



---

**Н.Г.Бураго**

**Вычислительная механика**

**Москва 2017**

Книга содержит расширенный конспект лекций по численным методам механики сплошной среды, читанных автором студентам 5-го курса МГТУ им. Н.Э. Баумана в период 2002-2012 г. Целью лекций является систематическое, краткое, но достаточно полное освещение идей, лежащих в основе численных методов механики сплошных сред, включая подходы, которые еще не освещались в учебной литературе. Книга может использоваться студентами, аспирантами и научными работниками как учебное и справочное пособие по вычислительной механике.

ЭТО ЧЕРНОВИК,  
ПОЭТОМУ ПРИ ОБНАРУЖЕНИИ ОШИБОК  
ПРОСЬБА СОХРАНЯТЬ СПОКОЙСТВИЕ

## Оглавление

<b>ПРЕДИСЛОВИЕ</b> .....	<b>9</b>
<b>ГЛАВА 1. ПРОЕКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ</b> .....	<b>11</b>
1.1. ОБЩАЯ СХЕМА ПРОЕКЦИОННЫХ МЕТОДОВ .....	11
1.2. ТЕОРЕМЫ О СХОДИМОСТИ .....	16
1.3. ОШИБКИ ПРОЕКЦИОННЫХ МЕТОДОВ .....	17
1.4. ВАРИАНТЫ МЕТОДА ГАЛЕРКИНА.....	18
1.5. ПРОЕКЦИОННЫЕ МЕТОДЫ МИНИМИЗАЦИИ .....	20
1.5.1. Метод Рэлея-Ритца .....	20
1.5.2. Метод наименьших квадратов .....	21
1.6. НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ЗАДАЧИ .....	22
1.7. ЗАДАЧИ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ .....	23
<b>ГЛАВА 2. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ</b> .....	<b>25</b>
2.1. ЗАДАНИЕ ФУНКЦИЙ .....	25
2.2. ПОЛИНОМЫ ЛАГРАНЖА .....	26
2.3. СТЕПЕННЫЕ ФУНКЦИИ .....	26
2.4. ОШИБКИ И ЧИСЛО ОБУСЛОВЛЕННОСТИ .....	27
2.5. ВАЖНОСТЬ ВЫБОРА БАЗИСА.....	28
2.6. МНОГОМЕРНАЯ СЕТОЧНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ .....	29
2.6.1. Типы сеток.....	29
2.6.2. Сплайн-аппроксимация.....	30
2.6.3. Применение отображений.....	31
2.6.4. L-координаты.....	31
<b>ГЛАВА 3. ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ</b> .....	<b>35</b>
3.1. ПРОСТЕЙШИЕ КВАДРАТУРНЫЕ ФОРМУЛЫ .....	35
3.2. КВАДРАТУРЫ ГАУССА.....	36
3.2.1. Одномерное интегрирование.....	37
3.2.2. Двумерное интегрирование .....	38
3.2.3. Трехмерное интегрирование.....	40
3.3. БЕССЕТОЧНОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ .....	40
<b>ГЛАВА 4. ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ</b> .....	<b>42</b>
4.1. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНТЕРПОЛЯНТОВ.....	42
4.2. МЕТОД НЕОПРЕДЕЛЕННЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ.....	42
4.3. ЕСТЕСТВЕННАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ПРОИЗВОДНЫХ .....	44
4.4. МЕТОД ОТОБРАЖЕНИЙ ИЛИ МЕТОД ЯКОБИАНОВ .....	45
4.5. ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ .....	46
<b>ГЛАВА 5. ПРЯМЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ</b> .....	<b>48</b>
5.1. ПРЕДОБУСЛОВЛИВАНИЕ И МАСШТАБИРОВАНИЕ.....	48
5.2. ПРАВИЛО КРАМЕРА .....	49
5.3. МЕТОДЫ ИСКЛЮЧЕНИЯ.....	49
5.4. ОПТИМИЗАЦИЯ СТРУКТУРЫ И ХРАНЕНИЕ МАТРИЦ СЛАУ .....	52
5.5. СИММЕТРИЗАЦИЯ СЛАУ .....	53
5.6. МЕТОД $LDL^T$ -ФАКТОРИЗАЦИИ .....	54
5.7. МЕТОД КВАДРАТНОГО КОРНЯ.....	54

5.8. Метод Холецкого.....	55
5.9. Фронтальные методы .....	56
5.10. Исключение внутренних степеней свободы .....	56
5.11. Итерационное уточнение.....	57
<b>ГЛАВА 6. ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ.....</b>	<b>59</b>
6.1. Метод простой итерации .....	59
6.2. Метод последовательных смещений.....	59
6.3. Методы последовательной релаксации .....	60
6.4. Градиентные методы .....	60
6.5. Метод сопряженных градиентов .....	62
6.6. Безматричные итерационные методы .....	64
<b>ГЛАВА 7. НЕЛИНЕЙНЫЕ УРАВНЕНИЯ .....</b>	<b>65</b>
7.1. Метод Ньютона.....	65
7.2. Метод дифференцирования по параметру .....	66
7.3. Метод погружения.....	67
<b>ГЛАВА 8. ЕДИНСТВЕННОСТЬ И ВЕТВЛЕНИЕ РЕШЕНИЙ.....</b>	<b>69</b>
8.1. Теорема о неявной функции.....	69
8.2. Особые точки и продолжение решений .....	70
<b>ГЛАВА 9. МЕТОДЫ МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛОВ.....</b>	<b>72</b>
9.1. Условная минимизация линейных функционалов.....	72
9.2. Условная минимизация нелинейных функционалов.....	74
9.2.1. Метод множителей Лагранжа .....	74
9.2.2. Методы штрафных и барьерных функций.....	75
9.3. Метод локальных вариаций для негладких функционалов .....	76
<b>ГЛАВА 10. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ КОШИ ДЛЯ ОДУ .....</b>	<b>78</b>
10.1. Постановка задач Коши .....	78
10.2. Многошаговые методы Рунге-Кутты.....	79
10.3. Многослойные методы Адамса.....	80
10.4. Неявные схемы для жестких задач .....	81
<b>ГЛАВА 11. ДВУХТОЧЕЧНЫЕ КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ.....</b>	<b>84</b>
11.1. Метод стрельбы .....	84
11.2. Методы квазилинеаризации .....	86
11.2.1 Метод Ньютона-Канторовича для краевых задач. ....	86
11.2.2. Метод дифференцирования по параметру для краевых задач. ....	87
11.3. Методы для линейных двухточечных краевых задач.....	88
11.3.1. Конечные разности и матричная прогонка.....	88
11.3.2. Дифференциальные прогонки .....	89
11.3.2.1. Метод дифференциальной прогонки .....	89
11.3.2.2. Метод ортогональной прогонки .....	90
11.3.2.3. Метод переноса граничных условий .....	91
11.3.3. Метод сплайнов.....	91
<b>ГЛАВА 12. КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ МСС.....</b>	<b>93</b>
12.1. Формулировка задач МСС .....	93

12.2. ТИПЫ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ .....	98
12.3. РОЛЬ КОНСЕРВАТИВНОЙ ФОРМЫ ЗАПИСИ .....	104
12.4. СВОЙСТВА ГИПЕРБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ .....	105
12.4.1. Характеристики и характеристические соотношения .....	105
12.4.2. Пример определения характеристик .....	108
12.4.3. Соотношения на сильных разрывах .....	109
12.4.4. Вязкие эффекты и гиперболичность .....	111
12.5. ПРИМЕРЫ МОДЕЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ .....	112
12.6. ИСКУССТВЕННЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ .....	114
12.7. ОБЕЗРАЗМЕРИВАНИЕ УРАВНЕНИЙ .....	115
12.8. ОБЗОР МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ .....	118
12.8.1. Разделение переменных .....	118
12.8.2. Сведение начально-краевых задач к начальным .....	118
12.8.3. Покоординатная редукция уравнений .....	119
12.8.4. Методы расщепления .....	120
12.8.5. Методы конечных разностей .....	121
12.8.6. Метод конечных объемов .....	122
12.8.7. Метод конечных элементов .....	123
12.8.8. Методы граничных элементов .....	124
12.8.9. Бессеточные методы .....	124
<b>ГЛАВА 13. ТЕОРЕМЫ О СХОДИМОСТИ РЕШЕНИЙ.....</b>	<b>126</b>
13.1. АППРОКСИМАЦИЯ .....	126
13.2. УСТОЙЧИВОСТЬ .....	127
13.3. СХОДИМОСТЬ .....	127
13.4. СХОДИМОСТЬ РАЗРЫВНЫХ РЕШЕНИЙ .....	128
<b>ГЛАВА 14. ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ .....</b>	<b>129</b>
14.1. МЕТОД ДИСКРЕТНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ .....	129
14.2. МЕТОД ГАРМОНИЧЕСКИХ ВОЗМУЩЕНИЙ .....	130
14.3. СПЕКТРАЛЬНЫЙ МЕТОД .....	132
14.4. МЕТОД ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ .....	132
14.5. “ЗАМОРОЖИВАНИЕ” КОЭФФИЦИЕНТОВ .....	135
14.6. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАСЩЕПЛЕНИЯ .....	136
14.7. ВЛИЯНИЕ СВОБОДНЫХ ЧЛЕНОВ .....	136
14.8. КОЭФФИЦИЕНТ ЗАПАСА .....	136
14.9. УСЛОВИЕ ТОЧНОСТИ .....	137
14.10. ОЦЕНКА ШАГА ПО ПРОСТРАНСТВУ .....	137
<b>ГЛАВА 15. КЛАССИЧЕСКИЕ СХЕМЫ .....</b>	<b>138</b>
15.1. СХЕМА ВВЦП .....	138
15.2. ВВЦП-СХЕМА С ИСКУССТВЕННОЙ ВЯЗКОСТЬЮ .....	139
15.3. СХЕМА ЛАКСА .....	139
15.4. ВВЦП-СХЕМА СО СГЛАЖИВАНИЕМ .....	140
15.5. СХЕМА С РАЗНОСТЯМИ ПРОТИВ ПОТОКА .....	141
15.6. СХЕМЫ РАСЧЕТА ДИФфуЗИИ .....	143
15.7. СХЕМА ЧЕХАРДА .....	144
15.8. СХЕМА ДЮФОРТА-ФРАНКЕЛА .....	145
15.9. СХЕМА ЛАКСА-ВЕНДРОФФА .....	146
15.10. СХЕМА МАК-КОРМАКА .....	147

15.11. МЕТОДЫ ХАРАКТЕРИСТИК .....	148
15.11.1. Прямой метод характеристик .....	148
15.11.2. Обратный метод характеристик .....	149
<b>ГЛАВА 16. РАСЧЕТ СЖИМАЕМЫХ ТЕЧЕНИЙ.....</b>	<b>150</b>
16.1. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ .....	150
16.2. СПОСОБЫ РАСЧЕТА РАЗРЫВНЫХ ТЕЧЕНИЙ.....	151
16.3. СХЕМЫ СКВОЗНОГО СЧЕТА.....	152
16.4. СХЕМА ГОДУНОВА.....	154
16.4.1. Консервативная аппроксимация законов сохранения.....	155
16.4.2. Расчет значений на границах ячеек.....	156
16.4.3. Повышение порядка точности.....	158
16.4.4. Расчет вязких течений.....	159
16.5. ГИБРИДНЫЕ СХЕМЫ .....	159
16.6. СХЕМЫ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЙ ПОДГОНКИ .....	162
16.7. СХЕМЫ УРАВНОВЕШЕННОЙ ВЯЗКОСТИ.....	163
16.8. НЕЯВНЫЕ СХЕМЫ.....	168
16.9. МАРШЕВЫЕ МЕТОДЫ .....	170
16.10. СХЕМЫ ДЛЯ ТЕЧЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ .....	171
16.11. ЛАГРАНЖЕВЫ СХЕМЫ НА ЭЙЛЕРОВЫХ СЕТКАХ.....	173
16.12. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ АНАЛИЗАТОРЫ УДАРНЫХ ВОЛН И КОНТАКТНЫХ РАЗРЫВОВ .....	174
<b>ГЛАВА 17. РАСЧЕТ НЕСЖИМАЕМЫХ ТЕЧЕНИЙ.....</b>	<b>177</b>
17.1. ПЕРЕМЕННЫЕ СКОРОСТЬ-ДАВЛЕНИЕ .....	177
17.1.1. Трехмерные нестационарные задачи .....	177
17.1.2. Двумерные нестационарные задачи .....	180
17.2. МЕТОДЫ ИСКУССТВЕННОЙ СЖИМАЕМОСТИ.....	182
17.3. УРАВНЕНИЕ ПУАССОНА ДЛЯ ДАВЛЕНИЯ.....	184
17.4. МЕТОД КОРРЕКЦИИ ДАВЛЕНИЯ.....	185
17.5. ПЕРЕМЕННЫЕ “ВЕКТОРНАЯ ФУНКЦИЯ ТОКА – ВИХРЬ” .....	187
17.6. ПЛОТНОСТЬ В НЕСЖИМАЕМОМ ТЕЧЕНИИ.....	189
17.7. ПЕРЕМЕННЫЕ “ФУНКЦИЯ ТОКА – ЗАВИХРЕННОСТЬ” .....	190
17.8. МЕТОДЫ В ПЕРЕМЕННЫХ “ФУНКЦИЯ ТОКА – ВИХРЬ”.....	191
17.9. МЕТОДЫ ДИСКРЕТНЫХ ВИХРЕЙ.....	193
17.9.1. Основы метода.....	193
17.9.2. Метод "Облако в ячейке" .....	196
17.9.3. Панельные методы.....	198
<b>ГЛАВА 18. МЕТОДЫ ДЛЯ ЗАДАЧ УПРУГОПЛАСТИЧНОСТИ .....</b>	<b>199</b>
18.1. ПОСТАНОВКИ ЗАДАЧ УПРУГО-ПЛАСТИЧНОСТИ.....	200
18.2. ВАРИАНТЫ ПОСТАНОВОК ЗАДАЧ УПРУГО-ПЛАСТИЧНОСТИ .....	203
18.3. ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ КЭ АППРОКСИМАЦИИ .....	209
18.4. ЯВНЫЕ ЛАГРАНЖЕВЫ СХЕМЫ.....	210
18.4.1. Первый этап .....	210
18.4.2. Второй этап .....	212
18.4.3. Третий этап .....	213
18.5. ВАРИАНТЫ ЯВНЫХ ЛАГРАНЖЕВЫХ СХЕМ .....	215
18.5.1. Схема квазивторого порядка точности.....	215
18.5.1. Полностью консервативная схема Самарского-Попова .....	215

18.6. НЕЯВНЫЕ ЛАГРАНЖЕВЫ СХЕМЫ.....	216
18.7. БЕЗМАТРИЧНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ НЕЯВНЫХ СХЕМ .....	218
18.8. ОБЗОР СХЕМ РАСЧЕТА КОНТАКТА ДЕФОРМИРУЕМЫХ ТЕЛ .....	221
18.9. РАСЧЕТ ПРОЦЕССОВ РАЗРУШЕНИЯ.....	222
18.9.1. Описание проблемы разрушения.....	222
18.9.2. Постановка задач о разрушении.....	225
18.9.3. Методы расчета разрушения .....	227
<b>ГЛАВА 19. ГЕНЕРАЦИЯ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СЕТОК.....</b>	<b>232</b>
19.1. ОСНОВНЫЕ ТИПЫ СЕТОК .....	232
19.2. РЕГУЛЯРНЫЕ СЕТКИ .....	233
19.2. НЕРЕГУЛЯРНЫЕ СЕТКИ .....	234
19.3. ГЕНЕРАЦИЯ СЕТОК ОТОБРАЖЕНИЯМИ.....	236
19.4. ДИНАМИЧЕСКИ АДАПТИВНЫЕ СЕТКИ .....	239
19.5. ВЛОЖЕННЫЕ СЕТКИ .....	241
<b>ГЛАВА 20. РАСЧЕТ ПОДВИЖНЫХ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА .....</b>	<b>243</b>
20.1. ТИПЫ ПОДВИЖНЫХ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА .....	243
20.2. ЛАГРАНЖЕВЫ СЕТКИ.....	243
20.3. ПЕРЕСТРАИВАЕМЫЕ ЛАГРАНЖЕВЫ СЕТКИ .....	244
20.4. ПРОИЗВОЛЬНО ПОДВИЖНЫЕ СЕТКИ .....	244
20.5. ПЕРЕКРЫВАЮЩИЕСЯ СЕТКИ .....	245
20.6. НЕПРЕРЫВНЫЕ МАРКЕРЫ .....	245
20.7. ГРАНИЧНЫЕ ДИСКРЕТНЫЕ МАРКЕРЫ .....	247
20.8. ДИСКРЕТНЫЕ МАРКЕРЫ.....	247
20.9. МЕТОД ГЛАДКИХ ЧАСТИЦ .....	248
<b>ГЛАВА 21. МЕТОД ГРАНИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ .....</b>	<b>252</b>
21.1. ГРАНИЧНЫЕ ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ .....	252
21.2. ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ .....	253
21.3. ПРЯМОЙ МГЭ ДЛЯ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ .....	255
<b>ПОСЛЕСЛОВИЕ .....</b>	<b>259</b>
<b>СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ .....</b>	<b>260</b>
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 1. ИЗ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО АНАЛИЗА.....</b>	<b>270</b>
П1.1. ЛИНЕЙНОЕ МНОЖЕСТВО.....	270
П1.2. НОРМА.....	270
П1.3. ГИЛЬБЕРТОВЫ ПРОСТРАНСТВА .....	271
П1.4. ЛИНЕЙНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ И БАЗИС .....	272
П1.5. ОПЕРАТОР И ФУНКЦИОНАЛ .....	273
П1.6. ПОЛНОТА.....	274
П1.7. ПОДПРОСТРАНСТВО .....	274
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 2. АБСТРАКТНАЯ ТЕНЗОРНАЯ НОТАЦИЯ.....</b>	<b>275</b>
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 3. КРИВОЛИНЕЙНЫЕ КООРДИНАТЫ.....</b>	<b>278</b>
ПЗ.1. ЦИЛИНДРИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ .....	278
ПЗ.2. СФЕРИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ.....	279

<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 4. СВОЙСТВА РАЗНОСТНЫХ СХЕМ .....</b>	<b>281</b>
<b>ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ.....</b>	<b>283</b>
<b>ИМЕННОЙ УКАЗАТЕЛЬ .....</b>	<b>286</b>

## Предисловие

Эта книга содержит сведения, которые будут интересны тем, кто хочет получить представление о методах и алгоритмах решения задач механики сплошной среды. Наряду с изложением основ численного анализа книга имеет своей целью ознакомление читателя с современными разработками и достижениями в области вычислительной континуальной механики.

Первая половина курса посвящена основам численного анализа. Знание этого материала абсолютно необходимо для понимания методов вычислительной механики, поэтому необходимый минимум сведений приводится. Ключом к большинству применяемых методов является теория проекционных методов, простой пересказ которой приведен в самом начале первой главы. Затем описаны основные методы интерполяции, численного интегрирования и дифференцирования. Показана важнейшая роль выбора базиса в успехе или неуспехе численного решения. Дано описание практически важных методов многомерного численного дифференцирования - метода естественной аппроксимации, метода отображений и вариационного метода, отсутствующее, как это ни странно, в курсах численного анализа. Дано описание многомерной кусочно-полиномиальной аппроксимации функций, основанной на понятиях площадных и объемных координат и пригодное для использования на произвольных неструктурированных сетках. Приведены практически важные квадратурные формулы для численного интегрирования в случае многих независимых переменных, описан метод бессеточного численного интегрирования.

Во многих случаях задачи численного анализа сводятся к системам алгебраических уравнений. Для решения линейных алгебраических уравнений наряду с традиционными вариантами метода исключения описаны наиболее перспективные итерационные безматричные методы, приводящие к точному решению за конечное число операций. Для нелинейных (в частности, алгебраических) задач описаны методы ньютоновской квазилинеаризации, методы погружения и продолжения по параметру, а также описаны приемы исследования вопросов существования и ветвления решений нелинейных уравнений в процессе численного решения.

Нередко задачи механики сплошных сред формулируются как вариационные задачи о минимальности или стационарности функционалов. Для решения таких задач описаны методы поиска экстремальных точек функционалов в соответствии с теорией математического программирования. Рассмотрены приемы сведения задач условной минимизации к задачам безусловной минимизации.

Завершена первая часть курса рассмотрением численного

решения начальных и двухточечных краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

Вторая часть курса посвящена методам численного решения уравнений в частных производных, возникающих в задачах вычислительной механики.

Рассмотрены основные классические разностные схемы и приемы их исследования.

Освещены основные схемы эйлеровой гидрогазодинамики. Рассмотрены способы учета несжимаемости, вязкостных эффектов, расчета разрывов, пограничных слоев.

Рассмотрены лагранжевы методы для задач упругопластичности с большими деформациями, в частности, методы контрольных объемов и конечных элементов.

Для расчета подвижных контактных, свободных и межфазных границ изложены метод произвольно подвижных адаптивных координат, метод фиктивных областей и подвижных перекрывающихся сеток, метод граничных элементов и бессеточные методы такие, как методы частиц, спектральные методы, методы Галеркина. Разобраны методы дискретных маркеров и частиц, а также методы непрерывного маркера для расчета многофазных течений. Дано представление о генерации сеток и управлении физически и геометрически адаптивными сетками.

В приложении приведен полезный справочный материал. Книга снабжена предметным и авторским указателями.

Целью книги является в годовом курсе осветить широкий круг вопросов вычислительной механики, не вдаваясь в детали, изучать которые “впрок” во всем множестве задач вычислительной механики невозможно, да и не нужно. Вникать в детали имеет смысл только в связи с решением конкретных задач достаточно узкого класса, используя специальную цитированную литературу.

Книга написана по материалам годового курса лекций, читанного автором студентам старших курсов кафедры прикладной математики МГТУ им. Н. Э. Баумана в (2002-2015), кафедры сопротивления материалов МГСУ-МИСИ (2006-2009), кафедры физики РГТУ-МАТИ (2009-2014), кафедры прикладной механики МФТИ (2014-2017).

В книге материал лекций дан в расширенном объеме, так что она является своего рода справочным пособием для более подробной проработки тем. Однако надо заметить, что арсенал методов вычислительной механики необъятен и что данная книга ни в коей мере не претендует на роль энциклопедии.

Автор благодарит В.С.Зарубина, Г.Н.Кувыркина, В.Н.Кукуджанова и А.В.Манжирова за поддержку работы по написанию книги.

## Глава 1. Проекционные методы

Проекционные методы подразумевают поиск решения в виде линейной комбинации базисных функций, которая приближенно удовлетворяет уравнениям, граничным и начальным условиям задачи. Большинство численных методов решения задач континуальной механики можно трактовать как частные случаи общей схемы проекционных методов. Идея проекционных методов дает общую основу численным методам континуальной механики и позволяет понять, как они работают, а также помогает сознательно конструировать новые методы с желаемыми свойствами. Поэтому начнем изучение численных методов именно с описания основ теории проекционных методов.

### 1.1. Общая схема проекционных методов

В самом общем случае под приближенным решением начально-краевых задач математической физики (механики сплошных сред, в частности) подразумевается поиск проекции точного решения из бесконечномерного пространства точных решений на аппроксимирующее конечномерное подпространство приближенных решений. Коэффициенты разложения приближенного решения по базису аппроксимирующего подпространства определяются при этом из системы уравнений, выражающей требование близости приближенного и точного решений (такое требование определяется неоднозначно). Методы решения, основанные на отыскании конечномерных проекций решения, называются проекционными. Ранее использовалось другое название этих методов – “прямые методы” (см. Михлин, 1950).

Рассмотрим схему проекционных методов на примере некоторой краевой задачи, которая в условной операторной записи выглядит так:

$$Ax = y$$

где  $A$  - линейный оператор, обозначающий последовательность математических операций, которые надо применить к искомому решению  $x$ , чтобы получить в результате заданный вектор правой части  $y$ . Для облегчения понимания дальнейшего заметим, что рассматриваемое операторное уравнение допустимо трактовать ("для себя") как алгебраическое. Векторы (функции)  $x$  и  $y$  являются элементами некоторых гильбертовых пространств  $X$ ,  $Y$  (то есть, нормированных пространств с операцией скалярного произведения элементов). Значения  $A$ ,  $x$  и  $y$  могут зависеть от

пространственных независимых переменных (для краткости представим их радиус-вектором  $\mathbf{r}$ ). Предполагается, что задача корректна, т.е. для оператора  $A$  существует ограниченный обратный оператор  $\|A^{-1}\| \leq M < \infty$ , определяющий решение:  $x = A^{-1}y$ . В общем случае факт существования ограниченного обратного оператора задачи (то есть факт существования и единственности искомого решения) не всегда заранее известен. Часто он устанавливается в процессе решения.

Приближенное решение исходной задачи строится в виде разложений по некоторому множеству базисных элементов  $\{u_i(\mathbf{r})\}_{i=1}^k$ , называемому аппроксимационным базисом. По другой терминологии говорят, что приближенное решение строится в виде линейных комбинаций пробных функций. Базисные (пробные) функции могут быть заданы аналитически (например, степенные функции, тригонометрические функции, собственные функции операторов частного вида) или алгоритмически (например, пробные функции метода конечных элементов, базисные сплайны, локальные полиномы метода конечных разностей, финитные функции свободных узлов в бессеточных методах и так далее).

Таким образом, приближенное решение представляется линейной комбинацией элементов аппроксимационного базиса с набором коэффициентов  $x^k = \{a_i\}_{i=1}^k$ , подлежащих определению

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^k a_i u_i(\mathbf{r})$$

Часто коэффициенты  $a_i$  играют роль узловых значений искомой функции и ее производных. Обратим внимание на разницу в обозначениях, принятых для наборов коэффициентов разложения  $x^k$  (являющимися наборами чисел  $a_i$ ) и для самих приближенных решений  $x^{(k)} = x^{(k)}(\mathbf{r})$  (являющихся функциями).

Приближенное решение в общем случае не удовлетворяет исходному уравнению, поэтому

$$Ax^{(k)} \neq y$$

Погрешность уравнения, обусловленная приближенностью решения, характеризуется суммой всех членов уравнения, перенесенных в правую часть

$$R^{(k)} = y - Ax^{(k)}$$

и называется невязкой исходного уравнения. Для точного решения

невязка уравнения равна нулю.

Коэффициенты разложения  $x^k = \{a_i\}_{i=1}^k$  ( $k$  чисел) определяются из требований ( $k$  соотношений) равенства нулю проекции невязки на некоторое, так называемое, проекционное пространство, определяемое своим базисом  $\{v_i(\mathbf{r})\}_{i=1}^k$ , функции которого называют весовыми. Условия равенства нулю проекций невязки имеют вид:

$$(R^{(k)}, v_i) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, k)$$

Здесь выражение  $(u, v)$  обозначает скалярное произведение. Проекционный базис  $v_i$  может не совпадать с аппроксимационным базисом  $u_i$  и также может быть задан как аналитически, так и алгоритмически.

