

УДК 519.6

О РАЗВИТИИ ВАРИАЦИОННОГО ПОДХОДА ПОСТРОЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ СЕТОК (ОБЗОР)

О. В. Ушакова

В статье представлен обзор более полувекового развития вариационного подхода построения оптимальных сеток, предложенного А. Ф. Сидоровым. Изложены концепция подхода, основу которой в качестве критериев оптимальности сеток составляют требования близости сетки к равномерной, ортогональной и адаптации к заданной функции или решению уравнений в частных производных, и ее применение для построения структурированных сеток в двумерных и трехмерных областях геометрически сложной формы. Описываются созданные алгоритмы построения сеток и их приложения. Обзор поделен на два периода: годы жизни ученого и последующие годы. Конструкции функционалов, формализующих критерии оптимальности сеток, изложены применительно к единой технологии построения сеток, созданной во второй период для численного моделирования вихревых процессов многокомпонентной гидродинамики. Приводятся примеры расчетов сеток по развиваемому в настоящее время в рамках указанной технологии алгоритму построения сеток в объемах, полученных деформациями объемов вращения с помощью обобщений объемов вращения. Под объемом вращения понимается конструкция, образованная вращением плоской образующей кривой, состоящей из отрезков прямых, дуг окружностей и эллипсов, называемых элементами, на 180° вокруг оси. Обобщение объема вращения представляет собой объем, образованный поверхностями, полученными вращением элементов плоских образующих кривых на 180° вокруг параллельных осей. Деформированный объем вращения представляет собой объем, полученный деформацией объема вращения другим объемом вращения или его обобщением. Случаи объемов вращения, обобщений объемов вращения, объемов вращения, деформированных объемами вращения, сформировали описываемую технологию построения сеток. Базовой конструкцией в технологии является объем вращения, позволивший осуществлять ее дальнейшее развитие в направлении усложнения конструкций. В настоящее время возможно строить структурированные сетки в очень сложных трехмерных областях. Такая возможность появилась благодаря применению техники подвижных сеток, естественным образом реализуемой в вариационных конструкциях, и разработки нестационарного алгоритма, осуществляющего деформацию объема вращения до нужной деформированной формы, деформацию и оптимизацию сетки с целью удовлетворения критериев оптимальности.

Ключевые слова: структурированные сетки, оптимальные сетки, подвижные сетки, построение сеток в деформированных областях.

O. V. Ushakova. On the development of the variational approach to the generation of optimal grids (a survey).

A survey of the more than a half-century development of the variational approach to the generation of optimal grids suggested by A. F. Sidorov is presented in the paper. The idea of the approach is based on the requirements that the grid is close to a uniform orthogonal grid and is adjusted to a given function or to the solution of partial differential equations; these requirements are chosen as optimality criteria. The implementation of this idea for the generation of structured grids in two- and three-dimensional domains of geometrically complex shape is given. The developed grid generation algorithms and their applications are described. The survey is divided into two periods: the years of Sidorov's life and the subsequent years. The constructions of the functionals that formalize the grid optimality criteria are presented in relation to a unified technology created in the second period for the numerical simulation of vortex processes in multicomponent hydrodynamics. Examples of grid calculations are given using the currently developed grid generation algorithm in volumes obtained by deformations of volumes of revolution by generalizations of volumes of revolution. A volume of revolution is understood as a shape formed by the rotation of a plane generatrix consisting of segments of straight lines, arcs of circles, and ellipses, called elements, by 180° around an axis. A generalization of a volume of revolution is a volume formed by surfaces obtained by rotating elements of plane generatrices by 180° about parallel axes. A deformed volume of revolution is a volume obtained by deforming a volume of revolution by another volume of revolution or by a generalization of the volume of revolution. The cases of volumes of revolution, generalizations of volumes of revolution, and volumes of revolution deformed by volumes of revolution have formed the described grid generation technology. A basic structure in the technology is a volume of revolution, which made it possible to carry out its further development in the direction of complication of shapes of domains. At present, it is possible to build structured grids in very complicated three-dimensional domains. This possibility appeared due to the application of the moving grid technique, which is naturally implemented in variational constructions, and also due to the development of a nonstationary algorithm that deforms a volume of revolution up to a desired deformed shape and deforms and optimizes the grid in order to satisfy the optimality criteria.

Keywords: structured grids, optimal grids, moving grids, generation of grids in deformed volumes.

MSC: 35-04, 65M50, 65M06

DOI: 10.21538/0134-4889-2023-29-2-217-247

Введение

Методы построения сеток — общепризнанный инструмент, применяемый в математическом моделировании физических явлений и процессов. Методы построения сеток используются для дискретизации непрерывной среды области с целью моделирования явлений и процессов с нужной степенью точности. Интенсивное развитие методов началось с появлением вычислительной техники. В статье представлен обзор развития вариационного подхода построения оптимальных сеток [1; 2], предложенного А. Ф. Сидоровым. Подход развивался теоретически с целью получения новых конструкций и методик для построения сеток и их обоснования и практически — методики всегда реализовывались в компьютерных программах (генераторах сеток), а также в моделировании. Работа состоит из двух разделов. В разделе 1 приведено краткое описание развития подхода в годы жизни его основателя, так как аналогичные обзорные работы были уже опубликованы в [1] (А. Ф. Сидоров, Т. И. Серезникова и О. В. Ушакова) и [2] (А. Ф. Сидоров, О. В. Ушакова и О. Б. Хайруллина), в разделе 2 — более подробное описание, охватывающее последующий период до настоящего времени, так как обзорных работ в это время не было. В первый период развивались преимущественно одномерные и двумерные конструкции, но уже тогда были предложены и трехмерные модели с примерами их реализации. Предложенные алгоритмы и созданные на их основе генераторы сеток применялись для решения задач энерговыделения и для моделирования процессов, возникающих в камерах сгорания твердотопливных ракетных двигателей. В последующий период развивались трехмерные технологии, применяемые для моделирования процессов многокомпонентной гидродинамики, численного решения задач обтекания. Имена ученых, внесших вклад в развитие подхода, приводятся по тексту статьи. В обзор включены только основные работы.

1. Период до 31.03.1999 г.

Зарождение подхода. Появление первого генератора сеток и его применение для моделирования процессов энерговыделения. Вариационный подход построения оптимальных сеток начал развиваться с конца 50-х г. прошлого века, когда А. Ф. Сидоров предложил способ формализации критерия близости сетки к равномерной и первый вариационный алгоритм [3] для построения одномерных оптимальных сеток с заданными значениями граничных интервалов. На основе алгоритма была создана первая программа автоматического выбора расчетной сетки и предложена методика МОПС (массовые оптимальные сетки). Методика МОПС до недавнего времени использовалась в российских федеральных ядерных центрах в Сарове и Снежинске [4] при решении задач энерговыделения. Описание алгоритма было опубликовано в 1966 г. Оказалось, что предложенная конструкция минимизируемого функционала обладает рядом полезных свойств. В 1969 г. О. С. Широковской в работе [5] было доказано: $h_{i+1} - h_i \approx O(N^{-2})$, где h_i — i -й шаг сетки, N — число шагов. Полученная в [5] оценка близости сетки к равномерной по расстояниям между соседними узлами позволяет более точно аппроксимировать производные высоких порядков. (Вопрос о таких сетках был поставлен в [6].) Позднее в [7; 8] показано, что за счет выбора лишь значений граничных интервалов построенные на основе таких сеток обычные разностные схемы при решении краевых задач для обыкновенных уравнений, содержащих малый параметр ε , обладают свойством равномерной по параметру ε сходимости при $N \rightarrow \infty$. Таким образом, предложенная конструкция функционала в ряде случаев позволяет осуществить и адаптацию сеток к особенностям решения краевых задач за счет выбора граничных интервалов.

В 1971 г. А. Ф. Сидоровым в [9] была предложена промежуточная конструкция функционала, формализующего критерий близости сетки к равномерной, для построения двумерных сеток для некоторого класса областей.

Формирование концепции построения оптимальных сеток. Затем в 1980-е гг. последовала целая серия работ А. Ф. Сидорова, Т. Н. Кошкиной (Брониной), Т. И. Сережниковой (Шабашовой) и автора этой статьи, и сформировалась концепция построения оптимальных сеток, подробно изложенная в обзоре проведенных исследований [1] (1989 г.). Кратко изложим суть концепции. Алгоритм автоматического построения оптимальных сеток (генератор сеток) должен быть универсальным¹, эффективным², надежным³, использующим минимальное количество информации.

Наиболее гибкими в построении оптимальных сеток, удовлетворяющих перечисленным требованиям проявили себя вариационные методы. Вариационные методы построения сеток хотя и требуют при их реализации решения довольно трудоемких задач (минимизации функционалов от функций многих переменных или решения соответствующих уравнений Эйлера — Остроградского (Э-О)), тем не менее дают возможность строить сетки, удовлетворяющие различным критериям оптимальности и с хорошими вычислительными достоинствами.

Критерии оптимальности. Наиболее широко используются для построения оптимальных сеток следующие критерии оптимальности.

1. Критерий близости сеток к равномерным (Р). Объемы соседних элементарных ячеек сетки должны быть одного порядка. В противном случае трудно строить достаточно точные разностные аппроксимации дифференциальных уравнений. Кроме того, резко ухудшается обусловленность систем разностных уравнений, аппроксимирующих на построенной сетке системы дифференциальных уравнений.

2. Критерий близости сеток к ортогональным (О). Координатные линии или поверхности различных семейств не должны пересекаться под углами, близкими к 0 или π . В противном случае также ухудшается обусловленность систем разностных уравнений.

3. Критерий адаптации (А). Криволинейная сетка должна отслеживать особенности заданной функции (семейства функций) или должна изменяться в итерационных или нестационарных процессах при решении краевых задач. Сгущение сетки должно происходить, в частности, в зонах больших градиентов, для которых строится адаптивная сетка.

Особенность подхода. В [1] выделена главная особенность развиваемого подхода, отличающая его от других вариационных подходов. Она состоит в специальном способе формализации критерия (Р), приводящем к нелинейному вариационному функционалу, в который входят как первые, так и вторые частные производные функций, реализующих отображение. Этот непрерывный функционал появляется естественным образом после рассмотрения дискретного функционала, минимизирующего меру относительной погрешности неравномерной сетки по сравнению с равномерной. Такая формализация приводит к системе уравнений Э-О четвертого порядка⁴, гиперболической в широком смысле. Это позволило рассмотреть новые более широкие типы краевых условий, а также разработать эффективные алгоритмы и программы построения сеток для весьма сложных областей. Экономичные и эффективные процедуры расчета сеток связаны с применением итерационных процессов, использующих как специальную нестационарную модификацию уравнений Э-О, так и прямые геометрические способы

¹Позволяющим рассчитывать сетки в широком классе областей, в случае нестационарных задач рассчитывать сетки в областях, существенно отличающихся от первоначальной формы.

²Позволяющим моделировать физический процесс с нужной степенью точности и экономично.

³Обеспечивающим построение сеток требуемого качества без вмешательства пользователя.

⁴В подавляющем большинстве случаев в интегральные вариационные функционалы, формализующие критерии оптимальности, входят первые частные производные функций, осуществляющих отображение. Уравнения Э-О для них — система уравнений в частных производных второго порядка, как правило, эллиптического типа.

минимизации дискретных функционалов, формализующих все три критерия оптимальности.

Создание двумерных моделей, генераторов сеток и их параллельных реализаций. Следующее десятилетие характеризовалось дальнейшим развитием и применением подхода.

Были созданы и разработаны программы построения сеток. В частности, программа МОПС-2 (многосвязные оптимальные сетки) и ее версии для параллельного расчета геометрически оптимальных⁵ структурированных и блочно-структурированных сеток в двумерных односвязных и многосвязных областях геометрически сложной формы со сложной топологией (см. работы А. Ф. Сидорова, О. Б. Хайруллиной, А. Ф. Хайруллина, Н. А. Артемовой [10–12]), программы для построения одномерных и двумерных оптимальных адаптивных сеток, в том числе и программы для комплексов ЭВМ параллельного действия (см. работы автора [13–15]). Были разработаны алгоритмы и программы для построения невырожденных начальных сеток, используемых в качестве начальных приближений для итерационных процедур расчета сеток, на основе R-функций [16] для двумерных областей звездного типа (см. работу И. А. Гасиловой [17]).

Точные решения уравнений Э-О. Точные решения уравнений Э-О для специальных вариационных задач расчета сеток в двумерном случае [18] были найдены А. Ф. Сидоровым, в трехмерном случае [19] — Л. И. Рубиной. Эти решения могут быть использованы в качестве тестов для алгоритмов и программ расчета сеток.

Применение генераторов для моделирования вихревых течений газа в каналах сложных геометрий. Двумерные оптимальные сетки использовались для решения различных задач математической физики, в частности, для моделирования вихревых течений газа в каналах сложных геометрий [20–23]. В таких каналах часто образуются сложные нестационарные гидро- и газодинамические течения. При проектировании таких установок одним из важных моментов является знание как структуры течений, так и параметров, характеризующих их. С целью сокращения натуральных испытаний необходимы эффективные численные методы, позволяющие достаточно быстро рассчитывать надежно прогнозируемые параметры течений. Создание же численных методов расчета течений газа в каналах сложных геометрий связано с большими трудностями. Это сложные геометрии расчетных областей, большой диапазон изменения скоростей потока, образование многих вихревых зон с замкнутыми линиями тока, вызванное взаимодействием встречных потоков. Как правило, расчеты были связаны с серьезными ограничениями на геометрии каналов либо на структуру течений.

Применение оптимальных гладких блочно-структурированных криволинейных сеток явилось весьма существенным фактором при решении прикладных задач [20–24]. Хорошие аппроксимационные качества используемых сеток [5; 7; 8] стали основой достигнутых результатов. Работы [10; 20–24] были только частью большого цикла исследований по разработке эффективных методов моделирования газодинамических и акустических процессов в камерах сгорания твердотопливных ракетных двигателей, за которые в 1999 г. А. Ф. Сидорову, О. Б. Хайруллиной, О. В. Коковихиной и большой группе других ученых была присуждена Государственная премия Российской Федерации в области науки и технологий.

Краткий обзор проведенных исследований можно найти в [2].

2. Период после 31.03.1999 г.

Последующие разработки были посвящены развитию подхода в трехмерном случае и созданию технологии построения сеток, предназначенной для численного моделирования вихревых процессов многокомпонентной гидродинамики [25], а также для решения других важных инженерных и прикладных задач. Первоначальный опыт для трехмерного случая уже имелся, см. работы А. Ф. Сидорова, Т. Н. Брониной [26], Т. И. Шабашовой [27].

⁵Удовлетворяющим двум критериям оптимальности (Р) и (О).

