решения других инженерных и физических задач. В трехмерном случае подход описан в [1] и [6]. Его основной чертой является специальный способ формализации критерия близости сетки к равномерной, обеспечивающий вместе с критерием ортогональности гладкость сеток, реализацию различных краевых условий для построения сеток и возможность создания эффективных вычислительных процедур для расчета сеток на основе дискретных и вариационных формулировок.

В разделе 1 описываются основные идеи развиваемого подхода. В разделе 2 мы приводим описание алгоритмов для построения трехмерных структурированных сеток в областях, полученных вращением направляющей вокруг оси. Предлагаются алгоритмы, в которых построение трехмерной сетки не сводится к вращению двумерной сетки вокруг оси. При построении трехмерных сеток с помощью вращения двумерных сеток вокруг оси (O,C-сетки) возникают особенности (вырожденные ячейки [12, 13]) на оси вращения, более того вырожденные ячейки становятся малыми для малых углов поворота. Такое качество сеток не удовлетворяет пользователей, поэтому были предложены новые алгоритмы. Часто при Лагранжевом методе построения сеток для какого-то момента времени могут возникнуть сильно искривленные сетки близкие к вырожденным. Дальнейшее продолжение расчетов возможно лишь после улучшения качества сеток. С этой целью рассматриваемый подход используется для глобальной перестройки сетки. Соответствующий алгоритм описан в разделе 3. В данном разделе обсуждаются также вопросы качества сеток. В разделе 4 предложены алгоритмы для расчета сеток в областях типа трубопроводов.

1 Конструкция функционала оптимальности

Для изложения основной идеи подхода в трехмерном случае будем рассматривать в пространстве переменных x_1, x_2, x_3 криволинейный односвязный шестигранник G с ребрами l_i ($i=1, \dots, 12$), криволинейными гранями S_k ($k=1, 2, \dots, 6$) и восьмью вершинами. Требуется построить в G сетку с координатными поверхностями λ_i, μ_j, ν_k ($i=0, 1, \dots, N$; $j=0, 1, \dots, M$; $k=0, 1, \dots, K$). При $i=0, N$; $j=0, M$; $k=0, K$, координатные поверхности совпадают с гранями S_k . Пересечение трех координатных поверхностей дает узел сетки H_{ijk} . Пусть $r_{i\pm 1, j, k} = |\overrightarrow{H_{ijk} H_{i\pm 1, j, k}}| = |\mathbf{h}_{i\pm 1}|$. Аналогично вводятся $r_{i, j\pm 1, k}$, $r_{i, j, k\pm 1}$, $\mathbf{h}_{j\pm 1}$, $\mathbf{h}_{k\pm 1}$. Обозначим α_{ij}^l углы между векторами $\mathbf{h}_{i\pm 1}$, $\mathbf{h}_{j\pm 1}$ ($l = 1, 2, 3, 4$), $\Phi(x_1, x_2, x_3)$ — функцию, под которую должна осуществляться адаптация сетки.

Введем функционалы

$$D_U = \sum_{ijk} \left\{ [r_{i+1, j, k} - r_{i-1, j, k}]^2 \left(\frac{1}{r_{i+1, j, k}^2} + \frac{1}{r_{i-1, j, k}^2} \right) + \right. \quad (1)$$

$$+ [r_{i, j+1, k} - r_{i, j-1, k}]^2 \left(\frac{1}{r_{i, j+1, k}^2} + \frac{1}{r_{i, j-1, k}^2} \right) + \\ \left. + [r_{i, j, k+1} - r_{i, j, k-1}]^2 \left(\frac{1}{r_{i, j, k+1}^2} + \frac{1}{r_{i, j, k-1}^2} \right) \right\},$$

$$D_O = \sum_{ijk} \sum_{p=1}^4 \left(\frac{1}{\sin^2 \alpha_{ij}^p} + \frac{1}{\sin^2 \alpha_{ik}^p} + \frac{1}{\sin^2 \alpha_{jk}^p} \right), \quad (2)$$

$$D_A = \sum_{ijk} \left\{ r_{i+1, j, k}^2 [\Phi(H_{i+1, j, k}) - \Phi(H_{ijk})]^2 + \right. \quad (3)$$

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

$$D = A_U D_U + A_O D_O + A_A D_A. \quad (4)$$

Суммирование осуществляется по всем внутренним узлам.

Функционалы D_U , D_O , D_A формализуют соответственно критерии близости сеток к равномерным, ортогональным и адаптивным. Постоянные A_U , A_O , A_A — положительные весовые коэффициенты, определяющие вклад соответствующего критерия оптимальности в построение сетки.