Подставляя выражение для невязки в записанные выше равенства нулю проекций невязки, получаем систему алгебраических уравнений дискретизированной задачи

$$A_k x^k = y^k$$

где  $A_k = \left\{ (v_i, Au_j) \right\}_{i,j=1}^k$ ,  $y^k = \{(v_i, y)\}_{i=1}^k$ . Здесь  $A_k$  является матрицей дискретизированной задачи, а  $y^k$  обозначает вектор известной правой части. Отметим, что часто для решения задач никаких матриц  $A_k$  формировать и запоминать не нужно, достаточно описать алгоритм вычисления невязки

$$R^k = y^k - A_k x^k$$

При реализации проекционного метода решаются следующие подзадачи:

- 1) построить или выбрать базисы  $\{u_i\}_{i=1}^k$ ,  $\{v_i\}_{i=1}^k$ .
- 2) сформировать систему уравнений дискретизированной задачи (или указать алгоритм вычисления невязок для уравнений дискретизированной задачи).
- 3) построить алгоритм решения уравнений дискретизированной задачи
- 4) убедиться в том, что приближенные решения  $x^{(k)}$  стремятся к точному решению  $x^*$  при  $k \rightarrow \infty$ .

Рассмотренные операции получения аппроксимаций (приближенных представлений) решения и оператора задачи

определяют операторы проектирования  $\varphi_k : X \rightarrow X^k$  и  $\phi_k : Y \rightarrow Y^k$ , что записывается так:

$$x^k = \varphi_k x, \quad y^k = \phi_k y$$

Здесь  $X$  и  $Y$  - пространства решений и правых частей исходной задачи,  $X^k$  и  $Y^k$  - пространства коэффициентов разложения решения  $\{a_i\}_{i=1}^k$  и правой части  $\{b_i\}_{i=1}^k$  по базисам  $\{u_i\}_{i=1}^k$  и  $\{v_i\}_{i=1}^k$ , соответственно. Наборы чисел-коэффициентов разложения  $x^k = \{a_i\}_{i=1}^k$  и  $y^k = \{b_i\}_{i=1}^k$  являются дискретными образами приближенных решений и правых частей или, как говорят, их каркасами.

Преобразование наборов коэффициентов разложения в элементы функциональных пространств реализуют операторы восполнения  $\tilde{\varphi}_k : X^k \rightarrow X^{(k)}$  и  $\tilde{\phi}_k : Y^k \rightarrow Y^{(k)}$ , что записывается так

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^k a_i u_i, \quad y^{(k)} = \sum_{i=1}^k b_i v_i$$

или

$$x^{(k)} = \tilde{\varphi}_k x^k, \quad y^{(k)} = \tilde{\phi}_k y^k$$

Здесь  $X^{(k)}$  и  $Y^{(k)}$  - пространства приближенных решений и правых частей,  $X^k$  и  $Y^k$  - пространства соответствующих коэффициентов разложения. Подчеркнем, что операторы проектирования и восполнения не являются взаимно обратными.

Имеется два возможных пути преобразования решения исходной задачи  $x$  в дискретный вектор правой части  $y^k$ , приводящие, вообще говоря, к разным результатам

$$x \rightarrow Ax \rightarrow \phi_k (Ax)$$

$$x \rightarrow \varphi_k x \rightarrow A_k \varphi_k x$$

где  $A_k : X^k \rightarrow Y^k$  дискретный аналог исходного оператора задачи.

На первом пути вектор решения исходным оператором преобразуется в вектор правой части, который затем проектируется на проекционное пространство. На втором пути вектор решения заменяется его дискретным аналогом, то есть, коэффициентами разложения по аппроксимационному базису, которые оператором дискретизированной задачи переводятся в проекцию вектора правой части на проекционное пространство.

Сделанное выше пространное словесное пояснение путей наглядно демонстрирует преимущества математической записи мыслей такого рода: это преимущество краткости. Однако, нередко сло-

весное описание бывает не лишним и более понятным.

Мера аппроксимации определяется формулой

$$\gamma_k = \| A_k \phi_k x - \phi_k Ax \|$$

где  $A_k \phi_k x$  - однородная часть дискретного уравнения,  $\phi_k Ax$  - дискретная проекция однородной части исходного уравнения.

Ошибка приближенного решения в некотором общем для приближенного и точного решений нормированном пространстве определяется нормой их разности

$$\delta^{(k)} = \| x^{(k)} - x^* \|$$

где  $x^{(k)}$  - приближенное решение,  $x^*$  - точное решение.

Ошибка приближенного решения в пространстве каркасов приближенных решений  $X^k$  определяется формулой

$$\tau_k = \| x^k - \phi_k x^* \|,$$

где  $x^k = A_k^{-1} y^k$  - каркас приближенного решения,  $\phi_k x^*$  - каркас проекции точного решения  $x^*$ .

**Пример.** Пусть исходное уравнение

$$\frac{du}{dt}(t) = f(t)$$

аппроксимируется на равномерной сетке  $t_i = i\Delta t$ , ( $i = 0, 1, \dots, k; \Delta t = T/k$ ) по формуле

$$\frac{u(t_{i+1}) - u(t_i)}{\Delta t} = f(t_i)$$

Тогда погрешность аппроксимации равна

$$\gamma_k = \left\| \frac{u(t_{i+1}) - u(t_i)}{\Delta t} - \left[ \frac{du}{dt} \right]_{x=x_i} \right\| = \left\| \frac{u(t_i + \Delta t) - u(t_i)}{\Delta t} - \left[ \frac{du}{dt} \right]_{x=x_i} \right\| =$$

$$= \left\| \frac{u(t_i) + [du/dt]_{t=t_i} \Delta t + [d^2u/dt^2]_{t=t_i} \Delta t^2 / 2 + O(\Delta t^3) - u(t_i)}{\Delta t} - \left[ \frac{du}{dt} \right]_{x=x_i} \right\| =$$

$$= \left\| \left[ \frac{d^2u}{dt^2} \right]_{x=x_i} \right\| \left\| \frac{\Delta t}{2} + O(\Delta t^2) \right\| \approx Ck^{-1}$$

где для экономии места принято обозначение для нормы дискретного решения  $\|a_i\| \equiv \|\{a_i\}_{i=1}^k\|$  и учтено, что при фиксированном интервале изменения независимого переменного  $t$  величина шага  $\Delta t$  обратно пропорциональна числу шагов  $k$ .

## 1.2. Теоремы о сходимости

Основная теорема проекционных методов утверждает, что из аппроксимации и устойчивости следует сходимость. Рассмотрим ее подробнее.

Пусть для меры аппроксимации  $\gamma_k = \|A_k \varphi_k x - \phi_k Ax\|$  имеет место оценка  $\gamma_k = Ck^{-N}$ , где положительное число  $N > 0$  возможно является дробным и характеризует скорость убывания меры аппроксимации с ростом размерности  $k$  аппроксимирующего пространства  $X^k$ . Это число  $N$  называется порядком аппроксимации. Стремление меры аппроксимации к нулю в пределе при  $k \rightarrow \infty$  называется согласованностью конечномерной задачи с исходной бесконечномерной задачей.

Под устойчивостью конечномерной задачи понимается существование ограниченного обратного оператора  $\|A_k^{-1}\| \leq Mk^Q < \infty$ , где  $Q \geq 0$ . При этом возмущения решения малы, если малы возмущения правых частей и оператора задачи.

Теорема о сходимости каркасов приближенных решений формулируется так: *из аппроксимации  $\gamma_k = \|A_k \varphi_k x - \phi_k Ax\| = Ck^{-N}$  при  $N > 0$  и устойчивости  $\|A_k^{-1}\| \leq Mk^Q < \infty$  при  $Q \geq 0$  и  $N - Q > 0$ . следует сходимость каркасов приближенных решений:  $\tau_k = \|x^k - \varphi_k x^*\| \rightarrow 0$  при  $k \rightarrow \infty$ .*

Доказательство:

Поскольку  $A_k x^k = y^k = \phi_k y = \phi_k Ax$ , то

$$\begin{aligned} \tau_k &= \|\varphi_k x^* - x^k\| = \|A_k^{-1}(A_k \varphi_k x^* - A_k x^k)\| \leq \\ &\leq \|A_k^{-1}\| \|A_k \varphi_k x^* - \phi_k y\| \leq M C k^{-(N-Q)} \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Теорема о сходимости приближенных решений формулируется так: если при  $k \rightarrow \infty$  каркасы приближенных решений сходятся, то есть,  $\beta_k = \|A_k^{-1}\| \gamma_k \rightarrow 0$ , а оператор выполнения корректен, то есть  $\|\tilde{\varphi}_k \varphi_k x^* - x^*\| \rightarrow 0$ , и ограничен, то есть  $\|\tilde{\varphi}_k\| \leq P < \infty$ , то приближенные решения сходятся к точному:  $x^{(k)} \rightarrow x^*$ .

Доказательство:

$$\begin{aligned} \|x^{(k)} - x^*\| &= \|\tilde{\varphi}_k x^k - x^*\| \leq \|\tilde{\varphi}_k x^k - \tilde{\varphi}_k \varphi_k x^*\| + \|\tilde{\varphi}_k \varphi_k x^* - x^*\| \leq \\ &\leq \|\tilde{\varphi}_k\| \|\varphi_k x^* - x^k\| + \|\tilde{\varphi}_k \varphi_k x^* - x^*\| = \\ &= \|\tilde{\varphi}_k\| \|\varphi_k x^* - A_k^{-1} A_k x^k\| + \|\tilde{\varphi}_k \varphi_k x^* - x^*\| = \\ &= \|\tilde{\varphi}_k\| \|A_k^{-1} A_k \varphi_k x^* - A_k^{-1} \phi_k A x\| + \|\tilde{\varphi}_k \varphi_k x^* - x^*\| \leq \\ &\leq \|\tilde{\varphi}_k\| \beta_k + \|\tilde{\varphi}_k \varphi_k x^* - x^*\| \rightarrow 0. \end{aligned}$$

### 1.3. Ошибки проекционных методов

При численной реализации различают:  
ошибку в задании оператора задачи  $\Delta A$ ,  
ошибку в задании правой части  $\Delta y^*$  и  
ошибку в вычислении невязки уравнения  $\Delta_s$ .

Важным является вопрос о влиянии этих ошибок (неизбежных при численном моделировании) на получаемые приближенные решения.

Ошибка приближенного решения  $\Delta x^*$  определяется из уравнения:

$$(A + \Delta A)(x^* + \Delta x^*) = y^* + \Delta y^* + \Delta_s$$

и подчинена следующему неравенству (интересующиеся могут найти вывод этого неравенства в книге Гавурина (1971)):

$$\Delta x^* \leq \frac{\text{cond}(A)}{1 - \text{cond}(A) \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} \left[ \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta y^*\| + \|\Delta_s\|}{\|y^*\|} \right]$$

где  $\text{cond}(A) = \|A^{-1}\| \|A\| = \lambda_{\max} / \lambda_{\min} \geq 1$  - число обусловленности оператора  $A$ ,  $\lambda_{\max}$  и  $\lambda_{\min}$  - максимальное и минимальное собственные числа оператора  $A$ . Аналогичная оценка справедлива и для ошибки решения дискретизированной задачи  $x^k = A_k^{-1} y^k$ .

При больших значениях числа обусловленности  $\text{cond}(A) \gg 1$  влияние ошибок на решение становится катастрофически сильным и приводит к потере точности. Задачи с большими значениями числа обусловленности оператора задачи, называются плохо обусловленными задачами и представляют определенные трудности для решения. Операция преобразования (регуляризации) оператора задачи с целью улучшения его обусловленности называется предобусловливанием. Способы предобусловливания зависят от содержания задачи. На формальном уровне операторной записи можно сказать, что предобусловливание сводится к умножению уравнения задачи  $Ax = y^*$  на оператор  $B$ , приближенно равный обратному оператору задачи

$$BAx = By^*$$

В идеальном случае, когда  $B \equiv A^{-1}$ , такое умножение приводит к точному решению задачи с минимальным числом обусловленности, равным единице.

Определение числа обусловленности в виде отношения максимального и минимального собственных чисел справедливо только для положительно определенных, самосопряженных линейных операторов  $A$ .

В общем случае законеопределенных и несамосопряженных операторов  $A$  число обусловленности определяют отношением максимального и минимального сингулярных чисел, которые являются квадратными корнями собственных чисел положительно определенного и самосопряженного оператора  $A^T A$  (см. Форсайт, Мальколм, Молер, 1980).

## 1.4. Варианты метода Галеркина

Рассмотренная в разделе 1.2. общая схема проекционного метода называется методом Галеркина-Петрова, обобщенным методом Галеркина или методом взвешенных невязок. Термин "взвешенные невязки" означает "невязки, скалярно умноженные на весовые функции"  $\{v_i\}_{i=1}^k$ . Коэффициенты разложения по пробным базисным функциям называются в этой терминологии весовыми коэффициен-

тами.

В частном случае, если аппроксимационный и проекционный базисы совпадают, метод Галеркина-Петрова называется просто методом Галеркина или методом Бубнова-Галеркина.

Справедлива следующая лемма (см. Гавурин, 1971): преобразования базисов  $\{\mathbf{u}_i\}_{i=1}^k$ ,  $\{\mathbf{v}_i\}_{i=1}^k$ , сохраняющие аппроксимационную (координатную) и проекционную оболочки  $X^k$  и  $Y^k$ , не меняют решения  $x^{(k)}$ .

Напомним, что оболочками называют пространства, образованные всевозможными линейными комбинациями базисных векторов.

Выбор аппроксимационного и проекционного базисов критичен, поскольку влияет на скорость сходимости приближенных решений и на обусловленность систем алгебраических уравнений дискретизированной задачи. Примеры удачного и неудачного выбора базисных функций приведены далее в разделе про интерполяцию.

Для любой задачи существует бесконечное множество вариантов метода Галеркина-Петрова, которые могут различаться выбором аппроксимационного и проекционного пространств, выбором базисов, методами формирования систем дискретных уравнений, методами их решения и методами восполнения каркасов приближенных решений.

**Пример.** Если проекционный базис образован набором дельта-функций

$$v_i = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

определяемых соотношениями

$$f(\mathbf{r}_i) = \int_V f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) dV$$

то имеем *метод коллокации*, требующий обращения невязок в нуль в конечном числе заданных точек  $\mathbf{r}_i$  области решения. Метод коллокации при использовании аппроксимационного базиса из локальных полиномов для окрестностей узлов сетки, приводит к методу конечных разностей.

**Пример.** Выбор степенных функций в качестве проекционного базиса (то есть, в качестве весовых функций)

$$v_i = x^{i-1}$$

приводит к *методу моментов*, называемому так из-за аналогии формул для матрицы  $A_k$  и вектора  $y^k$  с определениями моментов сил

$(i-1)$ -го порядка.

## 1.5. Проекционные методы минимизации.

### 1.5.1. Метод Рэлея-Ритца

В случае положительно определенного самосопряженного оператора  $A$  исходное уравнение

$$Ax = y$$

является уравнением Эйлера для функционала энергии

$$F = \frac{1}{2}(Ax, x) - (y, x)$$

и выражает условия его минимума (равенство нулю вариации функционала):

$$\delta F = (Ax, \delta x) - (y, \delta x) = 0$$

где  $\delta x = x_1 - x_2$  - вариация решения, представляющая разность двух произвольных элементов (функций) пространства решений  $X$ .

Разыскивая приближенное решение вариационной задачи в виде проекции на линейную оболочку  $X^{(k)}$ , определяемую базисными векторами  $\{u_i\}_{i=1}^k$

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^k a_i u_i, \quad \delta x^{(k)} = \sum_{i=1}^k \delta a_i u_i$$

каркас приближенного решения  $x^{(k)} = \{a_i\}_{i=1}^k$  определяем из условий минимума функционала энергии  $\delta F = (Ax, \delta x) - (y, \delta x) = 0$ , которые можно переписать так

$$\delta F = \sum_{i=1}^k \frac{\partial}{\partial a_i} F(x^{(k)}) \delta a_i = 0 \quad (i=1, 2, \dots, k)$$

и, таким образом, приходим к системе уравнений метода Рэлея-Ритца:

$$\sum_{j=1}^k (Au_i, u_j) a_j = (y, u_i) \quad (i=1,2,\dots,k)$$

Система уравнений метода Рэлея-Ритца, как нетрудно заметить, совпадает с системой уравнений метода Бубнова-Галеркина  $(u_i, Ax_{(k)} - y^*) = 0$ . Однако, метод Бубнова-Галеркина является более общим, поскольку в отличие от метода Ритца он не требует существования функционала энергии и, соответственно, не требует положительной определенности и самосопряженности оператора исходной задачи. Область применимости методов Ритца ограничена задачами со знакоопределенными и самосопряженными операторами.

#### 1.5.2. Метод наименьших квадратов

В общем случае знаконеопределенного и несамосопряженного оператора  $A$  исходную задачу можно-таки свести к задаче поиска минимума функционала и затем использовать метод Ритца. Для этого в качестве функционала данной задачи принимается квадрат нормы невязки  $R_k = y - Ax^{(k)}$ , а именно, функционал  $F = (R_k, R_k)$ , тогда в качестве условий минимума  $F$  по  $a_j$  имеем следующую систему уравнений относительно  $a_j$ :

$$\sum_{j=1}^k (Au_i, Au_j) a_j = (y, Au_i), \quad i=1,2,\dots,k$$

Заметим, что система уравнений метода наименьших квадратов характеризуется симметричной и положительно определенной матрицей  $A^T A$ , но хуже обусловлена, чем система уравнений метода Бубнова-Галеркина, так как ее число обусловленности больше, чем у исходной системы уравнений

$$\text{cond}(A^T A) = (\text{cond}(A))^2 \geq \text{cond}(A) \geq 1$$

Поэтому система уравнений метода наименьших квадратов нуждается в предобусловливании путем умножения ее на приближенную обратную к  $A^T A$  матрицу для уменьшения числа обусловленности. Это необходимо для подавления влияния на решение ошибок при вычислении правой части и оператора задачи.

## 1.6. Нестационарные задачи

Рассмотрим применение проекционных методов в случае эволюционных уравнений. В этом случае запись исходной задачи в операторной форме содержит нестационарные члены с производной по времени  $\partial_t = \partial / \partial t$ , например:

$$\partial_t x = y^* - Ax$$

и начальные условия

$$x|_{t=0} = x_0(\mathbf{r})$$

Решение по методу Галеркина-Петрова ищется в виде разложения по пространственным базисным функциям, но с коэффициентами, зависящими от времени

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^k a_i(t) u_i(\mathbf{r})$$

То есть, каркасы приближенных решений являются искомыми функциями времени.

Разрешающие уравнения, как и для стационарных задач, выражают ортогональность невязки к проекционному пространству. Но из-за нестационарных членов разрешающие уравнения принимают вид системы обыкновенных дифференциальных уравнений по времени

$$\sum_{j=1}^k (v_i, u_j) \partial_t a_j = (y, v_i) - \sum_{j=1}^k (A u_j, v_i) a_j$$

где  $i=1,2,\dots,k$ . Начальные условия исходной задачи скалярным умножением на проекционный базис приводятся к начальным условиям для каркасов приближенных решений

$$\sum_{j=1}^k (v_i, u_j) a_j = (v_i, x_0)$$

Методы Бубнова-Галеркина ( $u_i = v_i$ ) и коллокации ( $v_i = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ ) также, в частности, применимы к нестационарным задачам.

Методы, основанные на минимизации функционалов также можно

применять в нестационарных задачах. Для этого можно строить вспомогательный функционал нормы ошибки на каждом шаге по времени, используя, например, разностную аппроксимацию производных по времени:

$$\frac{x^{n+1} - x^n}{\Delta t_n} = Ax^{n+1} - y^{n+1}$$

Для величин на каждом новом  $(n + 1)$ -м временном слое возникает вспомогательная стационарная задача уже рассмотренная ранее, так что все ранее рассмотренные проекционные методы можно применять и в этом случае.

## 1.7. Задачи на собственные значения

Задачи на собственные значения возникают во многих практических приложениях в связи с определением собственных частот и форм колебаний, критических нагрузок и форм потери устойчивости, построением спектральных базисов, точек неединственности и ветвления решений нелинейных задач.

Операторная запись линейной задачи на собственные значения имеет вид:

$$Ax = \lambda Bx$$

Тривиальное решение  $x = 0$  имеет место для любых значений числа  $\lambda$  и интереса не представляет. Требуется определить нетривиальные решения (собственные функции) и соответствующие значения параметра  $\lambda$  (собственные значения).

Проекционные методы отыскания нетривиальных решений, которые отвечают собственным значениям числа  $\lambda$ , основаны на представлении решения в виде линейных комбинаций координатных функций:

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^k a_i u_i$$

Для метода Галеркина-Петрова конечномерные (алгебраические) уравнения задачи на собственные значения выражают ортогональность невязки к проекционному пространству с базисом  $v_i$  и имеют вид:

$$A_k x^k = \lambda B_k x^k$$

где

$$A_k = \{(v_i, Au_j)\}_{i,j=1}^k, \quad B_k = \{(v_i, Bu_j)\}_{i,j=1}^k$$

Решение полученной алгебраической задачи на собственные значения получается далее методами линейной алгебры.

Имеется вариационный способ отыскания собственных решений для задач с самосопряженными операторами (Михлин (1970), Уилкинсон и Райнш (1976)). Если пронумеровать вещественные собственные числа по нарастанию их величины, то наименьшее собственное число определяется минимизацией отношения Рэля

$$\lambda_1 = \min_{x \in X} \frac{(Ax, x)}{(Bx, x)}$$

Следующие собственные значения  $\lambda_m$  для  $m = 2, 3, \dots$  также определяются с помощью минимизации отношения Рэля на подпространствах  $X \setminus X_{m-1}$

$$\lambda_m = \min_{x \in X \setminus X_{m-1}} \frac{(Ax, x)}{(Bx, x)}$$

где  $\tilde{X}_{m-1}$  - оболочка, натянутая на собственные функции, отвечающие первым  $m-1$  собственным числам. Подробное практическое описание этого метода, включающее программу для ЭВМ, можно найти в книге Уилкинсона и Райнша (1976) .

## Глава 2. Интерполяция

### 2.1. Задание функций

Известны следующие способы задания функций:  
*аналитический способ* подразумевает, что имеется формула для вычисления значения функции по значению аргумента;  
*алгоритмический способ* использует последовательность математических действий (алгоритм) вычисления функции по значению аргумента и, наконец,  
*табличный способ*, который определяет интерполяцией значение функции  $f(x)$  по ее значениям в конечном числе точек (то есть по таблице):  $(x_k, f_k)_{k=1}^N$ .

*Интерполяция* это аналитическое или алгоритмическое приближенное представление таблично заданной функции, позволяющее определить ее значение в любой точке ее области определения.

*Экстраполяция* это применение интерполяционных формул или алгоритмов для вычисления значений функции за пределами ее области определения.

Различают следующие основные типы интерполяции. *Глобальная интерполяция* использует базисные функции, отличные от нуля во всей области определения интерполируемой функции. Примером может служить интерполяция степенными или тригонометрическими функциями. Глобальная интерполяция часто является бессеточной.

*Локальная интерполяция* использует базисные функции, отличные от нуля в малой окрестности данной точки. Такие интерполяции используются при численном моделировании с применением сеток или частиц. Примером является одномерная сеточная кусочно-линейная интерполяция.

$$f(x) = \frac{(x - x_i)f_{i+1} + (x_{i+1} - x)f_i}{(x_{i+1} - x_i)}$$

где  $x \in [x_i, x_{i+1}]$ ,  $i = 1, 2, \dots, N - 1$ . Кусочно-линейная базисная функция  $\varphi_i(x)$  в этом случае ассоциируется с узлом  $i$ , где принимает значение 1, в то время как в остальных узлах она полагается равной нулю.

## 2.2. Полиномы Лагранжа

Функции полиномиального базиса следующего вида называются полиномами Лагранжа

$$\varphi^{(i)}(x) = \frac{\prod_{k=1, k \neq i}^N (x - x_k)}{\prod_{k=1, k \neq i}^N (x_i - x_k)} \equiv \frac{(x - x_1) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_N)}{(x_i - x_1) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_N)}$$

где  $i$ -й полином степени  $(N-1)$  принимает значение 1 в точке  $x_i$  и значение 0 во всех остальных табличных точках.

Таблично заданная функция приближенно представляется разложением по базису из полиномов Лагранжа, которое называют интерполяционным полиномом Лагранжа, а именно

$$f^{(N)}(x) = \sum_{i=1}^N f_i \varphi^{(i)}(x)$$

откуда видно, что табличные значения функции служат коэффициентами разложения.

Погрешность интерполяции Лагранжа определяется формулой

$$|f(x) - f^{(N)}(x)| \leq M |x - x_1| \cdots |x - x_N|$$

где  $|d^{(N)}f/dx^N| \leq M$ . Оценка справедлива при условии, что интерполируемая функция  $N$  раз непрерывно дифференцируема.

## 2.3. Степенные функции

Рассмотрим решение задачи интерполяции разложением по степенным функциям

$$f(x) = \sum_{i=1}^N c_i x^{i-1}$$

Интегральная ошибка разложения равна

$$E = \int_{x_1}^{x_N} \left[ \sum_{i=1}^N c_i x^{i-1} - f(x) \right]^2 dx,$$

Коэффициенты разложения определим из условий минимума ошибки

$$\frac{\partial E}{\partial c_i} = 0 \quad (i = 1, \dots, N)$$

которые приводят к системе уравнений

$$\sum_{j=1}^N h_{ij} c_j = b_i \quad (i = 1, \dots, N)$$

где

$$b_i = \int_{x_1}^{x_N} f(x) x^{i-1} dx, \quad h_{ij} = \int_{x_1}^{x_N} x^{i+j-2} dx = \frac{1}{i+j-1}$$

Матрица этой системы уравнений  $H = \{h_{ij}\}$  называется матрицей Гильберта и является очень плохой для вычислений, что сейчас станет видно.

## 2.4. Ошибки и число обусловленности

Ошибки в задании правой части и в задании матрицы системы уравнений влияют на решение системы алгебраических уравнений. Это влияние зависит от числа обусловленности, которое определяется по спектру собственных значений этой матрицы.

Уравнение для собственных значений матрицы  $H$  имеет вид

$$\det \{h_{ij} - \lambda \delta_{ij}\} = 0$$

где  $\delta_{ij}$  - дельта Кронекера, равная единице для одинаковых индексов и нулю в противном случае, она представляет индексную запись единичной матрицы.

Числом обусловленности симметричной вещественной положительной матрицы  $H$  называется величина

$$\text{cond}(H) = \|H\| \|H^{-1}\| = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$$

Число обусловленности по определению больше или равно единице.

Для законеопределенных матриц  $H$  число обусловленности определяется как отношение максимального и минимального сингу-

лярных чисел матрицы, которые являются квадратными корнями собственных чисел симметризованной положительной матрицы  $H^T H$ .

Можно показать, что ошибка решения  $|\delta c|$  системы линейных алгебраических уравнений

$$Hc = b$$

возникающая при внесении погрешности в правую часть  $|\delta b|$  растет пропорционально числу обусловленности (см. Форсайт, Моллер, 1967; Гавурин, 1971).

$$\|\delta \bar{c}\| / \|\bar{c}\| \leq \text{cond}(H) \|\delta \bar{b}\| / \|\bar{b}\|$$

## 2.5. Важность выбора базиса

Выбор базисных функций исключительно важен для успеха численных методов. В функциональном пространстве степенных полиномов, которому принадлежат полиномы Лагранжа, можно ввести другой базис (например, базис из степенных функций) и столкнуться с вычислительной катастрофой.

В случае базиса из степенных функций числа обусловленности для матрицы Гильберта очень быстро стремятся к бесконечности с ростом размерности  $N$  аппроксимационного пространства, что показано в Таблице 1.3.4.1.

Таблица 1.3.4.1. Зависимость числа обусловленности матрицы Гильберта  $\text{cond}(H)$  от числа базисных функций  $N$ .