Процессы многокомпонентной гидродинамики. Динамика многокомпонентных сред (см. [25])— очень важная сфера прикладных исследований во многих научных областях, таких, как физика материи и энергии высокой плотности (термоядерный синтез, взрывные процессы), астрофизика (зарождение и эволюция звезд, сверхновые звезды), физика атмосферы и гидросферы Земли. Многие процессы, изучаемые в данных областях, происходят в объемах вращения и объемах, ограниченных поверхностями вращения с параллельными осями вращения (обобщениях объемов вращения), а также в деформированных объемах. Физические процессы характеризуются гидродинамической неустойчивостью, возникновением вихревых и потоковых течений, потерей первоначальной топологической структуры, а также сильными деформациями границ областей, поэтому создание и разработка технологий построения трехмерных сеток в соответствии с требованиями математического моделирования многокомпонентных сред (см. [25]) были важны и актуальны. Математическое моделирование гидродинамических течений в таких средах представляет собой очень сложную проблему и требует сеток особого качества. Разностные методы с использованием структурированных сеток просты в реализации для таких задач и позволяют описывать как границы, так и детали течения. Поэтому для [25] требуются генераторы структурированных (регулярных) сеток, узлы которых в нужном объеме — области решения физической задачи G (физической области) — находятся с помощью непрерывного отображения

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi) = \mathbf{x}(\xi^1, \xi^2, \xi^3) = \{x^1(\xi^1, \xi^2, \xi^3), x^2(\xi^1, \xi^2, \xi^3), x^3(\xi^1, \xi^2, \xi^3)\} \quad (2.1)$$

равномерной ортогональной сетки $\xi_{ijk} = (i, j, k)$, $i = 0, 1, \dots, N - 1$, $j = 0, 1, \dots, M - 1$, $k = 0, 1, \dots, L - 1$ прямоугольного параллелепипеда (вычислительной области)

$$P = \{\xi = (\xi^1, \xi^2, \xi^3) : 0 \leq \xi^1 \leq N - 1, 0 \leq \xi^2 \leq M - 1, 0 \leq \xi^3 \leq L - 1\},$$

где N, M, L — целые числа, определяющие число узлов $\mathbf{x}_{ijk} = \mathbf{x}(i, j, k)$ сетки вдоль каждого из координатных направлений i, j, k соответственно. Кроме того, в [25] требуется, чтобы ячейки сетки были линейчатыми шестигранными ячейками — строились с помощью трилинейных отображений⁶ единичных кубов

$$P_{ijk} = \{\xi = (\xi^1, \xi^2, \xi^3) : i - 1 \leq \xi^1 \leq i, j - 1 \leq \xi^2 \leq j, k - 1 \leq \xi^3 \leq k\},$$

$i = 1, \dots, N - 1$, $j = 1, \dots, M - 1$, $k = 1, \dots, L - 1$, сетки в P . Таким образом результирующее отображение является кусочно-гладким. При таком способе построения сетки отображение \mathbf{x} (2.1) определяет способ представления области G в виде криволинейного шестигранника, называемый далее конфигурацией области (сетки). Сетки для [25] должны быть особой конфигурации, если необходимо — адаптивными.

Создание основ численного анализа трехмерных сеток. Разработка технологии началась с создания основ численного анализа трехмерных сеток автором этого обзора. Прежде всего требовалось получить условия невырожденности отображения, используемого для построения сеток. Для этого нужно было получить условия невырожденности линейчатых ячеек. Такие условия ранее не были получены. Оценка невырожденности трехмерных сеток с помощью визуализации была ненадежной, а для больших массивов узлов и невозможной. Условия невырожденности были получены в [29; 30]. Они представляют собой условия положительности якобиана трилинейного отображения⁷ и требуют проверки 27 неравенств для 32

⁶Для ячейки с вершинами $\mathbf{x}_{i+i_1, j+i_2, k+i_3}$, $i_l = 0, 1, l = 1, 2, 3$, трилинейное отображение имеет вид $\mathbf{x}(\xi) = \sum_{i_1, i_2, i_3=0}^1 \mathbf{x}_{i+i_1, j+i_2, k+i_3} \Xi^{i_1} \Xi^{i_2} \Xi^{i_3}$, где $\Xi^{i_l} = i_l + (-1)^{i_l} (1 - \xi^l)$, $0 \leq \xi^l \leq 1$, $i_l = 0, 1$, $l = 1, 2, 3$, ($\Xi^{i_l} = 1 - \xi^l$, если $i_l = 0$, $\Xi^{i_l} = \xi^l$, если $i_l = 1$). Использование трилинейных отображений для восполнения отображения \mathbf{x} (2.1) — это наиболее распространенный способ построения шестигранных ячеек (см. [28]). У таких ячеек грани — линейчатые поверхности второго порядка, поэтому сами ячейки называются линейчатыми, см. [29].

⁷Для этого впервые были выписаны формулы его различных представлений.

объемов специальных тетраэдров с вершинами в вершинах ячеек. Были получены необходимые, а также достаточные условия, не совпадающие с необходимыми. Проведена численная оценка широты полученных условий с помощью вычислительного эксперимента со случайными числами. Полученные необходимые условия позволили отсеивать вырожденные ячейки, а достаточные — делать вывод о невырожденности сеток. Было показано, что полученные достаточные условия являются достаточно общими. В численном эксперименте со случайными числами были получены шестигранные ячейки, для которых выполнялись необходимые условия, но не выполнялись достаточные, в этом случае для оценки невырожденности приходится использовать вычислительный алгоритм проверки якобиана трилинейного отображения на положительность, который позднее был описан в [31]. Случаев его применения для оценки невырожденности сеток, рассчитанных на практике, зафиксировано не было: для проверки невырожденности сеток всегда использовались аналитические условия [29; 30]. Там же, в [29; 30], были получены экономичные формулы для вычисления объема шестигранных линейчатых ячеек. Долгое время экономичных формул для вычисления объема также не было. Отметим, что, по-видимому, невозможно получить условия, являющиеся одновременно необходимыми и достаточными (или условия более сильные, чем [29]), так как для этого приходится исследовать на знакоположительность полином четвертой степени от трех переменных, поэтому за два последних десятилетия продвижения в этом направлении не было⁸. Надежный и эффективный численный алгоритм для проверки положительности такого полинома был недавно предложен в [32].

В [31] автор статьи обсуждает вопрос о невырожденности сеток и наличии общих теорем о гомеоморфизмах отображений в аспекте их применимости в теории и практике построения сеток, приводит формулировки теорем о гомеоморфизмах отображений областей из [33], которые могут использоваться для оценки невырожденности отображений для построения сеток. Формулировка одной из таких теорем, которую можно применять для рассматриваемого кусочно-гладкого отображения, приводится в приложении. В [31] получены критерии невырожденности и формулы объемов для других видов линейчатых ячеек, используемых для построения трехмерных ячеек (призматических, пирамидальных и тетраэдральных), а также более сложных криволинейных ячеек, получаемых с помощью полиномиальных функций, являющихся обобщением трилинейного отображения и заданных в форме полиномов Бернштейна — Безье. Такая форма записи наиболее распространена в геометрических конструкциях [34]. Рассматриваемые конструкции применяются для построения конечных элементов, а полученные достаточные условия могут быть использованы в конечно-элементном анализе. Результаты работы [31] сравниваются с результатами других авторов [35–37]. Несомненным преимуществом критериев невырожденности (формул для вычисления объемов) является то, что все они получены в виде неравенств (формул) для специальных объемов тетраэдров с вершинами в вершинах ячеек. Кроме того, для линейчатых ячеек и ячеек, конструируемых с помощью полиномов Бернштейна — Безье, условия являются самыми сильными из известных.

Начало развития трехмерных технологий построения сеток и требований к ним.

Параллельно с данными исследованиями шла разработка трехмерных алгоритмов построения сеток и началось создание технологии построения сеток для математического моделирования многокомпонентных сред [25].

Основы [38] технологии построения сеток для [25] в областях вращения были созданы Т. Н. Брониной и автором, в трубопроводах — И. А. Гасиловой.

⁸Якобиан трилинейного отображения может быть записан в виде полинома шестой степени, представляющего собой сумму полиномов, внутри единичного куба больших нуля. Достаточные условия 1 представляют собой положительность коэффициентов при этих полиномах, а достаточные условия 2 (более общие достаточные условия) были получены на основе записи якобиана в виде полинома четвертой степени, представленного в форме квадратного трехчлена от одной переменной при фиксированных двух других.

Алгоритмы для объемов вращения. Т. Н. Брониной предложены три различных алгоритма построения начальных сеток для областей вращения, основанных на геометрическом подходе. В [38] рассматривались области вращения G , получающиеся вращением образующей кривой, заданной в плоскости x_1, x_3 , вокруг оси x_3 на угол φ , ($\varphi_0 \leq \varphi \leq \pi$). Образующая может быть составлена из отрезков прямых, дуг окружностей и эллипсов. В предложенных алгоритмах построение трехмерной сетки не сводится к вращению двумерной сетки вокруг оси. При построении трехмерных сеток с помощью вращения двумерных сеток вокруг оси (О, С-сетки, см. [39]) возникают особенности (вырожденные ячейки [40], см. обсуждение далее) на оси вращения, более того, вырожденные ячейки становятся малыми для малых углов поворота. Такое качество сеток не удовлетворяет разработчиков [25], поэтому были предложены новые алгоритмы. Они были проанализированы с точки зрения различных критериев качества сеток [2; 25]. В [38] автор статьи предложила алгоритмы глобальной перестройки сеток. Часто при лагранжевом методе построения сеток (см. [25]) 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 описываемый вариационный подход был использован для разработки алгоритма глобальной перестройки сетки.

Алгоритм для трубопроводов. Идею алгоритма для трубопроводов предложила в [38] И. А. Гасилова. Суть алгоритма состоит в построении двумерной оптимальной сетки без особенностей, свойственных сеткам О-типа (см. [39]) в поперечном сечении, которое равномерно движется вдоль плоской направляющей и осуществляет поворот или растяжение в зависимости от геометрии направляющей. Для построения двумерной оптимальной сетки в поперечном сечении сначала применяется алгоритм И. А. Гасиловой [17] для построения начальной сетки, основанный на использовании аппарата R-функций [16] и проверяющий также принадлежность двумерной области к звездному типу, и затем программа ЛАДА [13] автора этой статьи для построения оптимальной сетки.

Итоги этих исследований обобщены в монографии [41] (под редакцией автора этой статьи). В ч. II подробно представлены алгоритмы автора (гл. 9), Т. Н. Брониной и автора (гл. 10), И. А. Гасиловой (гл. 11), предназначенные для численного моделирования многокомпонентных сред [25] (гл. 8 О. М. Козырева с соавторами), с описания которого начинается указанная часть монографии, а также ранее неопубликованные алгоритмы. Это описание методики и программы МОПС-3 построения трехмерных сеток для задач обтекания с помощью вращения двумерных сеток вокруг оси [42] (гл. 6 монографии [41]).

Методика для задач обтекания. Методика создана О. Б. Хайруллиной и Н. А. Артемовой на основе программы МОПС-2. Она позволяет строить трехмерные блочно-регулярные сетки сложных топологий в односвязных и многосвязных областях вращения, предназначенные для численного решения задач обтекания (см. работу [43] С. Н. Мартюшова). Отличительные особенности методики — описываемый подход к построению сеток (способ формализации критерия равномерности), гладкая стыковки сеток на границах блоков, автоматизация генерации произвольной топологии сеток и применение комбинированных итераций, использующих как дискретные, так и вариационные интерпретации подхода. Примеры использования методики в расчетах задач обтекания по программе Института прикладной математики им. М. В. Келдыша приводятся в [42].

Алгоритм консервативной интерполяции на гексаэдральных сетках. Кроме того, в [44] ([41, ч. II, гл. 12]) описан алгоритм Б. Н. Азаренка для консервативной интерполяции на гексаэдральных сетках. Более подробное описание алгоритма можно найти в [45].

Необходимость интерполяции физических величин с одной разностной сетки, состоящей из шестигранных ячеек, на другую встречается при решении задач гидродинамики, в частности, задач многокомпонентной гидродинамики. При моделировании на некоторых подвижных сетках (например, в лагранжевых координатах) со временем некоторые ячейки сетки могут вырождаться. Чтобы избежать остановки расчетов, следует осуществить глобальную перестройку

ку сетки и переинтерполировать физические величины со старой “плохой” сетки на новую “хорошую”. В некоторых случаях необходимо осуществлять консервативную интерполяцию, когда количество величины в одном и том же локальном объеме должно оставаться неизменным после интерполяции. Именно такой алгоритм предложен для [25] и описан в [41, гл. 12]. Интерполяция сводится к определению объема фигуры пересечения ячеек старой и новой сеток. Определение области пересечения двух шестигранных линейчатых ячеек является сложной задачей, поскольку приходится выделять линии пересечения линейчатых поверхностей, решая дифференциальные уравнения. Эти уравнения имеют особенности в тех областях, где, например, грани ячеек пересекаются и почти параллельны, в местах соприкосновения граней и т. д. (см. [46]). Вместо этого решается задача поиска пересечения двенадцатигранных ячеек с плоскими треугольными гранями, что существенно облегчает задачу интерполяции. Идея такой замены возникла из полученной в [29] формулы объема линейчатой ячейки, согласно которой ее объем равен полусумме объемов двух двенадцатигранников с теми же, что и у шестигранной ячейки вершинами, но с плоскими треугольными гранями (рис. 1). На рис. 1 шестигранная ячейка с линейчатыми гранями заменяется двумя двенадцатигранниками с плоскими треугольными гранями, что приводит к задаче построения фигуры пересечения двух двенадцатигранников. Для текущей ячейки новой сетки предложен оптимальный алгоритм перебора ячеек старой сетки, имеющих в пересечении с ней непустое множество. Проводится оценка ошибки интерполяции. Рассмотрены примеры интерполяции.

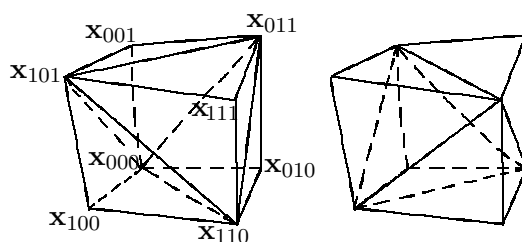


Рис. 1. Двенадцатигранники, соответствующие шестигранной ячейке с вершинами x_{i_1, i_2, i_3} , $i_l = 0, 1$, $l = 1, 2, 3$, являющейся образом единичного куба P_{111} .

Теоретические исследования, теоремы о гомеоморфизмах, их применение для оценки невырожденности сеток. В рамках развития подхода продолжают исследования [47] с целью получения общих теорем о гомеоморфизмах отображений для обоснования алгоритмов построения сеток, а именно невырожденности сеток. М. Ф. Прохоровой были получены новые теоремы о гомеоморфизмах отображений, которые существенно обобщают теоремы, доказанные ранее в [33], расширяют возможности их использования. Кроме того, в [47] были выявлены некоторые ошибки и неточности, допущенные при доказательстве теорем в [33]. Приведем более подробное описание результатов из [47], которые используются для оценки невырожденности сеток в описываемом подходе. Начнем с формулировки требования невырожденности.

Требование невырожденности сеток. Вычислительная сетка должна быть невырожденной, так как на вырожденных сетках физическое явление или процесс не могут быть описаны с требуемой точностью. На вырожденных сетках системы алгебраических уравнений, заменяющих исходную систему дифференциальных уравнений, моделирующих процесс или явление, плохо обусловлены, так как содержат вырождающиеся значения в знаменателях коэффициентов системы и невозможно решить их с требуемой точностью. Обычно (см. [31]) невырожденность сетки (ячейки) обеспечивается невырожденностью отображения, используемого для ее построения. Ячейка (сетка) считается невырожденной (см. [48]), если отображение, используемое для ее построения, — инъекция (взаимно однозначное отображение), сюръекция (отображение “на”), т. е. биекция (при условиях на отображение x (2.1) — гомеоморфизм) и

характеризуется ненулевыми (обычно положительными) значениями якобиана отображения⁹. Если отображение не удовлетворяет этим условиям, то сетка (ячейка) считается вырожденной.