Для дискретных функционалов мы можем выписать возникающие вариационные задачи для построения сеток. Опустим формулировки и описание особенностей задач, ссылаясь на [1, 6].

Мы будем рассматривать только два критерия оптимальности, отвечающие за близость сетки к равномерной и ортогональной, и разрабатывать алгоритмы построения сеток геометрически оптимальных без учета критерия адаптации.

2 Алгоритмы для расчета сеток в телах вращения

Задача состоит в построении структурированной 3D сетки в области G , получающейся вращением направляющей кривой, заданной в плоскости x_1, x_3 , вокруг оси x_3 на угол φ , ($\varphi_0 \leq \varphi < \pi$). Как отмечалось выше, по требованию пользователя алгоритм построения сетки не должен сводиться к вращению двумерной сетки вокруг оси. Направляющая может быть составлена из отрезков прямых, дуг окружностей и эллипсов. Область G представляется как криволинейный шестигранник с восьмью выделенными вершинами. Несколько примеров направляющих и соответствующих им областей вращения представлены на Рис. 1 (первая и вторая строки). Области таких конфигураций очень часто встречаются в многокомпонентных гидродинамических приложениях.

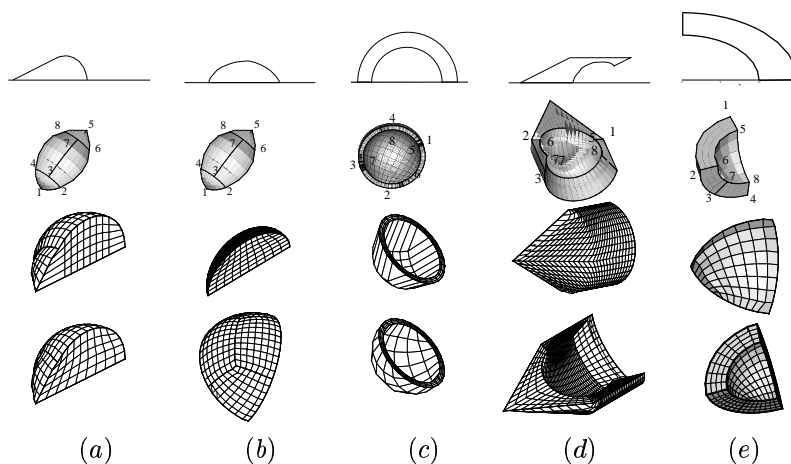


Рис. 1: Примеры направляющих, тел вращения и сеток на границах областей.

Алгоритм состоит из двух независимых частей: построения начальной сетки и оптимизации полученной сетки в соответствии с заданными критериями оптимальности.

Для построения начальной сетки используются линейная интерполяция (построение вспомогательного шестигранника), проектирование вспомогательного шестигранника на поверхность вращения [10], интерполяция В-сплайнами [14],[15] для построения начальной сетки на поверхности области и внутри нее, и для оптимизации сетки.

Для каждой конфигурации на Рис. 1 предлагается свой алгоритм автоматической расстановки вершин основного шестигранника, причем допускается задание координат некоторых вершин пользователем. Расставив вершины и соединив их отрезками прямых, определяем ребра вспомогательного шестигранника (Рис. 2 (a)). Используя линейную интерполяцию, строим сетку во вспомогательном шестиграннике. Проектируя узлы с границы вспомогательного шестигранника на границу заданной области, получаем "начальную сетку" на границе области основного шестигранника G (Рис. 2 (b)).

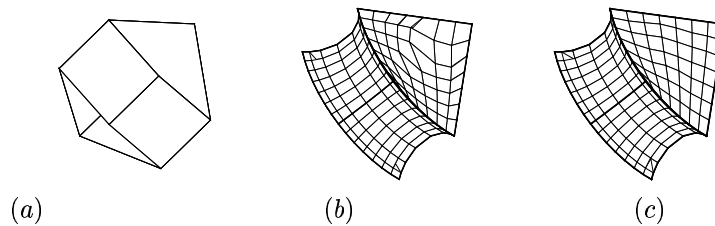


Рис. 2: Этапы построения 3D - сетки на теле вращения:

- (a) - вспомогательный шестигранник, (b) - начальная сетка,
(c) - сетка после оптимизации.