$N$	2	3	4	5	6	7	8
$\text{cond}(H)$	19	524	15500	$477_{103}$	$150_{105}$	$475_{106}$	$153_{108}$

Большие значения числа обусловленности делают невозможным определение коэффициентов интерполяции уже при приближении числа базисных функций  $N$  к 10, так как неизбежно возникающие при реализации задачи на ЭВМ небольшие возмущения в правой части уравнения вызывают огромные изменения в решении. Отсюда следует вывод о том, что степенные функции образуют очень плохой базис, который приводит к очень плохо обусловленной задаче для определения коэффициентов интерполяции.

Хотя полиномы Лагранжа являются линейными комбинациями степенных функций и принадлежат тому же функциональному

пространству, они представляют наилучший базис в этом пространстве, поскольку система уравнений для коэффициентов интерполяционного полинома Лагранжа характеризуется единичной матрицей и имеет число обусловленности равное единице, что представляет идеальный случай хорошо обусловленной системы уравнений.

Рассмотренный пример показывает, что эффективность проекционного метода решения в значительной мере определяется выбором базиса.

## 2.6. Многомерная сеточная интерполяция

### 2.6.1. Типы сеток

Далее будет использоваться стандартная терминология для характеристики свойств используемых сеток. Говорят, что *сетка* задана, если ее узлы пронумерованы, координаты узлов заданы и для каждого узла сетки определены номера его соседей. Область определения заданной на сетке функции при этом должна быть аппроксимирована (приближенно представлена) объединением ячеек сетки, для которых указаны номера образующих эти ячейки узлов.

Регулярная (структурированная) сетка это такая сетка, для которой имеется правило для определения соседства узлов. Примером может служить  $ijk$ -сетка с координатами  $x_i = ih_x$ ,  $y_j = jh_y$ ,  $z_k = kh_z$ . В такой сетке для узла  $(i, j, k)$  соседями являются узлы  $(i \pm 1, j \pm 1, k \pm 1)$ .

В нерегулярных (неструктурированных) сетках соседство узлов определяется информационными массивами соседства, содержащими для каждого узла номера соседних узлов (массив шаблонов) или для каждой ячейки номера образующих ее узлов (массив ячеек).

В равномерной сетке все ячейки имеют одинаковую форму и размер. В неравномерных сетках имеются ячейки разных размеров. В однородных сетках все ячейки имеют одинаковое число узлов. В неоднородных сетках содержатся ячейки с разным числом узлов.

Ребром называется линия, соединяющая два соседних узла. Гранью называется поверхностная ячейка, служащая частью границы для объемной ячейки. Заметим, что регулярная сетка вполне может быть неравномерной и непрямоугольной при использовании криволинейных координатных линий, отвечающих постоянным значениям индексов  $i$ ,  $j$  или  $k$ . Валентностью узла называют число исходящих из него ребер.

Отдельно вводятся информационные массивы соседства узлов (номера узлов в ячейках или в шаблонах) для границ области решения. В одномерных задачах граница задана граничными точками. В двумерных задачах граница представляется отрезками линий, в трехмерных задачах граница чаще всего представляется двумерными треугольными ячейками. Это удобно, так как такие ячейки гарантированно являются плоскими.

### 2.6.2. Сплайн-аппроксимация

В основе сплайн-аппроксимации лежит идея приближения функции степенными полиномами невысокого порядка, каждый из которых действует на своей ячейке сетки. Коэффициенты таких полиномов определяются условиями коллокации (совпадения значений) этих полиномов и интерполируемой функции в точках коллокации и условиями сопряжения полиномов между собой по значению функции и ее нескольким низшим производным на границах между ячейками. Для замыкания системы алгебраических уравнений на границах области изменения функции сплайны подчиняются некоторым дополнительным граничным условиям (выражающим, например, равенство нулю старших производных). Сплайны применяются на регулярных сетках, имеющих  $ijk$  покоординатную нумерацию узлов, при этом условия непрерывности на границах ячеек также записываются по координатам. Кусочно-полиномиальная аппроксимация сплайнами приводит к хорошо обусловленным системам алгебраических уравнений относительно коэффициентов разложения. Системы уравнений для коэффициентов сплайна характеризуются ленточными матрицами.

Повышение точности сплайн-аппроксимации достигается измельчением сетки. Во многих случаях сплайны показывают очень хорошие результаты. Кубические сплайны (то есть, сплайны, образованные полиномами третьей степени) позволяют интерполировать табличные данные так, что человеческий глаз не замечает каких-либо изломов на получающихся графиках. Для точного воспроизведения окружности достаточно использовать параметрическое представление окружности ( $x = R \cos \varphi$ ,  $y = R \sin \varphi$ ) и представить функции  $x$  и  $y$  кубическими сплайнами на равномерной сетке четырех одномерных ячеек по параметрической координате  $\varphi$  ( $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ ).

Подробное изложение теории сплайн-аппроксимации с практическими примерами дано в монографии (Алберг, Нильсон, Уолш, 1973). Применение сплайн-аппроксимации рассмотрено подробно далее в разделе о численном решении двухточечных краевых задач.

### 2.6.3. Применение отображений

Часто криволинейные сетки получаются взаимно-однозначным невырожденным (без вывернутых ячеек) отображением  $x = x(\xi)$ , где  $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$  - координаты узлов прямоугольной сетки в  $n$ -мерном арифметическом пространстве,  $x = (x_1, \dots, x_n)$  координаты узлов (криволинейной) сетки в  $n$ -мерном актуальном пространстве, наведенной данным отображением. Сначала интерполяционные формулы получаются для прямоугольной сетки, а затем для интерполяции на криволинейной сетке используется формула интерполянтов на исходной прямоугольной сетке (прообразе) и криволинейной сетке (образе), которая имеет вид

$$f_x(x) = f_\xi(\xi(x))$$

### 2.6.4. L-координаты

Обобщение кусочно-полиномиальной аппроксимации на произвольные нерегулярные сетки приводит к методу конечных элементов. При этом для интерполяции на одномерных (отрезок), двумерных (треугольник) или трехмерных (тетраэдр) ячейках используются так называемые L-координаты.

Одномерные L-координаты. В одномерном случае ячейка сетки является отрезком  $[x_1, x_2]$ , соединяющим соседние узлы. Значение интерполируемой функции  $f(x)$  определяется по следующей интерполяционной формуле

$$f(x) = f_1 L_1(x) + f_2 L_2(x)$$

где  $x \in [x_1, x_2]$ , L-координаты определяются отношениями длин отрезков

$$L_1 = \frac{l_{2p}}{l_{21}} = \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1}, \quad L_2 = \frac{l_{p1}}{l_{21}} = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$$

где  $l_{ij} = x_i - x_j$ . Заметим, что  $L_1 + L_2 = 1$ .

Двумерные (площадные) L-координаты. В двумерном случае для треугольной ячейки значение интерполируемой функции  $f$  в точке  $p$  с координатами  $(x, y)$  по ее значениям в узлах определя-

ется по следующей интерполяционной формуле

$$f(x, y) = f_1 L_1(x, y) + f_2 L_2(x, y) + f_3 L_3(x, y)$$

где L-координаты определяются отношениями площадей треугольников

$$L_1 = \frac{\Delta_{p23}}{\Delta_{123}}, \quad L_2 = \frac{\Delta_{1p3}}{\Delta_{123}}, \quad L_3 = \frac{\Delta_{12p}}{\Delta_{123}}$$

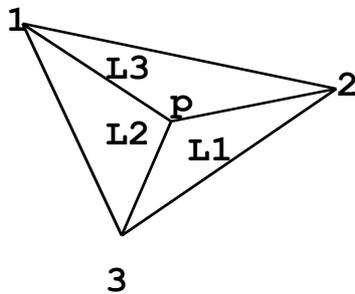


Рис. 1. Иллюстрация определения площадных L-координат.

Площадь треугольника  $\Delta_{ijk}$ , где  $i, j, k$  – номера узлов – вершин треугольника, определяется половиной векторного произведения векторов, представляющих смежные стороны треугольника:

$$\Delta_{ijk} = [(y_j - y_i)(x_k - x_i) - (y_k - y_i)(x_j - x_i)] / 2$$

или в другой записи

$$\Delta_{ijk} = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x_1 - x_m & y_1 - y_m \\ 1 & x_2 - x_m & y_2 - y_m \\ 1 & x_3 - x_m & y_3 - y_m \end{vmatrix}$$

где

$$x_m = (x_1 + x_2 + x_3) / 3$$

$$y_m = (y_1 + y_2 + y_3) / 3$$

Трехмерные (объемные) L-координаты. В трехмерном случае для тетраэдрального конечного элемента значение интерполируемой функции  $f$  в точке  $p$  с координатами  $(x, y, z)$  определяется по

значениям функции в узлах с помощью следующей интерполяционной формулы

$$f(x, y, z) = \sum_{i=1}^4 f_i L_i(x, y, z)$$

где  $L$ -координаты определяются объемами тетраэдров, основаниями которых являются грани исходного тетраэдра, а вершиной является точка  $p$ , отнесенными к объему исходного тетраэдра:

$$L_1 = \frac{V_{p234}}{V_{1234}}, L_2 = \frac{V_{1p34}}{V_{1234}}, L_3 = \frac{V_{12p4}}{V_{1234}}, L_4 = \frac{V_{123p}}{V_{1234}}$$

Напомним, что объем тетраэдра  $V_{ijkl}$ , где  $i, j, k, l$  – номера вершин, определяется формулой

$$V_{ijkl} = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} 1 & x_1 - x_m & y_1 - y_m & z_1 - z_m \\ 1 & x_2 - x_m & y_2 - y_m & z_2 - z_m \\ 1 & x_3 - x_m & y_3 - y_m & z_3 - z_m \\ 1 & x_4 - x_m & y_4 - y_m & z_4 - z_m \end{vmatrix}$$

где

$$x_m = (x_1 + x_2 + x_3 + x_4) / 4$$

$$y_m = (y_1 + y_2 + y_3 + y_4) / 4$$

$$z_m = (z_1 + z_2 + z_3 + z_4) / 4$$

Приведенные простейшие интерполяционные формулы используют кусочно-линейную аппроксимацию и имеют второй порядок точности, то есть ошибка интерполяции пропорциональна квадрату характерного размера ячейки:  $\varepsilon = O(h^2)$ . С помощью понятия  $L$ -координат строятся интерполяции и более высоких порядков. Более подробное описание дано в книге Сегерлинда (1979).

Заметим, что при вычислении площадей и объемов не следует упрощать формулы, полагая средние значения  $x_m, y_m, z_m$  равными нулю, что формально не нарушит формул для площадей и объемов. Фактически же такое обнуление приведет при больших значениях координат к потере точности из-за нехватки разрядности представления чисел в счетных машинах. Например, точность будет

## Глава 2. Интерполяция

---

потеряна, если мы попытаемся на простом калькуляторе таким образом вычислять площадь комнаты в Москве, располагая начало координат во Владивостоке.

Описанные в данной главе способы интерполяции далеко не исчерпывают их множества и разнообразия. Приведены только наиболее употребительные способы.

## Глава 3. Численное интегрирование

В практических задачах интегралы от нелинейных подынтегральных выражений по необходимости определяются численно. Для этого область интегрирования представляется суммой непересекающихся элементарных подобластей простой формы, называемых ячейками. Искомый интеграл представляется суммой интегралов по ячейкам, на каждой из которых для вычисления интеграла применяется приближенная квадратурная формула.

### 3.1. Простейшие квадратурные формулы

Простейшей квадратурной формулой является формула прямоугольников, которая в одномерном случае имеет вид:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = f(\tilde{x})(x_{i+1} - x_i)$$

и легко просто обобщается на двумерный и трехмерный случаи

$$\int_{S_k} f(x) dS = f(\tilde{x}) S_k, \quad \int_{V_k} f(x) dV = f(\tilde{x}) V_k$$

где  $(x_{i+1} - x_i)$  - длина одномерной ячейки,  $S_k$  - площадь поверхностной ячейки и  $V_k$  объем пространственной ячейки,  $\tilde{x}$  - некоторая точка, принадлежащая ячейке, в качестве которой чаще всего используется ее геометрический центр.

В одномерном случае оценка локальной ошибки квадратурной формулы прямоугольников выполняется так

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \left| \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx - f(\tilde{x})(x_{i+1} - x_i) \right| \leq \\ &\leq \left| f'(\tilde{x}) \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - \tilde{x}) dx \right| + \frac{1}{2} \left| f''(\tilde{x}) \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - \tilde{x})^2 dx \right| + (h_i^4) \end{aligned}$$

где  $h_i = x_{i+1} - x_i$ . Во всех точках кроме центра интервала  $x \neq x_{i+1/2} = 0.5(x_i + x_{i+1})$  локальная ошибка пропорциональна квадрату шага сетки:

$$\varepsilon = \frac{1}{2} M_i^{(1)} h_i^2 \quad |f'(x)| \leq M_i^{(1)}$$

а в центре интервала  $x = x_{i+1/2}$  она пропорциональна третьей степени шага сетки:

$$\varepsilon = \frac{1}{24} M_i^{(2)} h_i^3 \quad |f''(x)| \leq M_i^{(2)}$$

В середине интервала асимптотическая скорость убывания погрешности скачком возрастает. Такие точки называются *точками сверхсходимости*.

Пример квадратурной формулы повышенной точности дает формула Симпсона:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \frac{h}{3} (f_i + 4f_{i+1} + f_{i+2})$$

где  $h = x_{i+2} - x_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ .

Локальная ошибка для формулы Симпсона записывается так:

$$\varepsilon \sim M^{(4)} h^5, \quad |f^{(4)}(x)| \leq M^{(4)}$$

## 3.2 Квадратуры Гаусса

В многомерном случае применяются квадратурные формулы Гаусса

$$\int_V f(x) dV = \sum_{i=1}^N f(a_i) \omega_i \text{mes}(V) + R_N$$

где  $V$  -  $n$ -мерная ячейка (отрезок, треугольник, четырехугольник, тетраэдр, куб и т.д.),  $\text{mes}(V)$  - объем ячейки,  $N$  - количество гауссовых точек интегрирования  $x = a_i$ ,  $\omega_i$  - весовые коэффициенты, обладающие свойством

$$\sum_{i=1}^N \omega_i = 1$$

необходимым для точного интегрирования функции-константы,  $R_N$  - погрешность. Число гауссовых точек интегрирования  $N$ , их координаты  $a_i (i = 1, \dots, N)$  и весовые коэффициенты  $\omega_i (i = 1, \dots, N)$  для каждой квадратуры зависят от типа ячейки (линейная, плоская, объемная, треугольная, четырехугольная, тетраэдральная и так далее) и желаемой точности интегрирования. Таблицы часто используемых гауссовых квадратур приведены ниже.

### 3.2.1. Одномерное интегрирование

Приведем квадратуры Гаусса для вычисления интеграла

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(a_i)$$

где координаты точек интегрирования  $a_i = \pm a$ , число точек  $n$  и весовые коэффициенты  $\omega_i$  даны ниже в таблице

Таблица 1.3.2.1.

$a$	$\omega$
n=2	
0.577360	1.0
n=3	
0.774591	0.(5)
0	0.(8)
n=4	
0.861136	0.347865
0.339981	0.652145
n=5	
0.906180	0.236927
0.538470	0.478629
0.0	0.56(8)
n=6	
0.932470	0.171324
0.661210	0.360762
0.238619	0.467914
n=7	
0.949110	0.129485
0.741531	0.279705
0.405845	0.381830
0.0	0.417959

### Глава 3. Численное интегрирование

---

n=8	
0.960290	0.101228
0.796666	0.222381
0.525532	0.313707
0.183435	0.362684
N=9	
0.968160	0.081274
0.836031	0.180648
0.013371	0.260611
0.324253	0.312347
0.0	0.330239
n=10	
0.973906	0.066671
0.865063	0.149451
0.679410	0.219086
0.433395	0.269267
0.148874	0.295524

#### 3.2.2. Двумерное интегрирование

Квадратуры Гаусса для треугольных ячеек имеют вид

$$\int_{S_{\Delta}} f(x, y) dS = S_{\Delta} \sum_{i=1}^n \omega_i f(L_1, L_2, L_3) + R$$

где  $S_{\Delta}$  - площадь треугольника. В приводимой таблице даны значения L-координат точек численного интегрирования, соответствующие значения весовых коэффициентов  $\omega_i$  и погрешности  $R$

Таблица 1.3.2.2

$\omega$	$L_1$	$L_2$	$L_3$	Кратность
n=3, $R = O(h^2)$				
0.(3)	0.(6)	0.1(6)	0.1(6)	3
n=3, $R = O(h^2)$				
0.(3)	0.5	0.5	0.0	3
n=4, $R = O(h^3)$				
-0.56250	0.(3)	0.(3)	0.(3)	1
0.5208(3)	0.6	0.2	0.2	3
n=6, $R = O(h^3)$				
0.1(6)	0.659028	0.231933	0.109039	6
n=6, $R = O(h^4)$				
0.109952	0.816848	0.091576	0.091576	3
0.223381	0.108103	0.445948	0.445948	3
n=7, $R = O(h^4)$				
0.375	0.(3)	0.(3)	0.(3)	1
0.1041(6)	0.736712	0.237932	0.025355	6
n=7, $R = O(h^5)$				
0.225033	0.(3)	0.(3)	0.(3)	1
0.125939	0.797427	0.101286	0.101286	3
0.132394	0.470142	0.470142	0.059716	3
n=9, $R = O(h^5)$				
0.205950	0.124950	0.437525	0.437525	3
0.063691	0.797112	0.165410	0.037477	6
n=12, $R = O(h^6)$				
0.050845	0.873822	0.063089	0.063089	3
0.116786	0.501426	0.249287	0.249287	3
0.082851	0.636502	0.310352	0.053145	6
n=13, $R = O(h^7)$				
-0.149570	0.(3)	0.(3)	0.(3)	1
0.175615	0.479308	0.260346	0.260346	3
0.053347	0.869740	0.065130	0.065130	3
0.077114	0.638444	0.312865	0.048690	6

Приведенные формулы (Стренг и Фикс, 1977) симметричны относительно пространственных переменных, поэтому если встречается квадратурный узел  $(L_1, L_2, L_3)$ , то обязательно встречаются и все его перестановки. Если все  $L$ -координаты различны, то таких узлов

в квадратуре 6, если две L-координаты совпадают, то таких узлов три, если используется центральная точка (все L-координаты совпадают), то лишь один раз. В выражении для погрешности R величина h обозначает характерный размер треугольной ячейки.

### 3.2.3. Трехмерное интегрирование

Квадратуры Гаусса для интегралов по тетраэдральной ячейке имеют вид

$$\int_{V_{\Delta}} f(x, y) dS = V_{\Delta} \sum_{i=1}^n \omega_i f(L_1, L_2, L_3, L_4) + R$$

где обозначения предыдущего раздела сохранены. Значения L-координат гауссовых точек и весовых коэффициентов приведены в следующей таблице

Таблица 1.3.2.3.

Точки	L-координаты	$\omega$
N=1, R = O(h <sup>2</sup> )		
A	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	1.0
N=4, R = O(h <sup>3</sup> ), $\alpha = 0.585410, \beta = 0.138197$		
A	$\alpha, \beta, \beta, \beta$	$\frac{1}{4}$
B	$\beta, \alpha, \beta, \beta$	$\frac{1}{4}$
C	$\beta, \beta, \alpha, \beta$	$\frac{1}{4}$
D	$\beta, \beta, \beta, \alpha$	$\frac{1}{4}$
N=5, R = O(h <sup>4</sup> )		
A	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$-\frac{4}{5}$
B	$\frac{1}{3}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}$	$\frac{9}{20}$
C	$\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}$	$\frac{9}{20}$
D	$\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}$	$\frac{9}{20}$
E	$\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{3}$	$\frac{9}{20}$

## 3.3. Бессеточное интегрирование

Нередко возникает необходимость численного интегрирования функций многих переменных в областях сложной формы в условиях, когда никакой сетки нет, а сама подынтегральная функция определена алгоритмически. Например, такая ситуация создается при реализации бессеточных методов Галеркина, в которых решение ищется в виде разложения по некоторому, не связанному с какой-либо сеткой, набору финитных базисных функций. В таких случаях область решения покрывается равномерной регулярной  $ijk$  сеткой ячеек-параллелепипедов и интеграл представляется суммой интегралов по этим ячейкам. Запоминать такую сетку не надо. В каждой ячейке интеграл аппроксимируется по какой-либо квадратурной формуле, например, по формуле прямоугольников с точкой интегрирования в центре ячейки. Объем ячейки интегрирования известен, остается только вычислить значение подынтегрального выражения в гауссовой точке, умножить на весовой коэффициент и на объем ячейки и просуммировать вклады в интеграл от тех ячеек, гауссовы точки которых принадлежат области решения.

. Погрешности, возникающие из-за несогласованности сетки параллелепипедов с границей области интегрирования, стремятся к нулю при увеличении числа ячеек интегрирования. Упомянутая вспомогательная сетка используется только для целей численного интегрирования и, как уже было сказано, не требует запоминания каких-либо массивов в памяти ЭВМ, поэтому фактически реализация вычисления интегралов в бессеточных методах является бессеточной.

## Глава 4. Численное дифференцирование

### 4.1. Использование интерполянтов.

Наиболее очевидный способ численного дифференцирования заключается в построении интерполирующей функции и в ее последующем обычном дифференцировании. Пусть  $f^{(N)}(x)$  - интерполянт функции  $f(x)$  и ошибка интерполяции равна  $O(h^m)$ , где шаг  $h \sim 1/N$ ,  $N$  - число шагов,  $m > 0$  - порядок аппроксимации. Тогда интерполянт производной вычисляется так

$$\frac{df}{dx} = \frac{df^{(N)}}{dx} + O(h^{m-1})$$

в результате дифференцирования порядок аппроксимации производной (то есть  $m$  - показатель степени шага в ошибке) оказывается на единицу меньше, чем для самой функции. Интерполянты часто используются для вычисления производных во всех проекционных методах.

### 4.2. Метод неопределенных коэффициентов

Формулы для вычисления производных в узле сетки можно получить методом неопределенных коэффициентов. В соответствии с этим методом в окрестности данного узла сетки функция ищется в виде полинома. Коэффициенты полинома определяются из системы алгебраических уравнений, выражающих требование равенства значений полинома и функции в узлах (условия коллокации). Пока полиномы имеют невысокий порядок, вычислительная катастрофа, описанная в разделе про интерполяцию степенными функциями, нам не грозит. Ниже приводятся наиболее распространенные формулы численного дифференцирования, получаемые этим способом для одномерного случая. Выкладки по выводу формул элементарны и опущены.

Простейшая формула для производной первого порядка имеет вид:

$$f'_{hi}(x) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

Оценим ошибку аппроксимации, используя разложение Тейлора в окрестности точки  $x$

$$f'_h(x) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \left[ f(x) + f'(x)(x_{i+1} - x) + \frac{1}{2} f''(x)(x_{i+1} - x)^2 + O((x_{i+1} - x)^3) - \right. \\ \left. - f(x) - f'(x)(x_i - x) - \frac{1}{2} f''(x)(x_i - x)^2 + O((x_i - x)^3) \right]$$

откуда следует

$$f'_{hi}(x) = f'(x) + \frac{f''(x)[(x_{i+1} - x)^2 - (x_i - x)^2]}{2(x_{i+1} - x_i)} + O((x_{i+1} - x_i)^2)$$

то есть, ошибка имеет первый порядок для всех точек, кроме середины ячейки:  $x \neq x_{i+1/2} = 0.5(x_i + x_{i+1})$  и второй порядок в середине. Напомним, что точки ячеек, в которых производные имеют повышенный порядок точности, называют точками сверхсходимости.

Для равномерной сетки с шагом  $h$  формулы второго порядка точности для первой производной в точке  $x_i$  имеют вид:

$$f'_h = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h} \\ f'_h = \frac{4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}) - 3f(x_i)}{2h} \\ f'_h = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) - f(x_{i-2}))}{2h}$$

Формула для второй производной в точке  $x_i$  на неравномерной сетке имеет первый порядок точности и выглядит так:

$$f''_{hi} = \frac{2}{x_{i+1} - x_{i-1}} \left[ \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} - \frac{f(x_i) - f(x_{i-1}))}{x_i - x_{i-1}} \right]$$

Можно показать, что для равномерной сетки эта формула имеет второй порядок точности.

Метод неопределенных коэффициентов можно применять и в общем многомерном случае, однако при этом вывод формул можно предоставить вычислительной машине. В самом деле, для этого в окрестности каждого узла достаточно сформировать систему алгебраических уравнений (условий коллокации) для определения коэф-

фициентов усеченного ряда Тейлора, интерполирующего данную функцию. Из численного решения этой системы необходимые производные в данном узле определяются как коэффициенты разложения Тейлора.

### 4.3. Естественная аппроксимация производных

*Метод естественной аппроксимации производных* основан на интегральных определениях операторов дифференцирования. Например, для вычисления производных применяется формула Остроградского-Гаусса для преобразования интеграла по ячейке объема  $V_i$  в интеграл по ее поверхности  $S_i$

$$\int_{V_i} \nabla \cdot \mathbf{F} dV = \int_{S_i} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS$$

из которой, учитывая теорему Ролля или применяя квадратурную формулу прямоугольников, получают формулу для дивергенции

$$[\nabla \cdot \mathbf{F}]_i = \left( \int_{S_i} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS \right) \left( \int_{V_i} dV \right)^{-1}$$

Формулы для производных по отдельным координатам  $\partial f / \partial x, \partial f / \partial y, \partial f / \partial z$  получаются путем подстановки в это соотношение выражений  $\mathbf{F} = (f, 0, 0)$ ,  $\mathbf{F} = (0, f, 0)$ ,  $\mathbf{F} = (0, 0, f)$ . При интегрировании поверхность пространственной ячейки разбивается на треугольные или на плоские четырехугольные ячейки и используются квадратуры Гаусса, например, формула прямоугольников.

Для двумерного случая формулы дифференцирования принимают вид

$$\left[ \frac{\partial f}{\partial x} \right]_i = \left( \int_{l_i} f dy \right) \left( \int_{l_i} x dy \right)^{-1}, \quad \left[ \frac{\partial f}{\partial y} \right]_i = \left( \int_{l_i} f dx \right) \left( \int_{l_i} y dx \right)^{-1}$$

В отечественной литературе метод естественной аппроксимации производных называется интегро-интерполяционным методом дифференцирования. Описание метода и его оформление в виде теорем можно найти в книге "Вычислительные методы в гидродинамике" (1967), в монографии Годунова и Рябенского (1968).

#### 4.4. Метод отображений или метод якобианов

Метод отображений или якобианов позволяет использовать простейшие аппроксимации производных для равномерной сетки и в случае неравномерных сеток. Для этого произвольно ориентированная ячейка неравномерной и, возможно, неструктурированной сетки преобразованием координат отображается на каноническую ячейку (на ячейку простой правильной формы вроде отрезка, прямоугольника или параллелепипеда). В прямоугольных канонических ячейках используется простейшее численное дифференцирование, а затем искомые формулы дифференцирования для исходной сетки определяются обратным преобразованием координат.