Для проверки невырожденности сеток используются теоремы о гомеоморфизмах [33; 47], условия невырожденности [29; 49] и тесты [48]. Теоремы о гомеоморфизмах — это общие теоремы для отображений, обеспечивающие их гомеоморфизм. Они собраны в [48] и доказаны в [33; 47] специально для случая построения сеток. Теоремы М.Ф. Прохоровой из [47] существенно расширили возможности обоснования различных алгоритмов построения сеток. В отличие от [33] они были доказаны не только для случая, когда P и G — области, но и для случая топологических многообразий (см. формулировку обобщений теоремы о гомеоморфизмах [47] в приложении), кроме того, сократился список условий, которые требуется проверять для обеспечения гомеоморфизма отображения. В теоремах о гомеоморфизмах из [33] предполагается, что вычислительная и физические области P и G соответственно — это ограниченные связные гомеоморфные области. Область P “поделена” на несамопересекающиеся выпуклые подобласти P_i ($i = 1, \dots, m$) (называемые “ячейками” в [47]) так, что для их замыканий \bar{P} и \bar{P}_i справедливо

$$\bar{P} = \bigcup_{i=1}^m \bar{P}_i.$$

В нашем случае роль P_i выполняют единичные кубические ячейки P_{ijk} прямоугольного параллелепипеда P . В отличие от теоремы [33] из приложения в ее обобщении из [47] не требуется гомеоморфности отображения \mathbf{x} (2.1) на границе P , а также на границах ячеек P_{ijk} . В [47] от отображения требуется иметь на границе G одну точку с одноэлементным прообразом. Кроме того, в отличие от [33] условие положительности якобиана отображения должно выполняться внутри единичных кубов и на их гранях (но не на их замыканиях).

Так как отображение для построения сетки \mathbf{x} (2.1) строится с помощью трилинейных отображений единичных кубических ячеек равномерной ортогональной сетки прямоугольного параллелепипеда P , якобиан отображения \mathbf{x} (2.1) (его сужений, см. теорему из приложения) в каждой точке вычислительной области и на ее границе равен якобиану соответствующего трилинейного отображения в этой точке. Условия положительности якобиана трилинейного отображения получены в [29; 31] и называются условиями невырожденности. Тесты для проверки невырожденности [48] — это алгебраические неравенства для специальных объемов тетраэдров (необязательно являющиеся достаточными условиями невырожденности), но с некоторой долей вероятности они обеспечивают положительность якобиана трилинейного отображения. По объему вычислений тесты — условия более экономичные, чем условия невырожденности [29]. Их предлагали в качестве тестов для проверки невырожденности шестигранных линейчатых ячеек многие авторы (см. [48]). В работе [48] приводятся результаты исследования восьми тестов в вычислительном эксперименте со случайными числами, использованными для генерации множества шестигранных линейчатых ячеек. Тесты изучались на надежность и процент охвата невырожденных ячеек. Среди тестов выявлен самый надежный, гарантирующий в большинстве случаев невырожденность шестигранных ячеек и сеток. Этот тест состоит в проверке положительности 10 объемов тетраэдров¹⁰. Они формируют две двенадцатигранные

⁹Если осуществляется преобразование координат на выбранной сетке, эти значения будут содержаться в знаменателях коэффициентов систем алгебраических уравнений, заменяющих системы дифференциальных уравнений, описывающих физический процесс, поэтому они не должны вырождаться.

¹⁰Восьми объемов $V_{i_1 i_2 i_3}^{pqr}$ тетраэдров с вершиной $\mathbf{x}_{i_1 i_2 i_3}$, $i_l = 0, 1, l = 1, 2, 3$, и ребрами $\mathbf{p}_{i_1 i_2 i_3} = \mathbf{x}_{\bar{i}_1 i_2 i_3} - \mathbf{x}_{i_1 i_2 i_3}$, $\mathbf{q}_{i_1 i_2 i_3} = \mathbf{x}_{i_1 \bar{i}_2 i_3} - \mathbf{x}_{i_1 i_2 i_3}$, $\mathbf{r}_{i_1 i_2 i_3} = \mathbf{x}_{i_1 i_2 \bar{i}_3} - \mathbf{x}_{i_1 i_2 i_3}$ (угловые тетраэдры), см. коэффициенты $\alpha_{i_1 i_2 i_3} = \delta_{i_1 i_2 i_3} [\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{r}]_{i_1 i_2 i_3} = J_{i_1 i_2 i_3} = 6V_{i_1 i_2 i_3}^{pqr}$ в [29], и двух объемов диагональных тетраэдров V_{lll}^{uvw} , $l = 0, 1$, с вершиной \mathbf{x}_{lll} и ребрами $\mathbf{u}_{lll} = \mathbf{x}_{\bar{l}l} - \mathbf{x}_{lll}$, $\mathbf{v}_{lll} = \mathbf{x}_{ll\bar{l}} - \mathbf{x}_{lll}$, $\mathbf{w}_{lll} = \mathbf{x}_{ll\bar{l}} - \mathbf{x}_{lll}$, $l = 0, 1$, соответствующих величинам $\bar{\kappa}_{lll} = \delta_{lll} [\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}]_{lll} = 6V_{lll}^{uvw}$ из [29]. Здесь и в [29] $\bar{0} = 1$, $\bar{1} = 0$, $\delta_{i_1 i_2 i_3} = (-1)^{i_1 + i_2 + i_3}$, нижние индексы при смешанных произведениях векторов относятся к каждому вектору, $J_{i_1 i_2 i_3} = J(\mathbf{x}_{i_1 i_2 i_3})$ — значение якобиана трилинейного отображения в вершине $\mathbf{x}_{i_1 i_2 i_3}$, равное ушестеренному объему соответствующего углового тетраэдра.

ячейки¹¹, изображенные на рис. 1. Тест удобен для проверки невырожденности сетки в процессе ее построения. После того как сетка построена, проверяются условия невырожденности [29].

Описываемая концепция невырожденности сеток формировалась вместе с требованиями к сеткам, применяемым в [25] для необходимых типов областей и их конфигураций, и с развитием технологий построения сеток в соответствии с ними.

Требования к сеткам при моделировании процессов гидродинамики. Прежде всего в [25] требовалось создать технологию построения сеток в специальных объемах вращения, которые представляли собой половину от классического объема вращения. При этом, так же как и в [38], плоская образующая кривая состояла из отрезков прямых, дуг окружностей и эллипсов (элементов), но вращалась на угол φ , равный π (в [38] угол мог быть меньшим π) вокруг оси x_3 . Технология включала способ задания геометрии объема вращения путем такого описания образующей кривой с помощью начальных и конечных точек элементов и их типов (отрезок прямой, дуга окружности и эллипса) и некоторых других параметров (для окружности и эллипса), когда с помощью отдельных конечных точек определялись конфигурация области (способ ее представления в виде криволинейного шестигранника) и некоторые другие геометрические свойства сетки. Она также включала алгоритм построения начальной сетки [50], которая затем использовалась в качестве начального приближения в алгоритме оптимизации [51] (или глобальной перестройки сетки), также входящем в технологию построения сеток. При этом требовалось, чтобы сетка была структурированной, но не блочно-структурированной, состоящей из отдельных блоков. А технология была бы полностью трехмерной и также, как и в [38], не сводилась к построению ротационных сеток¹².

Ротационные сетки часто используются в трехмерных вычислениях, включая моделирование процессов многокомпонентной гидродинамики. Такие сетки характеризуются вырождением на оси вращения. Шестигранные ячейки вдоль оси вращения вырождаются в линейчатые призмы с треугольным основанием¹³ (см. [31; 40]). Случай вырожденных ячеек на оси вращения был нежелательным для разработчиков [25], и они (А. М. Козырев, В. А. Гордейчук, А. И. Анучина и др.) предложили строить сетки других конфигураций, показанных для различных объемов вращения на рис. 2, где числа обозначают соответствие между вершинами прямоугольного параллелепипеда P и криволинейного шестигранника G .

Отличительной особенностью предложенных конфигураций является то, что две грани криволинейного шестигранника G (соответствующие индексам $k = 0, L - 1$) состоят из поверхностей вращения, а остальные грани либо лежат в одной плоскости, либо являются линейчатыми поверхностями (см. рис. 2). Криволинейный шестигранник G может иметь две, три или четыре грани, лежащие в одной плоскости (плоскости задания образующей кривой). Шестигранные ячейки вдоль ребер стыковки плоских граней, лежащих в одной плоскости, также вырождаются в линейчатые призмы с треугольным основанием, но тип вырождения другой¹⁴, см. работу [40], чем у ячеек, вырождающихся на оси вращения¹⁵. Численное моделирование [25]

¹¹Согласно теореме (и ее обобщениям) из приложения условия положительности указанных выше десяти тетраэдров — это условия невырожденности двенадцатигранных ячеек, соответствующих восьми вершинам шестигранной ячейки и имеющих плоские треугольные грани (см. рис. 1). Для двенадцатигранных ячеек отображение, используемое для их построения, кусочно-линейное и кусочно-гладкое, отображающее соответствующий тетраэдр единичного квадрата в тетраэдр ячейки. Невырожденные шестигранные ячейки с указанными положительными десятью тетраэдрами называются в [49] невыкрученными ячейками.

¹²Получаемых вращением с равным шагом (на один и тот же угол) вокруг оси двумерных сеток, заданных в плоской области, ограниченной образующей кривой.

¹³Так как противоположные ребра шестигранных ячеек совпадают (целая грань шестигранника вырождается в ребро призмы, лежащее на оси вращения). Отображение \mathbf{x} (2.1) не является гомеоморфизмом, и якобиан трилинейных отображений, используемых для построения ячеек, вырождается.

¹⁴Везде в P отображение \mathbf{x} (2.1) — гомеоморфизм, но имеет вырождающийся якобиан трилинейных отображений ячеек на рассматриваемых ребрах.

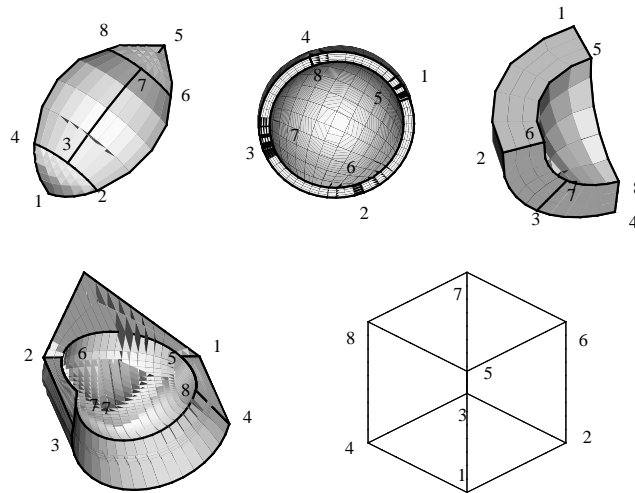


Рис. 2. Криволинейные шестигранники, различные конфигурации.

допускает такие вырожденные ячейки. Для этих ячеек применяется модификация численного алгоритма решения задачи. Другие ячейки должны быть невырожденными.

Рассматриваемый пример использования вырожденных ячеек иллюстрирует ситуации, когда моделирование может осуществляться на сетках, содержащих отдельные вырожденные ячейки. Для этого важно уметь распознавать случаи вырождения и выявлять его типы, чтобы нужным образом модифицировать вычислительный процесс и исключить потерю точности¹⁶. Численные критерии распознавания вырожденных случаев шестигранных ячеек были предложены в [40].

Конфигурация области должна сохранять симметрии объема вращения.

Технологии для построения сеток в объемах вращения. Для [25] оказалось невозможным построить сетки желаемого качества, используя традиционные генераторы сеток (часто основанные на алгебраических методах интерполяции, применяемых для построения сеток, см. [52; 53], и для рассматриваемых конфигураций, генерирующих вырожденные сетки, содержащие самопересекающиеся ячейки), поэтому для целей [25] была выбрана вариационная техника [2].

Построение начальной сетки. Вариационная техника построения сетки требует начального приближения. Обычно в качестве начальной берется сетка, построенная методом линейной интерполяции [2; 52; 53], но для сложных конфигураций областей, как упоминалось

¹⁵Вырожденные ячейки на оси вращения менее предпочтительны, чем вырожденные ячейки вдоль ребер стыковки плоских граней криволинейного шестигранника G . При увеличении числа узлов в соответствующем координатном направлении (радиальном для ротационных сеток и вдоль ребер стыковки граней, лежащих в одной плоскости, для сеток с конфигурациями, показанными на рис. 2) вырожденные ячейки на оси вращения становятся малыми, так как угол поворота становится малым, а вырожденные ячейки вдоль ребер — нет. Более того, модификация алгоритма для решения физической задачи на ротационных сетках может быть более сложной и в некоторых случаях невозможной. Для таких задач требуется глобальная реконструкция сетки. Вдоль оси вращения выделяется специальный блок, и в этом блоке построение сетки осуществляется специальным образом [42]: сетка становится блочно-структурированной и невырожденной в блоке вдоль оси вращения.

¹⁶В вырожденных случаях, чтобы исключить потерю точности, применяются специальные стратегии. Стратегии могут быть различными: вырожденные ячейки могут исключаться из вычислений, расчеты на них могут осуществляться отличным от основного алгоритма способом, вырождающиеся на вырожденных ячейках значения могут заменяться невырождающимися, и так далее. Наконец, если построенная сетка содержит недопустимые типы вырожденных ячеек (как, например, ротационная сетка), может применяться другой метод построения сеток или сетка, содержащая допустимые типы вырождения, как в конфигурациях на рис. 2.

выше, такая сетка может иметь вырожденные самопересекающиеся ячейки. Известно также, что хорошее начальное приближение позволяет сократить в десятки раз число итераций при построении сетки вариационным методом, а иногда оказывает существенное влияние на качество конечной (оптимальной) сетки. Кроме того, построение сетки на границе области тоже представляет собой отдельную задачу. В [50] Т. Н. Бронина для областей вращения предложила алгоритм построения трехмерных структурированных сеток, не имеющих особенностей на оси вращения, в соответствии с требованиями к конфигурациям [25], а также с другими требованиями [25]. Этот алгоритм позволяет построить сетку на границе области и гарантирует отсутствие самопересекающихся ячеек. Получаемая сетка сохраняет симметрии области. В [50] рассматриваются образующие областей вращения, у которых не больше двух элементов лежат на оси вращения¹⁷. Там же рассмотрено два типа областей: первый тип, когда существует единственный элемент, принадлежащий оси вращения; второй тип, когда существуют два элемента, принадлежащих оси вращения. Алгоритмы для каждого типа предложены для двух различных конфигураций. Идея предлагаемого алгоритма состоит в том, что сетка составляется из набора двумерных сеток, рассчитанных на поверхностях вращения, образующие которых расположены в плоскости задания образующей. Фактически в плоскости задания образующей рассчитывается двумерная сетка, координатные линии одного из семейств которой выбираются в качестве образующих для построения поверхностей вращения. С помощью предложенных алгоритмов можно строить и блочно-структурированные сетки для случая, когда одна область вращения “надевается” на другую, а также для случая, когда в структурированной сетке выделяются подблоки (вставки) вдоль оси вращения, отличающиеся густотой узлов. Сетки в первом случае стыкуются из узла в узел по поверхностям вращения, во втором — по плоским границам вставок также из узла в узел (примеры см. в [50]).