Далее, интерполирую каждую "координатную" линию кубическими В-сплайнами и расставляя узлы сетки равномерно по длине кривой на каждой грани криволинейного шестигранника (Рис. 2(c)), минимизируем значение функционала $D_U(1)$, улучшая качество сетки. Аналогичный процесс перестановки осуществляем и для внутренних узлов сетки.

Примеры сеток для различных тел вращения представлены на Рис. 1. На Рис. 1 (a), (c) в строке 3 — начальная сетка, в строке 4 — сетка после оптимизации. На Рис. 1 (b) показаны сетки для различных углов вращения ($\varphi = 15^\circ$, $\varphi = 90^\circ$). На Рис. 1 (d), (e) показаны примеры сеток для оболочек различной конфигурации.

3 Алгоритм глобальной перестройки сетки

Предполагается, что расчет физической задачи начинается на начальной сетке, построенной методом, описанном в предыдущем разделе

ле. На каждой итерации процедуры решения физической задачи сетка строится Лагранжевым методом. На какой-то момент времени Лагранжевая сетка может стать сильно искривленной и неудовлетворительной по качеству. Она может содержать ячейки сильно отличающиеся по размерам, может быть не гладкой и очень близкой к вырожденной. Однако, расчет физической задачи требуется продолжить и для больших моментов времени. В такой ситуации необходима глобальная перестройка сетки. Требуется алгоритм, который на основе "плохой" сетки осуществляет построение сетки "хорошей" по качеству: близкой к равномерной, ортогональной и гладкой. С этой целью мы предлагаем следующий алгоритм.

Пусть односвязная область G задана структурированной невырожденной трехмерной сеткой. Задача состоит из двух подзадач.

Случай 1. Разработка алгоритма и программы перестройки сетки исходя из перечисленных выше критериев оптимальности для подобласти, выделяемой из данной односвязной области заданием начальных и конечных значений индексов узлов сетки. При этом граничные узлы подобласти считаются фиксированными.

Случай 2. Разработка алгоритмов и программ перестройки сетки для всей области. Алгоритмы, разрабатываемые на этом этапе, предполагают перестройку узлов сетки исходя из критериев оптимальности как на границе области (ребрах и гранях), так и внутри нее. Фиксированными остаются лишь вершины криволинейного шестигранника, определяющего односвязную область. При перестройке сетки требуется сохранять форму границы исходной области.

Не ограничивая общности будем считать далее что, подобласть, в которой требуется осуществить перестроение узлов, совпадает с областью G .

Численный алгоритм решения поставленной задачи является трехмерным аналогом [8] и разрабатывается в рамках подхода [1]. Алгоритм представляет собой алгоритм минимизации дискретного функционала (4) с $A_A = 0$. Эта минимизация должна обеспечить построение сетки близкой к равномерной и ортогональной, с гладкими сеточными линиями, и обеспечить глобальную перестройку сетки. Алгоритм для случая 1 это алгоритм минимизации функционала (4) с фиксированными узлами на границе [1].

Алгоритм для случая 2 это алгоритм минимизации функционала для случая свободных узлов на границе области [1]. В вариационной задаче построения сеток функции координат узлов на границе области не заданы, и чтобы найти их на границе необходимо рассматривать

естественные граничные условия и еще какие-либо условия. Мы можем задавать угол наклона координатных линий к границе, в частности, рассматривать случай координатных линий, ортогональных границе.

Опишем основные идеи предлагаемого алгоритма. Будем рассматривать случай с фиксированными узлами на границе области. Итерации начинаются с некоторой невырожденной начальной сетки, выполняющей роль начального приближения.

При определении узла i, j, k другие узлы фиксируются и положение узла находится из условия невырожденности сетки и условия минимума функционала D на специальном множестве точек. Для каждого внутреннего узла будем применять процедуру локальной оптимизации сетки. Будем рассматривать восемь ячеек, содержащих узел i, j, k в качестве вершины. Для построения ячеек сетки будем использовать трилинейное отображение единичного куба [12]. Такое отображение дает линейчатые шестигранные ячейки. Узлы сетки $H_{i+\Delta_i, j+\Delta_j, k+\Delta_k}^n$, $\Delta_i, \Delta_j, \Delta_k = -1, 0, 1$, являющиеся вершинами рассматриваемых восьми шестигранников, образуют так называемый 27 точечный шаблон. Мы фиксируем внешние узлы этих восьми шестигранников, позволяя двигаться только внутреннему узлу. Отметим следующие основные черты этой процедуры.