Рассмотрим, например, определение производных для тетраэдральной ячейки, которая определяется 4 узлами  $(x_i, y_i, z_i), i = 1, 2, 3, 4$ . Отобразим ее на каноническую ячейку в трехмерном параметрическом пространстве (декартовых) координат  $\xi, \eta, \theta$  так, чтобы узел 1 находился в начале координат, а узлы 2, 3, 4 находились на осях координат  $\xi, \eta, \theta$  на единичном расстоянии от начала координат. Для данной канонической ячейки операция дифференцирования по координатам  $\xi, \eta, \theta$  тривиальна:

$$\partial_{\xi} f = f_2 - f_1, \quad \partial_{\eta} f = f_3 - f_1, \quad \partial_{\theta} f = f_4 - f_1$$

По цепному правилу дифференцирования легко найти связь производных в физическом и параметрическом пространствах:

$$\begin{aligned} \partial_{\xi} f &= \partial_x f \partial_{\xi} x + \partial_y f \partial_{\xi} y + \partial_z f \partial_{\xi} z \\ \partial_{\eta} f &= \partial_x f \partial_{\eta} x + \partial_y f \partial_{\eta} y + \partial_z f \partial_{\eta} z \\ \partial_{\theta} f &= \partial_x f \partial_{\theta} x + \partial_y f \partial_{\theta} y + \partial_z f \partial_{\theta} z \end{aligned}$$

В результате имеем три уравнения для определения трех искомого производных  $(\partial_x f, \partial_y f, \partial_z f)$  в физическом пространстве. Коэффициенты при неизвестных вычисляются так же легко, как и левые части. Искомые производные можно определить методом исключения Гаусса или с помощью правила Крамера. Матрица системы уравнений является матрицей Якоби преобразования координат. Якобиан (детерминант матрицы Якоби) должен быть положительным, чтобы система уравнений имела решение, а объемы ячеек оставались тоже положительными (не выворачивались наизнанку). Отсюда и про-

изошло название данного способа численного дифференцирования - метод якобианов. Формулы численного дифференцирования по методу якобианов совпадают с формулами естественной аппроксимации при использовании квадратурных формул прямоугольников. Формулы дифференцирования повышенной точности можно получать методом якобианов. Для этого надо повысить точность аппроксимации формул дифференцирования в параметрическом пространстве за счет введения дополнительных узлов, повышения точности интерполяционных полиномов и квадратурных формул.

## 4.5. Вариационный метод численного дифференцирования

Предположим, что для некоторой таблично заданной функции, надо найти ее вторые производные, а использовать разрешается только кусочно-линейную аппроксимацию. Формально, если сама функция представлена как кусочно-линейная, то ее первые производные, полученные непосредственным дифференцированием интерполанта на интервалах дифференцируемости будут кусочно-постоянными функциями, а вторые производные при дальнейшем дифференцировании на интервалах между разрывами окажутся равными нулю тождественно. То есть, метод непосредственного дифференцирования интерполантов в данном случае не работает. Выход, однако, имеется.

Соблюдая указанные выше условия, вторые производные можно найти, воспользовавшись их определением в смысле обобщенного решения. Обозначим искомые значения вторых производных функции  $f$  по какой-либо координате  $x$  символом  $f_{xx}$  и будем их искать как решение вариационной задачи о минимуме функционала

$$\Phi = \int_V [\partial^2 f / \partial x^2 - f_{xx}]^2 dV$$

Условия минимума имеют вид:

$$\delta \Phi = \int_V [f_{xx} - \partial^2 f / \partial x^2] \delta f_{xx} dV = 0$$

Выполняя интегрирование по частям, понизим порядок входящих в это уравнение производных, получим

$$\int_V f_{xx} \delta f_{xx} dV - \int_V \partial / \partial x (\partial f / \partial x \delta f_{xx}) dV + \int_V \partial f / \partial x \partial (\delta f_{xx}) / \partial x dV = 0$$

или

$$\int_V f_{xx} \delta f_{xx} dV - \int_{\partial V} n_x \frac{\partial f}{\partial x} \delta f_{xx} dV + \int_V \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (\delta f_{xx}) dV = 0$$

где  $n_x$  проекция внешней единичной нормали к границе области решения  $\partial V$ . Далее функция  $f_{xx}$  ищется как решение данной вариационной задачи на множестве кусочно-линейных функций, определенных на имеющейся сетке. На границе области решения  $\partial V$  при этом надо задать либо значения первой производной  $n_x \frac{\partial f}{\partial x}$ , либо значения искомой второй производной  $f_{xx}$ .

В наиболее простом варианте можно положить граничные значения  $f_{xx}$  равными нулю. При этом второй интеграл в вариационном уравнении исчезнет. Если же для первого интеграла в вариационном уравнении использовать квадратуры с гауссовыми точками в узлах сетки, то система уравнений для вторых производных в узлах будет иметь диагональную матрицу и будет явно разрешимой. Так что вторые производные определяются легко и быстро.

## Глава 5. Прямые методы решения СЛАУ

При реализации численных методов важным является вопрос о том, как решать возникающие системы алгебраических уравнений. В общем случае такие системы уравнений нелинейны. Решение нелинейных уравнений получается как предел последовательности решений вспомогательных линеаризованных уравнений. Поэтому ниже сначала рассматривается решение систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) вида

$$Ax - b = 0$$

где  $A$  - матрица системы уравнений,  $x$  - вектор неизвестных,  $b$  - вектор правой части. Ниже дается описание только наиболее важных для практического применения методов.

Под прямыми методами здесь подразумеваются различные варианты метода Гауссова исключения. Такие методы называются точными, поскольку они позволяют в принципе получить точное решение за конечное число операций. Отметим сразу, что для задач с большим числом дискретных параметров (узлов, ячеек) более предпочтительными являются итерационные методы, рассматриваемые в следующей главе.

### 5.1. Предобусловливание и масштабирование

Еще до решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) число обусловленности ее матрицы можно уменьшить и тем самым уменьшить чувствительность решения данной алгебраической задачи к возмущениям компонент матрицы и правой части, а также к ошибкам округления в процессе численного решения. Для этого можно умножить рассматриваемую СЛАУ на приближенную обратную матрицу системы ( $A_0^{-1}$ ). Такая операция называется предобусловливанием (или переобусловливанием) и приводит к новой системе уравнений, имеющей то же решение, но лучшие свойства:

$$A_0^{-1}(Ax - b) = 0, \quad 1 \leq \text{cond}(A_0^{-1}A) \leq \text{cond}(A)$$

*Масштабирование неизвестных* является простейшим частным случаем предобусловливания, когда приближенная обратная матрица выбирается диагональной, составленной из обратных диа-

гональных элементов исходной матрицы. Подробные примеры масштабирования приведены в книге (Форсайт и Молер, 1967).

Отметим, что масштабирование неизвестных вообще в численных алгоритмах играет важнейшую роль. Масштабирование делает задачи более удобными для численного анализа, позволяет избежать операций со слишком большими и слишком маленькими числами, придает значениям искомым величин ясный (физический) смысл и уменьшает влияние неизбежных при численном счете ошибок в представлении входных данных и результатов вычислений.

Заметим, что в литературе вместо ясного русского термина «обусловливание» часто встречается неграмотный термин «обуславливание», употреблять который не рекомендуется, см. Даль В. *Толковый словарь русского языка*. М.: ГИИНС, 1955. том. 3. стр.628.

## 5.2. Правило Крамера

Известное из линейной алгебры *правило Крамера* имеет вид

$$x_i = \det A_i / \det A$$

где матрица  $A_i$  получается из матрицы  $A$  заменой ее  $i$ -го столбца столбцом свободных членов.

Правило Крамера дает пример очень неэффективного метода решения СЛАУ с большим числом неизвестных из-за неприемлемо быстрого роста числа операций, пропорционального четвертой степени числа неизвестных. Для систем уравнений с малым числом неизвестных (меньше 5) правило Крамера удобно и часто применяется.

## 5.3. Методы исключения

Обычно гауссово исключение неизвестных производится путем линейного комбинирования уравнений (то есть путем сложения одного из уравнений с другим, умноженным на некоторое число, обеспечивающее в результате исключение одного из неизвестных). Последовательное исключение неизвестных проводится с учетом структуры матрицы СЛАУ так, чтобы минимизировать число операций с нулевыми элементами и не плодить по возможности, новых ненулевых элементов. В процессе исключения система уравнений сначала преобразуется к виду с нижней треугольной матрицей (прямой ход исключения), а затем она преобразуется к виду с единичной матрицей (обратный ход исключения), в результате решение дается вектором правой части преобразованной системы уравнений.

Описанная процедура исключения соответствует разложению матрицы  $A$  на нижнюю  $L$  и верхнюю  $U$  треугольные матрицы

$$A = LU$$

При этом прямой ход отвечает умножению исходной СЛАУ слева на обратную к  $L$  матрицу

$$U\mathbf{x} = L^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{c}$$

а обратный ход отвечает умножению слева полученного матричного уравнения на обратную к  $U$  матрицу

$$\mathbf{x} = U^{-1}\mathbf{c}$$

Число операций в методе Гаусса растет пропорционально кубу числа неизвестных. Так что метод Гаусса гораздо экономнее, чем правило Крамера.

**Метод Гаусса с выбором главного элемента.** Устойчивость (чувствительность решения к возмущениям коэффициентов уравнения и ошибкам округления) метода исключения Гаусса зависит от порядка реализации исключений. Наиболее устойчивым по отношению к возмущениям матрицы и правых частей, вызванных ошибками округления при вычислениях на ЭВМ, является метод исключений Гаусса с выбором главного элемента. В этом варианте метода Гаусса среди элементов  $a_{ij}$  ( $i, j = 1, \dots, n$ ) матрицы системы уравнений выбирается максимальный по модулю, называемый главным элементом. Пусть им является, например, элемент  $a_{pq}$ . Строка с номером  $p$ , содержащая главный элемент, называется главной строкой.

Далее из каждой  $i$ -й неглавной строки расширенной матрицы (со столбцом правой части системы уравнений) вычитается главная строка, умноженная на  $m_i = a_{iq} / a_{pq}$ . В результате получается матрица, у которой все элементы  $q$ -го столбца, за исключением  $a_{pq}$ , равны нулю. Отбрасывая этот столбец и главную строку, получим новую матрицу с меньшим на единицу числом строк и столбцов. С полученной матрицей описанная выше операция повторяется пока не получится матрица содержащая одну строку. Затем все главные строки подвергаются перестановке, приводящей систему уравнений к виду с треугольной матрицей. На этом оканчивается этап прямого хода. Решение полученной системы с треугольной матрицей составляет алгоритм обратного хода.

Заметим, что СЛАУ, возникающие при реализации проекционных методов, характеризуются матрицами с диагональным преобла-

данием, имеющими максимальные по модулю элементы на главной диагонали. Для таких систем уравнений выбор главного элемента означает их преобусловливание путем умножения на приближенную обратную матрицу, полученную обращением диагональной матрицы, составленной из диагональных элементов исходной матрицы.

**Прогонка.** Ленточными называют матрицы, у которых ненулевые элементы расположены вблизи главной диагонали. Для СЛАУ с ленточными матрицами метод Гаусса называется прогонкой. Например, для системы уравнений с трехдиагональной матрицей

$$\begin{aligned} a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} &= d_i \quad (i = 1, \dots, N) \\ x_0 &= U_0, \quad x_{N+1} = U_1 \end{aligned}$$

где  $a_i, b_i, c_i (i = 1, \dots, N), U_0, U_1$  заданы, формулы метода прогонки имеют вид:

$$x_i = X_i x_{i+1} + Y_i \quad (i = 1, \dots, N)$$

где

$$X_i = \frac{-c_i}{b_i + a_i X_{i-1}}, \quad Y_i = \frac{d_i - a_i Y_{i-1}}{b_i + a_i X_{i-1}} \quad (i = 1, \dots, N)$$

$$X_0 = 0, \quad Y_0 = U_0$$

На прямом ходе прогонки определяются коэффициенты  $X_i$  и  $Y_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ), а затем на обратном ходе для  $i = N, \dots, 1$  по формулам метода прогонки определяется искомое решение.

**Матричная прогонка.** Прогонка для СЛАУ с блочно-ленточными матрицами называется матричной. При этом коэффициенты  $a_i, b_i, c_i, d_i$  из предыдущего примера являются квадратными матрицами порядка  $m$  (блоками), а искомые неизвестные  $x_i$  являются векторами размерности  $m$ . Формулы метода прогонки сохраняют свой вид, только деление надо понимать как умножение на обратную матрицу.

Алгоритм метода прогонки устойчив для матриц с диагональным преобладанием, если модуль диагонального элемента в строке больше суммы модулей остальных элементов данной строки. Это свойство называется принципом максимума. Число операций в

методе прогонки растет пропорционально  $n^2 m_1$ , где  $m_1$  - ширина ленты.

**Экономичное вычисление определителей.** Для экономичного вычисления определителя  $\det(A)$  достаточно выполнить прямой ход метода Гаусса и затем найти произведение ведущих (главных) элементов

$$\det(A) = a_{11} a_{22}^{(1)} \dots a_{nn}^{(n-1)}$$

где  $a_{ii}^{(i-1)}$  - значение главного элемента в  $i$ -й строке после использования первых  $(i-1)$  строк в прямом ходе процедуры исключения.

## 5.4. Оптимизация структуры и хранение матриц СЛАУ

Структура матриц СЛАУ, порождаемых проекционными методами при различных способах аппроксимации, зависит от выбора базисных функций и их нумерации. Для финитных базисных функций, матрицы получаются редкозаполненными, имеющими большое число нулевых элементов, поскольку скалярные произведения базисных функций, носители которых не пересекаются, равны нулю (носителем функции называется область, в которой она отлична от нуля). Редкозаполненные матрицы свойственны большинству сеточных методов. Напротив, в проекционных методах, использующих глобальные базисные функции, матрицы для коэффициентов разложения решения по базису получаются полностью заполненными, хотя в большинстве случаев абсолютная величина элементов матрицы убывает по мере удаления от главной диагонали. Иногда удаленными от главной диагонали элементами можно пренебрегать без заметной потери точности решения.

В методах, использующих локальные базисные функции, имеется связь между структурой матриц (расположением ненулевых элементов) и нумерацией базисных функций. В сеточных методах это выражается в зависимости структуры матрицы от нумерации узлов. Поэтому в 1970-е годы много работ было посвящено построению алгоритмов перенумерации узлов сетки для преобразования системы уравнений к виду с ленточной матрицей с минимальной шириной ленты.

Для больших задач со многими тысячами неизвестных актуальной является родственная проблема экономичного формирования и хранения матриц решаемых систем уравнений. Ленточные матрицы

требуют меньшей памяти машины, отсюда происходит интерес к оптимизации нумерации узлов.

При хранении произвольных редкозаполненных матриц хранят обычно только ненулевые элементы вместе с информацией об их расположении (по строкам хранят номера столбцов ненулевых элементов).

В настоящее время это направление практически потеряло актуальность, поскольку разработаны точные итерационные методы решения, которые сходятся к точному решению за конечное число итераций. Такие методы, рассматриваемые в следующем разделе, вообще не требуют формирования и хранения матриц СЛАУ, довольствуясь вычислением невязок алгебраических уравнений. Таким образом, проблемы формирования и хранения матриц, оптимизации их структуры, оптимальной нумерации узлов или базисных функций при реализации таких методов отсутствуют. Отметим, что безматричные итерационные методы все чаще используются даже для решения задач на собственные значения, что традиционно требовало работы с матрицами, представлявшими свойства физических систем.

Сказанное не означает, что прямые методы потеряли свою актуальность, а лишь то, что они потеряли монополию на звание точных методов и в настоящее время все больше уступают свои позиции итерационным методам типа метода сопряженных градиентов. Это объясняется тем, что итерационные методы легче реализовывать и легче приспособлять к расчетам на многопроцессорных компьютерах, а также тем, что безматричные итерационные методы требуют значительно меньших вычислительных ресурсов памяти и быстродействия.

## 5.5. Симметризация СЛАУ

Симметризация СЛАУ необходима для функционирования некоторых методов решения и заключается в переходе к симметризованной системе уравнений

$$A^T(Ax - b) = 0$$

с симметричной положительной матрицей  $A^T A$ . Симметризация увеличивает число ненулевых элементов и увеличивает ширину ленты для ленточных матриц. Обусловленность системы при этом ухудшается, так как

$$\text{cond}(A^T A) = (\text{cond}(A))^2$$

Поэтому при использовании симметризации необходимо дополнительное преобусловливание, не нарушающее симметрии.

Несмотря на требующуюся дополнительную вычислительную работу, симметризация часто производится, поскольку задачи с симметричными и положительными матрицами предпочтительны для численного решения (для таких задач решение заведомо существует и единственно).

## 5.6. Метод $LDL^T$ -факторизации

Рассмотрим далее наиболее распространенные методы гауссова исключения. Начнем с метода  $LDL^T$ -факторизации. Симметричная матрица коэффициентов может быть разложена в произведение нижней треугольной, диагональной и верхней треугольной матриц, т.е.

$$A = LDL^T$$

Это разложение называется тройной факторизацией. С его помощью СЛАУ решается в два этапа

$$Lc = b$$

$$DL^T x = c$$

Сначала первое из этих уравнений решается относительно  $c$ , а затем второе относительно  $x$ . Элементы матриц  $D$  и  $L$  вычисляются по формулам

$$d_{ii} = a_{ii} - \sum_{m=1}^{i-1} l_{im}^2 d_{mm}$$
$$l_{ii} = 1$$
$$l_{ij} = (1/d_{ii}) \left( c_i - \sum_{m=i+1}^n d_{im} l_{mi} x_m \right)$$

где  $n$  - число неизвестных.

Разложение  $LDL^T$  эффективно выполняется вычислением элементов  $D$  и  $L$  по столбцам. При этом метод факторизации работает значительно быстрее простого метода исключения Гаусса.

## 5.7. Метод квадратного корня

Метод квадратного корня эффективно реализует гауссово исключение для СЛАУ с симметричными положительно определенными матрицами, не меняя при этом ширину ленты исходной матрицы СЛАУ (см., например, Копченова и Марон, 1972; Уилкинсон и Райнш, 1976). Положительная симметричная матрица  $A$  представляется произведением взаимно транспонированных треугольных матриц:

$$A = \tilde{L}^T \tilde{L}$$

где компоненты матрицы  $\tilde{L} = [\tilde{l}_{ij}]$  определяются формулами

$$\begin{aligned} \tilde{l}_{11} &= \sqrt{a_{11}}, \quad \tilde{l}_{1j} = \frac{1}{\tilde{l}_{11}} a_{1j}, \quad j=2, \dots, n; \\ \tilde{l}_{ii} &= \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} (\tilde{l}_{ki})^2}, \quad \tilde{l}_{ij} = \frac{1}{\tilde{l}_{ii}} \left( a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \tilde{l}_{ki} \tilde{l}_{kj} \right), \quad j=i+1, \dots, n. \end{aligned}$$

Решение системы уравнений  $Ax = b$  по методу квадратного корня сводится к обращению двух треугольных матриц.

## 5.8. Метод Холецкого

Иногда метод квадратного корня называют методом Холецкого, хотя в методе Холецкого используется другое разложение, а именно

$$A = LU$$

где отличные от нуля компоненты матриц  $U$  и  $L$  определяются так:

$$\begin{aligned} u_{i1} &= a_{i1} \\ u_{ij} &= a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} u_{ik} l_{kj} \quad (i \geq j > 1) \\ l_{ij} &= 1, \quad l_{1j} = \frac{a_{1j}}{u_{11}} \\ l_{ij} &= \frac{1}{u_{ii}} \left( a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} u_{ik} l_{kj} \right) \quad (1 < i < j) \end{aligned}$$

а искомый вектор  $x$  вычисляется из уравнений с треугольными матрицами

$$Uy = b, \quad Lx = y$$

**Неполное разложение Холецкого**, а также **приближенная версия метода квадратного корня** используют приближенные треугольные матрицы, вычисленные с пренебрежением компонентами матрицы  $A$ , расположенными вне ленты заданной ширины. Приближенные обратные матрицы, основанные на неполном разложении Холецкого, часто служат эффективным предобусловливателем для ускорения сходимости итерационных методов решения. При этом для эффективного предобусловливания часто достаточно использовать ширину ленты, равную единице, то есть попросту ограничиться диагональным приближением матрицы разложения Холецкого  $\tilde{L} = |\tilde{l}_{ij}|$ , образованным квадратными корнями диагональных элементов матрицы  $A$ . Метод Холецкого требует немного больше операций, нежели метод тройной  $LDL^T$ -факторизации, но он также значительно быстрее простого метода исключения Гаусса.

## 5.9. Фронтальные методы

При решении задач с большим числом неизвестных матрицы систем уравнений в оперативной памяти ЭВМ не умещаются и их хранят на устройствах внешней памяти (лентах, дисках, барабанах). Метод исключения Гаусса при этом реализуется поэтапно так, что на каждом этапе прямого и обратного хода процесса исключения в оперативной памяти ЭВМ находится лишь активная часть матрицы СЛАУ.

Этот способ решения реализуют фронтальные методы решения конечноэлементных СЛАУ путем фронтального обхода конечноэлементной сетки элемент за элементом (отсюда произошло название методов). Фронтальные методы подробно разбираются в монографиях по численному решению больших разреженных СЛАУ метода конечных элементов (см. Норри и де Фриз, 1981). Эти методы требуют интенсивного обмена данными с медленными устройствами внешней памяти, хранящими матрицу системы уравнений, поэтому они заведомо неэффективны. Их применяли в условиях, когда большие системы уравнений требовалось решить любой ценой, невзирая на затраты машинного и обычного времени. Сейчас такие задачи без особых проблем эффективно решаются безматричными итерационными методами вроде метода сопряженных градиентов.

## 5.10. Исключение внутренних степеней свободы

Блочные методы исключения дают интересную возможность, о которой стоит упомянуть.

В СЛАУ, возникающих при использовании сеточных методов решения краевых задач, неизвестные  $\mathbf{x}$  можно разделить на две группы, первая из которых  $\mathbf{x}_{(1)}$  содержит искомые значения в граничных узлах, а вторая  $\mathbf{x}_{(2)}$  содержит значения решения во внутренних узлах. Система уравнений в блочной форме принимает вид

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{(1)} \\ \mathbf{x}_{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_{(1)} \\ \mathbf{b}_{(2)} \end{pmatrix}$$

Если исключить сначала все неизвестные, связанные с внутренними узлами, то получится система уравнений, содержащая связи между значениями решения на границе области решения

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{(2)} &= \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{b}_{(2)} - \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{x}_{(1)} \\ (\mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21}) \mathbf{x}_{(1)} &= \mathbf{b}_{(1)} - \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{b}_{(2)} \end{aligned}$$

Новая матрица СЛАУ  $(\mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21})$ , называемая передаточной матрицей, играет роль дискретной функции влияния Грина. Порядок такой матрицы значительно меньше порядка исходной матрицы, так как для сеток с большим числом узлов число граничных точек значительно меньше числа внутренних точек.

Хотя передаточная матрица является полностью заполненной, экономия в вычислениях достигается при использовании блочного представления области решения с применением исключения внутренних переменных для каждого однотипного блока, называемого *суперэлементом*. Такой вариант гауссовского исключения в методе конечных элементов называется *методом суперэлементов*.

Изучаемый в математической физике метод функций влияния Грина является дифференциальным аналогом метода суперэлементов. Аналогичная идея лежит и в основе методов граничных элементов и граничных интегральных уравнений. Подробнее с методом суперэлементов можно познакомиться по книге Постнова (1979). Метод граничных элементов рассматривается здесь в отдельной главе.

## 5.11. Итерационное уточнение

Из-за плохой обусловленности СЛАУ решение, полученное прямыми методами, нередко содержит погрешности, которые можно уменьшить посредством итерационного уточнения решения. Пусть

$\tilde{\mathbf{x}}$  - полученное прямым методом приближенное решение СЛАУ. Используя арифметику с двойной точностью, вычисляют невязку

$$\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\tilde{\mathbf{x}}$$

а затем решают уравнение

$$A\mathbf{y} = \mathbf{r}$$

относительно  $\mathbf{y}$  и определяют уточненное решение

$$\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{y}$$

Этот процесс повторяется, пока поправка не станет достаточно малой. Если поправка мала, то можно ожидать, что полученное решение обладает достаточной точностью, в противном случае СЛАУ плохо обусловлена. Более подробно итерационное уточнение обсуждается в книге (Форсайт и Молер, 1969).

## Глава 6. Итерационные методы решения СЛАУ

Значительные упрощения в алгоритмах решения СЛАУ возможны при использовании итерационных методов решения. Современные итерационные методы сильно потеснили прямые методы Гауссова исключения, особенно при решении задач с очень большим числом неизвестных, для которых итерационные методы решения не имеют альтернативы.

### 6.1. Метод простой итерации

Простейший итерационный процесс решения системы алгебраических уравнений носит название метода простой итерации и имеет следующий вид:

$$x^{n+1} = x^n - A_0^{-1}(Ax^n - b)$$

где  $A_0$  - некоторая невырожденная матрица, аппроксимирующая матрицу системы уравнений  $A$ , для которой нетрудно найти обратную. Для ошибки  $e^n = x^n - x^*$  (разность приближенного и точного решений) итерационный процесс переписывается в виде

$$e^n = (I - A_0^{-1}A)^n e^0$$

Условие сходимости, называемое принципом сжимающих отображений, имеет вид

$$\|I - A_0^{-1}A\| < 1 \Rightarrow \|e^n\| \leq \|e^0\| \|I - A_0^{-1}A\|^n \rightarrow 0$$

Отображение  $\Psi(x) = x - A_0^{-1}(Ax - b)$  преобразует решение рассматриваемой системы уравнений в себя  $x = \Psi(x)$ , поэтому решение называют неподвижной точкой этого отображения.

### 6.2. Метод последовательных смещений

Алгоритм метода последовательных смещений, называемого также методом Гаусса-Зейделя или методом Либмана, имеет следующий вид.

1. задается начальное приближение  $x_i^{(0)}$ .

2. Цикл по уравнениям  $i=1,2,\dots,N$ :

$$x_i^{(n+1)} = a_{ii}^{-1} \left( b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(n+1)} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij} x_j^{(n)} \right)$$

3. Если  $\max |x_i^{(n+1)} - x_i^{(n)}| > \varepsilon$ , то повторить цикл 2.

Пусть  $D$  - диагональная матрица, составленная из диагональных элементов матрицы  $A$ ,  $L$  - нижняя треугольная матрица, составленная из элементов матрицы  $A$  исключая главную диагональ, а  $U$  - верхняя треугольная матрица из оставшихся элементов  $A$

$$A = L + D + U$$

тогда рассмотренный процесс можно записать кратко так:

$$(D + U)x^{(n+1)} + Lx^{(n)} = b$$

Для сходимости матрица  $(D + U)^{-1}L$  должна удовлетворять принципу сжимающих отображений.

### 6.3. Методы последовательной релаксации

Для ускорения сходимости процесс последовательных смещений модифицируется.

$$(D + U)x^{(n+1)} + \omega Lx^{(n)} = b$$

Если параметр релаксации имеет величину  $1 \leq \omega \leq 2$ , то имеем *метод последовательной верхней релаксации*, если же  $0 \leq \omega \leq 1$ , то имеем *метод последовательной нижней релаксации*. Методы последовательных смещений и релаксации использовались довольно часто на начальной стадии развития численных алгоритмов в 50-60-70 годы 20-го столетия, пока не были вытеснены более эффективными методами исключения и сопряженных градиентов.

### 6.4. Градиентные методы

Можно построить функционалы, для которых рассматриваемая система уравнений будет выражать условия их минимума. Для положительно определенных симметричных матриц  $A$  (то есть

таких, что для любого  $x \neq 0$  скалярное произведение  $Ax \cdot x > 0$ ) существует положительно определенный функционал энергии

$$\Psi(x) = \frac{1}{2} Ax \cdot x - b \cdot x.$$

Для произвольной невырожденной матрицы можно построить положительно определенный функционал нормы невязки

$$\Psi(x) = (Ax - b) \cdot (Ax - b)$$

Очевидно число различных функционалов, имеющих минимум на решении рассматриваемой системы уравнений, бесконечно.