Алгоритм оптимизации трехмерных сеток. Алгоритм оптимизации трехмерных сеток для областей вращения был подробно описан автором в [51]. Он использовался для оптимизации начальных сеток, построенных методом [50], и для глобальной перестройки сеток вариационной техникой [2]. Этот алгоритм сформировал основу метода оптимизации сеток в развиваемой технологии. Построение сетки осуществляется минимизацией дискретного функционала качества сетки

$$D = D_P + A_O D_O, \quad (2.2)$$

формализующего критерии равномерности (P) и ортогональности (O), т. е. критерии геометрической оптимальности и представляющего собой сумму мер уклонения сетки от равномерной D_P и ортогональной D_O

$$D_P = \sum_{ijk} \left\{ [r_{i+1,j,k} - r_{i-1,j,k}]^2 \left(\frac{1}{r_{i+1,j,k}^2} + \frac{1}{r_{i-1,j,k}^2} \right) + [r_{i,j+1,k} - r_{i,j-1,k}]^2 \left(\frac{1}{r_{i,j+1,k}^2} + \frac{1}{r_{i,j-1,k}^2} \right) + [r_{i,j,k+1} - r_{i,j,k-1}]^2 \left(\frac{1}{r_{i,j,k+1}^2} + \frac{1}{r_{i,j,k-1}^2} \right) \right\}, \quad (2.3)$$

$$D_O = \sum_{ijk} \sum_{l=1}^4 \left(\frac{1}{\sin^2 \varphi_{ij}^l} + \frac{1}{\sin^2 \varphi_{ik}^l} + \frac{1}{\sin^2 \varphi_{jk}^l} \right), \quad (2.4)$$

с положительным весовым коэффициентом A_O , определяющим вклад функционала D_O в построение сетки.

Здесь величины $r_{i\pm 1,j,k} = |\overrightarrow{H_{ijk} H_{i\pm 1,j,k}}| = |\mathbf{h}_{i\pm 1}|$, φ_{ij}^l — углы между векторами $\mathbf{h}_{i\pm 1}$, $\mathbf{h}_{j\pm 1}$, ($l = 1, 2, 3, 4$) (см. рис. 3a), $r_{i,j\pm 1,k}$, $r_{i,j,k\pm 1}$; $\mathbf{h}_{j\pm 1}$, $\mathbf{h}_{k\pm 1}$, φ_{ik}^l , φ_{jk}^l определяются аналогично.

¹⁷Если таких элементов больше, тогда образующая разбивается на подмножества так, чтобы это требование выполнялось для каждого подмножества. В этом случае сетка рассчитывается отдельно в каждом подмножестве. Если элементов образующей на оси вращения нет, то предлагаемый в [50] алгоритм совпадает с ротационным.

Суммирование производится по всем внутренним узлам сетки.

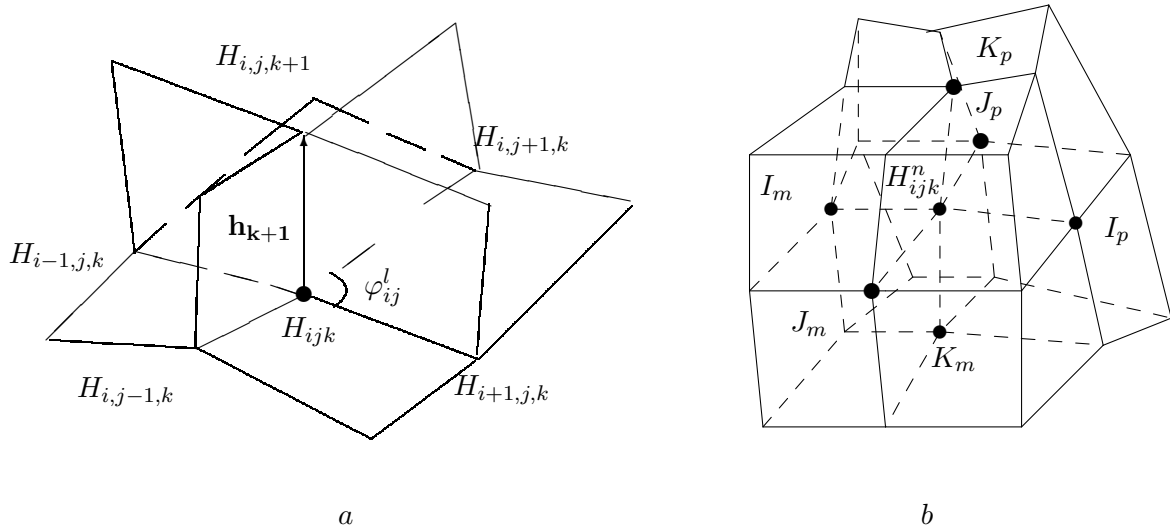


Рис. 3. Элементы трехмерной сетки: *a* — узлы, расстояния между узлами, углы между координатными линиями; *b* — шаблон узлов для минимизации функционала D .

Минимизация функционала D должна обеспечить построение оптимальной сетки, близкой к равномерной и ортогональной.

Непрерывные аналоги функционалов имеют вид

$$I = I_P + A_O I_O, \tag{2.5}$$

$$I_P = \iiint_P \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial}{\partial \xi_i} \ln \sqrt{g_{ii}} \right)^2 d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3,$$

$$I_O = \iiint_P \frac{1}{J^2} \left(\frac{G_1 G_2}{g_{33}} + \frac{G_1 G_3}{g_{22}} + \frac{G_2 G_3}{g_{11}} \right) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3,$$

$$g_{ii} = \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial x_j}{\partial \xi_i} \right)^2, \quad J = \det \left\{ \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \right\}, \quad G_i = g_{kk} g_{ll} - g_{kl}^2, \quad i \neq k, l, \quad g_{kl} = \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial x_j}{\partial \xi_k} \frac{\partial x_j}{\partial \xi_l} \right)^2.$$

Функционал I_P называется в [54] функционалом эксцентриситета и является мерой эксцентриситета сетки. Величина $\left(\frac{\partial}{\partial \xi_i} \ln \sqrt{g_{ii}} \right)^2$ является относительной мерой эксцентриситета сетки вдоль i -го координатного направления, характеризующей изменение расстояний между узлами (ребер ячеек, шагов сетки) вдоль указанного координатного направления. Если она равна 0, расстояние между узлами не меняется в данном направлении.

В рассматриваемом способе формализации критериев оптимальности возможна реализация всех известных способов задания граничных условий (расстановки граничных узлов) как при минимизации дискретных функционалов, так и в вариационных задачах. В вариационной постановке определяющим является слагаемое I_P . Оно дает второй порядок подынтегрального выражения минимизируемого функционала I , допуская произвол в выборе искомых функций и их первых производных. Это позволяет при формулировке краевой задачи расчета сетки задавать либо оставлять свободными как положение самих узлов на границе области (определяется значениями искомых функций), так и угол наклона координатных линий к границе (определяется значениями производных от искомых функций) (см. [51]). В [51] реализовано 6

способов расстановки граничных узлов: 1) фиксированные узлы, 2) свободные узлы, 3) ортогональность координатных линий граням, 4) ортогональность координатных линий граням и ребрам, 5) расчет граничных узлов, выбранных пользователем (из условия минимума функционала, условия ортогональности координатных линий на границе или условия гладкой стыковки на ребрах), 6) условие гладкой стыковки на ребрах.

Слагаемое I_P определяет не только возможность задания различных краевых условий, но и тип системы уравнений Э-О. Структуру системы уравнений Э-О для функционалов вида (2.5) с выделением главной части можно представить в виде

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\partial x_k}{\partial \xi_i} \frac{\partial^4 x_k}{\partial \xi_i^4} + L_i(x_1, x_2, x_3) = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.6)$$

где $L_i(x_1, x_2, x_3)$ — нелинейные формы, содержащие частные производные функций x_k не выше третьего порядка.

Пусть уравнение

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = 0$$

является уравнением характеристического многообразия для системы уравнений (2.6). Из (2.6) следует (см. [55]), что дифференциальное уравнение для Ψ имеет вид

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial \xi_1}\right)^4 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \xi_2}\right)^4 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \xi_3}\right)^4 = 0.$$

Таким образом, система уравнений (2.6) является гиперболической в широком смысле [55], а линии или плоскости $\xi_i = \text{const}$ являются характеристическими.

Если в (2.5) оставить лишь функционал, отвечающий за близость сеток к ортогональным, то прямой анализ системы уравнений Э-О [56] показывает, что эта система второго порядка смешанного эллиптико-гиперболического типа, так что краевая задача может быть некорректно поставленной. Таким образом, введение слагаемого с $A_P \neq 0$ играет важную регуляризующую роль. Численные эксперименты только с одним функционалом ортогональности как в двумерном случае [56], так и трехмерном [38] обнаруживают неустойчивость численных процедур.

Исследование выпуклости минимизируемого функционала и корректности краевых задач для системы (2.6) представляется весьма трудным из-за их нелинейности. Простейший модельный пример корректной краевой задачи приведен в [56]. Позже были найдены примеры точного решения уравнений Э-О для двумерного [18] и трехмерного случая [19]. К сожалению, в отличие от одномерного случая [3; 57] теоремы о существовании и единственности решения, корректности поставленных задач в настоящее время неизвестны¹⁸.

Функционал ортогональности $I_O(D_O)$ также играет очень важную роль. Благодаря его конструкции целевая функция содержит якобиан от искомого преобразования в качестве знаменателя, поэтому $I(D)$ будет обращаться в бесконечность, если якобиан от искомого преобразования или дискретный аналог якобиана в узле сетки (в трехмерном случае объем тетраэдра, построенный на ребрах ячейки, выходящих из данного узла, см. коэффициенты $\alpha_{i_1 i_2 i_3}$ из [29]) будет обращаться в нуль. Такие конструкции для построения сеток называют барьерными методами [58; 59], обладающими “барьером” против вырожденных элементов. Кроме того, как показывает опыт многочисленных расчетов, использование только одного функционала равномерности приводит к построению равномерных, но не гладких сеток, а функционал ортогональности (при наличии функционала равномерности) обеспечивает построение гладких

¹⁸Формальные соображения (на границе вычислительной области задано 18 функций $x_i|_{\partial P} = l_i(\xi)$, $\xi \in \partial P$, $i = 1, 2, 3$, по три на каждой из шести граней прямоугольного параллелепипеда P , т. е. имеется произвол в 18 функций) и большой опыт расчетов сеток подтверждают гипотезу о корректности краевой задачи.

сеток. Отметим, что важно следить за тем, чтобы барьерные свойства функционала сохранялись при численной реализации алгоритма. Для некоторых вырожденных ячеек барьерное свойство функционала ортогональности будет нарушаться (см. [51]). Поэтому в численной процедуре оптимизации сетки [51] осуществляется дополнительный контроль за невырожденностью ячеек, что также предотвращает возникновение вырожденных сеток.

В [51] анализируются преимущества и недостатки алгоритмов оптимизации сеток, основанные на численном решении уравнений Э-О и непосредственной минимизации функционала, а также даются рекомендации для выбора весовых коэффициентов для случая, когда минимизируемый функционал представляет сумму функционалов с весами. Для устойчивого счета слагаемые в минимизируемом функционале должны быть одного порядка. В качестве алгоритма оптимизации сетки выбран алгоритм, разработанный по аналогии с двумерным алгоритмом [13].

Алгоритм оптимизации представляет собой итерационную процедуру минимизации дискретного функционала D . Алгоритм минимизации функционала осуществляется аналогом метода покоординатного спуска, где в качестве одного из направлений минимизации выступает один узел сетки. На каждой итерации n для нахождения каждого внутреннего узла H_{ijk}^n осуществляется локальная оптимизация сетки, основанная на геометрических принципах. Положение нового узла H_{ijk}^{n+1} ищется из условия минимума функционала

$$D(\mathbf{x}_{000}^n, \mathbf{x}_{001}^n, \dots, \mathbf{x}_{ijk}^{n+1}, \dots, \mathbf{x}_{N-1, L-1, K-1}^n) = \min_{\mathbf{x}_{ijk} \in H} D(\mathbf{x}_{000}^n, \mathbf{x}_{001}^n, \dots, \mathbf{x}_{ijk}, \dots, \mathbf{x}_{N-1, L-1, K-1}^n)$$

на специально построенном множестве H и из условия невырожденности сетки (см. [29; 30]). Локальная минимизация сетки осуществляется на шаблоне из восьми ячеек сетки, содержащих рассчитываемый узел в качестве вершины (см. рис. 3b). Внешние узлы шаблона фиксируются. Смещение любого узла не изменяет геометрию шаблонов узлов, не являющихся соседями с данным узлом, следовательно, оно не может изменить значения отображения, задающего сетку, и его якобиана в узлах, не являющихся соседними с данным, а значит, и качество сетки в этих узлах.

На очередной итерации n при выборе смещения $\overrightarrow{H_{ij}^n H_{ijk}^{n+1}}$ узла H_{ijk}^n , минимизирующего функционал и сохраняющего невырожденность сетки, можно руководствоваться различными стратегиями. Допустимым множеством (обеспечивающим невырожденность) в большей части случаев будет восьмигранник с плоскими гранями (см. рис. 3b), с вершинами в точках $I_m = H_{i-1jk}^n$, $I_p = H_{i+1jk}^n$, $J_m = H_{ij-1k}^n$, $J_p = H_{ij+1k}^n$, $K_m = H_{ijk-1}^n$, $K_p = H_{ijk+1}^n$, если этот восьмигранник выпуклый¹⁹. Случаи невыпуклых восьмигранников также рассмотрены в [51]. После того как очередной узел найден из вышеуказанных условий, его координаты заменяются на новые. На границе были предложены аналогичные алгоритмы для расчета узлов из условия невырожденности сетки и минимума функционала. Порядок пересчета узлов может быть различным (см. [51]), один из вариантов расчета по окаймляющим поверхностям и линиям предложен там же. Способы вычисления дискретных функционалов также предложены и описаны в [51]. Приводятся примеры расчетов.

Некоторые недавние достижения в развитии оптимизационных алгоритмов построения сеток можно найти в работах [60–65]. Однако большинство этих работ посвящены разработке алгоритмов для построения неструктурированных сеток, алгоритмы для построения структурированных сеток тестировались на двумерных примерах, для трехмерного случая в качестве примеров применения рассматривались области с конфигурациями без особенностей и более простых геометрий, чем те, которые требуются для [25] и будут представлены далее в работе.

¹⁹При движении узлов внутри восьмигранника не меняются знаки объемов угловых тетраэдров, соответствующих коэффициентам $\alpha_{i_1 i_2 i_3}$. В случае положительности объемов выполняется тест положительности объемов десяти тетраэдров, соответствующих двенадцатигранникам на рис. 1, — тест для проверки невырожденности ячеек.

Свойство консервативности алгоритмов. Одно из требований [25] к алгоритмам построения сеток — это свойство сохранять объем области как локально внутри ячеек, так и области в целом, называемое свойством консервативности. Недостатком алгоритма [51] являлось то, что движение узлов на границе областей вращения осуществлялось по линейчатым поверхностям граней начальной сетки. В результате граничные узлы могли лежать вблизи поверхностей вращения, но не принадлежать им, что могло приводить к потере точности при аппроксимации краевых условий и потере объема области как локально внутри ячеек, так и области в целом, т. е. свойства консервативности, поэтому был разработан алгоритм коррекции узлов сетки к поверхностям вращения [66; 67]. Идея алгоритма состоит в следующем. Граничные узлы (не лежащие на плоских гранях) проецируются лучом, идущим в радиальном к оси вращения направлении, на соответствующую поверхность вращения. Какая поверхность вращения выбирается для проецирования узла, определяется третьей координатой узла, соответствующей оси вращения. Каждый элемент образующей кривой имеет свой диапазон изменения третьей координаты. Для каждой грани, формируемой поверхностями вращения, определяются номера элементов, формирующих грань. Интервал, который включает в себя третью координату узла, определяет номер элемента, порождающего соответствующую поверхность вращения. Благодаря этому алгоритму движение узлов осуществляется вдоль поверхностей вращения, и алгоритм оптимизации становится консервативным; таким образом реализуется свойство консервативности.

Применение созданных генераторов сеток позволило существенно повысить эффективность математического моделирования многокомпонентных сред: сократить время расчетов на один, а в некоторых задачах на два порядка по сравнению с традиционными алгоритмами построения сеток.