Смещение любого узла не изменяет геометрию шаблонов узлов, не являющихся соседями с данным узлом, следовательно, оно не может изменить значения якобиана отображения в узлах, не являющихся соседними с данным и качество сетки в этих узлах.

На очередной итерации n при выборе смещения $H_{ij}^n H_{ij}^{n+1}$ узла H_{ij}^n , минимизирующего функционал и сохраняющего невырожденность сетки, можно руководствоваться различными стратегиями. Допустимым множеством (обеспечивающим невырожденность) в большей части случаев будет множество $H_{i,j-1,k}^n, H_{i,j+1,k}^n, H_{i-1,j,k}^n, H_{i+1,j,k}^n, H_{i,j,k-1}^n, H_{i,j,k+1}^n$, если этот восьмигранник выпуклый.

Целевая функция содержит якобиан от искомого преобразования в качестве знаменателя, поэтому D будет обращаться в бесконечность, если дискретный аналог якобиана в узле сетки (в трехмерном случае объем тетраэдра, построенный на ребрах ячейки, выходящих из данного узла) будет обращаться в ноль. Такие конструкции для построения сеток называют барьерными методами [16], обладающими "барьером" против вырожденных элементов.

Так как сетка, требующая улучшения, часто может быть близкой к вырожденной, то для того, чтобы распознать ее от вырожденных случаев, и чтобы оценить, дает ли смещение узла невырожденную сетку,

мы использовали критерии невырожденности, полученные в [12],[13]. На основе этих критериев была создана программа для тестирования структурированной сетки на невырожденность. Для оценки качества построенных сеток использовались значения дискретных функционалов равномерности D_U и D_O . Чем меньше эти величины, тем ближе сетка к равномерной по расстояниям между соседними узлами и тем ближе к ортогональной, соответственно.

Для оценки качества сетки использовались также линейные размеры ячеек. Эти размеры используются в ограничениях на временной шаг итерационной процедуры решения физической задачи. Поэтому, одним из основных критериев хорошего качества сеток, на который ориентируется пользователь, является близость к единице отношения максимального и минимального по всей расчетной области линейных размеров ячеек сетки. Этот критерий и способ вычисления линейных размеров ячеек был предложен О.М.Козыревым.

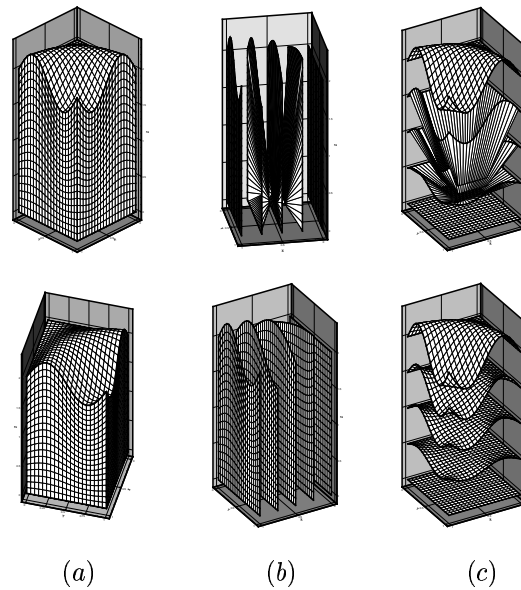


Рис. 3: Пример перестройки сетки: (a) сетка на границе, координатные поверхности $i = 0, 5, 10, 15, 20$ (b), $k = 0, 5, 10, 15, 20$ (c).

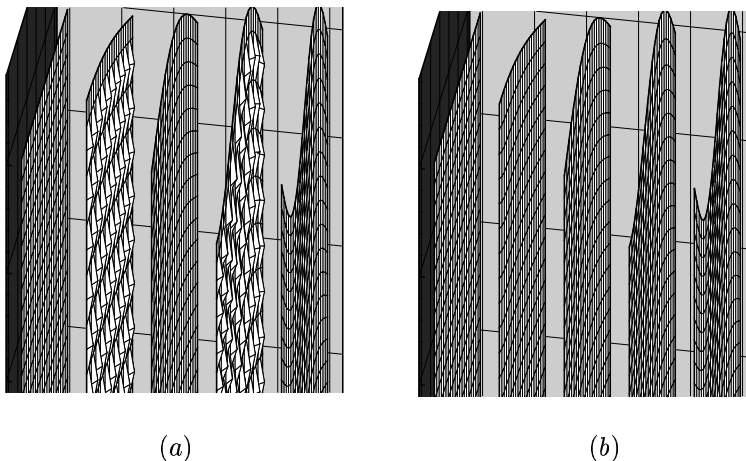


Рис. 4: Пример перестройки сетки:
 (a) начальная сетка, (b) оптимальная сетка
 (координатные поверхности: $i = 0, 5, 10, 15, 20$).