Градиентный метод минимизации функционала энергии под названием *метод наискорейшего спуска* был предложен Коши в 1845 году. Метод имеет вид

$$x^{n+1} = x^n - \alpha_n g^n, \quad g^n = Ax^n - b, \quad \alpha_n = \frac{g^n \cdot g^n}{Ag^n \cdot g^n}$$

где счетчик итераций  $n=0,1,2,\dots$ . Коэффициент  $\alpha_n$  обеспечивает минимум одномерному функционалу  $\Phi(x) = 0.5Ax \cdot x - b \cdot x$  вдоль линии  $x(\alpha) = x^n - \alpha_n g^n$  (точка минимума определяется из условия  $\partial\Phi / \partial\alpha_n = 0$ ).

Аналогичный метод минимизации функционала нормы невязки называется *методом минимальных невязок* и имеет вид

$$x^{n+1} = x^n - \alpha_n g^n, \quad g^n = Ax^n - b, \quad \alpha_n = \frac{g^n \cdot Ag^n}{Ag^n \cdot Ag^n}$$

где счетчик итераций  $n=0,1,2,\dots$ . Коэффициент  $\alpha_n$  обеспечивает минимум одномерному функционалу  $\Phi(x) = (Ax - b) \cdot (Ax - b)$  вдоль линии  $x(\alpha) = x^n - \alpha g^n$ .

Оба описанных градиентных метода очень быстро минимизируют функционалы на первых итерациях, а потом начинают “буксовать”, то есть дальнейшее итерирование показывает очень медленную сходимость, делающую применение градиентных методов неэффективным. Это особенно проявляется в случае, когда собственные значения матрицы  $A$  сильно различны.

## 6.5. Метод сопряженных градиентов

Недостаток эффективности градиентных методов устранен в методе сопряженных градиентов, первый вариант которого был предложен Хестенесом и Штифелем (1952). Алгоритмы метода сопряженных градиентов относятся к числу наиболее эффективных методов для СЛАУ большой размерности, возникающих при численном решении задач механики сплошных сред. Они решают систему уравнений за конечное число операций. Это обусловлено тем, что на каждой итерации эти методы определяют очередной базисный элемент и соответствующую проекцию искомого решения. Поэтому число итераций не превышает числа базисных элементов конечномерного пространства.

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Итерационный процесс метода сопряженных градиентов имеет вид

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(n+1)} &= \mathbf{x}^{(n)} - \alpha_n \mathbf{s}^{(n)} \\ \mathbf{s}^{(n+1)} &= \mathbf{g}^{(n+1)} - \beta_n \mathbf{s}^{(n)}\end{aligned}$$

где  $n=0,1,\dots$ . Вектор невязки (градиента) определяется соотношениями

$$\begin{aligned}\mathbf{g}^{(n+1)} &= \mathbf{g}^{(n)} - \alpha_n \mathbf{A} \mathbf{s}^{(n)} \\ \mathbf{g}^{(0)} &= \mathbf{A} \mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{b}\end{aligned}$$

коэффициенты  $\alpha_n$  и  $\beta_n$  определяются формулами

$$\begin{aligned}\alpha_n &= \frac{\mathbf{g}^n \cdot \mathbf{s}^n}{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{s}^n) \cdot \mathbf{s}^n} \\ \beta_n &= \frac{\mathbf{A} \mathbf{g}^{n+1} \cdot \mathbf{s}^n}{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{s}^n) \cdot \mathbf{s}^n}\end{aligned}$$

если минимизируется функционал энергии. Решение в этом случае представлено проекциями на  $\mathbf{A}$ -ортогональный базис  $\mathbf{A} \mathbf{s}^{n+1} \cdot \mathbf{s}^n = 0$ ,  $\mathbf{g}^{n+1} \cdot \mathbf{s}^n = 0$ .

Если же минимизируется функционал нормы невязки, то коэффициенты  $\alpha_n$  и  $\beta_n$  определяются формулами

$$\alpha_n = \frac{\mathbf{g}^n \cdot \mathbf{A}\mathbf{s}^n}{\mathbf{A}\mathbf{s}^n \cdot \mathbf{A}\mathbf{s}^n}$$

$$\beta_n = \frac{\mathbf{A}\mathbf{g}^{n+1} \cdot \mathbf{A}\mathbf{s}^n}{\mathbf{A}\mathbf{s}^n \cdot \mathbf{A}\mathbf{s}^n}$$

Решение при этом представлено проекциями на  $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ -ортогональный базис  $\mathbf{A}\mathbf{s}^{n+1} \cdot \mathbf{A}\mathbf{s}^n = 0$ ,  $\mathbf{g}^{n+1} \cdot \mathbf{A}\mathbf{s}^n = 0$ .

В первом случае метод минимизирует функционал энергии, во втором случае – функционал нормы невязок. В первом случае матрица  $\mathbf{A}$  должна быть знакоопределенной (положительной или отрицательной). Во втором случае матрица  $\mathbf{A}$  должна быть просто невырожденной. Свойство симметричности матрицы  $\mathbf{A}$  в обоих случаях не требуется.

Классические формулы для коэффициентов  $\alpha_n$  и  $\beta_n$ , предложенные Хестенесом и Штифелем, имеют вид

$$\alpha_n = \frac{\mathbf{g}^n \cdot \mathbf{s}^n}{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{s}^n) \cdot \mathbf{s}^n}$$

$$\beta_n = \frac{\mathbf{g}^{n+1} \cdot \mathbf{A}\mathbf{s}^n}{(\mathbf{A} \cdot \mathbf{s}^n) \cdot \mathbf{s}^n}$$

Эти формулы получаются в результате решения на каждой итерации двухпараметрической (параметры  $\alpha$  и  $\beta$ ) задачи минимизации функционала энергии  $\Phi(x) = 0.5\mathbf{A}x \cdot x - \mathbf{b} \cdot x$ , что приводит к дополнительным требованиям положительности и симметричности матрицы  $\mathbf{A}$ . В первых двух вариантах метода на каждой итерации требуется два умножения матрицы  $\mathbf{A}$  на вектор (плата за несимметричность), в третьем (классическом) методе требуется только одно такое умножение, но повторяем, матрица должна быть симметричной и положительной.

Методы сопряженных градиентов обеспечивают решение задачи за число итераций, не превосходящее числа неизвестных, поскольку в итерациях последовательно вырабатывается базис в конечномерном пространстве решения и тут же находятся проекции решения на этот базис. Поскольку число базисных элементов конечно, то и число итераций конечно. При хорошем начальном приближении число итераций резко сокращается. Оно сокращается также и при хорошем предобусловливании. Подчеркнем, что предобусловливание абсолютно необходимо, иначе из-за ошибок в определении базиса свойство конечности числа итераций для определения решения будет утеряно. Реально для достижения машинной точности требуется  $N^{1/2}$  итераций. Например, СЛАУ с миллионом неизвестных решится за 1000 итераций!

## 6.6. Безматричные итерационные методы

Итерационные методы, основанные на вычислении невязок или градиентов, не требуют вычисления матриц СЛАУ. Основной проблемно-ориентированной на конкретную задачу механики операцией является вычисление вектора невязки СЛАУ (градиента минимизируемого функционала), которое легко реализуется без формирования матрицы системы уравнений. Вычисление невязки на каждой итерации совпадает с вычислением временного шага явных схем для нестационарных задач механики. Поэтому проблемы, связанные с формированием и хранением матриц СЛАУ и оптимизацией их структуры путем оптимальной перенумерации узлов сетки, в итерационных методах не возникают вообще. Алгоритмы сильно упрощаются по сравнению с прямыми матричными методами, значительно сокращаются затраты труда на разработку и отладку программ для ЭВМ, а сами программы становятся очень гибкими в плане адаптации в возможным изменениям в постановках задач. При этом достигается большая экономия в использовании машинной памяти и процессорного времени, с высокой эффективностью обеспечивается основное свойство, присущее прямым методам - конечность числа операций, необходимых для решения СЛАУ. Для реализации итераций дополнительно к вектору неизвестных  $\mathbf{x}$  требуется использовать всего лишь 4 рабочих вектора  $\mathbf{g}, \mathbf{s}, \mathbf{as}, \mathbf{g1}$  размерности  $N$ .

Подчеркнем, что итерационные алгоритмы полностью аналогичны двухслойным явным схемам для нестационарных задач, так как каждый итерационный процесс можно трактовать как некоторую явную схему решения вспомогательной нестационарной задачи методом установления. Неявные схемы для нестационарных задач также эффективно реализуются с использованием итерационных методов. В таких задачах хорошими начальными приближениями служат решения на предыдущем временном слое. Это резко сокращает требуемое число итераций до 10 и менее и делает итерационно реализуемые неявные схемы асимптотически столь же быстрыми как явные схемы.

Необходимо отметить, что итерационные безматричные алгоритмы удобны для реализации на многопроцессорных компьютерах.

## Глава 7. Нелинейные уравнения

Реальные задачи механики сплошных сред как правило нелинейны. Рассмотрим способы решения нелинейной задачи

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = 0$$

Для нелинейных задач основными методами решения являются метод Ньютона, метод дифференцирования по параметру, метод установления и всевозможные их модификации.

### 7.1. Метод Ньютона

Итерационный метод Ньютона для нелинейных уравнений основан на разложении нелинейных членов уравнений в ряд Тейлора в окрестности приближенного решения  $\mathbf{x}^{(n)}$  с удержанием линейной части разложения (нелинейная часть разложения отбрасывается). Полученная в результате линеаризованная система алгебраических уравнений позволяет взамен старого приближенного решения  $\mathbf{x}^{(n)}$  найти новое уточненное приближенное решение  $\mathbf{x}^{(n+1)}$ :

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(n)}) + \left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(n)}} (\mathbf{x}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n)}) = 0$$

Оператор линеаризованной задачи  $\left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(n)}}$  изменяется на каждой итерации. Рассмотренная операция замены исходного нелинейного уравнения на линеаризованное называется квазилинеаризацией исходной нелинейной задачи.

Упрощенный **модифицированный метод Ньютона** подразумевает проведение итераций с использованием постоянного оператора линеаризованной задачи, отвечающего начальному приближению:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(n)}) + \left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(0)}} (\mathbf{x}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n)}) = 0$$

Примером модифицированного метода Ньютона является *метод упругих решений* для задач деформационной теории пластичности, в котором оператором линеаризованной задачи служит оператор задачи линейной теории упругости, соответствующей исходной нелинейной задаче. Сходимость итераций, упрощенных по

модифицированному методу Ньютона, ухудшается по сравнению с методом квазилинеаризации Ньютона.

Применительно к вариационным и интегро-дифференциальным уравнениям метод Ньютона называют **методом квазилинеаризации или методом Ньютона-Канторовича**. Применительно к нелинейным системам алгебраических уравнений метод Ньютона называют **методом Ньютона-Рафсона**.

Комментируя метод Ньютона-Рафсона, подчеркнем, что получить аналитические выражения для нелинейных алгебраических уравнений дискретизированных задач как правило невозможно, так как нет способа ввести в компьютер нелинейную систему алгебраических уравнений. Максимум, что можно сделать, это задать алгоритм вычисления невязок нелинейных дискретных уравнений.

Поэтому метод Ньютона-Рафсона, относящийся к нелинейным алгебраическим уравнениям, которые аналитически задать невозможно, имеет чисто методическое значение, как некая конструкция, удобная для объяснения принципов работы алгоритма решения. В реальности квазилинеаризация вынужденно проводится еще на стадии исходной вариационной и интегро-дифференциальной постановки задач с использованием дифференцирования по Гао, см. Колмогоров, Фомин (1972).

Обобщающий термин **квазиньютоновские методы** используется для обозначения всего обширного семейства итерационных методов, которые используют линеаризацию путем разложения нелинейностей в ряд Тейлора в окрестности некоторого элемента в пространстве решений с удержанием линейных членов. Более подробно о вариантах метода Ньютона можно прочитать в книгах Коллатца (1968), Беллмана и Калабы (1968), Григолюка и Шалашилина (1988).

## 7.2. Метод дифференцирования по параметру

Рассмотрим уравнения, имеющие внешний параметр  $\lambda$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}, \lambda) = 0$$

где параметр  $\lambda$  является, например, параметром нагружения. Для решения таких уравнений применяется метод продолжения по параметру, предложенный Давиденко (1953). Линеаризация исходного нелинейного уравнения в окрестности точки  $(\mathbf{x}^{(n)}, \lambda^{(n)})$  имеет следующий общий вид:

$$\alpha \mathbf{g}(\mathbf{x}^{(n)}, \lambda^{(n)}) + \left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\substack{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(n)} \\ \lambda=\lambda^{(n)}}} (\mathbf{x}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n)}) + \left. \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \lambda} \right|_{\substack{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(n)} \\ \lambda=\lambda^{(n)}}} (\lambda^{(n+1)} - \lambda^{(n)}) = 0$$

где при  $\alpha = 0$  имеем **метод дифференцирования по параметру**, при  $\alpha = 1$  имеем **квазиньютоновский метод**. В методе дифференцирования по параметру полагается, что начальное приближение удовлетворяет исходному нелинейному уравнению  $\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(0)}, \lambda^{(0)}) = 0$ . Квазиньютоновский метод отличается от метода Ньютона тем, что в нем решение реализуется заданными шагами по параметру нагружения с использованием одной итерации Ньютона на каждом шаге по параметру.

Оба рассмотренных метода являются примерами **инкрементального метода** или, в терминологии механики деформируемого твердого тела, метода приращений, пошагового метода или метода переменных параметров упругости. Вспомогательная задача Коши метода дифференцирования по параметру

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \frac{d\mathbf{x}}{d\lambda} + \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \lambda} &= 0 \\ \mathbf{x}|_{\lambda=\lambda^{(0)}} &= \mathbf{x}^{(0)} \end{aligned}$$

может быть проинтегрирована более точно, нежели по выписанной выше схеме Эйлера, с использованием явных методов Рунге-Кутты и Адамса или неявных методов Ньюмарка, Кранка-Николсон, Гира и так далее (описание см. далее в этой книге).

### 7.3. Метод погружения

Метод погружения для решения нелинейных задач заключается в том, что вводится дополнительная эволюционная переменная (фиктивное время)  $t$  и соответствующий нестационарный член добавляется в исходное уравнение (задача "погружается" в пространство дополнительного измерения, играющего роль времени). Решение ищется как стационарное (установившееся) решение вспомогательной задачи вида

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{B} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t}, \quad \mathbf{x}|_{t=0} = \mathbf{x}_0$$

где  $\mathbf{B}$  - некоторая знакоопределенная невырожденная, легко обратимая матрица (например, диагональная). Правая часть начального

условия  $\mathbf{x}_0$  часто полагается равной нулю. Матрица  $B$  должна гарантировать затухание решений  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_{const} e^{\mu_k t}$  линеаризованной однородной задачи

$$\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{x} = B \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t}$$

с ростом времени  $t$  независимо от выбора  $\mathbf{x}_{const}$ . В задачах механики исходный нелинейный оператор задачи  $\mathbf{g}$  часто является эллиптическим. В этом случае для затухания решений линеаризованной однородной задачи уравнение метода погружения должно принадлежать параболическому типу.

Иногда метод погружения называют нефизическим **методом установления**. Прилагательное "нефизический" отличает метод погружения от методов физического установления, которые заключаются в том, что решение стационарной задачи ищется как установившееся (переставшее меняться во времени) решение соответствующей нестационарной физической задачи.

## Глава 8. Единственность и ветвление решений

### 8.1. Теорема о неявной функции

В курсах функционального анализа (см. Колмогоров, Фомин 1972) доказывается **теорема о неявной функции**: неявная функция  $\mathbf{x}(\lambda)$  являющаяся решением нелинейного уравнения

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}, \lambda) = 0$$

имеет единственное продолжение в малой окрестности точки  $(\mathbf{x}_0, \lambda_0)$ , где  $\mathbf{g}(\mathbf{x}_0, \lambda_0) = 0$ , если оператор линеаризованной задачи

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}_0, \lambda_0) + \mathbf{g}'_{\mathbf{x}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \mathbf{g}'_{\lambda}(\lambda - \lambda_0) + O(\Delta \mathbf{x}^2, \Delta \lambda^2) = 0$$

(то есть оператор  $\mathbf{g}'_{\mathbf{x}}$ ) невырожден. Приведенная теорема имеет место в общем случае функциональных уравнений, так что нелинейное уравнение, о котором идет речь, может соответствовать в равной степени и задачам для системы нелинейных интегро-дифференциальных уравнений, и задачам для системы нелинейных алгебраических уравнений.

Поскольку при численном решении нелинейные задачи так или иначе приводятся к системам нелинейных алгебраических уравнений, то самым наглядным для понимания данной теоремы и обсуждаемого далее материала является именно алгебраический вариант теоремы о неявной функции.

Чаще всего параметр  $\lambda$  связывается с интенсивностью процессов в сплошной среде. Например, в механике деформируемых твердых тел роль параметра  $\lambda$  исполняет параметр нагружения, в задачах механики жидкости роль  $\lambda$  можно отдать характеристикам интенсивности течений, например, числам Рейнольдса, Маха, Фруда, Рэлея или Грасгофа в зависимости от рассматриваемой задачи. Иногда роль параметра  $\lambda$  играют параметры геометрии или свойств материала. Параметр  $\lambda$  может даже вводиться искусственно для построения численного решения рассматриваемыми далее методами.

Если линеаризованный оператор  $\mathbf{g}'_{\mathbf{x}}$  вырождается, то точка  $(\mathbf{x}_0, \lambda_0)$  называется *особой*, вопрос о возможном дальнейшем продолжении решения по параметру  $\lambda$  становится нетривиальным и рассматривается далее. В континуальной механике анализ поведе-

ния решения в особых точках и их обнаружение составляет предмет ряда теорий, изучающих ветвление (неединственность) решений: теории устойчивости тонкостенных конструкций, теории реологической устойчивости, теории гидродинамической устойчивости и тому подобных.

## 8.2. Особые точки и продолжение решений

Особыми называются точки  $(x, \lambda)$  в пространстве решений, в которых одно или несколько собственных значений оператора линеаризованной задачи  $g'_x$  обращаются в нуль.

Если имеется только одно, равное нулю, собственное значение и соответствующая собственная функция удовлетворяет неоднородной линеаризованной задаче, то неявная функция  $x(\lambda)$  имеет единственное продолжение и эта собственная функция указывает направление продолжения. Соответствующая точка называется предельной точкой. Таковы точки, описывающие состояние цилиндрических панелей перед прощелкиванием к новому устойчивому положению равновесия при действии внешнего давления. Соответствующее явление хорошо известно всем, кто когда-либо играл, щелкая кусочком фотопленки.

Если же собственная функция не удовлетворяет неоднородной линеаризованной задаче, то неявная функция  $x(\lambda)$  не имеет продолжения в направлении данной собственной функции. При отсутствии возможных продолжений решения особая точка называется точкой умирания решения или тупиковой точкой.

Если однородная линеаризованная задача имеет несколько нулевых собственных чисел, то соответствующие собственные решения могут указывать несколько направлений продолжения неявной функции при условии, что они удовлетворяют неоднородной линеаризованной задаче. Соответствующая особая точка называется точкой ветвления решений нелинейной задачи. Такие случаи встречаются в теории устойчивости и выпучивания деформируемых тел, в теории устойчивости гидродинамических течений. Примером может служить изученный Эйлером случай потери устойчивости сжимаемого стержня, когда при достижении критической нагрузки наряду с прямолинейной формой становятся возможными и изогнутые равновесные формы стержня.

Заметим, что могут существовать и изолированные ветви решения задачи о неявной функции, на которые нельзя попасть непрерывно продолжая решение. Иногда их удается обнаружить в численных экспериментах "методом тыка" (перебором вероятных значений). Примеры изолированных ветвей решения можно найти в

## Глава 8. Единственность и ветвление решений

---

книге Валишвили (1978) по устойчивости и ветвлению решений теории оболочек. Подробный теоретический анализ класса задач о ветвлении решений, называемых нелинейными задачами на собственные значения имеется в сборнике статей [Келлер, 1974].

## Глава 9. Методы минимизации функционалов

Системы алгебраических уравнений часто представляют условия минимума или стационарности для некоторых функционалов (условия Эйлера), возникающих в задачах вариационного исчисления и в теории оптимизации процессов и конструкций. Задачи о минимизации функционалов составляют предмет теории математического (линейного и нелинейного) программирования. Заметим, что, несмотря на наличие слова “программирование”, данная теория не имеет никакого отношения к языкам программирования и составлению программ для ЭВМ. Подробное изложение теории математического программирования можно найти, например, в книгах Полака (1974), Пшеничного, Данилина (1979), а также в сборнике статей американских специалистов (Методы условной минимизации, 1977). Ниже приводятся основные положения этой теории.

### 9.1. Условная минимизация линейных функционалов

Сначала рассмотрим задачи минимизации линейных функционалов. Несмотря на линейность рассматриваемых функционалов их минимизация является существенно нелинейной задачей, так как множество (область) допустимых решений определяется набором некоторых ограничений типа равенств и неравенств.

Например, вес летательного аппарата представляется суммой весов его составных частей. Аргументами функционала веса являются параметры геометрии, удельные веса материалов и тому подобные характеристики, каждая из которых имеет определенные границы изменения, зависящие возможно от значений других параметров и от существующих технологий а авиапромышленности. Минимум функционала может быть неединственным, задача его поиска является нетривиальной и, конечно же, не сводится к решению системы линейных уравнений.

Другой пример приложения теории линейного программирования дает задача поиска равнопрочных конструкций, все составляющие которых имеют одинаковый запас прочности, т.е. отношение предела прочности к максимальному напряжению при эксплуатации. Такие функционалы как правило не имеют аналитического представления и определяются алгоритмически по результатам решения вспомогательных краевых задач, описывающих напряженно-деформированное состояние элементов конструкции.

Каноническая формулировка задачи линейного программирования имеет вид:

найти  $x \mid \min_x (c^T \cdot x)$  при ограничениях  $A \cdot x = b, x \geq 0$

где  $c^T$  - заданный вектор размерности  $n$ ,  $n$  - размерность вектора неизвестных  $x$ ,  $A$  является матрицей  $m$  на  $n$  и  $m < n$ ,  $m$  - число ограничений. Записанная выше в предикатах (в конструкциях математической логики) формулировка читается так: найти  $x$  такой, что на нем достигается минимум целевого линейного функционала  $(c^T \cdot x)$  при ограничениях  $A \cdot x = b$  и положительных  $x \geq 0$ . В формулировке задачи вертикальная черта заменяет слова «такой что» или «обеспечивающий».

Каждое из ограничений равенств определяет  $(n-1)$ -мерную плоскость, пересечение которой с областью допустимых значений неизвестных  $Q$ , определяемой неравенствами  $(x \geq 0)$ , дает выпуклый  $(n-1)$ -мерный многогранник  $G$ . Минимальное значение целевого функционала достигается в некоторой вершине многогранника  $G$  (при вырождении оно может достигаться во всех точках ребра (линии пересечения граней) или грани многогранника). Для решения задачи линейного программирования достаточно найти координаты вершины с наименьшим значением целевого функционала  $(c^T \cdot x)$ .

В практических задачах количество вершин многогранника  $G$  так велико, то просмотр их перебором даже с использованием ЭВМ невозможен. Поэтому разработаны специальные численные методы решения задач линейного программирования. Наиболее распространенным является симплекс-метод (подробности есть в книге Методы условной минимизации, 1977)

Идея симплекс-метода состоит в следующем. Вначале рассматривается некоторая вершина многогранника  $G$  и все ребра, выходящие из этой вершины. Далее при поиске минимума перемещаются вдоль того из ребер, по которому функция убывает, и попадают в следующую вершину. Находят выходящие из нее ребра и повторяют процесс. Когда приходят в такую вершину, в которой вдоль всех выходящих из нее ребер функция возрастает, то минимум найден. Отметим, что, выбирая одно ребро, исключают из рассмотрения вершины, лежащие на остальных траекториях. В результате количество рассматриваемых вершин резко сокращается.

## 9.2. Условная минимизация нелинейных функционалов

Методы безусловной минимизации квадратичных функционалов, имеющих системы линейных алгебраических уравнений в качестве условий минимума, уже рассмотрены выше в разделах по градиентным методам решения систем линейных алгебраических уравнений.

Методы минимизации нелинейных функционалов общего вида при наличии ограничений составляют предмет теории нелинейного программирования. Постановка общей задачи нелинейного программирования имеет вид:

найти  $\mathbf{x} \mid \min_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x})$  при ограничениях  $c_i(\mathbf{x}) \geq 0, \quad i=1,2,\dots,m$ .

где размерность вектора неизвестных  $\mathbf{x}$  равна  $n$  и  $n > m$ ,  $m$  – число ограничений. При  $m=0$  имеем задачу безусловной минимизации, в противном случае решаем задачу условной минимизации.

Иногда ограничения можно учесть явно. Это можно сделать, например за счет специальной замены переменных, при которой ограничения выполняются автоматически. Например, в задачах о течениях несжимаемой жидкости ограничение, выражающее условие несжимаемости (равенство дивергенции скорости нулю), можно учесть явно с самого начала, записывая уравнения Навье-Стокса в переменных функция тока – завихренность (см. далее в этой книге).

Более общие методы неявного учета ограничений сводят задачу условной минимизации к последовательности задач безусловной минимизации. Такие методы называются также методами преобразования. Основоположником методов преобразования является американский математик Курант (1943). Среди множества методов преобразования наиболее употребительными являются метод множителей Лагранжа, метод штрафных функций и барьерный метод, рассматриваемые ниже.

### 9.2.1. Метод множителей Лагранжа

Обозначим множество номеров активных ограничений (обращающихся в нуль на решении  $\mathbf{x}^*$ ) символом  $J$ . Допустимое множество значений пробных решений имеет вид:

$$R = \{\mathbf{x} : c_i(\mathbf{x}) \geq 0 (i = 1, \dots, m)\}$$

где записанное следует читать так: множество  $R$  состоит из элементов  $x$  таких, что  $c_i(x) \geq 0$  для  $i = 1, \dots, m$ .

Если  $x^*$  является решением задачи нелинейного программирования, то найдется вектор  $\lambda^*$  размерности  $m$  такой, что

$$\begin{aligned} g(x^*) - \sum_{i=1}^m \lambda_i^* a_i(x^*) &= 0 \\ \lambda_i^* &\geq 0, \quad i \in J \\ \lambda_i^* &= 0, \quad i \notin J \end{aligned}$$

где через  $g$  и  $a_i$  обозначены градиенты функций  $F$  и  $c_i$ . Этот результат, известный как **теорема Куна-Таккера**, распространяется и на случай ограничений типа равенств, только в этом случае соответствующие **множители Лагранжа**  $\lambda_i^*$  могут иметь произвольный знак. При дополнительном требовании независимости градиентов функций ограничений, активных на  $x^*$ , множители Лагранжа определяются однозначно.

Учет ограничений с помощью множителей Лагранжа носит название **метода множителей Лагранжа**. Хорошим примером этого способа решения являются расчеты несжимаемых сред, в которых давление играет роль множителя Лагранжа для условия несжимаемости.