Когда была разработана технология построения сеток для объемов вращения, началось ее дальнейшее развитие для более сложных конструкций, необходимых для математического моделирования многокомпонентных сред [25], а затем и с целью реализации третьего критерия оптимальности сеток — критерия адаптации. При разработке алгоритмов и соответствующих технологий основополагающей конструкцией являлись объем вращения и алгоритмы построения сеток, созданные для него. Были разработаны три различные технологии для трех различных видов областей: области, полученные деформацией областей вращения, другими областями вращения; области, образованные поверхностями вращения с параллельными осями вращения (обобщения объемов вращения), и области, полученные деформацией областей вращения обобщениями объемов вращения.

Технология для построения сеток в объемах, полученных деформацией объемов вращения другими объемами вращения. Идея алгоритма предложена авторами [25]. Первая формулировка задачи для разработки алгоритма построения сеток приводится в [68]. Деформация объема вращения (основного или деформируемого тела) осуществляется другим объемом вращения (вспомогательным или деформирующим телом). Как результат такого воздействия основное тело деформируется: граница основного тела приобретает форму вспомогательного в месте деформации, форма другой части основного тела (не подвергшейся деформации) не меняется. Деформирующее тело предполагается твердым, т. е. оно не деформируется, а деформируется основное тело. Сетку требуется построить в деформированном теле. Так как технология для построения сеток уже была создана для объема вращения, привлекательным было применить ее для деформированного объема вращения, а не разрабатывать новую технологию, которая неочевидна в общем случае, особенно для стадий описания геометрии (деформированных граней), конфигурации области и построения начальной сетки. Естественным было построить сетку в основном объеме вращения, а затем постепенно (не допуская вырождений в сетке) ее деформировать, перестраивая сетку в соответствии с желаемыми требованиями на каждом шаге деформации. Такой алгоритм является нестационарным алгоритмом построения сеток, в котором меняется граница объема вращения в соответствии с процессом деформации. Нестационарный алгоритм представляет собой итерационную процедуру, где на

каждой итерации граница основного тела деформируется под давлением вспомогательного тела. Вспомогательное тело двигается внутрь основного тела, граничные узлы основного тела, попадающие во вспомогательное тело, проецируются на деформирующую поверхность, и затем осуществляется оптимизация деформированной сетки в соответствии с вариационной техникой [2;50;51]. Заметим, что аналогичный алгоритм может быть разработан и для построения неструктурированных сеток. Такой алгоритм позволяет строить сетки в очень сложных геометриях. Для этого нет необходимости описывать сложную геометрию деформированной области, что неочевидно в общем случае. Это нужно сделать только для объемов вращения основного и деформирующего тел путем задания образующих кривых для них (см., например, рис. 4, 5 слева), что значительно проще²⁰. Такой подход позволяет исключить некоторые другие этапы традиционной генерации сеток вариационными методами, например такие, как построение начальной сетки для деформированного тела.

Предложенный алгоритм построения сеток относится к подходу построения подвижных сеток, в котором сетка движется, подстраиваясь обычно под процесс физической задачи: изменяющуюся геометрию или другие физические параметры. В предложенном алгоритме сетка автоматически подстраивается под меняющуюся геометрию области. Проблемы построения подвижных сеток рассматриваются многими авторами (см., например, обзор и основополагающие принципы в [69]; обзор, примеры и сравнение различных методов подвижных сеток, примененных к трехмерной оптимизации в [70]; методы подвижных сеток в [71; 72]). Отличительная особенность описываемого метода — это реализация оригинального вариационного подхода [1; 2] в нестационарной процедуре. Процедура организована без связи с решением какой-либо физической задачи, но с целью построить сетку в нужном деформированном объеме для моделирования процессов многокомпонентной гидродинамики [25]. Процедура итерационная и на каждой итерации комбинирует деформацию и оптимизацию сетки в областях сложных геометрий с конфигурациями, имеющими особенности, описанные выше. Основная сложность нестационарных алгоритмов (см., например [73]) заключается в том, чтобы обеспечить построение сеток, удовлетворяющих нужным требованиям автоматически без вмешательства пользователя. Поэтому предложенный алгоритм — это решение сложной проблемы.

Развитие алгоритма началось с рассмотрения случаев деформирующего тела в виде конуса, цилиндра и сферы (см. [74], Н. А. Артемова), так как эти случаи определяют поверхности его границы в общем случае деформирующего тела вращения, а также в более сложном случае, когда деформирующее тело образуется поверхностями вращения с параллельными осями вращения [68;75;76]. Затем автором и Н. А. Артемовой был реализован общий случай деформирующего объема вращения (см. [77]). Нестационарный алгоритм начинается со вспомогательного этапа, в котором 1) анализируется форма деформирующего тела²¹, 2) вспомогательное тело выдвигается из основного²². Затем происходит деформация. Вспомогательное тело начинает двигаться на основное с некоторым шагом. Узлы, попадающие внутрь вспомогательного тела, т. е. в части конуса, цилиндра или сферы, проецируются на их границы, и основное тело в области деформации приобретает форму вспомогательного тела. Так как проверка принадлежности узлов осуществляется для вспомогательного тела, то естественно для упрощения

²⁰При задании образующих рассматриваются случаи элементов кривых в виде отрезков прямых и дуг окружностей, элементы в виде дуг эллипсов не рассматриваются, так как в этом не было необходимости в [25]. Задаются элементы образующей для основного тела и вспомогательного в системах координат с соответствующими названиями. Задаются точка начала координат вспомогательной системы координат в основной системе координат и матрица ее поворота. Эти параметры определяют конечное положение деформирующего тела в основном теле. Задается вектор деформации, указывающий направление давления вспомогательного тела на основное.

²¹В зависимости от типа области, задаваемой образующей, определяются номера и количество элементов, формирующих деформирующую поверхность. Каждый тип элемента порождает часть деформирующего тела, являющуюся частью конуса, цилиндра или сферы. Эти части соединяются вдоль оси вращения.

²²При задании данных указывается конечное положение вспомогательного тела в основном.

алгоритма все проверки проводить во вспомогательной системе координат и осуществлять движение основного тела на вспомогательное, а не наоборот. В этом случае деформирующая поверхность вспомогательного тела не меняет свое положение, а движется основное тело. На этом этапе выбирается такой шаг деформации (движения основного тела), чтобы деформация не затрагивала (вспомогательное тело после движения основного тела не касалось) внутренних узлов сетки основного тела. Граничные узлы основного тела, подвергшиеся деформации (попавшие внутрь вспомогательного тела), перемещаются на деформирующую поверхность вспомогательного тела: проецируются по алгоритмам автора [66; 67] на эту поверхность. Затем осуществляются обратное преобразование координат в основную систему координат и этап оптимизации [51]. Для того чтобы оптимизация [51] была консервативной, автором разработан алгоритм проецирования узлов для деформированных тел вращения [78]. В нем деформированные узлы проецируются на поверхности вращения вспомогательного тела, другие — на поверхности вращения основного тела. Развитие нестационарного алгоритма описано А. И. Анучиной, Н. А. Артемовой, В. А. Гордейчуком, автором в [76; 79–81], а во всех подробностях этот алгоритм и соответствующая программа, написанная на языке C++, объединяющая в себе алгоритмы и программы для деформации сетки (Н. А. Артемовой) и оптимизации сетки (автора) представлены автором, Н. А. Артемовой в [82].

Технология для построения сеток в обобщениях объемов вращения — объемах, образованных поверхностями вращения с параллельными осями вращения. Такие объемы образуются двумя гранями криволинейного шестигранника (соответствующими значениям $k = 0, L - 1$), состоящими из поверхностей вращения, и двумя (или четырьмя) гранями, лежащими в плоскости задания образующей²³ (см. рис. 5). Для задания каждой грани из поверхностей вращения задаются левая U_L и правая U_R образующие, состоящие из элементов, и набор параллельных осей к ним (см. рис. 5 слева, цифры на рисунке обозначают соответствие осей и элементов). Элементы вращаются относительно соответствующих осей на 180° , образуя поверхности вращения, пересекающиеся друг с другом²⁴. Для разработки технологии построения сеток в таких областях потребовалось создать алгоритмы описания образующих и конфигураций областей (Т. Н. Бронина), построения начального приближения (Т. Н. Бронина) и для оптимизации сеток модернизировать алгоритм [51], создав для него для обеспечения консервативности оптимизации алгоритм коррекции граничных узлов к соответствующим поверхностям вращения [75] (автор). Краткое описание развития указанных алгоритмов можно найти в [76; 80; 83] (автор).

Технология для построения сеток в объемах, полученных деформацией объемов вращения обобщениями объемов вращения. Развитие технологии осуществляется на основе технологии для объемов, полученных путем деформации объемов вращения другими объемами вращения, но в ней роль вспомогательного тела вместо объема вращения выполняет обобщение объема вращения. Для создания технологии были модернизированы этапы задания начальных данных, алгоритмы деформации и оптимизации, а также проецирования узлов²⁵. Технология еще развивается и оптимизируется, но первые результаты уже опубликованы автором, Н. А. Артемовой в [84]. Приведем пример расчета сеток в таких областях.

²³В рассматриваемом примере еще две грани являются также поверхностями вращения.

²⁴Левая и правая части образующей для каждой из двух граней, состоящих из поверхностей вращения, ограничивают замкнутую плоскую область, которая может быть поделена на подобласти ортогональными проекциями линий пересечения поверхностей вращения. Каждая из граней, $k = 0, L - 1$, образуется теми частями поверхностей вращения, ортогональные проекции которых совпадают с возникающими подобластями (см. описание в [75]).

²⁵На этапе задания начальных данных по-другому задаются образующие объема (левая и правая и оси к ним). На этапе деформации для деформированных узлов условия принадлежности телам вращения (конусу, цилиндру и сфере) могут выполняться одновременно для двух тел, соответствующих разным типам элементов образующих. В этом случае выбор проекции на деформирующую поверхность осуществляется из условия наименьшего расстояния от деформированного узла до проекции.

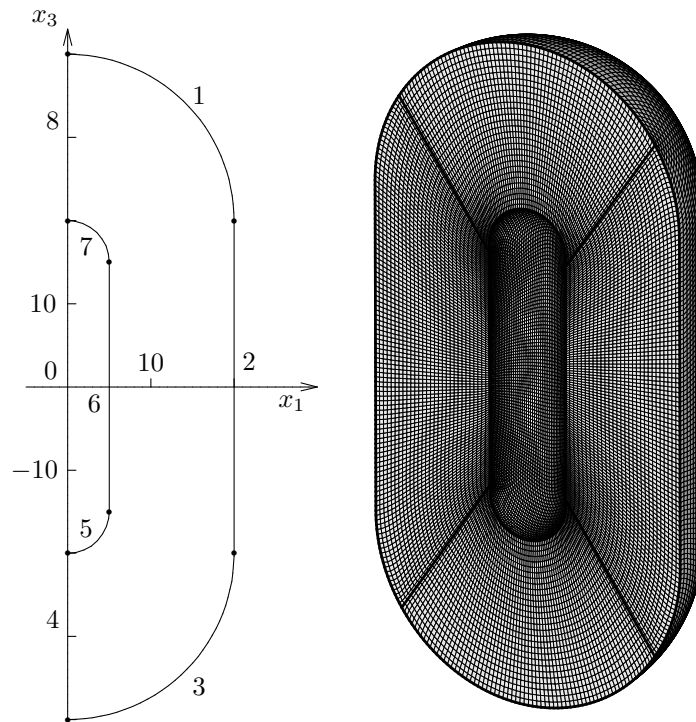


Рис. 4. Образующая и сетка основного тела.

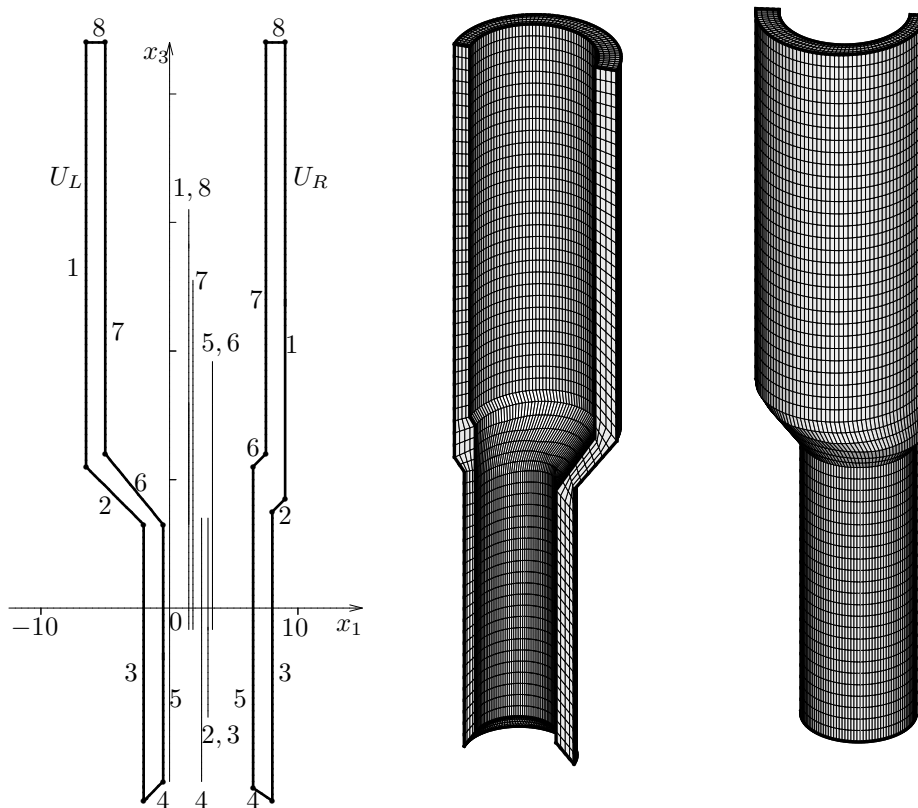


Рис. 5. Образующая и сетка вспомогательного тела.

Для расчета, так же, как и для технологии в случае деформации объемом вращения, задается образующая основного тела (см. рис. 4 слева), на этом этапе задается конфигурация основного объема, которая в процессе расчета не меняется. Строится начальная сетка для

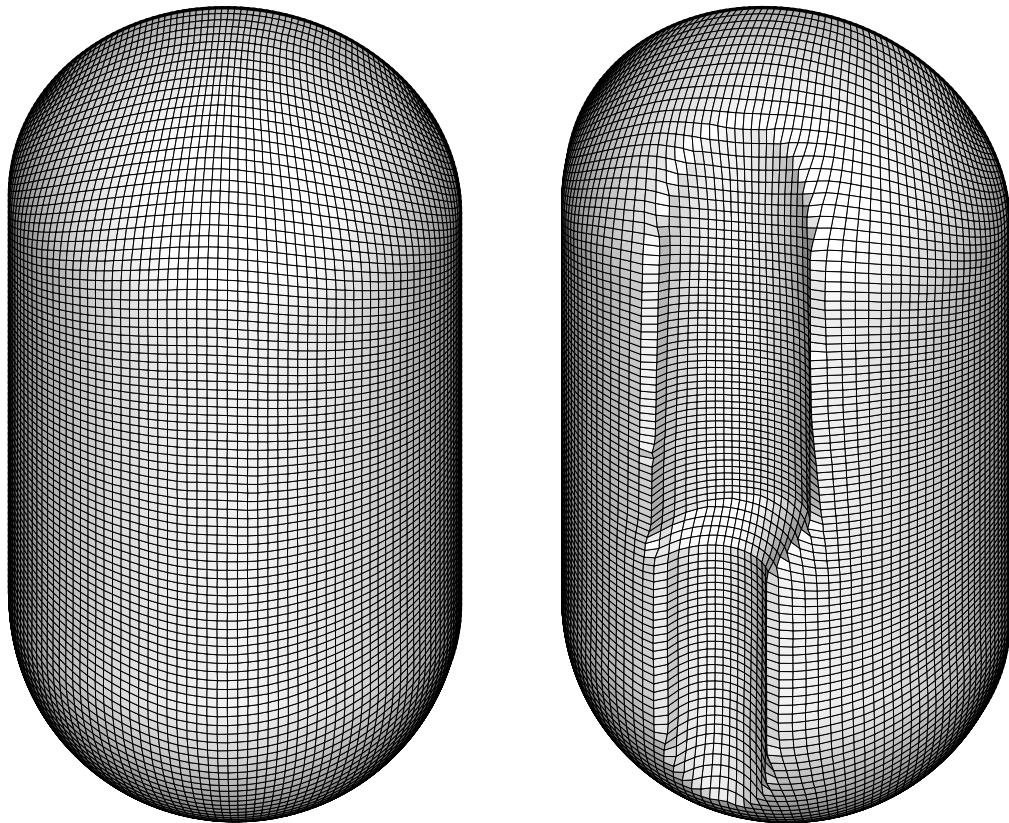


Рис. 6. Сетки основного тела до и после деформации (вид сзади).