На рисунке 3 представлен модельный пример перестройки сетки, показанной на рисунке 3 (b), (c) верхние примеры. Оптимальная сетка показана на нижних рисунках. Граничные узлы фиксированы и представлены на рисунке 3 (a) (верхние и нижние примеры дают виды с разных точек зрения). Начальная сетка строилась с помощью равномерной сетки куба, вписанного в область G . Приграничные узлы начальной сетки (лежащие на границе куба) соединялись с соответствующими узлами на границе. Узлы на границе области фиксированы. Начальная сетка на рисунке 4 строилась равномерным образом по координатам x_1, x_2, x_3 . Затем, по аналогии с [17], заменялись координаты с нечетными индексами так, чтобы получить искривленную сетку (Рис. 4), близкую к вырожденной.

В расчетах $A_U = 1.$, $A_O = 0.1$. Для начальной сетки на Рис. 3 $D_U = 3621900.$, $D_O = 134660$. отношение максимального и минимального по всей области линейного размера ячеек равно 125.59. Для оптимальной сетки $D_U = 8758.$, $D_O = 87277$. отношение максимального и минимального по всей области линейного размера ячеек равно 4.53. Для начальной сетки на Рис. 4 $D_U = 16883.$, $D_O = 101340.$, для оптимальной сетки $D_U = 9064.$, $D_O = 90382$. Линейные размеры ячеек в этом примере не сильно отличаются для случаев (a) и (b), но начальная сетка близка к вырожденной.

4 Алгоритм для "трубопроводов"

Пусть в плоскости x_1, x_2 задана односвязная область Q звездного типа. Она является поперечным сечением "трубопровода" с плоской направляющей T , состоящей из отрезков прямых и дуг окружностей. Для этого "трубопровода" требуется построить объемную сетку без особенностей, свойственных сеткам О-типа.

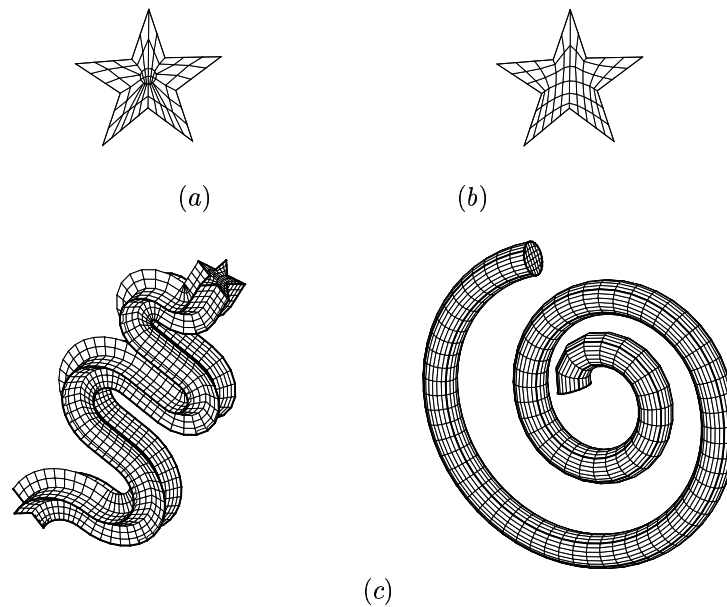


Рис. 5: Пример объемных сеток для "трубопроводов":

(a) начальная сетка, (b) оптимальная сетка;
(a), (b) поперечное сечение, (c) объемные сетки.

Идея алгоритма состоит в построении двумерной оптимальной сетки в поперечном сечении Q , которое равномерно движется вдоль направляющей T и осуществляет поворот на угол γ или растяжение, в зависимости от геометрии направляющей T .

Для построения двумерной оптимальной сетки в поперечном сечении Q сначала применяется алгоритм [9] для построения начальной сетки (Рис. 5 (a)), основанный на использовании аппарата R-функций [18] и проверяющий также принадлежность двумерной области Q к

звездному типу, и затем программа ЛАДА [7] для построения оптимальной сетки (Рис. 5 (b)). Полные объемные сетки для "трубопроводов" продемонстрированы на Рис. 5 (c).