### 9.2.2. Методы штрафных и барьерных функций

**В методе штрафных функций** вместо отыскания решения  $x^*$  сформулированной в начале раздела 9.2 исходной задачи условной минимизации функционала  $F(x)$  рассматривается модифицированная задача безусловной минимизации функционала

$$T(x, s) = F(x) + \Phi(c(x), s)$$

где  $s$  - вектор управляющих параметров, а  $\Phi$  - положительная штрафная функция, регулируемая вектором  $s$ . Безусловный локальный минимум функционала  $T$  по  $x$  обозначается  $x(s)$ . Различные методы преобразования отличаются выбором штрафного функционала  $\Phi$  и последовательности управлений  $s^{(k)}$ , обеспечивающих сходимость  $x(s^{(k)})$  к  $x^*$  при  $k \rightarrow \infty$ .

В методе штрафных функций приближенные решения могут не принадлежать допустимому множеству пробных решений, то есть

ограничения типа равенств выполняются с погрешностью, которая постепенно стремится к нулю с ростом  $k$ .

Примером метода штрафных функций в механике несжимаемой жидкости является введение искусственной сжимаемости и поиск давления в виде  $p = -\lambda \nabla \cdot \mathbf{u}$ ,  $\lambda \gg 1$  - коэффициент штрафа (подробности см. далее в главе про несжимаемые течения).

**В методе барьерных функций** для выполнения ограничений типа неравенств функция  $\Phi$  подбирается так, чтобы на границе допустимого множества “построить барьер”, препятствующий нарушению ограничений в процессе безусловной минимизации функции  $T$  по  $\mathbf{x}$ , и чтобы точки  $\mathbf{x}^{(k)}$  сходились к  $\mathbf{x}^*$  изнутри допустимого множества  $R$ . Проще говоря в этом методе чем сильнее нарушение ограничений, тем больше значение минимизируемого функционала, то есть нарушать ограничения можно, но невыгодно.

Конкретные примеры штрафных и барьерных функций приводятся далее при рассмотрении способов учета ограничений в задачах о несжимаемых средах, в контактных задачах, в задачах построения сеток и управления подвижными сетками.

### 9.3. Метод локальных вариаций для негладких функционалов

Для минимизации негладких функционалов был разработан метод локальных вариаций, широко используемый в механике деформируемого тела, теории управления и оптимизации (Баничук, Картвелишвили, Черноушко, 1973).

На каждой итерации метода локальных вариаций функционалы минимизируются последовательно по отдельным компонентам вектора неизвестных. Значение каждого отдельного неизвестного увеличивается и уменьшается на некоторую фиксированную величину приращения (проводится “локальная вариация” функционала). За новое значение этого неизвестного принимается то, которое приводит к уменьшению функционала. Если перебор новых значений неизвестных не уменьшает функционал, то величина приращения уменьшается вдвое и процесс локальных вариаций продолжается до тех пор, пока минимум функционала не будет найден для достаточно малого приращения неизвестных.

Для экономии вычислений при минимизации интегральных функционалов континуальной механики методом локальных вариаций используется тот факт, что вариация узлового неизвестного меняет только ту часть функционала, которая определяется интегрированием по окрестности этого узла.

Метод локальных вариаций применим к произвольным негладким положительным функционалам, поскольку не содержит опера-

ций дифференцирования функционала. Скорость сходимости метода локальных вариаций невысока, что является платой за универсальность. Для негладких функционалов ничего лучше пока не придумали.

## Глава 10. Решение задач Коши для ОДУ

### 10.1. Постановка задач Коши

Рассмотрим задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка

$$dy/dt = f(y, t), \quad y|_{t=0} = y_0_{об}$$

где  $t$  – “временная” координата (независимая переменная),  $y$  - искомые функции, функция  $f$  и значение  $y_0$  заданы. Численное решение ищется путем пошагового интегрирования уравнений для последовательно возрастающих дискретных значений времени  $t_0 < t_1 < t_2 < \dots$ , представляющих временные слои.

О свойствах системы ОДУ судят по поведению решений соответствующей однородной линеаризованной системы дифференциальных уравнений

$$dy/dt = \partial f / \partial y |_{y=y_n} \cdot y$$

Решения этой системы уравнений ищутся в виде экспонент  $y = y^* e^{\lambda t}$ . В результате для определения векторов  $y^*$  и чисел  $\lambda$  получается алгебраическая задача на собственные значения

$$(\partial f / \partial y |_{y=y_n} - E\lambda)y^* = 0$$

где  $E$  – единичная матрица размерности  $N \times N$ ,  $N$  – размерность вектора  $y^*$ . Собственные числа  $\lambda$  определяются из условия существования нетривиальных решений

$$\det(\partial f / \partial y - \lambda E) = 0$$

Если все фундаментальные решения  $y = y^* e^{\lambda t}$  убывающие, то есть, если все показатели экспонент  $\lambda$  отрицательны, то исходная система уравнений является устойчивой. В противном случае среди фундаментальных решений имеются неограниченно возрастающие ( $\lambda > 0$ ) и решение исходной системы уравнений имеет смысл только на ограниченном интервале времени, для которого малым

изменениям в начальных данных будут отвечать достаточно малые изменения в решении (требование устойчивости задачи).

Методы решения задач Коши для системы ОДУ, служащие для определения значений искомых функций в узлах сетки, называются *разностными схемами*.

Явная разностная схема представляется системой алгебраических уравнений относительно значений искомых функций в узлах сетки на новом временном слое  $t = t_{n+1}$ , которая характеризуется диагональной матрицей и легко (явно) разрешается.

Неявная разностная схема требует для определения узловых значений решения на новом временном слое обращения недиагональной матрицы системы алгебраических уравнений.

В зависимости от числа временных слоев, используемых для аппроксимации временных производных, различают двух-, трех-,..., много-слойные разностные схемы.

Одно-, двух-,..., много-шаговые разностные схемы используют соответствующее число промежуточных вспомогательных временных шагов (промежуточных вычислений функции правой части) на каждом основном шаге по времени.

## 10.2. Многошаговые методы Рунге-Кутты

Семейство методов Рунге-Кутты реализует повышение точности аппроксимации дифференциального уравнения на шаге по времени ( $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$ ) за счет увеличения числа промежуточных вычислений функции правой части. Ниже приводятся варианты методов Рунге-Кутты в порядке повышения их точности.

В явной схеме Эйлера (одношаговый метод Рунге-Кутты)

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \mathbf{f}^n \Delta t_n$$

ошибка убывает со скоростью  $O(\Delta t_n)$ .

В явной схеме Эйлера с пересчетом (двухшаговый метод Рунге-Кутты, называемый в западной литературе методом Хойна)

$$\tilde{\mathbf{y}}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \mathbf{f}^n \Delta t_n$$

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + (\mathbf{f}^n + \tilde{\mathbf{f}}^{n+1}) \Delta t_n / 2$$

ошибка убывает со скоростью  $O(\tau^2)$ .

В явной схеме предиктор-корректор второго порядка точности (двухшаговая схема Рунге-Кутты)

$$\mathbf{y}^{n+1/2} = \mathbf{y}^n + \mathbf{f}^n \Delta t_n / 2$$

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \mathbf{f}^{n+1/2} \Delta t_n$$

ошибка убывает со скоростью  $O(\tau^2)$ .

Классический метод Рунге-Кутты четвертого порядка точности выражается формулой (четырёхшаговый метод)

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \frac{1}{6}(\mathbf{k}_0 + 2\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)$$

где

$$\mathbf{k}_0 = \Delta t_n \mathbf{f}(\mathbf{y}^n, t_n)$$

$$\mathbf{k}_1 = \Delta t_n \mathbf{f}(\mathbf{y}^n + \mathbf{k}_0 / 2, t_n + \Delta t_n / 2)$$

$$\mathbf{k}_2 = \Delta t_n \mathbf{f}(\mathbf{y}^n + \mathbf{k}_1 / 2, t_n + \Delta t_n / 2)$$

$$\mathbf{k}_3 = \Delta t_n \mathbf{f}(\mathbf{y}^n + \mathbf{k}_2, t_n + \Delta t_n)$$

Методы Рунге-Кутты более высоких порядков точности приводятся в справочниках.

Все показанные выше двухслойные многшаговые схемы Рунге-Кутты выводятся применением квадратурных формул численного интегрирования к формуле аналитического представления решения задачи Коши на шаге по времени

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f} dt$$

Схема Эйлера отвечает квадратурной формуле прямоугольников. Схема Эйлера с пересчетом соответствует квадратурной формуле трапеций. Схема третьего порядка точности получается с помощью квадратурной формулы Симпсона. И так далее.

### 10.3. Многослойные методы Адамса

В схемах Адамса повышение точности достигается за счет увеличения числа временных слоев, используемых для аппроксимации дифференциального уравнения. Схемы Адамса более экономичны, так как используют уже вычисленные значения функции правой части, но требуют постоянного шага по времени. Простейшей схемой этой группы является явная двухслойная схема Эйлера первого порядка точности (см. выше). Следующей является трехслойная схема квазивторого порядка точности:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + ((1 + \alpha)\mathbf{f}^n - \alpha\mathbf{f}^{n-1})\Delta t_n$$

Эта схема при  $\alpha = 0$  совпадает со схемой Эйлера первого порядка точности, а при  $\alpha = 0.5$  имеет второй порядок точности и называется схемой Адамса-Башфорта. Схемы более высокого порядка точности описаны в справочниках (см. книгу Камке).

Схема Адамса 4-го порядка имеет следующий вид:

предиктор

$$\tilde{\mathbf{y}}^{n+1} = \mathbf{y}^n + (55\mathbf{f}^n - 59\mathbf{f}^{n-1} + 37\mathbf{f}^{n-2} - 9\mathbf{f}^{n-3})\Delta t / 24$$

корректор

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + (9\tilde{\mathbf{f}}^{n+1} + 19\mathbf{f}^n - 5\mathbf{f}^{n-1} + \mathbf{f}^{n-2})\Delta t / 24$$

Схемы Адамса выводятся по формуле аналитического представления решения задачи Коши на шаге по времени

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{f} dt$$

с использованием интерполяции Лагранжа подинтегральной функции  $\mathbf{f}$  по ее  $k$  значениям  $\mathbf{y}^{n-k+1}, \mathbf{y}^{n-k+2}, \dots, \mathbf{y}^n$  на предшествующих временных слоях.

Порядок точности схем Адамса равен числу использованных для интерполяции предшествующих значений подинтегральной функции.

## 10.4. Неявные схемы для жестких задач

Неявные аппроксимации применяются для жестких систем ОДУ, характеризующихся тем, что матрицы  $\partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y} |_{\mathbf{y}=\mathbf{y}_n}$  соответствующих линеаризованных систем ОДУ плохо обусловлены. Такие системы ОДУ имеют сильно различающиеся по скорости изменения фундаментальные решения  $\mathbf{y} = \mathbf{c}e^{\lambda t}$ ,  $|\lambda|_{\max} / |\lambda|_{\min} \gg 1$  или просто очень быстро меняющиеся фундаментальные решения  $\mathbf{y} = \mathbf{c}e^{\lambda t}$ ,  $\max |\lambda| T \gg 1$ , где  $[0, T]$  - интервал интегрирования.

Явные схемы для жестких систем уравнений требуют очень сильных ограничений на шаг интегрирования  $\Delta t < 1 / |\lambda|$  и неэффективны, если надо получить решение на больших интервалах  $T$ . Проведение расчета по явной схеме с шагом, превышающим упомянутое ограничение на шаг по времени, немедленно приводит к неустойчивости.

Простейший пример задачи Коши для жесткого дифференциального уравнения можно искусственно построить так. Пусть решением является функция  $y = \cos(t)$ . Хорошо обусловленное уравнение для этого решения получается непосредственным дифференцированием принятого решения:  $y'_t = -\sin(t)$ . Сделаем это уравнение жестким, добавив член, равный на решении нулю, с большим коэффициентом:

$$\frac{dy}{dt} = -100(y - \cos(t)) - \sin(t)$$

и дополним полученное уравнение начальным условием, вид которого также диктуется желанием сделать функцию  $\cos(t)$  решением рассматриваемой задачи:

$$y|_{t=0} = 1$$

Фундаментальное решение данной задачи характеризуется показателем роста  $\lambda = -100$  и на интервале  $t \in [0, T]$ ,  $T = 1$  является быстро изменяющимся  $|\lambda| T = 100 \gg 1$ . Это фундаментальное решение является убывающим и, следовательно, задача Коши устойчива. Однако она является жесткой. Попытка решения такой задачи по явной схеме с шагом по времени, превышающим  $1/|\lambda| = 0.01$  обречена на неудачу: небольшим изменениям в начальных данных будут отвечать громадные изменения в значении решения в конце интервала изменения независимой координаты  $t$ . Это легко проверяется непосредственным вычислением. С ростом показателя роста  $\lambda \rightarrow \infty$  величина шага по времени будет стремиться к нулю. Число шагов интегрирования явной схемы при этом будет неограниченно возрастать, хотя точным решением является простая косинусоида, независимо от показателя роста.

Ярким примером жестких систем уравнений является система обыкновенных дифференциальных уравнений по времени, возникающая для каркасов приближенных решений гиперболических систем уравнений в частных производных при использовании проекционных методов. В частности, для явных сеточных методов решения гиперболических уравнений шаг интегрирования по времени ограничен условием устойчивости Куранта, которое требует, чтобы за один шаг по времени сигнал от данного узла не вышел бы за пределы его окрестности, образованной соседними узлами пространственной сетки. На этом примере можно теоретически обосновать и определить ограничение на шаг по времени, гарантирующее устойчивый расчет по явным схемам ( $\Delta t < h/c$ , где  $c$  - скорость распространения малых возмущений). На больших интервалах времени  $T \gg h/c$  число шагов интегрирования по явным схемам становится неприемлемо большим.

Поэтому во многих случаях, возникающих в приложениях, применение явных схем невозможно, так как требуется определить решение на интервале времени, значительно превышающем ограничение на шаг по времени в явных схемах. В этих случаях имеется потребность в специальных методах интегрирования, допускающих устойчивый расчет решений жестких систем ОДУ независимо от размера шага по времени. Ключевым средством обеспечения безусловной устойчивости является применение неявных схем решения.

Приведем типичные примеры методов для жестких уравнений

1) неявная схема Эйлера (это простейший вариант метода Гира, называемый также обратным методом Эйлера):

$$y^{n+1} = y^n + f(y^{n+1}, t_{n+1})\tau_n$$

2) неявная схема Кранка-Николсон:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + ((1 - \alpha)\mathbf{f}(\mathbf{y}^n, t_n) + \alpha\mathbf{f}(\mathbf{y}^{n+1}, t_{n+1}))\tau_n$$

3) неявная квазиньютоновская схема (линеаризованная схема Кранка-Николсон)

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + (\mathbf{f}(\mathbf{y}^n, t_n) + \alpha \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}^n} (\mathbf{y}^{n+1} - \mathbf{y}^n))\tau_n$$

Для жестких дифференциальных уравнений применяются также и неявные многослойные схемы Адамса-Башфорта.

Схемы Кранка-Николсон безусловно устойчивы при  $\alpha > 0.5$  и переходят в явную схему Эйлера при  $\alpha \rightarrow 0$ . Подробнее о методах решения жестких систем ОДУ можно прочитать в книге Форсайта и др. (1980).

Системы нелинейных алгебраических уравнений, к которым приводят неявные схемы, решаются обычно с помощью каких-либо вариантов итерационного метода Ньютона<sup>1</sup>. Если шаг по времени мал, то часто хватает одной итерации по методу Ньютона на каждом временном шаге, как это и делается в записанной выше квазиньютоновской схеме.

Помимо ограничений, связанных со скоростью изменения решений, шаг интегрирования для явных и неявных схем подчиняется *условию точности* путем сравнения результатов расчетов на вложенных сетках (то есть на сетках с шагами  $\tau_n$  и  $\tau_n/2$ ) и поддержания разности таких решений достаточно малой за счет уменьшения шага  $\Delta t_n$ .

По поводу русскоязычного наименования схемы Кранка-Николсон заметим, что Ф. Николсон – дама, поэтому ее фамилия не склоняется: Phyllis Nicolson (21 September 1917 – 6 October 1968) was a British mathematician most known for her work on the Crank–Nicolson scheme together with John Crank.

[http://en.wikipedia.org/wiki/Phyllis\\_Nicolson](http://en.wikipedia.org/wiki/Phyllis_Nicolson)

## Глава 11. Двухточечные краевые задачи

Рассмотрим методы решения нелинейных двухточечных краевых задач

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= \mathbf{f}(\mathbf{y}(x), x), \\ y_i(x_a) &= \alpha_i, \quad i = 1, \dots, N_0 < N \\ y_i(x_b) &= \beta_i, \quad i = N_0 + 1, \dots, N \end{aligned}$$

где  $\mathbf{y} = \{y_1, \dots, y_N\}$ ,  $\mathbf{f} = \{f_1, \dots, f_N\}$ ,  $x_a \leq x \leq x_b$

### 11.1. Метод стрельбы

Рассмотрим решение нелинейной двухточечной краевой задачи методом стрельбы. Обозначим неизвестные значения искомых функций на границах так

$$\begin{aligned} y_i(x_a) &= a_i, \quad i = N_0 + 1, \dots, N \\ y_i(x_b) &= b_i, \quad i = 1, \dots, N_0 < N \end{aligned}$$

Задавая наугад недостающие значения параметров на левой границе области решения  $y_i(x_a) = \tilde{a}_i$  ( $i = N_0 + 1, \dots, N$ ) можно решить вспомогательную задачу Коши

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= \mathbf{f}(\mathbf{y}(x), x), \\ y_i(x_a) &= \alpha_i, \quad i = 1, \dots, N_0 < N \\ y_i(x_a) &= \tilde{a}_i, \quad i = N_0 + 1, \dots, N \end{aligned}$$

одним из методов главы 10. Вычисленные значения искомых функций на правой границе области решения  $y_i(x_b) = \tilde{b}_i$  ( $i = N_0 + 1, \dots, N$ ) являются функциями от значений решения на левой границе  $\tilde{a}_i$  ( $i = N_0 + 1, \dots, N$ ). Эти функции определены алгоритмически через решение указанных выше вспомогательных задач Коши. Невязки граничных условий на правой границе равны

$$\varphi_i(\tilde{a}_{N_0+1}, \dots, \tilde{a}_N) = \tilde{b}_i(\tilde{a}_{N_0+1}, \dots, \tilde{a}_N) - \beta_i, \quad i = N_0 + 1, \dots, N$$

Если эти невязки равны нулю, то недостающие значения на левом краю найдены и исходная задача решена. В противном случае равенства нулю невязок граничных условий

$$\varphi_i(a_{N_0+1}, \dots, a_N) = 0$$

образуют систему нелинейных уравнений для определения недостающих граничных условий на левом краю. Функции невязок  $\varphi_i(\tilde{a}_{N_0+1}, \dots, \tilde{a}_N)$  определены алгоритмически через решение вспомогательных задач Коши. Описанный метод сведения двухточечной краевой задачи к системе нелинейных алгебраических уравнений называется *методом стрельбы* или *методом пристрелки*.

Из данной системы нелинейных алгебраических уравнений видно, почему метод Ньютона-Рафсона на практике реализовать невозможно. Этому препятствует алгоритмическое определение уравнений и, следовательно, невозможность аналитического дифференцирования нелинейных членов уравнений.

Выход из этого затруднения, однако, имеется. Для решения системы нелинейных алгебраических уравнений относительно  $\tilde{a}_i$  ( $i = N_0 + 1, \dots, N$ ) можно применить метод Стеффенсона, согласно которому нелинейная система уравнений решается методом Ньютона, в котором производные  $\frac{\partial \varphi_i}{\partial a_j}$  ( $i, j = N_0 + 1, \dots, N$ )

аппроксимированы разностными формулами дифференцирования в соответствии с результатами решения вспомогательных задач Коши.

Ясно, что метод стрельбы является очень трудоемким из-за необходимости многократного решения вспомогательных задач Коши в итерациях Стеффенсона и работает метод стрельбы только для хорошо обусловленных систем ОДУ, когда выполнено эмпирически (то есть, по опыту вычислений) формулируемое условие

$$\max(\lambda_i)(x_b - x_a) < 2$$

где  $\lambda_i$  - собственные значения матрицы  $\partial f / \partial y|_{y=y_n}$  системы однородных линеаризованных уравнений, связанных с рассматриваемой задачей

$$dy/dx = \partial f / \partial y|_{y=y_n} y$$

Для плохо обусловленных задач интервал интегрирования разбивается на подынтервалы так, чтобы сделать на каждом

подынтервале задачу хорошо обусловленной. Число параметров стрельбы расширяется за счет неизвестных значений искомых функций на стыках подынтервалов. Эти дополнительные параметры стрельбы подчинены условиям непрерывности решения на стыках подынтервалов. Это приводит к необходимости решения нелинейной системы алгебраических уравнений относительно параметров стрельбы более высокой размерности. Такой способ решения применялся в 1970-е годы при решении краевых задач нелинейной теории оболочек (Валишвили, 1978), но в дальнейшем больше не использовался, вытесненный более эффективными методами, с самого начала использующими квазилинеаризацию исходной задачи.

## 11.2. Методы квазилинеаризации

Методы квазилинеаризации сводят исходную нелинейную задачу к последовательности вспомогательных квазилинейных задач. Это реализуется двумя основными способами.

### 11.2.1 Метод Ньютона-Канторовича для краевых задач.

На каждой итерации  $n=0,1,\dots$  решается линеаризованная задача

$$\frac{d\mathbf{y}^{(n+1)}}{dx} = \mathbf{f}(\mathbf{y}^{(n)}(x), x) + \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}=\mathbf{y}^{(n)}} (\mathbf{y}^{(n+1)} - \mathbf{y}^{(n)})$$

$$y_i^{(n+1)}(x_a) = \alpha_i, \quad i = 1, \dots, N_0 < N$$

$$y_i^{(n+1)}(x_b) = \beta_i, \quad i = N_0 + 1, \dots, N$$

Линеаризация достигается разложением нелинейной правой части в функциональный ряд Тейлора в окрестности предыдущего ( $n$ -го) приближения к решению с удержанием двух первых членов разложения. Алгоритмы, использующие квазилинеаризацию, называют квазиньютоновскими по аналогии с методом Ньютона для нелинейных алгебраических уравнений.

На практике для вычисления функциональной производной пользуются определением *дифференциала Гато*, которое имеет вид

$$f_i(y_j^{(n+1)}, x) - f_i(y_j^{(n)}, x) \cong \left. \frac{\partial f_i}{\partial y_j} \right|_{\mathbf{y}=\mathbf{y}_j^{(n)}} (y_j^{(n+1)} - y_j^{(n)}) =$$

$$= \left. \frac{\partial}{\partial \alpha} f_i(y_j^{(n)} + \alpha(y_j^{(n+1)} - y_j^{(n)}), x) \right|_{\alpha=0}$$

где  $\alpha$  - вещественный параметр. Если дифференциал Гато существует для любых направлений  $y_j^{(n+1)} - y_j^{(n)}$ , то он совпадает с

дифференциалом Фреше, который и использован в линеаризованном уравнении квазиньютоновского метода (подробнее см. книгу Колмогоров, Фомин (1972)).

Имеется по крайней мере два пути реализации численного решения исходной нелинейной краевой задачи с использованием метода Ньютона. Первый путь заключается в дискретизации исходной нелинейной краевой задачи и сведении ее к системе нелинейных алгебраических уравнений, которая затем решается итерированием линеаризованных уравнений по методу Ньютона-Рафсона. Только что на примере метода стрельбы было показано, что этот путь можно реализовать только мысленно, поскольку нет иного способа задания системы нелинейных алгебраических уравнений в ЭВМ, кроме задания алгоритма вычисления невязок уравнений для заданного приближенного решения  $y^{(n)}$ .

Поэтому на практике как правило используется второй путь, который заключается в сведении исходной нелинейной краевой задачи к последовательности вспомогательных квазилинейных краевых задач по методу Ньютона-Канторовича еще на уровне интегро-дифференциальных формулировок. И только потом вводится дискретизация.

Метод Стефенсона, который вроде бы указывает путь к реализации метода Ньютона-Рафсона, требует настолько больших затрат вычислительной работы, что вряд ли стоит рассматривать его в этом качестве всерьез.

#### 11.2.2. Метод дифференцирования по параметру для краевых задач.

Рассмотрим отличный от метода Ньютона способ квазилинеаризации, называемый методом дифференцирования по параметру.

В качестве упомянутого параметра  $\lambda$  используется или имеющийся в задаче физический параметр, определяющий интенсивность описываемого явления (например, в задачах деформирования это параметр нагрузки), или искусственно введенный параметр.

Например, можно правые части уравнений и граничных условий умножить на параметр  $\lambda$  и искать решение для  $\lambda = 1$ , стартуя с нулевого решения  $y = 0$  при  $\lambda = 0$ . В этом варианте метод квазилинеаризации выглядит так:

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{dy}{d\lambda} \right) \cong \frac{\partial f}{\partial \lambda} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{d\lambda}$$

$$\frac{dy_i}{d\lambda}(x_a) = \frac{d\alpha_i}{d\lambda} \quad (i = 1, \dots, N_0 < N)$$

$$\frac{dy_i}{d\lambda}(x_b) = \frac{d\beta_i}{d\lambda} \quad (i = N_0 + 1, \dots, N)$$

$$y(x)|_{\lambda=0} = 0$$

где записаны продифференцированные по параметру  $\lambda$  уравнение и граничные условия, а также начальное условие при  $\lambda = 0$ . По параметру  $\lambda$  имеем задачу Коши, которую надо решать каким-либо из методов Адамса или Рунге-Кутты. Значения производных  $dy/d\lambda$  при этом определяются из решения вспомогательных линейных двухточечных краевых задач.

Таким образом квазилинеаризация методами Ньютона и дифференцирования по параметру сводит нелинейную задачу к последовательности линейных задач.

### 11.3. Методы для линейных двухточечных краевых задач.

Поэтому далее рассмотрим основные способы решения линейных двухточечных краевых задач для системы ОДУ

$$\frac{dy}{dx} = A\mathbf{y}(x) + \mathbf{g}(x), \quad \mathbf{y} = (y_1, \dots, y_N), \quad x_a \leq x \leq x_b$$

$$y_j(x_a) = \alpha_j, \quad j = 1, \dots, N_0$$

$$y_j(x_b) = \beta_j, \quad j = N_0 + 1, \dots, N$$

#### 11.3.1. Конечные разности и матричная прогонка

Запишем простейшую конечно-разностную аппроксимацию уравнений и граничных условий рассматриваемой линейной двухточечной краевой задачи. В области решения введем регулярную сетку узлов  $x_m$  ( $m = 0, \dots, M$ ).

На левой границе граничные условия и уравнения имеют вид

$$y_j^0 = \alpha_j \quad j = 1, \dots, N_0 < N$$

$$\frac{y_j^1 - y_j^0}{x^1 - x^0} = \sum_{k=1}^N a_{jk}^0 y_k^0 + g_j^0 \quad j = N_0 + 1, \dots, N$$

Во внутренних узлах сетки уравнения имеют вид

$$\frac{y_j^{m+1} - y_j^{m-1}}{x^{m+1} - x^{m-1}} = \sum_{k=1}^N a_{jk}^m y_k^m + g_j^m \quad m = 1, \dots, M-1; j = 1, \dots, N-1$$

На правой границе уравнения и граничные условия таковы

$$\begin{aligned} \frac{y_j^M - y_j^{M-1}}{x^M - x^{M-1}} &= \sum_{k=1}^N a_{jk}^M y_k^M + g_j^M & j = 1, \dots, N_0 < N \\ y_j^M &= \beta_j & j = N_0 + 1, \dots, N \end{aligned}$$

Верхний индекс обозначает номер узла, а нижний индекс показывает номер искомой функции.