процесса деформации — это оптимальная сетка для основного объема вращения (см. рис. 4 справа). Задаются вспомогательное тело (см. рис. 5 по центру и справа) также с помощью образующих (см. рис. 5 слева), задается вектор деформации и необходимые параметры для осуществления преобразования координат вспомогательной системы для определения конечного положения вспомогательного тела в основном (см. рис. 6 справа), где изображена построенная оптимальная сетка для деформированного тела.

Реализация критерия адаптации (А). Развитие технологии осуществляется не только в направлении усложнения конструкций для расчета сеток, но и усложнения вида минимизируемого функционала. Автором были разработан алгоритм оптимизации и соответствующая программа, когда к минимизируемому функционалу (2.2) добавляется третье слагаемое — мера адаптации D_A сетки под заданную функцию $\Phi = \Phi(\mathbf{x}) = \Phi(x_1, x_2, x_3)$ (мера сгущения узлов там, где функция Φ быстро меняется). Функционал для реализации критерия адаптации имеет вид

$$D = D_P + A_O D_O + A_A D_A, \quad (2.7)$$

где D_P , D_O определены в (2.3), (2.4), а D_A определяется следующим образом:

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

Здесь величина $\Phi(\mathbf{x}_{ijk})$ — значение в узле $\mathbf{x}_{ijk} = H_{ijk}$ заданной функции $\Phi(x_1, x_2, x_3)$, под которую осуществляется адаптация (такая функция обычно называется мониторной). Вариации мониторной функции для исключения вырождений в алгоритмах построения сеток заменяют

весовыми функциями, большими нуля. Отметим, что функционал адаптации приведен в [1; 2], а предложен еще ранее, в 1985 г. (см. [1]). Его непрерывный аналог приведен в обзоре [86] со ссылкой на работу [1]. Отметим работы, в которых осуществлены его трехмерные реализации для расчета сеток в объемах, ограниченных поверхностями вращения. Алгоритм оптимизации трехмерного функционала описан в [85]. Разработаны реализации критерия адаптации в физической области G и в вычислительной области P . Отличие алгоритма [85] от алгоритма [51] — это конструкция дискретного функционала, содержащего третье слагаемое, отвечающее за адаптацию, и в соответствии с ним новый способ построения допустимого множества для его минимизации, основанный на реализации критерия адаптации вдоль каждого из координатных направлений $[I_m, I_p]$, $[J_m, J_p]$, $[K_m, K_p]$ шаблона, изображенного на рис. 3*b*. В [51] в основе построения допустимого множества реализуется критерий равномерности. Критерий адаптации реализован для объемов вращения [80], объемов вращения, деформированных другими объемами вращения [81; 85], а также для обобщений объемов вращения [83]. Приводятся примеры адаптации как под мониторинговую функцию [80; 85], так и под ее производные, а также их комбинацию [81; 83].

Алгоритм для тестирования структурированной сетки из шестигранных ячеек.

Для тестирования построенной сетки на невырожденность и выявление различных типов шестигранных ячеек были получены критерии [40], а затем автором описаны соответствующий алгоритм и программа тестирования сеток [49]. Этот алгоритм представляет собой следующую процедуру. Проверяются условия положительности якобиана трилинейного отображения для каждой ячейки. Проверяются необходимые условия, достаточные условия. Сначала проверяются необходимые условия, если они не выполняются, то ячейка вырождена. Если выполняются, проверяются достаточные условия. Если они выполняются, то ячейка невырождена. Если достаточные условия не выполняются, тогда может использоваться численный алгоритм для проверки якобиана трилинейного отображения на положительность (см. [31; 49]). Однако полученные достаточные условия достаточно общие, и при установлении невырожденности сеток, построенных на практике, использовались именно достаточные условия²⁶.

Для вырожденных ячеек осуществляется дальнейшая диагностика с использованием критериев вырождения шестигранных ячеек в многогранники с меньшим числом граней: призмы с треугольным основанием, пирамиды с четырехугольным основанием, тетраэдры, многогранники, представляющие собой объединение двух призм²⁷. Анализ вырождений осуществляется на основе вырождений якобиана в вершинах ячеек. Выдаются индексы ячеек. Выявляются другие виды вырождения (проверяются необходимые условия положительности якобиана на ребрах, внутри граней и внутри ячеек), объединенные в недопустимые типы вырождения. Алгоритм выявляет индексы ячеек и определяет тип вырождения.

Для невырожденных ячеек выявляется, выкручены ли они по отношению к диагональным тетраэдрам. Проверяется знакоопределенность объемов диагональных тетраэдров $\bar{\kappa}_{000}$, $\bar{\kappa}_{111}$. Если хотя бы один из объемов отрицательный (см. рис. 1), то ячейка называется выкрученной. Такие ячейки являются экзотическими по форме и могут быть недопустимыми в расчетах (см. [44; 45]).

Заключение

В статье представлен обзор развития вариационного подхода построения оптимальных сеток [1; 2] за период более полувека. Разработки, проведенные в рамках подхода, нашли свое применение в моделировании процессов гидродинамики в областях геометрически сложной

²⁶Случаев использования численного алгоритма при проверке невырожденности сеток зафиксировано не было. Этот алгоритм использовался только для проверки невырожденности ячеек, построенных с помощью случайных чисел.

²⁷Эти виды вырождения могут быть допустимыми в расчетах. В этом случае они возникают на границах областей.

формы. Концепция вариационного подхода естественным образом позволяет реализовать его для построения подвижных сеток и конструировать инструмент для построения сеток в областях очень сложной геометрии. Примером тому являются представленные в работе алгоритмы для построения сеток в телах, полученных деформациями тел вращения. При этом нет необходимости описывать сложную геометрию деформированного тела, а также его конфигурацию, достаточно это сделать для тела вращения путем описания образующей кривой. Нет необходимости строить начальную сетку для тела сложной геометрии, это нужно сделать только для тела вращения, что существенно упрощает процесс построения сетки.

Дальнейшие направления исследований связаны с улучшением качества построенных сеток и оптимизацией алгоритмов и программ. Примеры таких разработок уже имеются. Так, фиксированием отдельных точек образующей можно более точно описывать геометрию рассматриваемых тел (см. алгоритмы с фиксированием в геометрии отдельных точек образующей в [83], линий вращения, соответствующих точкам образующей в [81], вершины конуса при деформации конусом [82]). В оптимизации программ реализована возможность применять оптимизацию сетки только во фрагменте, соответствующем деформации, который в процессе деформации может меняться, а на некоторых итерациях осуществлять оптимизацию во всей сетке. Такая реализация существенно сокращает время расчета сетки и повышает эффективность алгоритма и программы. Возможны исследования с целью выбора новых конструкций функционалов.

Автор выражает признательность Н. А. Артемовой за проведение расчетов сеток и подготовку по ним рис. 4, 5, 6, а также за помощь в подготовке статьи к публикации.

Приложение. Теоремы о гомеоморфизмах

Сначала приведем формулировку теоремы из [33].

Теорема 1. Пусть P и G — ограниченные связные гомеоморфные области. Пусть область P “разбита” на непересекающиеся выпуклые подобласти P_i ($i = 1, \dots, m$) так, что $\bar{P} = \bigcup_{i=1}^m \bar{P}_i$. Пусть $\mathbf{x} : \bar{P} \rightarrow \bar{G}$ — непрерывное отображение, являющееся гладким на каждом \bar{P}_i . Сужение отображения \mathbf{x} на \bar{P}_i обозначим через \mathbf{x}_i ($i = 1, \dots, m$). Пусть \mathbf{x} гомеоморфно отображает ∂P на ∂G , и для любого $i = 1, \dots, m$ его сужение \mathbf{x}_i гомеоморфно отображает ∂P_i на $\mathbf{x}(\partial P_i)$ и, кроме того,

$$\det \mathbf{x}'(\xi) > 0 \quad (\xi \in \bar{P}_i, i = 1, \dots, m).$$

Тогда \mathbf{x} является гомеоморфизмом из \bar{P} на \bar{G} .

Затем приведем обобщения из [47] для теоремы из [33].

Обобщения для теоремы о гомеоморфизмах:

- ячейки P_i ($i = 1, \dots, m$) могут иметь произвольную форму (не требуются выпуклость, плоские грани и др.);
- не требуется гладкость отображения \mathbf{x} (достаточно непрерывности);
- условие (“невырожденности”, а в случае гладкого отображения положительность якобиана отображения) налагается на поведение \mathbf{x} только внутри ячеек и граней, а не на их замыкании;
- не требуется инъективность \mathbf{x} на границах ячеек;
- достаточно лишь наличия одной точки с одноэлементным прообразом (не требуется, чтобы \mathbf{x} гомеоморфно отображало границу области на границу);
- отображение определено на произвольном топологическом многообразии (а не на замкнутой области в \mathbb{R}^n) и действует в произвольное топологическое многообразие (а не в исходную P или гомеоморфную исходной область G).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Serezhnikova T.I., Sidorov A.F., Ushakova O.V.** On one method of construction of optimal curvilinear grids and its applications // *Sov. J. Numer. Anal. Math. Modelling*. 1989. Vol. 4, № 2. P. 137–155. doi: 10.1515/rnam.1989.4.2.137
2. **Khairullina O.B., Sidorov A.F., Ushakova O.V.** Variational methods of construction of optimal grids // *Handbook of grid generation* / eds. J.F. Thompson, B.K. Soni, N.P. Weatherill. Boca Raton; London; NY; Washington: CRC Press, 1999. P. 36–1–36–25.
3. **Сидоров А.Ф.** Об одном алгоритме расчета оптимальных разностных сеток // *Тр. Математического 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 атом. науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов*. 1998. Вып. 2. С. 50–59.
5. **Широковская О.С.** Замечание к статье А.Ф. Сидорова “Об одном алгоритме расчета оптимальных разностных сеток” // *Журн. вычисл. математики и мат. физики*. 1969. Т. 9, № 2. С. 468–469.
6. **Тихонов А.Н., Самарский А.А.** Однородные разностные схемы на неравномерных сетках // *Журн. вычисл. математики и мат. физики*. 1985. Т. 2, № 5. С. 812–832.
7. **Емельянов К.В.** Применение оптимальных разностных сеток к решению задач с сингулярным возмущением // *Журн. вычисл. математики и мат. физики*. 1994. Т. 34, № 6. С. 936–943.
8. **Emel'yanov K.V.** On optimal grids and their application to the solution of problems with a singular perturbation // *Russ. J. Numer. Anal. and Math. Modelling*. 1995. Vol. 10, № 4. P. 299–310.
9. **Сидоров А.Ф.** Об одном алгоритме расчета криволинейных сеток, близких к равномерным // *Числ. методы механики сплошной среды*. 1977. Т. 8, № 4. С. 149–156.
10. **Khairullina O.B.** Method of constructing block regular optimal grids in two-dimensional multiply-connected domains of complex geometries // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*. 1996. Vol. 11, no. 4. P. 343–358.
11. **Sidorov A.F., Khairullina O.B., Khairullin A.F.** Parallel algorithms of generation of optimal multi-block-structured two-dimensional and three-dimensional grids of large size // *Numerical grid generation in comput. field simulation* / eds. M. Cross, B.K. Soni, J.F. Thompson, J. Hauser, P.R. Eiseaman. Mississippi State: ISGG, 1998. P. 759–769.
12. **Артемова Н.А., Хайруллин А.Ф., Хайруллина О.Б.** Параллельный алгоритм расчета оптимальных сеток // *Вычисл. технологии*. 2001. Т. 6, № 2. С. 3–13.
13. **Ушакова О.В.** ЛАДА — экономичный алгоритм и программа построения двумерных криволинейных оптимальных адаптивных сеток в односвязных областях геометрически сложной формы // *Вопросы атом. науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов*. 1994. Вып. 3. С. 47–56.
14. **Ушакова О.В.** Параллельный алгоритм и программа построения оптимальных адаптивных сеток // *Алгоритмы и програм. средства парал. вычислений: сб. науч. тр. / ИММ УрО РАН*. 1995. С. 182–194.
15. **Ushakova O.V.** Algorithm of two-dimensional optimal grid generation // *Numerical grid generation in comput. field simulation: Proc. 5th intern. conf.* / eds. B.K. Soni, J.F. Thompson. Mississippi State: Mississippi State University, 1996. Vol. 1. P. 37–46.
16. **Рвачев В.Л.** Теория R-функций и некоторые ее приложения. Киев: Наукова думка, 1982.
17. **Гасилова И.А.** Алгоритм автоматического построения начального приближения криволинейной сетки для областей звездного типа // *Вопросы атом. науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов*. 1994. Вып. 3. С. 33–40.
18. **Сидоров А.Ф.** Примеры точного построения геометрически оптимальных двумерных сеток // *Вопросы атом. науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов*. 1994. Вып. 4. С. 18–22.
19. **Рубина Л.И.** Примеры точного решения задачи построения трехмерных оптимальных сеток // *Вопросы атом. науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов*. 1995. Вып. 4. С. 37–41.
20. **Хайруллина О.Б.** Расчет стационарных дозвуковых вихревых потоков идеального газа в осесимметричных каналах сложных геометрий // *Вопросы атом. науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов*. 1990. Вып. 3. С. 32–39.
21. **Ахмадеев В.Ф., Сидоров А.Ф., Спиридонов Ф.Ф., Хайруллина О.Б.** О трех методах численного моделирования дозвуковых течений в осесимметричных каналах сложной формы // *Моделирование в механике*. 1990. Т. 4 (21), № 5. С. 15–25.