Заключение

Предложенные алгоритмы и примеры показали свою эффективность. В дальнейшем предполагается их развитие в следующих направлениях. Для построения начальной сетки в телах вращения будут использоваться многомерные B-сплайны в комбинации с подходом [1]. Для оптимизации начальной сетки планируется использовать алгоритм раздела 3. Этот алгоритм будет модифицирован для случая 2.

Список литературы

- [1] O. B. Khairullina, A. F. Sidorov, and O. V. Ushakova. Variational methods of construction of optimal grids. Handbook of Grid Generation, J. F. Thompson, B. K. Soni, and N. P. Weatherill, eds., CRC Press, Boca Raton, FL, 1999, 36-1–36-25.
- [2] Serezhnikova T.I., Sidorov A.F. and Ushakova O.V. On One Method of Construction of Optimal Curvilinear Grids and Its Applications. Soviet Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, 4, (2), 1989, 137–155.
- [3] Сидоров А.Ф. Об одном алгоритме расчета оптимальных разностных сеток. Тр. матем. ин-та им. В.А.Стеклова АН СССР. 1966. Т. 74. С. 147–151.
- [4] Потугина И.В. Освоение и развитие методики программ расчета одномерных задач энергоснабжения во ВНИИЭФ (1954-1986). Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Математическое моделирование физических процессов, 1998, 2, 50–59.
- [5] Khairullina O.B. Method of Constructing Block Regular Optimal Grids in Two-dimensional Multiply-connected Domains of Complex Geometries. Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, 11, (4), 1996, 343–358.
- [6] A.F.Sidorov, O.B.Khairullina, A.F.Khairullin. Parallel algorithms of generation of optimal multi-block-structured two-dimensional and three-dimensional grids of large size. Numerical Grid Generation in Computational Field Simulation, M. Cross, B. K. Soni and J. F. Thompson, J.Hauser, P.R.Eiseman eds., ISGG, MS, 1998, 759–769.
- [7] 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. Мат. моделир. физ. процессов. 1994. Вып. 3. С. 47–56.

- [8] O. V. Ushakova. Algorithm of two-dimensional optimal grid generation. Numerical Grid Generation in Computational Field Simulation. B. K. Soni and J. F. Thompson, eds., Mississippi State University, Mississippi State, MS, 1996, 37–46.
- [9] Гасилова И.А. Алгоритм автоматического построения начального приближения криволинейной сетки для областей звездного типа. Вопросы атомной науки и техники. Сер. Мат. моделир. физ. процессов. 1994. Вып. 3. С. 33–40.
- [10] Т.Н.Кошкина, А.Ф.Сидоров. Об одном геометрическом способе построения трехмерных разностных сеток. Сб.Численные и аналитические методы решения задач механики сплошной среды, Свердловск,1981г.,С.91–100
- [11] Khairullina O.B. Modelling subsonic vortex gas flows in channels of complex geometries. Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, 13, (3), 1998, 191–219.
- [12] Ushakova O.V. Conditions of nondegeneracy of three- dimensional cells. A formula of a volume of cells. SIAM J. Sci. Comp, 23, 4, 2001, 1273–1289.
- [13] Ushakova O.V. Nondegeneracy criteria for 3-D grid cells. Formulas for a cell volume. Grid Generation: New trends and applications in real-world simulations. Proceedings of the minisymposium in the International conference "Optimization of finite-element approximations, splines and wavelets". June 25-29, 2001. St.-Petersburg, Russia. Edited by S.A.Ivanenko, V.A.Garanzha, 115–128.
- [14] G.Farin. Computer-Aided Geometric Design. Handbook of Grid Generation, J. F. Thompson, B. K. Soni, and N. P. Weatherill, eds., CRC Press, Boca Raton, FL, 1999, pp. 28-1–28-22.
- [15] I.D.Faux, M.J.Pratt. Computational geometry for design and manufacture, Ellis Horwood Ltd. 1979.
- [16] S. A. Ivanenko and A. A Charakhch'yan, Curvilinear grids of convex quadrilaterals, USSR Comput. Maths. Math. Phys, 28(2), 1988, 126–133. С.А.Иваненко, А.А.Чарахч'ян. Криволинейные сетки из выпуклых четырехугольников. Журнал вычислительной математики и матем. физики. Т.28(2), 1988, с.126–133.
- [17] J.Grandy. Conservative Remapping and Region Overlays by Intersecting Arbitrary Polyhedra. *Journal of Computational Physics*, 148, 433-466 (1999)
- [18] В.Л.Рвачев. Теория R-функций и некоторые ее приложения. Киев: Наукова думка, 1982.