Полученную СЛАУ с блочно-ленточной "трехдиагональной" матрицей относительно  $(M+1) \cdot N$  сеточных значений искомых функций можно решить методом матричной прогонки.

### 11.3.2. Дифференциальные прогонки

Применение конечно-разностных схем решения для достижения определенной точности приводит к алгебраическим задачам значительно более высокой размерности, нежели возникающие в рассматриваемых далее вариантах дифференциальных прогонок Калнинса, Годунова и Абрамова. Дифференциальные прогонки позволяют получать высокоточные решения при существенной экономии памяти ЭВМ.

#### 11.3.2.1. Метод дифференциальной прогонки

В методе дифференциальной прогонки Калнинса (1964) область решения (отрезок, интервал) разбивается на подынтервалы

$$x_a = x_0 < \dots < x_i < \dots < x_M = x_b$$

такие, что  $\max_j (\lambda_j) (x_i - x_{i-1}) < 2 \max_j (\lambda_j) (x_i - x_{i-1}) < 2$ , где  $\lambda_j$  - собственные числа матрицы  $A$ . Решение на каждом подынтервале  $i = 1, \dots, M$  ищется в виде:

$$y^{(i)} = y_0^{(i)} + \sum_{j=1}^N \alpha_j^{(i)} y_j^{(i)}$$

где  $y_0^{(i)}$  - решение задачи Коши для неоднородной системы уравнений с нулевыми начальными условиями

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= Ay(x) + g(x), \quad y = \{y_1, \dots, y_N\}, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ y(x_{i-1}) &= 0, \quad i = 1, \dots, M, \quad j = 1, \dots, N \end{aligned}$$

и  $y_j^{(i)}$  -  $N$  базисных решений однородной системы уравнений, являющиеся решениями вспомогательных задач Коши и составляющих матрицу  $Y^{(i)}(x)$

$$\begin{aligned} \frac{dY^{(i)}}{dx} &= AY^{(i)}, \quad Y^{(i)} = \{y_j^{(i)}\}_{j=1}^N, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ Y^{(i)}(x_{i-1}) &= E, \quad i = 1, \dots, M, \quad j = 1, \dots, N \end{aligned}$$

Коэффициенты  $\alpha_j^{(i)}$  ( $i = 1, \dots, M$ ,  $j = 1, \dots, N$ ) определяются путем решения системы линейных алгебраических уравнений, которая состоит из граничных условий исходной задачи ( $N$  соотношений) и условий непрерывности решения исходной задачи на границах интервалов интегрирования ( $N(M - 1)$  соотношений).

Зачем вводить разбиение на подынтервалы, почему не обойтись одним интервалом? Дело в том, что  $N$  независимых базисных решений однородной задачи при интегрировании вспомогательных задач Коши быстро портятся, то есть, они перестают быть взаимно ортогональными и становятся трудно различимыми (“сплющиваются”). Это приводит к тому, что сформированная на их основе после их подстановки в граничные условия система алгебраических уравнений для определения коэффициентов разложения оказывается очень плохо обусловленной. Введение подынтервалов расширяет число неизвестных коэффициентов разложения решения по базисным функциям (они теперь свои для каждого подынтервала), но такое разбиение делает систему уравнений хорошо обусловленной, так как подынтервалы достаточно малы и базисные решения не успевают “сплющиться”.

### 11.3.2.2. Метод ортогональной прогонки

Годунов (1962) предложил более экономичный алгоритм борьбы с плохой обусловленностью двухточечных краевых задач,

заметив, что не надо перегонять с левого края на правый все  $N$  базисных решений, а только то их число  $(N - N_0)$ , которое равно числу условий, поставленных на правом краю. Для этого в качестве начальных условий для базисных решений на левом краю принимаются  $(N - N_0)$  независимых взаимно ортогональных векторов, удовлетворяющих левым граничным условиям. На границах подынтервалов проводится ортогонализация вычисленных (слегка “сплюснутых”) значений векторов базисных решений системы однородных уравнений и матрицы ортогонализации запоминаются. Ортогонализированные решения служат начальными условиями для вспомогательных задач Коши на следующем подынтервале. Разрешающая система линейных алгебраических уравнений на правом краю имеет порядок  $N - N_0$ . Ее решение и матрицы ортогонализации на подынтервалах используются для определения решения исходной задачи на границах подынтервалов интегрирования при обратном ходе прогонки. Этот метод значительно сложнее в реализации, нежели метод Калнинса, но зато он более экономичен (подробности см. в учебнике Бахвалова).

### 11.3.2.3. Метод переноса граничных условий

Абрамов (1961) вывел вспомогательные дифференциальные уравнения, которым должны удовлетворять коэффициенты матрицы и правые части граничных условий при их переносе с левого края на правый. Решение вспомогательных задач Коши для этих систем уравнений позволяет перенести недостающие граничные условия с одного края на другой, что сводит исходную двухточечную краевую задачу к задаче Коши. Поскольку коэффициентов матрицы граничных условий намного больше, чем граничных условий, то этот метод требует значительно большего объема вычислений, нежели методы Калнинса и Годунова, однако, он позволяет успешно преодолеть неприятности: связанные с плохой обусловленностью исходных краевых задач. Описание метода дано в учебнике Бахвалова.

### 11.3.3. Метод сплайнов

Рассмотрим еще один способ решения, называемый методом сплайнов (см. книгу Алберга, Нильсена и Уолша). В соответствии с этим методом интервал интегрирования разбивается на  $M$  подынтервалов, на каждом из которых решение ищется в виде полинома степени  $K$  (наиболее часто принимают  $K=2,3$ )

$$y^{(i)}(x) = \sum_{k=0}^K y_k^{(i)} (x - x_{i-1})^k / k!$$

где  $x_{i-1} \leq x \leq x_i$  и  $i = 1, \dots, M$ . Система уравнений для определения  $M(K+1)N$  ( $N$  - размерность вектора искомых функций) коэффициентов сплайна состоит из  $(M-1)KN$  условий непрерывности сплайна на границах подинтервалов

$$\frac{d^j}{dx^j} \mathbf{y}^{(i)}(x_i) = \frac{d^j}{dx^j} \mathbf{y}^{(i+1)}(x_i)$$

где ( $i = 1, \dots, M-1$ ;  $j = 0, \dots, K-1$ );  $N$  граничных условий

$$\begin{aligned} y_i^{(1)}(x_a) &= \alpha_i, \quad i = 1, \dots, N_0 < N \\ y_i^{(M)}(x_b) &= \beta_i, \quad i = N_0 + 1, \dots, N \end{aligned}$$

и  $(M+K-1)N$  условий коллокации (условий поточечного удовлетворения исходной линейной системы ОДУ)

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=\tilde{x}_j} = A\mathbf{y}(\tilde{x}_j) + \mathbf{g}(\tilde{x}_j)$$

где  $j=0, \dots, M+K-2$ . Для сплайнов 1-й степени ( $K=1$ ) точки коллокации совпадают с серединами подинтервалов  $\tilde{x}_{i-1} = (x_{i-1} + x_i) / 2$  для  $i = 1, \dots, M$  и метод сплайнов совпадает с методом конечных разностей первого порядка точности. Для сплайнов 2-й степени ( $K=2$ ) точки коллокации совпадают с границами подинтервалов  $\tilde{x}_i = x_i$  ( $i=0, \dots, M$ ). Для сплайнов 3-й степени ( $K=3$ ) точками коллокации являются границы области интегрирования  $\tilde{x}_0 = x_a$ ,  $\tilde{x}_{M+1} = x_b$  и середины подинтервалов:  $\tilde{x}_i = (x_{i-1} + x_i) / 2$  для  $i = 1, \dots, M$ .

Система алгебраических уравнений метода сплайнов имеет ленточную матрицу и может быть разрешена методом матричной прогонки. Благодаря эффективности сплайн-аппроксимации метод сплайнов дает достаточно высокую точность для сплайнов степени  $K=2,3$  даже на грубых сетках. Для линейных двухточечных краевых задач с числом обусловленности метод может успешно конкурировать с методами дифференциальной прогонки. В многомерных задачах для использования метода сплайнов требуются регулярные сетки.

В заключение отметим, что имеется бесконечное множество других способов решения двухточечных краевых задач, поскольку все рассматриваемые далее методы решения многомерных эллиптических задач применимы в частности и к решению пространственно одномерных (двухточечных) краевых задач.

## Глава 12. Краевые задачи МСС

### 12.1. Формулировка задач МСС

Основу постановки задач механики сплошной среды (МСС) или, как говорят, термомеханики составляют законы сохранения массы, количества движения (импульса) и энергии. Вывод и описание этих уравнений можно найти в курсах континуальной механики (см. например, книги Седова (1970) и Ильюшина (1971)).

Следующая форма записи законов сохранения называется дивергентной или консервативной

$$\partial_t Y + \nabla \cdot \mathbf{F}(Y) + G(Y) = 0$$

где искомые переменные  $Y$  называются консервативными переменными и они взаимно-однозначно связаны с основными неконсервативными переменными  $y$ . Величины  $\mathbf{F}(Y)$  являются потоками величин  $Y$  и в смысле тензорного исчисления имеют ранг на единицу выше по сравнению с величинами  $Y$ . Величина  $G(Y)$  определяет объемный источник величины  $Y$ . Дифференцирование по времени  $\partial_t = \partial / \partial t$  выполняется при фиксированных (эйлеровых или неподвижных) пространственных переменных. Оператор дифференцирования по пространственным переменным обозначен символом  $\nabla = \sum \mathbf{e}_i \partial_i$ , где  $\mathbf{e}_i$  - декартов базис,  $\partial_i = \partial / \partial x_i$  - производные по декартовым координатам  $x_i$ . Поскольку в уравнении базис и пространственные переменные не фигурируют, то оно справедливо для любой системы эйлеровых координат.

Законы сохранения можно переписать также в интегральной форме:

$$\int_{V^*} (\partial_t Y + G(Y)) dV + \int_{S^*} \mathbf{F}(Y) \cdot \mathbf{n} dS = 0$$

и вариационной форме:

$$\int_{V^*} (\partial_t Y + G(Y)) \delta Y dV - \int_{V^*} \mathbf{F} \cdot \nabla \delta Y dV + \int_{S^*} \mathbf{F}(Y) \cdot \mathbf{n} \delta Y dS = 0$$

где интегральное уравнение записано для произвольного эйлерового объема  $V^*$  с граничной поверхностью  $S^*$ , а вариационное уравнение записано для всей эйлеровой пространственной области решения  $V$

с граничной поверхностью  $S$ . Обозначение  $\mathbf{n}$  принято для компонент внешней единичной нормали к граничной поверхности.

Роль величин  $Y$  в законах сохранения массы, количества движения и энергии отводится соответственно плотности  $\rho$ , импульсу  $\rho\mathbf{v}$  и полной энергии  $\rho(U + 0.5\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})$ , где  $\mathbf{v}$  - скорость сплошной среды и  $U$  - ее внутренняя энергия. Основными неконсервативными переменными являются обычно плотность  $\rho$ , скорость  $\mathbf{u}$  и внутренняя энергия  $U$  или температура  $T$ , связанная с внутренней энергией калорическим уравнением состояния. В приближенной форме для газов и жидкостей калорическое уравнение часто имеет вид  $U = c_v T$ , где  $c_v$  - теплоемкость при постоянном объеме. В общем случае внутренняя энергия содержит составляющие, связанные с другими ее видами (энергия упругих деформаций, поверхностного натяжения для пористых сред и так далее).

Потоки  $\mathbf{F}$  представлены суммой конвективных потоков  $\rho Y \mathbf{v}$  и диффузионных потоков, представленных в законе сохранения импульса напряжением  $\boldsymbol{\sigma}$  и в законе сохранения энергии тепловым потоком  $\mathbf{q}$ .

Заметного диффузионного потока плотности ("самодиффузия") в природе не обнаружено. В литературе описано его измерение в опытах с изотопами и газовыми смесями (см. книгу "Современное состояние аэродинамики больших скоростей" (1956) и обзор Белевича (2016)). Поэтому диффузионным потоком плотности в законе сохранения массы пренебрегают. В численных моделях самодиффузия плотности присутствует явно в виде искусственной вязкости или неявно в виде аппроксимационной вязкости.

Отметим, что интегральная и вариационная формы законов сохранения предъявляют пониженные требования к гладкости решений (потоки не дифференцируются) и соответствующие решения называются слабыми (или обобщенными).

В развернутой форме основные законы сохранения имеют вид:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) &= 0 \\ \partial_t (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} - \boldsymbol{\sigma}) - \rho \mathbf{g} &= 0 \\ \partial_t (\rho E) + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{v} - \mathbf{q}) - \rho Q &= 0 \end{aligned}$$

объемные источники количества движения представлены объемными силами  $\rho \mathbf{g}$  ( $\mathbf{g}$  - ускорение сил тяжести) и объемными источниками тепла  $\rho Q$ ,  $E = U + 0.5\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$  - удельная на единицу массы полная энергия.

Дальнейшая развернутая форма записи законов сохранения в компонентах систем координат частного вида может быть получена подстановкой обозначений используемой здесь абстрактной тензорной нотации, которые приведены в приложении.

Для замыкания системы уравнений МСС требуются соотношения для диффузионных потоков, то есть для напряжений и для тепловых потоков. Эти соотношения называются определяющими соотношениями (или уравнениями состояния), так как они определяют, что за сплошная среда рассматривается и как она реагирует на попытки ее деформировать или разогреть. Приведем ниже варианты наиболее распространенных определяющих соотношений.

Вязкий теплопроводный газ. В этом случае термодинамическое состояние среды характеризуется плотностью, температурой, тензором скоростей деформаций и градиентом температуры. Определяющие соотношения имеют вид

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_v, \quad \mathbf{q} = k_T \nabla T$$

где  $p = (\gamma - 1)\rho U$  давление,  $\mathbf{I}$  единичный тензор,  $\boldsymbol{\sigma}_v = \lambda_v(\mathbf{e} : \mathbf{I})\mathbf{I} + 2\mu_v\mathbf{e}$  тензор вязких напряжений,  $\lambda_v$  и  $\mu_v$  коэффициенты динамической вязкости (обычно  $\lambda_v \approx 0$ ),  $\mathbf{e} = 0.5(\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T)$  тензор скоростей деформаций,  $k_T$  коэффициент теплопроводности. В идеальном (невязком) газе коэффициенты вязкости и теплопроводности равны нулю.

Термоупругопластическая разрушающаяся среда:

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p) : \mathbf{I} - \beta_T(T - T_0)\mathbf{I} + 2\mu(\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p), \quad \mathbf{q} = k_T \nabla T$$

где  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и  $\boldsymbol{\varepsilon}_p$  - тензоры полной и пластической деформаций, определяемые интегрированием уравнений

$$d_t \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \cdot \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{e} + \nabla \cdot (\nu_\varepsilon \nabla \boldsymbol{\varepsilon})$$

$$d_t \boldsymbol{\varepsilon}_p + \boldsymbol{\varepsilon}_p \cdot \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_p = \lambda_p : \boldsymbol{\sigma} + \nabla \cdot (\nu_p \nabla \boldsymbol{\varepsilon}_p)$$

где  $d_t = \partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla$  - оператор материальной временной производной (вдоль траекторий материальных точек). Коэффициенты  $\lambda$  и  $\mu$  являются коэффициентами упругости, а тензор  $\lambda_p$  определяет закон пластического течения,  $\beta_T$  - коэффициент температурного расширения. В общем случае все эти коэффициенты зависят от напряженно-деформированного состояния, температуры и от параметра поврежденности среды  $D$ . Для неповрежденной среды  $D = 0$ , а при накоплении повреждений  $D \rightarrow \infty$ , обеспечивая стремление коэффициентов упругости к нулю. Параметр поврежденности определяется своим уравнением

$$d_t D = \lambda_D + \nabla \cdot (\nu_D \nabla D)$$

где правая часть  $\lambda_D$  является заданной функцией состояния среды.

Заметим, что в число основных искомым функций можно ввести уравнение для перемещений  $\mathbf{u}$

$$d_t \mathbf{u} = \mathbf{v} + \nabla \cdot (\nu_u \nabla \mathbf{u})$$

тогда уравнение для деформаций не потребуется, поскольку деформацию можно определить через градиенты перемещений:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = 0.5(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \nabla \mathbf{u} \cdot (\nabla \mathbf{u})^T)$$

Заметим, что во все эволюционные уравнения (для полных и пластических деформаций, для поврежденности, для перемещений) введены диффузионные члены с коэффициентами кинематической вязкости  $\nu_\varepsilon$ ,  $\nu_p$ ,  $\nu_D$  и  $\nu_u$ , соответственно. В уравнения для пластической деформации и повреждаемости такие диффузионные члены вводятся в градиентных теориях пластичности и повреждаемости. В нашем случае они введены из соображений единообразия записи эволюционных уравнений задачи. Такие дополнительные члены при численном решении всегда можно занулить, а можно и использовать для сглаживания решений искусственной вязкостью. Конечно, такая вязкость должна быть малой, иначе она исказит решение.

Заметим также, что имеется большое разнообразие вариантов уравнений, описывающих вязкие теплопроводные среды (например, турбулентные режимы течений, неньютоновские среды) и структурированные деформируемые разрушающиеся среды (вязкоупругость, моментные теории и др.). Многие имеющиеся варианты выходят за рамки выписанных соотношений. Имеется также большое разнообразие способов определения тензоров напряжений и деформаций, а также параметра поврежденности, который в общем случае может быть, например, тензором второго ранга. С физической точки зрения способы формулировки уравнений и различия трактовки играют важную роль для адекватности (соответствия) математических моделей физическим явлениям. В нашем случае для принципиального описания численных методов эти нюансы роли не играют и поэтому в данной книге не обсуждаются, поскольку на то есть специальная литература. Если нас будут далее в связи с описанием численных методов интересовать другие варианты систем уравнений, то они будут выписываться отдельно. Пока вполне можно ограничиться приведенным вариантом эйлеровой формулировки.

Нетрудно убедиться в том, что число выписанных выше в общем виде уравнений соответствует числу искомым функций, составляющих решение. Действительно, для расчета течений газа основными искомыми величинами являются плотность, скорость и температура. Если в некоторый момент времени распределение основных величин в области решения задано, то все остальные величины

можно через них выразить, используя алгебраические зависимости и пространственное дифференцирование. В случае упругопластической среды в число основных искомым функций дополнительно включаются тензоры полной и пластической деформаций и параметр поврежденности.

Основными уравнениями являются эволюционные уравнения, то есть, уравнения, которые содержат производные по времени. Остальные соотношения служат для подсчета величин, участвующих в эволюционных уравнениях и, в принципе, с их помощью можно исключить все дополнительные величины, оставив в эволюционных уравнениях только основные величины. Делать этого не будем, предоставив эту работу ЭВМ.

Рассмотрим теперь вопрос о постановке начальных и граничных условий. С начальными условиями вопрос решается просто: в начальный момент времени распределение основных искомым функций в области решения должно быть задано.

Вопрос о необходимых граничных условиях решается с помощью вариационной формулировки уравнений. Рассматривая вариационные уравнения видим, что они содержат интегралы по границе области решения. В этих интегралах подинтегральные выражения должны быть заданы, ибо они выражают влияние внешней (отсеченной) сплошной среды на среду в области решения. Эти подинтегральные выражения можно не задавать, если на границе задать саму основную функцию, для определения которой служит эволюционное уравнение. Действительно граничные интегралы содержат вариацию основной искомой функции в качестве множителя, а вариация обращается в нуль там, где варьируемая функция задана. Граничные условия, задающие основную функцию называются главными.

На открытых границах, за которыми находится та же сплошная среда, что и в области решения, либо задаются основные функции, если среда втекает в область решения (случай входной границы), либо в слабом смысле вариационной или интегральной формулировки требуется обращение в нуль нормальных производных от основных искомым функций, что означает неизменность состояния сплошной среды при переходе через открытые границы. Граничные условия, задающие поток основной величины, называются естественными.

Конечно высказанные общие соображения о граничных условиях не исчерпывают их разнообразие и будут далее уточняться при рассмотрении конкретных задач.

Заметим, что интегральная форма уравнений иногда записывается в виде, получаемом интегрированием по произвольной пространственно-временной области  $\tilde{V} \times [t_1, t_2]$

$$\int_{\vec{V}} Y dV \Big|_{t=t_1}^{t=t_2} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\partial \vec{V}} \mathbf{F}(Y) \cdot \mathbf{n} dS dt + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\vec{V}} G(Y) dV dt$$

## 12.2. Типы уравнений в частных производных

Рассматривая выписанные уравнения МСС, можно заметить, что, благодаря присутствию диффузионных членов, эволюционные уравнения являются уравнениями в частных производных второго порядка. Для таких уравнений имеется классификация, выделяющая три основных типа уравнений: эллиптические, параболические и гиперболические. Эти типы уравнений приводят к решениям имеющим существенно различные свойства, которые надо себе представлять, когда решаешь численно какую-либо задачу континуальной механики.

Каноническая форма записи квазилинейных уравнений в частных производных второго порядка имеет следующий вид

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} + c = 0$$

где коэффициенты  $A, B, C, a, b, c$  являются функциями независимых переменных и решения  $u(x, y)$ . Запишем это уравнение в виде системы уравнений первого порядка относительно функций  $\mathbf{v} = (\partial u / \partial x, \partial u / \partial y, u)$ :

$$\begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} + \begin{bmatrix} B & 0 \\ -1 & C \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y} = \begin{bmatrix} -(av_1 + bv_2 + c) \\ 0 \\ du \\ 0 \end{bmatrix}$$

где  $v_1 = \partial u / \partial x$ ,  $v_2 = \partial u / \partial y$ . Проведем через рассматриваемую точку  $(x, y)$  линию  $y = y(x)$ , которая в малой окрестности этой точки определяется уравнением  $dy = \lambda(x, y) dx$ . Пусть на этой линии решение  $u$  известно. Чтобы найти решение вне этой линии, надо определить производные от этой функции по независимым переменным. Для этого выписанная выше система уравнений первого порядка на данной линии

$$\begin{bmatrix} B + \lambda A & 0 \\ -1 & C \\ 0 & \lambda \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} dy + \lambda dx \\ \\ \\ \end{matrix} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y} = \begin{bmatrix} -(av_1 + bv_2 + c) \\ 0 \\ du \end{bmatrix}$$

должна быть разрешима относительно производных  $\partial \mathbf{v} / \partial x$  и  $\partial \mathbf{v} / \partial y$ :

$$\det \begin{bmatrix} B - \lambda A & C & 0 \\ -1 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & dy - \lambda dx \end{bmatrix} = 0$$

откуда находим

$$(-(B - \lambda A)\lambda + C)(dy - \lambda dx) = 0$$

В зависимости от знака дискриминанта  $D = AC - B^2$  рассматриваемое уравнение относится к одному из следующих типов:  $D > 0$  - эллиптический тип,  $D = 0$  - параболический тип,  $D < 0$  - гиперболический тип, Тип уравнений сохраняется при любой взаимно-однозначной замене зависимых и независимых переменных.

Типичными примерами уравнений основных типов служат:

1) эллиптическое стационарное уравнение теплопроводности для некоторой функции  $u$ :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

2) параболическое нестационарное уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

3) гиперболическое уравнение колебаний.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

Характеризуя различие в поведении решений уравнений основных типов, следует прежде всего отметить следующее.

В эллиптических задачах любое возмущение имеет бесконечную скорость распространения и мгновенно возмущает решение повсюду в области решения. При неизменных во времени уравнениях и краевых условиях решение эллиптической задачи не зависит от времени. Например, простейшее уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = r$$

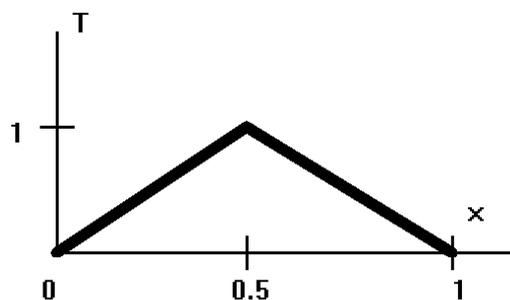
с граничными условиями

$$T|_{x=0} = 0, T|_{x=1} = 0$$

при  $r = 0$  имеет единственное решение  $T(x) = 0$ .



Возмущению  $T|_{x=0.5} = 1$  соответствует решение  $T = 1 - 2|x - 0.5|$



В гиперболических задачах любое возмущение распространяется с конечной скоростью  $c$ . Например, простейшее волновое уравнение

$$\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

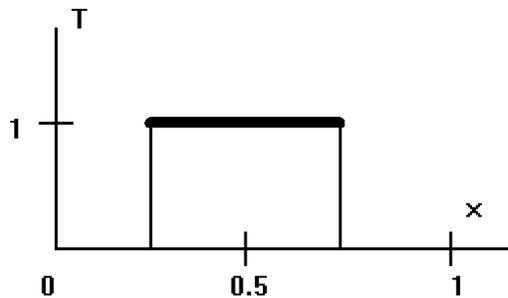
с начальными

$$T|_{t=0} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial t}|_{t=0} = 0$$

и граничными

$$T|_{x=0} = 0, \quad T|_{x=1} = 0$$

условиями имеет единственное решение  $T(x, t) = 0$ . Возмущению  $T(x, t)|_{x=0.5} = 1$  соответствует решение  $T = H((ct)^2 - (0.5 - x)^2)$ , где  $H$  - функция Хевисайда. Это решение показано ниже для момента времени  $t = 0.25/c$ :



В параболических задачах любое возмущение распространяется мгновенно, но его амплитуда в отличных от источника точках нарастает постепенно от нуля до значения, отвечающего решению соответствующей стационарной эллиптической задачи. Например задача для простейшего нестационарного параболического уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

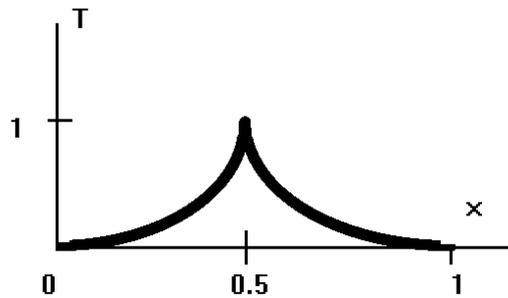
с начальным условием

$$T|_{x=0} = 0$$

и граничными условиями

$$T|_{x=0} = 0, \quad T|_{x=1} = 0$$

имеет единственное решение  $T(x, t) = 0$ . Возмущению  $T(x, t)|_{x=0.5} = 1$  соответствует решение, показанное ниже для некоторого момента времени  $t > 0$



Это решение в пределе при  $t \rightarrow \infty$  стремится к решению стационарной задачи  $T = 1 - 2|x - 0.5|$ , то есть к уже рассмотренному выше решению эллиптического уравнения стационарной теплопроводности.

Общая система уравнений механики сплошной среды обладает всеми упомянутыми выше свойствами поведения решений: и эллиптичностью, и гиперболичностью, и параболичностью, но проявляются эти свойства в разной степени в зависимости от свойств сплошной среды, скорости протекающих процессов и масштабов времени и пространства, на которых изучаются явления. Поясним это положение на примере модельных геофизических задач.