22. **Хайруллина О.Б.** К расчету вихревых течений газа в каналах сложных конфигураций // Прикл. механика и техн. физика. 1996. Т. 37, № 2. С. 103–108.
23. **Khairullina O.B.** Modelling subsonic vortex gas flows in channels of complex geometries // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. Vol. 13, no. 3. 1998. P. 191–219.
24. **Kokovikhina O.V., Sidorov A.F., Khairullina O.B.** Mathematical modelling of gas-dynamic and acoustic effects in combustion chambers // Theory of combustion of powder and explosives / ed. A.M. Lipanov. NY: Nova Science, 1996. P. 191–202.
25. **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. O.V. Ushakova. NY: Nova Science, 2007. P. 337–380.
26. **Кошкина Т.Н., Сидоров А.Ф.** Об одном геометрическом способе построения трехмерных разностных сеток // Числ. и аналит. методы решения задач механики сплошной среды: сб. тр. Свердловск: Уральский научный центр, Академия наук СССР, 1981. С. 91–100.
27. **Шабашова Т.И.** О построении оптимальных криволинейных координатных сеток в трехмерных областях // Числ. методы механики сплошной среды. 1986. Т. 17, № 1. С. 144–155.
28. Управляемый термоядерный синтез / под ред. Дж. Киллина. М.: Мир. 1980.
29. **Ushakova O.V.** Conditions of nondegeneracy of three-dimensional cells. A formula of a volume of cells // SIAM J. Sci. Comp. 2001. Vol. 23, iss. 4. P. 1289–1273.
30. **Ушакова О.В.** Условия невырожденности трехмерных ячеек. Формула для объема ячеек // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2001. Т. 41, № 6. С. 881–894.
31. **Ушакова О.В.** О невырожденности трехмерных сеток // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2004. Т. 13, № 1. С. 78–100.
32. **Johnen A., Weill J.C., Remacle J.F.** Robust and efficient validation of the linear hexahedral element // Procedia Eng. 2017. Vol. 203. P. 271–283.
33. **Бобылев Н.А., Иваненко С.А., Казунин А.В.** О кусочно-гладких гомеоморфных отображениях ограниченных областей и их приложениях к теории сеток // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2003. Т. 43, № 6. С. 808–817.
34. **Farin G.** Curves and surfaces for computer aided geometric design, A practical guide. Fourth edition. NY: Acad. Press, 1997.
35. **Knabner P., Summ G.** The invertibility of the isoparametric mapping for pyramidal and prismatic finite elements // Numer. Math. 2001. Vol. 88. P. 661–681.
36. **Knabner P., Korotov S., Summ G.** Conditions for the invertibility of the isoparametric mapping for hexahedral finite elements // Finite. Elem. Anal. Des. 2003.
37. **Vavasis S.A.** A Bernstein–Bezier sufficient condition for invertibility of polynomial mapping functions: e-resource (November 3, 2001). URL: <http://www.cs.cornell.edu/home/vavasis>.
38. **Бронина Т.Н., Гасилова И.А., Ушакова О.В.** Алгоритмы для построения трехмерных структурированных сеток // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2003. Т. 43, № 6. С. 875–883.
39. **Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Mastine C.W.** Numerical grid generation: foundation and applications. NY: Elsevier, 1985.
40. **Ушакова О.В.** Классификация шестигранных ячеек // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 2008. Т. 48, № 8. С. 1426–1428.
41. Advances in grid generation / ed. O.V. Ushakova. NY: Nova Science, 2007. 430 p.
42. **Artyomova N.A., Khairullin A.F., Khairullina O.B.** Generation of curvilinear grids in multiply connected domains of complex topology // Advances in grid generation / ed. O.V. Ushakova. NY: Nova Science, 2007. P. 161–188.
43. **Мартюшов С.Н.** Методика “МОДАМС” для расчета задач обтекания методом конечных объемов // Вопросы атом. науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1998. Вып. 2. С. 49–56.
44. **Azarenok B.N.** Conservative remapping on hexahedral meshes // Advances in grid generation / ed. O.V. Ushakova. NY: Nova Science, 2007. P. 337–379.
45. **Азаренко Б.Н.** Об одном методе консервативной интерполяции на гексаэдральных сетках // Мат. моделирование. 2008. Т. 20, № 2. С. 59–75.
46. **Dukowicz J.K., Padial N.T.** REMAP3D: A conservative three-dimensional remapping code: Technical Report. Oak Ridge: Technical Information Center Oak Ridge Tennessee, 1991. NTIS Issue Number 199201. 38 p.

47. Прохорова М.Ф. Проблемы гомеоморфизма, возникающие в теории построения сеток // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2008. Т. 13, № 1. С. 112–129.
48. Ushakova O.V. Nondegeneracy tests for hexahedral cells // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 2011. Vol. 200, iss. 17–20. P. 1649–1658.
49. Ushakova O.V. Criteria for hexahedral cell classification // Appl. Numer. Math. 2018. Vol. 127. P. 18–39. doi: 10.1016/j.apnum.2017.12.012.
50. Брони́на Т.Н. Алгоритм построения начальных трехмерных структурированных сеток для областей вращения // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2008. Т. 14, № 1. С. 3–10.
51. Ушакова О.В. Алгоритмы оптимизации трехмерных сеток для областей вращения // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2008. Т. 14, № 1. С. 150–180.
52. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М.: Наука, 1976. 400 с.
53. Knupp P.M., Steinberg S. Fundamentals of grid generation. Boca Raton, FL: CRC Press, 1994.
54. Liseikin V.D. Grid generation methods. Berlin: Springer, 1999.
55. Курант Р. Уравнения с частными производными. М.: Мир, 1964.
56. Сидоров А.Ф., Шабашова Т.И. Об одном методе расчета оптимальных разностных сеток для многомерных областей // Числ. методы механики сплошной среды. 1981. Т. 12, № 5. С. 106–123.
57. Ушакова О.В. Теорема существования и единственности решения краевой задачи построения одномерных оптимальных адаптирующихся сеток // Моделирование в механике. 1989. Т. 3, № 2. С. 134–141.
58. Иваненко С.А., Чарахчьян А.А. Криволинейные сетки из выпуклых четырехугольников // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1988. Т. 28, № 4. С. 503–514.
59. Ivanenko S.A. Selected chapters on grid generation and applications. М.: Dorodnicyn Computing Centre of the Russian Academy of Sciences, 2004.
60. Dobrev V., Knupp P., Kolev T., Mittal K., Tomov V. hr-Adaptivity for nonconforming high-order meshes with the target matrix optimization paradigm // Eng. Comput. 2022. Vol. 38. P. 3721–3737 doi: 10.1007/s00366-021-01407-6
61. Dobrev V., Knupp P., Kolev T., Mittal K., Tomov V. The target-matrix optimization paradigm for high-order meshes // SIAM J. Sci. Comput. 2019. Vol. 1. P. B50–B68. doi: 10.1137/18M1167206
62. Mittal K., Fischer P. Mesh smoothing for the spectral element method // J. Sci. Comput. 2019. Vol. 78. P. 1152–1173. doi: 10.1007/s10915-018-0812-9
63. Turner M., Peiro J., Moxey D. Curvilinear mesh generation using a variational framework // Comput.-Aided Des. 2018. Vol. 103. P. 73–91. doi: 10.1016/j.cad.2017.10.004
64. Xu K., Gao X., Chen G. Hexahedral mesh quality improvement via edge-angle optimization // Comput. Graph. 2018. Vol. 70. P. 17–27. doi: 10.21203/rs.3.rs-586657/v1
65. Zhu Y., Bridson R., Kaufman D.M. Blended cured quasi-newton for distortion optimization // ACM Trans. Graph. 2018. Vol. 37, № 4. doi: 10.1145/3197517.3201359
66. Ушакова О.В. Алгоритм коррекции сетки к области вращения // Вопр. атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов. 2016. Вып. 1. С. 16–27.
67. Ушакова О.В. Применение алгоритма коррекции сетки к области вращения // Вопр. атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов. 2016. Вып. 2. С. 31–37.
68. Ushakova O.V., Artyomova N.A., Bronina T.N., Anuchina A.I., Gordeichuk V.I. Grid generation in deformed volumes of revolution // Proc. Internat. conf. “Advanced mathematics, computations and applications 2015” (AMCA-2015), dedicated to the 90th anniversary of the birthday of academician Marchuk G.I. / Instit. Comp. Mathematics and Math. Geophysics SB RAS, Akademgorodok. Novosibirsk: Abvey, 2015. P. 782–788.
69. Zegeling P.A. Moving grid techniques // Handbook of grid generation / eds. J.F. Thompson, B.K. Soni, N.P. Weatheril. Boca Raton; London; NY; Washington: CRC Press, 1999. P. 37–1–37–22.
70. Staten M.L., Owen S.J., Shontz S.M., Salinger A.G., Coffey T.S. A comparison of mesh morphing methods for 3D shape optimization // Proc. of the 20th Internat. meshing roundtable / ed. W.R. Quadros. Berlin; Heidelberg: Springer, 2011. P. 293–311.
71. Immonen E. A parametric morphing method for generating structured meshes for marine free surface flow applications with plane symmetry // J. Comput. Des. Eng. 2019. Vol. 6. P. 348–353. doi: 10.1016/j.jcde.2018.11.002

72. **Biancolini M.E., Chiappa A., Giorgetti F., Porziana S., Rochette M.** Radial basis functions mesh morphing for the analysis of cracks propagation // *Procedia Struct. Integr.* 2018. Vol. 8. P. 433–443.
73. **Прокопов Г. Р.** Moving mesh calculation in unsteady two-dimensional problems // *Advances in grid generation* / ed. O.V. Ushakova. NY: Nova Science, 2007. P. 127–160.
74. **Артемова Н.А.** Нестационарный алгоритм построения структурированных сеток в деформированных областях // *Вопр. атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов.* 2018. Вып. 4. С. 76–86.
75. **Ушакова О.В.** Алгоритм коррекции сетки к области, образованной поверхностями вращения с параллельными осями вращения // *Вопр. атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов.* 2018. Вып. 1. С. 30–41.
76. **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: Proc. of the 9th international conference (NUMGRID 2018 / Voronoi 150, Celebrating the 150th anniversary of G.F. Voronoi)* / eds. V.A. Garanzha, L. Kamenski, H. Si. Ser. Lect. Notes Comput. Sci. Eng. 2019. Vol. 131. P. 281–292.
77. **Артемова Н.А., Ушакова О.В.** О развитии алгоритма построения сеток в деформированных телах вращения для случая их деформации телами вращения, образованными несколькими поверхностями // *Вопр. атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов.* 2020. Вып. 4. С. 86–96.
78. **Ушакова О.В.** Алгоритм коррекции сетки к деформированной области вращения // *Вопр. атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов.* 2017. Вып. 2. С. 53–65.
79. **Anuchina A.I., Artyomova N.A., Gordeychuck V.A., Ushakova O.V.** The algorithm for generation of structured grids in deformed volumes of revolution // *J. Phys. Conf. Ser.* 2019. Vol. 1392. Article no. 012029. doi: 10.1088/1742-6596/1392/1/012029
80. **Anuchina A.I., Artyomova N.A., Gordeychuck V.A., Ushakova O.V.** On the development of the grid generation technology for constructions bounded by the surfaces of revolutions // *AIP Conf. Proc.* 2020. Vol. 2312. Article no. 050002. doi: 10.1063/5.0035688
81. **Artyomova N.A., Ushakova O.V.** About grid generation in constructions bounded by the surfaces of revolution // *J. Phys. Conf. Ser.* 2021. Vol. 2099. Article no. 012018 doi: 10.1088/1742-6596/2099/1/012018
82. **Ushakova O.V., Artyomova N.A.** Non-stationary grid generation algorithm for deformed volumes of revolution // *Mathematics and Computers in Simulation.* 2023. Vol. 203. P. 878–909. doi: 10.1016/j.matcom.2022.07.016
83. **Ушакова О.В.** Реализация критерия адаптации в технологии построения сеток для конструкций, ограниченных поверхностями вращения с параллельными осями вращения // *Сиб. журн. вычисл. математики.* 2023. № 1. С. 93–100. doi: 10.15372/SJNM20230107
84. **Ушакова О.В., Артемова Н.А.** Технологии построения сеток в конструкциях, ограниченных поверхностями вращения с параллельными осями вращения // *Вестн. Башкирск. ун-та.* 2022. Т. 27, № 3. С. 541–546. doi: 10.33184/bulletin-bsu-2022.3.9
85. **Ушакова О.В.** Реализации критерия адаптации в алгоритме построения оптимальных сеток // *Вопр. атомной науки и техники. Сер. Мат. моделирование физ. процессов.* 2021. Вып. 2. С. 80–95.
86. **Лисейкин В.Д.** Обзор методов построения структурированных адаптивных сеток // *Журн. вычисл. математики и мат. физики.* 1996. Т. 36, № 1. С. 3–41.

Поступила 1.03.2023

После доработки 13.03.2023

Принята к публикации 20.03.2023

Ушакова Ольга Васильевна

д-р физ.-мат., наук, ведущий науч. сотрудник

Институт математики и механики им. Н. Н. Красовского УрО РАН

г. Екатеринбург

Уральский федеральный университет

г. Екатеринбург

e-mail: uov@imm.uran.ru

REFERENCES

1. Serezhnikova T.I., Sidorov A.F., Ushakova O.V. On one method of construction of optimal curvilinear grids and its applications. *Soviet Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 1989, vol. 4, no. 2, pp. 137–155. doi: 10.1515/rnam.1989.4.2.137
2. Khairullina O.B., Sidorov A.F., Ushakova O.V. Variational methods of construction of optimal grids. In: *Handbook of grid generation* / eds. J.F. Thompson, B.K. Soni, N.P. Weatherill, Boca Raton, London, NY, Washington: CRC Press, 1999, pp. 36-1–36-25.
3. Sidorov A.F. On an algorithm for computation of optimal difference nets. *Trudy Matematicheskogo Instituta imeni V.A. Steklova*, 1966, vol. 74, pp. 147–151 (in Russian).
4. Potugina I.V. Mastering and developing the methodology of programs for calculating one-dimensional problems of energy release at VNIIEF (1954–1986). *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 1998, iss. 2, pp. 50–59 (in Russian).
5. Shirokovskaya O.S. Some notes on the paper of A. F. Sidorov “An algorithm for the calculation of optimal difference nets”. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1969, vol. 9, iss. 2, pp. 293–295. doi: 10.1016/0041-5553(69)90112-8
6. Tikhonov A.N., Samarskii A.A. Homogeneous difference schemes on non-uniform nets. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1963, vol. 2, iss. 5, pp. 927–953. doi: 10.1016/0041-5553(63)90505-6
7. Emel’yanov K.V. Applying optimal difference grids to problems with singular perturbations. *Zhurnal vychislitel’noi matematiki i matematicheskoi fiziki*, 1994, vol. 34, no. 6, pp. 936–943 (in Russian).
8. Emel’yanov K.V. On optimal grids and their application to the solution of problems with a singular perturbation. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 1995, vol. 10, no. 4, pp. 299–309. doi: 10.1515/rnam.1995.10.4.299
9. Sidorov A.F. On one algorithm for calculating curvilinear grids that are close to uniform. *Chislennyye Metody Mekhaniki Sploshnykh Sredy*, 1977, vol. 8, no. 4, pp. 149–156 (in Russian).
10. 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*, 1996, vol. 11, no. 4, pp. 343–358. doi: 10.1515/rnam.1996.11.4.343
11. Sidorov A.F., Khairullina O.B., Khairullin A.F. Parallel algorithms of generation of optimal multi-block-structured two-dimensional and three-dimensional grids of large size. In: *Numerical grid generation in comput. field simulation* / eds. M. Cross, B.K. Soni, J.F. Thompson, J. Hauser, P.R. Eiseman, Mississippi State: ISGG, 1998, pp. 759–769.
12. Artyomova N.A., Khairullin A.F., Khairullina O.B. Parallel algorithm for calculating optimal grids. *Vychislitel’nye Tekhnologii*, 2001, vol. 6, no. 2, pp. 3–13 (in Russian).
13. Ushakova O.V. Efficient algorithm and program LADA for generation of two-dimensional curvilinear optimal adaptive grids in simply-connected domains of geometrically complex forms. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 1994, iss. 3, pp. 47–56 (in Russian).
14. Ushakova O.V. Parallel algorithm and program for generation of optimal adaptive grids. In: *Algorithms and software for parallel computing*, Sbornik nauchnykh trudov, Yekaterinburg, 1995, pp. 182–194 (in Russian).
15. Ushakova O.V. Algorithm of two-dimensional optimal grid generation. In: *Numerical grid generation in comput. field simulation: proc. 5th intern. conf.* / eds. B.K. Soni, J.F. Thompson, vol. 1, Mississippi State: Mississippi State University, 1996, pp. 37–46.
16. Rvachev V.L. Theory of R-functions and some applications. Kiev: Naukova Dumka, 1982, 552 p. (in Russian).
17. Gasilova I.A. Algorithm of automatic generation of an initial approximation of a grid for star type domains. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 1994, iss. 3, pp. 33–40 (in Russian).
18. Sidorov A.F. Examples of exact construction of geometrically optimal two-dimensional grids. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 1994, iss. 4, pp. 18–22 (in Russian).
19. Rubina L.I. Examples of exact solution of the problem for generation of three-dimensional optimal grids. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 1995, iss. 4, pp. 37–41 (in Russian).

20. Khairullina O.B. Calculation of stationary subsonic vortical flows of ideal gas in symmetric channels of complex geometries. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 1990, iss. 3, pp. 32–39 (in Russian).
21. Ahmadeev V.F., Sidorov A.F., Spiridonov F.F., Khairullina O.B. On three methods of numerical modelling of subsonic flows in symmetric channels of complex form. *Modelirovanie v Mekhanike*, 1990, vol. 4 (21), no. 5, pp. 15–25 (in Russian).
22. Khairullina O.B. To the calculation of flow of gas in channels of complex configuration. *Prikladnaya matematika i matematicheskaya fizika*, 1996, vol. 37, no. 2, pp. 103–108 (in Russian).
23. Khairullina O.B. Modelling subsonic vortex gas flows in channels of complex geometries. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 1998, vol. 13, no. 3, pp. 191–219.
24. Kokovikhina O.V., Sidorov A.F., Khairullina O.B. Mathematical modelling of gas-dynamic and acoustic effects in combustion chambers. In: *Theory of combustion of powder and explosives* / ed. A.M. Lipanov, NY: Nova Science, 1996. pp. 191–202.
25. 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. In: *Advances in grid generation* / ed. O.V. Ushakova, NY: Nova Science, 2007, pp. 337–380.
26. Koshkina T.N. (Bronina T.N.), Sidorov A.F. On one geometrical way of construction of three-dimensional difference grids. In: *Numerical and analytical methods for solving problems of continuum mechanics*, sbornik trudov, Sverdlovsk: Urals Scientific Center, USSR Acad. Sci., 1981, pp. 91–100 (in Russian).
27. Shabashova T.I. On the generation of optimal curvilinear coordinate grids in three-dimensional domains. *Chislennyye Metody Mekhaniki Sploshnykh Sredy*, 1986, vol. 17, no. 1, pp. 144–155 (in Russian).
28. *Controlled fusion* / ed. J. Killeen, London, NY, San Francisco: Acad. Press, 1976. Translated to Russian under the title *Upravlyaemyi termoyadernyi sintez*, Moscow: Mir, 1980.
29. Ushakova O.V. Conditions of nondegeneracy of three-dimensional cells. A formula of a volume of cells. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2001, vol. 23, iss. 4, pp. 1289–1273.
30. Ushakova O.V. Conditions of nondegeneracy of three-dimensional cells. A formula of a volume of cells. *Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki*, 2001, vol. 41, no. 6, pp. 881–894 (in Russian).
31. Ushakova O.V. On nondegeneracy of three-dimensional grids. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, Suppl. 1, 2004, pp. S78–S100.
32. Johnen A., Weill J.C., Remacle J.F. Robust and efficient validation of the linear hexahedral element. *Procedia Engineering*, 2017, vol. 203, pp. 271–283. doi: 10.48550/arXiv.1706.01613
33. Bobylev N.A., Ivanenko S.A., Kazunin A.V. On piecewise-smooth homeomorphic mappings of bounded domains and their applications to the theory of grids. *Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki*, 2003, vol. 43, no. 6, pp. 808–817 (in Russian).
34. Farin G. *Curves and surfaces for computer aided geometric design, A practical guide*. Fourth edition. NY: Acad. Press., 1997.
35. Knabner P., Summ G. The invertibility of the isoparametric mapping for pyramidal and prismatic finite elements. *Numerische Mathematik*, 2001, vol. 88, pp. 661–681. doi: 10.1007/PL00005454
36. Knabner P., Korotov S., Summ G. Conditions for the invertibility of the isoparametric mapping for hexahedral finite elements. *Finite Elements in Analysis and Design*, 2003, vol. 40, iss. 2, pp. 159–172. doi: 10.1016/S0168-874X(02)00196-8
37. Vavasis S.A. A Bernstein–Bezier sufficient condition for invertibility of polynomial mapping functions: e-resource (November 3, 2001). Available on <https://arxiv.org/pdf/cs/0308021.pdf>.
38. Bronina T.N., Gasilova I.A., Ushakova O.V. Algorithms for constructing three-dimensional structured grids. *Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki*, 2003, vol. 43, no. 6, pp. 875–883 (in Russian).
39. Thompson J.F., Warsi Z.U.A., Mastine C.W. *Numerical grid generation: foundation and applications*, NY: Elsevier, 1985, 502 p.
40. Ushakova O.V. Classification of hexahedral cells. *Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki*, 2008, vol. 48, no. 8, pp. 1426–1428 (in Russian). doi: 10.1134/S096554250808006X
41. *Advances in grid generation* / ed. O.V. Ushakova, NY: Nova Science, 2007. 382 p.
42. Artyomova N.A., Khairullin A.F., Khairullina O.B. Generation of curvilinear grids in multiply connected domains of complex topology. In: *Advances in grid generation* / ed. O.V. Ushakova, NY: Nova Science, 2007, pp. 161–188.

43. Martyushov S.N. The method MODAMS for calculating ideal gas flows around bodies by final volume technique. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 1998, iss. 2, pp. 49–56 (in Russian).
44. Azarenok B.N. Conservative remapping on hexahedral meshes. In: *Advances in grid generation* / ed. O.V. Ushakova, NY: Nova Science, 2007, pp. 337–379.
45. Azarenok B.N. A conservative interpolation method on hexahedral grids. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2008, vol. 20, no. 2, pp. 59–75 (in Russian).
46. Dukowicz J.K., Padial N.T. *REMAP3D: A conservative three-dimensional remapping code*: Technical Report. Oak Ridge: Technical Information Center Oak Ridge Tennessee, 1991. NTIS Issue Number 199201. 38 p.
47. Prokhorova M.P. Problems of homeomorphism arising in the theory of grid generation. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, Suppl. 1, 2008, pp. S165–S182. doi: 10.1134/S0081543808050155
48. Ushakova O.V. Nondegeneracy tests for hexahedral cells. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2011, vol. 200, iss. 17–20, pp. 1649–1658. doi: 10.1016/j.cma.2011.01.014.
49. Ushakova O.V. Criteria for hexahedral cell classification. *Applied Numerical Mathematics*, 2018, vol. 127, pp. 18–39. doi: 10.1016/j.apnum.2017.12.012
50. Bronina T.N. Algorithm for constructing initial three-dimensional structured grids for the domains of revolution. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, Suppl. 1, 2008, pp. S36–S43. doi: 10.1134/S008154380805004X
51. Ushakova O.V. Optimization algorithms for three-dimensional grids in domains of rotations. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, Suppl. 1, 2008, pp. S228–S259. doi: 10.1134/S0081543808050192
52. Godunov C.K., Zabrodin A.V., Ivanov M.Ya., Kraiko A.N., Prokopov G.P. Numerical solution of multi-dimensional problems of gasdynamics. Moscow: Nauka Publ., 1976. 400 p (in Russian).
53. Knupp P.M., Steinberg S. *Fundamentals of grid generation*. Boca Raton, FL: CRC Press, 1994.
54. Liseikin V.D. *Grid generation methods*. Berlin: Springer, 1999.
55. Kurant R. *Partial differential equations*, NY: Wiley, 1962. Translated to Russian under the title *Uravneniya s chastnymi proizvodnymi*, Moscow: Mir, 1964.
56. Sidorov A.F., Shabashova T.I. On one method of computation of optimal difference grids for multidimensional domains. *Chislennyye Metody Mekhaniki Sploshnykh Sredy*, 1981. vol. 12, no. 5, pp. 106–123 (in Russian).
57. Ushakova O.V. Theorem on existence and uniqueness of the solution of the boundary value problem for constructing one-dimensional optimal adaptive grids. *Modelirovanie v Mekhanike*, 1989, vol. 3, no. 2, pp. 134–141 (in Russian).
58. Ivanenko C.A., Charakhch'yan A.A. Curvilinear grids of convex quadrilaterals. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1988, vol. 28, no. 2, pp. 126–133. doi: 10.1016/0041-5553(88)90157-7.
59. Ivanenko S.A. *Selected chapters on grid generation and applications*. Moscow: Dorodnicyn Computing Centre of the Russian Academy of Sciences Publ., 2004.
60. Dobrev V., Knupp P., Kolev T., Mittal K., Tomov V. hr-Adaptivity for nonconforming high-order meshes with the target matrix optimization paradigm. *Engineering with Computers*, 2022, vol. 38, pp. 3721–3737. doi: 10.1007/s00366-021-01407-6
61. Dobrev V., Knupp P., Kolev T., Mittal K., Tomov V. The target-matrix optimization paradigm for high-order meshes. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2019, vol. 1, pp. B50–B68. doi: 10.1137/18M1167206
62. Mittal K., Fischer P. Mesh smoothing for the spectral element method. *Journal of Scientific Computing*, 2019, vol. 78, pp. 1152–1173. doi: 10.1007/s10915-018-0812-9
63. Turner M., Peiro J., Moxey D. Curvilinear mesh generation using a variational framework. *Computer-Aided Design*, 2018, vol. 103, pp. 73–91. doi: 10.1016/j.cad.2017.10.004
64. Xu K., Gao X., Chen G. Hexahedral mesh quality improvement via edge-angle optimization. *Computers and Graphics*, 2018, vol. 70, pp. 17–27. doi: 10.21203/rs.3.rs-586657/v1
65. Zhu Y., Bridson R., Kaufman D.M. Blended cured quasi-newton for distortion optimization. *ACM Transactions on Graphics*, 2018, vol. 37, no. 4. doi: 10.1145/3197517.3201359
66. Ushakova O.V. An algorithm of correcting a grid with respect to the surface of revolution. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 2016, iss. 1. pp. 16–27 (in Russian).

67. Ushakova O.V. Application of the algorithm of correcting a grid with respect to the surface of revolution. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 2016, iss. 2, pp. 31–37 (in Russian).
68. Ushakova O.V., Artyomova N.A., Bronina T.N., Anuchina A.I., Gordeichuk V.I. Grid generation in deformed volumes of revolution. In: *International conference “Advanced mathematics, computations and applications 2015” (AMCA-2015), dedicated to the 90th anniversary of the birthday of academician Marchuk G.I.*, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS, Novosibirsk: Abvey Publ., 2015, pp. 782–788.
69. Zegeiling P.A. Moving grid techniques. In: *Handbook of grid generation* / eds. J.F. Thompson, B.K. Soni, N.P. Weatherill, Boca Raton, London, NY, Washington: CRC Press, 1999, pp. 37-1–37-22.
70. Staten M.L., Owen S.J., Shontz S.M., Salinger A.G., Coffey T.S. A comparison of mesh morphing methods for 3D shape optimization. In: *Proceedings of the 20th international meshing roundtable* / eds. W.R. Quadros, Berlin, Heidelberg: Springer, 2011, pp. 293–311.
71. Immonen E. A parametric morphing method for generating structured meshes for marine free surface flow applications with plane symmetry. *Journal of Computational Design and Engineering*, 2019, vol. 6, pp. 348–353. doi: 10.1016/j.jcde.2018.11.002
72. Biancolini M.E., Chiappa A., Giorgetti F., Porziana S., Rochette M. Radial basis functions mesh morphing for the analysis of cracks propagation. *Procedia Structural Integrity*, 2018, vol. 8, pp. 433–443.
73. Prokopov G.P. Moving mesh calculation in unsteady two-dimensional problems. In: *Advances in grid generation* / ed. O.V. Ushakova, NY: Nova Science, 2007, pp. 127–160.
74. Artemova N.A. A nonstationary algorithm of constructing structured grids in deformed regions. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 2018, iss. 4, pp. 76–86 (in Russian).
75. Ushakova O.V. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 2018, iss. 1, pp. 30–41 (in Russian).
76. Anuchina A.I., Artyomova N.A., Gordeychuk V.A., Ushakova O.V. A technology for grid generation in volumes bounded by the surfaces of revolutions. In: Numerical geometry, grid generation and scientific computing: Proceedings of the 9th international conference NUMGRID 2018 / Voronoi 150, eds. V.A. Garanzha, L. Kamenski, H. Si, *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 2019, vol. 131, pp. 281–292. doi: 10.1007/978-3-030-23436-2_21
77. Artemova N.A., Ushakova O.V. On the development of a grid generation algorithm for deformed solids of revolution formed by several surfaces. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 2020, iss. 4, pp. 86–96 (in Russian).
78. Ushakova O.V. An algorithm of correcting a grid with respect to a deformed domain of revolution. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 2017, iss. 2, pp. 53–65 (in Russian).
79. Anuchina A.I., Artyomova N.A., Gordeychuk V.A., Ushakova O.V. The algorithm for generation of structured grids in deformed volumes of revolution. *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, vol. 1392, article no. 012029. doi: 10.1088/1742-6596/1392/1/012029
80. Anuchina A.I., Artyomova N.A., Gordeychuk V.A., Ushakova O.V. On the development of the grid generation technology for constructions bounded by the surfaces of revolutions. *AIP Conference Proceedings*, 2020, vol. 2312, article no. 050002. doi: 10.1063/5.0035688
81. Artyomova N.A., Ushakova O.V. About grid generation in constructions bounded by the surfaces of revolution. *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, vol. 2099, article no. 012018. doi: 10.1088/1742-6596/2099/1/012018
82. Ushakova O.V., Artyomova N.A. Non-stationary grid generation algorithm for deformed volumes of revolution. *Mathematics and Computers in Simulation*, 2023, vol. 203, pp. 878–909. doi: 10.1016/j.matcom.2022.07.016
83. Ushakova O.V. Realization of an adaptation criterion in grid generation technology for constructions bounded by surfaces of revolution with parallel axes of revolution. *Numerical Analysis and Applications*, 2023, vol. 16, no. 1, pp. 74–78. doi: 10.1134/S199542392301007X
84. Ushakova O.V., Artemova N.A. Grid generation technologies for constructions bounded by the surfaces of revolution with parallel axes of revolution. *Vestnik Bashkirskogo universiteta*, 2022, vol. 27, no. 3, pp. 541–546 (in Russian). doi: 10.33184/bulletin-bsu-2022.3.9

85. Ushakova O.V. Adaptation criterion implementations in optimal grid constructing algorithm. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov*, 2021, iss. 2, pp. 80–95 (in Russian).
86. Liseikin V.D. A survey of methods for constructing structured adaptive grids. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1996, vol. 36, no. 1, pp. 1–32.

Received March 1, 2023

Revised March 13, 2023

Accepted March 20, 2023

Olga Vasil'evna Ushakova, Dr. Phys.-Math. Sci., Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, 620108 Russia, Ural Federal University, Yekaterinburg, 620000 Russia, e-mail: uov@imm.uran.ru .

Cite this article as: O. V. Ushakova. On the development of the variational approach to the generation of optimal grids (a survey). *Trudy Instituta Matematiki i Mekhaniki UrO RAN*, 2023, vol. 29, no. 2, pp. 217–247.