**Пример 1.** При исследовании внутреннего строения Земли с помощью анализа распространения сейсмических упругих волн, Земля рассматривается как твердое деформируемое упругое тело и передача возмущений описывается гиперболическими уравнениями нестационарной теории упругости следующего вида

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \lambda \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right)$$

где  $u_i$  - смещение,  $\lambda$  и  $\mu$  - модули упругости,  $\rho$  - плотность,  $\delta_{ij}$  - дельта Кронекера. Масштаб времени при этом характеризуется минутами, а масштаб пространства – сотнями километров. Хотя поведение материалов, образующих Землю, описывается в общем случае сложными определяющими соотношениями, учитывающими нели-

нейное упругое поведение, вязкостные эффекты, явления пластичности, разрушения, неоднородность и анизотропию свойств, для рассматриваемого в данном примере типа задач основные особенности решения ухватываются уже простейшей моделью упругого изотропного материала.

**Пример 2.** При анализе квазистатического напряженно-деформированного состояния горных пород вблизи выработок пользуются стационарными уравнениями теории упругости

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \left( \lambda \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) = 0$$

и решают соответствующие краевые задачи эллиптического типа. Масштаб времени в таких задачах отсутствует (стационарная задача) или, при учете нестационарных членов, характерное время процесса велико по сравнению со временем распространения малых возмущений по области решения. Учет нестационарных инерционных членов при этом формально придает уравнениям свойство гиперболичности, как в примере 1, но на временах много больших времени пробега упругой волны по рассчитываемой пространственной области решение успевает установиться и практически совпадает с решением квазистатической задачи. При этом часто расчет проводится большими шагами по времени по неявной схеме, поскольку явные схемы требуют для получения решения слишком большого числа маленьких временных шагов, ограниченных условием Куранта-Фридрихса-Леви. Простейшая неявная схема Эйлера имеет вид:

$$\rho \frac{U_i^{n+1} - 2U_i^n + U_i^{n-1}}{\Delta t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \left( \lambda \frac{\partial U_k^{n+1}}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial U_i^{n+1}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j^{n+1}}{\partial x_i} \right) \right)$$

где шаг по времени  $\Delta t \gg L/c$ ,  $L$  - характерный размер области решения,  $c$  - скорость продольных упругих волн ( $c^2 = (\lambda + 2\mu)/\rho$ ). При этом влияние нестационарных членов является пренебрежимо малым, поскольку знаменатель в нестационарном члене стремится к бесконечности, и решение практически совпадает с решением стационарных уравнений. Таким образом, на пространственно-временном масштабе данной задачи решение полных нестационарных уравнений гиперболического типа имеет свойства, присущие решению эллиптических уравнений.

**Пример 3.** Течения материала в недрах Земли рассчитываются на длительных временах в миллионы лет и на пространственных масштабах  $L$ , исчисляемых сотнями и тысячами километров. Такие

процессы описываются нестационарными уравнениями вязкой жидкости:

$$\rho \left( \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \cdot \left( \lambda_V \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu_V \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right),$$

где  $u_i$  - скорость среды,  $p$  - давление, определяемое законом сжимаемости  $\partial p / \partial t - \rho c^2 \partial u_k / \partial x_k = 0$ ,  $\lambda_V, \mu_V$  - коэффициенты вязкости. На больших интервалах времени  $\Delta t \gg L / c$  материал ведет себя как несжимаемый, в уравнениях движения главную роль играют члены с давлением и вязкостью, конвективные члены малы и поведение решения отвечает параболическому типу уравнений.

Отметим, что записанные в рассмотренных примерах уравнения являются частными случаями общей системы уравнений механики сплошной среды, в которой определяющие соотношения для напряжений можно сформулировать в общем виде с учетом упругих, вязких и пластических свойств. В разных процессах для разных материалов основными становятся разные члены такой общей системы уравнений и соответственно меняются преобладающие свойства уравнений и поведение решений.

Свойства уравнений и поведение решений оказывают сильное влияние на выбор эффективных методов решения, поэтому эти свойства надо себе представлять заранее и учитывать их при конструировании численных алгоритмов.

### 12.3. Роль консервативной формы записи

Важными преимуществами консервативных форм записи исходных уравнений являются следующие свойства получаемых на их основе так называемых консервативных разностных схем. Консервативные схемы автоматически выполняют законы сохранения на дискретном уровне и аппроксимируют соотношения на сильных разрывах в схемах сквозного счета (в смысле обобщенного решения, в интегральных нормах).

Отметим, что само по себе выполнение свойства консервативности еще не гарантирует правильную работу разностной схемы, так как помимо этого требуется выполнение условий аппроксимации (согласованности) и устойчивости, о которых говорится далее. Нарушение же свойства консервативности может приводить к появлению нефизических источников рассчитываемых величин и к неверному описанию положения и параметров скачков решения (ударных волн). Отметим также, что нарушения консервативности могут

иметь место даже при использовании консервативной формы уравнений из-за неаккуратной постановки и аппроксимации граничных условий.

## 12.4. Свойства гиперболических уравнений

При численном решении системы уравнений гиперболического типа (эволюционные уравнения без диффузионных членов) записываются, как правило, в виде систем дифференциальных уравнений первого порядка. Такие системы уравнений являются в общем случае нелинейными и их можно записать либо в нелинейной дивергентной форме,

$$\partial_t(A_{(t)}(U)) + \sum_{k=1}^3 \partial_{x_k}(F_{(k)}(U)) + B(U) = 0$$

на которой основывается теория разрывных решений, либо в недивергентной квазилинейной форме

$$\partial_t U + \sum_{k=1}^3 \tilde{A}_{(k)} \partial_{x_k} U + \tilde{B}(U) = 0$$

которая служит основой для приведения систем гиперболических уравнений к характеристической форме. Здесь  $A_{(t)}, B(U), \tilde{B}(U), \tilde{A}_{(k)}, F_{(k)}(U)$  ( $k=1,2,3$ ) являются известными функциями времени  $t$ , координат  $x_k$  и решения  $U$ . Операторы дифференцирования по времени и пространству обозначены  $\partial_t$  и  $\partial_{x_k}$ . Полагаем, что величины  $U, B(U), \tilde{B}(U), F_{(k)}(U)$  являются векторами размерности  $N$  (число искоемых функций), а величины  $\tilde{A}_{(k)}$  являются матрицами  $N \times N$ .

### 12.4.1. Характеристики и характеристические соотношения

Для квазилинейной системы уравнений

$$\partial_t U + \sum_{k=1}^3 \tilde{A}_{(k)} \partial_{x_k} U + \tilde{B}(U) = 0 \quad (a)$$

рассмотрим задачу Коши о продолжении решения, заданного на гиперповерхности  $\varphi(x_1, x_2, x_3, t) = 0$ . Начальное условие имеет вид:

$$\varphi(x_1, x_2, x_3, t) = 0 : U = U_*(x_1, x_2, x_3, t)$$

Чтобы продолжить решение, заданное на некоторой поверхности, надо сначала определить его временные и пространственные производные на этой поверхности, а затем использовать представление решения рядом Тейлора в окрестности этой поверхности.

Временные и пространственные производные на рассматриваемой поверхности можно определить алгебраически из исходной системы квазилинейных уравнений и соотношений, связывающих искомые производные  $\partial_t U$  и  $\partial_{x_k} U$  ( $k=1,2,3$ ) с дифференциалами решения  $d_k U$  вдоль линий пересечения рассматриваемой поверхности с координатными плоскостями  $(t, x_k)$

$$d_k U - \partial_t U dt - \partial_{x_k} U dx_k = 0 \quad (k=1,2,3) \quad (b)$$

Линии пересечения рассматриваемой поверхности с координатными плоскостями определяются соотношениями

$$\frac{dx_k}{dt} = \lambda_k = -\frac{\partial \varphi}{\partial t} / \frac{\partial \varphi}{\partial x_k}$$

связывающими приращения пространственных переменных и времени в системе уравнений (a) и (b).

Исключая временные производные, из (a) и (b) получаем разрешающую систему уравнений относительно пространственных производных  $\partial_{x_k} U$ :

$$d_k U / dt + \sum_{k=1}^3 (\tilde{A}_{(k)} - E \lambda_k) \partial_{x_k} U dt + \tilde{B}(U) dt = 0$$

где  $E$  – единичная матрица.

Если собственные числа  $\lambda_{k(i)}$  матриц  $\tilde{A}_{(k)}$  (т.е. корни уравнения  $\det(\tilde{A}_{(k)} - \lambda_k E) = 0$ ) вещественны, то существуют поверхности  $\varphi(x_1, x_2, x_3, t) = 0$ , для которых задача определения производных вырождается (так как детерминант матрицы системы алгебраических уравнений равен нулю) и, следовательно, на таких поверхно-

стях, пересекающих координатные плоскости по линиям  $dx_k / dt = \lambda_{k(i)}$ , задача определения производных решения не имеет. Такие поверхности называются характеристическими, а линии их пересечения с координатными плоскостями называются характеристиками. На характеристиках исходные уравнения приводятся к характеристической форме, отражающей связь решения с его производными вдоль характеристик. Для получения характеристических соотношений надо определить левые собственные векторы  $l_{k(i)}$  матрицы  $\tilde{A}_{(k)}$ , отвечающие собственным значениям  $\lambda_{k(i)}$ . Эти векторы определяются как нетривиальные (ненулевые) решения системы однородных алгебраических уравнений:

$$l_{k(i)}(\tilde{A}_{(k)} - \lambda_{k(i)}E) = 0$$

где  $k=1,2,3$ . Умножая скалярно разрешающую систему уравнений слева на собственные векторы, получаем уравнения в характеристической форме

$$l_{k(i)} \cdot d_{k(i)}U / dt + l_{k(i)} \cdot \left( \sum_{j \neq k} \tilde{A}_{(j)} \partial_{x_j} U + B \right) = 0 \quad (k=1,2,3)$$

В характеристических соотношениях используются дифференциалы искоемых функций  $d_{k(i)}U$  вдоль характеристик  $dx_k / dt = \lambda_{k(i)}$

$$d_{k(i)} / dt = (\partial_t + \lambda_{k(i)} \partial_{x_k})$$

Производные в направлениях  $x_j$  ( $j \neq k$ ) рассматриваются как заданные.

Таким образом, если матрицы  $\tilde{A}_{(k)}$  имеют вещественные собственные числа, то рассматриваемая система уравнений относится к гиперболическому типу и приводится к характеристической форме.

Если матрица  $\tilde{A}_{(k)}$  имеет постоянные коэффициенты, то соотношения на характеристике  $dx_k / dt = \lambda_{k(i)}$  можно переписать так:

$$d_{k(i)}(l_k^{(i)} \cdot U) = -l_k^{(i)} \cdot \left( \sum_{j \neq k} A_{(j)} U_{x_j} + B \right) dt$$

Стоящие под знаком дифференциала величины  $r_{k(i)} = l_{k(i)} \cdot U$  называются *инвариантами Римана*. При равенстве нулю правых частей соотношения на характеристике инварианты Римана сохраняются вдоль характеристики.

Основными краевыми задачами для гиперболических систем уравнений являются: 1) *задача Гурса*, в которой функция  $U$  задана на нехарактеристической поверхности и требуется найти продолжение решения в область; и 2) *задача Коши-Римана*, в которой функция  $U$  задана на пересекающихся характеристических поверхностях и требуется найти продолжение решения в область.

Отметим, что уравнения эллиптического и параболического типов не имеют характеристик и не приводятся к характеристической форме, так как они либо не представимы в нормальной форме (в виде системы уравнений, разрешенных относительно первых производных по времени), либо для них собственные числа матриц  $\tilde{A}_{(k)}$  имеют ненулевые мнимые части.

#### 12.4.2. Пример определения характеристик

Рассмотрим нестационарное одномерное течение сжимаемого газа, которое описывается следующей системой уравнений гиперболического типа:

$$\begin{aligned} \partial_t p + u \partial_x p + \rho c^2 \partial_x u &= 0 \\ \rho \partial_t u + \rho u \partial_x u + \partial_x p &= 0 \\ \partial_t \eta + u \partial_x \eta &= 0 \end{aligned}$$

где  $u$  - скорость течения,  $p = p(\rho, \eta)$  - давление, являющееся заданной функцией плотности  $\rho$  и энтропии  $\eta$ ,  $c = \sqrt{\gamma p / \rho}$  - скорость звука. Характеристики определяются соотношениями

$$dx / dt = u, \quad dx / dt = u \pm c$$

а решение на характеристиках удовлетворяет характеристическим соотношениям

$$d\eta = 0, \quad dp \pm \rho c du = 0$$

На следующем рисунке показана конфигурация характеристик для дозвукового и сверхзвукового течений

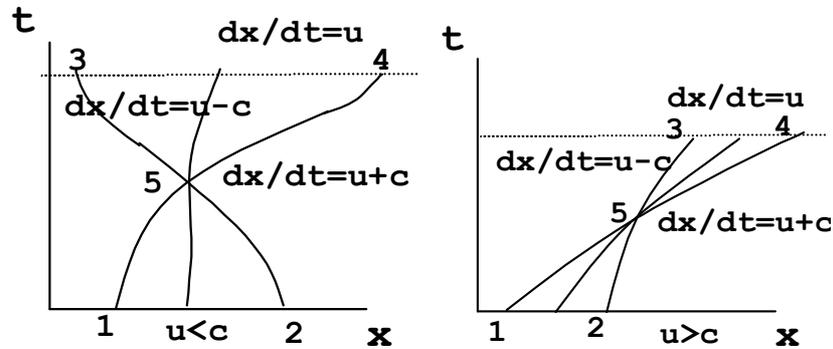


Рис. 1. Характеристик для дозвукового и сверхзвукового течений

Решение в точке 5 зависит только от решения в области влияния, представленной криволинейным треугольником (1-5-2). Криволинейный треугольник (5-3-4) выделяет область распространения возмущения, приложенного в точке 5.

### 12.4.3. Соотношения на сильных разрывах

Для исходной системы дивергентных уравнений

$$\partial_t Y + \nabla \cdot \mathbf{F}(Y) + g(Y) = 0$$

интегральная форма записи имеет вид:

$$\int_{V_t} [\partial_t Y + \nabla \cdot \mathbf{F}(Y) + g(Y)] dx dt = 0$$

где  $Y$  – консервативная переменная,  $F$  – поток величины  $Y$ ,  $g$  – источник величины  $Y$ , интегрирование проводится по произвольному гиперобъему  $V_t = V \times [t_1, t_2]$ . С использованием преобразования объемного интеграла в поверхностный получаем слабую интегральную формулировку закона сохранения

$$\int_{\partial V_t} (Y n_t + \mathbf{F}(Y) \cdot \mathbf{n}) dx dt + \int_{V_t} g(Y) dx dt = 0$$

которая в отсутствие диффузии не содержит операций дифференцирования и допускает разрывные решения.

В областях гладкости интегральное уравнение эквивалентно исходному дифференциальному уравнению. В случае, если область

$V_t$  содержит разрывные решения, переход от интегрального уравнения к исходному дифференциальному в окрестности разрыва невозможен и справедливы соотношения, связывающие значения иско- мых функций по обе стороны поверхности разрыва, называемые со- отношениями на скачке. Справедлива следующая теорема. о соот- ношениях на скачке: в случае разрывных решений на заранее неиз- вестных поверхностях разрыва, определяемых уравнением  $\varphi(x, t) = 0$ , выполняются соотношения на скачке

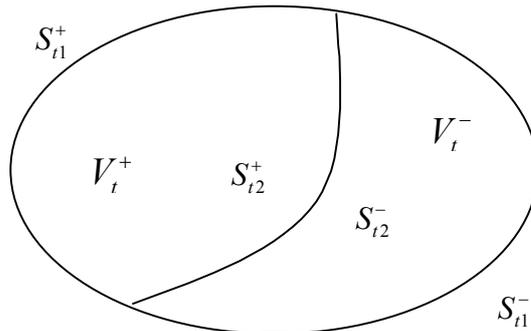
$$[Y]\varphi_t + [F(Y)] \cdot \nabla \varphi = 0$$

или

$$[Y]u_t + [F(Y)] \cdot \mathbf{n} = 0$$

где  $[f] = f^+ - f^-$  - скачок величины  $f$  при переходе через поверхность разрыва,  $u_t = \partial_t \varphi / |\nabla \varphi|$  - скорость движения поверхности разрыва по нормали,  $\mathbf{n} = \nabla \varphi / |\nabla \varphi|$  - пространственная внешняя нормаль к поверхности разрыва.

**Доказательство.** Пусть гиперобъем  $V_t$  содержит поверхность разрыва, которая делит его на две подобласти  $V_t = V_t^+ \cup V_t^-$ .



Поверхность каждой из этих двух подобластей частично совпадает с поверхностью исходного гиперобъема  $\partial V_t = S_{t1}^+ \cup S_{t1}^-$  и содержит участки поверхности  $S_2^+$  и  $S_2^-$ , принадлежащие поверхности разрыва:  $\partial V_t^+ = S_{t1}^+ \cup S_2^+$ ,  $\partial V_t^- = S_{t1}^- \cup S_2^-$ . Подвергнем интегральное уравнение цепочке преобразований с учетом аддитивности операции интегрирования и теоремы Остроградского-Гаусса:

$$\begin{aligned}
 0 &= \int_{V_t} (\partial_t Y + \nabla \cdot \mathbf{F}(Y) + \mathbf{g}(Y)) dxdt = \\
 &= \int_{V_t^+ \cup V_t^-} (\partial_t Y + \nabla \cdot \mathbf{F}(Y) + \mathbf{g}(Y)) dxdt = \\
 &= \int_{S_{11}^+ \cup S_{12}^+} (Yn_t + \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) dxdt + \int_{\partial S_{11}^- \cup S_{12}^-} (Yn_t + \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) dxdt + \\
 &+ \int_{V_t} \mathbf{g}(Y) dxdt = \\
 &= \int_{V_t} (\partial_t Y + \nabla \cdot \mathbf{F} + \mathbf{g}(Y)) dxdt + \int_{S_2} ([Y]n_t + [\mathbf{F}] \cdot \mathbf{n}) dxdt
 \end{aligned}$$

где явно выделены составляющие поверхностных интегралов относящиеся к поверхности разрыва. В силу произвольности рассматриваемого гиперобъема отсюда следуют соотношения на сильном разрыве.

**Следствие.** Для частного случая систем гиперболических уравнений с постоянными коэффициентами

$$A_{(t)} \partial_t y + A_{(k)} \cdot \nabla_k y + \mathbf{g}(y) = 0$$

необходимым условием существования скачка является условие

$$\det(A_{(t)} \varphi_t + A_{(k)} \varphi_{x_k}) = 0$$

иначе уравнение имеет лишь тривиальное решение и разрыв отсутствует.

Положение скачков и скорости их распространения для нелинейных систем гиперболических уравнений в общем случае зависят от интенсивности (величины) разрыва. Недифференциальные члены исходной системы уравнений не влияют на соотношения на сильном разрыве. Более подробное обсуждение условий на скачках следует искать в курсах механики сплошных сред (см., например, Зарубин, Кувыркин (2002))

#### 12.4.4. Вязкие эффекты и гиперболичность

Спрашивается, можно ли учесть диффузию и при этом сохранить гиперболичность системы уравнений. Ответ: можно. Для этого надо переопределить диффузионные потоки так, как это сделано в модели теплопроводности Максвелла-Катанео. В этой модели тепловые потоки отнесены в число основных искомых переменных и

для них предложено свое эволюционное уравнение следующего вида:

$$\tau_q \partial_t \mathbf{q} = k_T \nabla T - \mathbf{q}$$

где  $\tau_q$  - малая величина размерности времени, если ее положить равной нулю, то получаем обычный закон Фурье для теплового потока. Если же она мала и положительна, то определение теплового потока и уравнение теплопроводности

$$c_v \partial_t T = \nabla \cdot \mathbf{q} + Q$$

составляют относительно температуры и теплового потока систему уравнений гиперболического типа.

Аналогично можно переопределить вязкие напряжения, записав для них эволюционное уравнение

$$\tau_v \partial_t \boldsymbol{\sigma}_v = \lambda_v (\mathbf{e} : \mathbf{I}) \mathbf{I} + 2\mu_v \mathbf{e} - \boldsymbol{\sigma}_v$$

где  $\tau_v$  - малая величина размерности времени, тогда совместно с уравнениями движения и неразрывности получится модифицированный вариант уравнений Навье-Стокса, который относится к гиперболическому типу.

## 12.5. Примеры модельных уравнений

Приведем ниже некоторые важные модельные уравнения (не все возможные, конечно):

1) гиперболическое уравнение переноса содержит только нестационарный и конвективный члены.

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla A = 0$$

2) эллиптическое уравнение стационарной (решение в произвольной точке  $x$  не зависит от времени) диффузии:

$$\nabla \cdot (k \nabla A) + C = 0$$

3) параболическое уравнение нестационарной диффузии:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla A) + C$$

4) гиперболическое уравнение второго порядка

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = \nabla \cdot (k \nabla A) + C$$

5) система двух уравнений первого порядка гиперболического типа:

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial t} &= \nabla \cdot B + C \\ \frac{\partial B}{\partial t} &= k \nabla A \end{aligned}$$

6) эллиптическое погранслоное уравнение

$$\nabla \cdot (k \nabla A) + \mathbf{u} \cdot \nabla A + bA = 0$$

7) общее модельное балансное уравнение

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla A = \nabla \cdot (k \nabla A) + C(A)$$

где  $k \ll 1$  - малый параметр при старшей производной (коэффициент вязкости),  $\mathbf{u}$ ,  $b$  и  $C$  - заданные функции.

Для общего модельного балансного уравнения начальные и граничные условия имеют вид:

$$t = 0, \mathbf{x} \in V : A = A_0(\mathbf{x})$$

$$t \geq 0, \mathbf{x} \in S_{\text{un}} : A = A_*(\mathbf{x}, t) \quad (\text{условия Дирихле})$$

$$t \geq 0, \mathbf{x} \in S \setminus S_{\text{un}} : \mathbf{n} \cdot \nabla A = B_*(\mathbf{x}, t) \quad (\text{условия Неймана})$$

где  $V$  - пространственная область решения,  $S = \partial V$  - граница. Если граничный поток  $B_* = B_*(A, \mathbf{x}, t)$  зависит от  $A$ , то условия Неймана называют смешанными.

Вопрос о корректном задании начальных и граничных условий, а также о существовании и единственности решения служит предметом отдельного теоретического анализа и рассматривается для классических задач в курсе уравнений математической физики.

Конструирование и исследование численных методов часто проводится на примерах модельных задач, поскольку выполнить детальный анализ методов в условиях реальных задач в большинстве случаев практически невозможно. Под модельными краевыми задачами подразумеваются упрощенные варианты краевых задач математической физики, сохраняющие некоторые основные свойства реальных краевых задач. Выводы анализа модельных задач облегчают понимание поведения реальных численных решений, подсказывают улучшенные варианты численных алгоритмов и условия сходимости приближенных решений.

Задачи, возникающие в приложениях, часто не имеют априорного теоретического обоснования и решаются в условиях, когда вопросы о существовании и единственности решения являются открытыми и исследуются в процессе численного решения. Вопрос о достоверности получаемых численных решений выясняется путем всевозможных математических проверок таких, как

- 1) применение численного метода к модельным краевым задачам, имеющим известные решения,
- 2) сравнением численных и (искусственных) аналитических решений,
- 3) сравнением численных решений одной и той же задачи, полученных разными методами,
- 4) контролем диагностических функционалов, выражающих ожидаемые свойства решений такие, как выполнение законов сохранения или поведение ошибок,
- 5) численным исследованием сходимости решений при измельчении пространственно-временных сеток или (в случае бессеточных методов) при увеличении размерности конечномерных пространств приближенных решений,

Отметим, что вопреки распространенному заблуждению сравнение с данными физических экспериментов не дает никакой полезной информации о достоверности численных решений. Такое сравнение применяется для оценки достоверности физической теории, лежащей в основе численных решений, при условии, что достоверность самих численных решений уже проверена независимо чисто математическими средствами, упомянутыми выше.

## 12.6. Искусственные аналитические решения

Имеется следующий простой способ получения аналитических решений для дальнейшего их использования при тестировании. Для того, чтобы произвольная достаточно гладкая функция  $A = A^*(x, t)$  являлась аналитическим решением рассматриваемой краевой задачи, то есть в нашем случае удовлетворяла модельному уравнению, а

также начальным и граничным условиям, достаточно задать функцию правой части, начальные и граничные условия в виде:

$$C(x, t) = \frac{\partial A^*}{\partial t} + u \cdot \nabla A^* - \nabla \cdot (k \nabla A^*)$$

$$x \in S_A : A(x, t) = A^*(x, t)$$

$$x \in S \setminus S_A : n \cdot \nabla A(x, t) = n \cdot \nabla A^*(x, t)$$

$$t = 0 : A = A^*(x, 0)$$

Хотя физическая ценность таких искусственных аналитических решений равна нулю, проверка алгоритмов на таких решениях позволяет смоделировать разнообразные случаи, встречающиеся в реальных численных расчетах, и практически оценить достоверность, точность и эффективность численного метода.

## 12.7. Обезразмеривание уравнений

Для любой вычислительной машины имеется самое маленькое, отличное от нуля, число и самое большое число, с которым может оперировать данная машина. Например, для четырехбайтовых ЭВМ, к которым относятся обычные персональные компьютеры, минимальное и максимальное по модулю значения вещественных чисел равны:  $\pm 8.43_{10} - 37$  и  $\pm 3.37_{10} 38$ , а диапазон представления целых чисел определяется значениями  $\pm 2147483647$ , соответственно. Необходимо, чтобы диапазон изменения решения и входной информации находился бы в области представимых на ЭВМ значений. Отметим, что при выполнении арифметических действий ограничения, накладываемые на величины операндов ограниченной разрядностью представления чисел, являются более жесткими. Так, “машинное эpsilon”, то есть минимальное положительное вещественное число, добавление которого к единице приводит к результату, отличному от единицы, для четырехбайтовых ЭВМ равно примерно  $1_{10} - 6$ .

“Машинное эpsilon” играет важную роль при реализации неравенств в программах для ЭВМ. Если суммируются числа, величины которых отличаются более, чем на шесть порядков, то точность будет потеряна. То есть, например, добавление к единице бесконечного числа слагаемых, меньших “машинного эpsilon”, будет иметь своим результатом единицу! Желательно поэтому, чтобы функции, описывающие решение, не слишком бы отличались от единицы. Это достигается масштабированием (обезразмериванием) искомых функций.

Из теории размерности и подобия (см. Седов, 1962) известно, что числовые значения искомых переменных и коэффициентов уравнений зависят от выбора масштабов (размерностей или характерных значений). Неудачный выбор размерностей из-за ограниченного числа разрядов для представления чисел в вычислительных машинах может приводить к потере точности при выполнении арифметических операций с очень большими и очень маленькими числами. Поэтому важно хорошо отмасштабировать искомые переменные, то есть перейти от размерных к безразмерным переменным с разумным выбором масштабов размерных переменных. Выбор масштабов или, другими словами, выбор характерных значений физических величин производится так, чтобы безразмерные переменные не слишком отличались от единицы.

Разумно отмасштабированные переменные приобретают ясный физический смысл. Например, сообщение о том, что рассматривается соударение тел со скоростью 100 метров в секунду практически недостаточно для того, чтобы судить об интенсивности удара. Напротив, сообщение о том, что скорость соударения тел составляет одну десятую от скорости звука, говорит о том, что соударение является высокоскоростным и будет сопровождаться заметными деформациями соударяющихся тел. Аналогично, в гидродинамике для определения режима течения важно знать безразмерное значение скорости набегающего потока по отношению к скорости звука, простое же сообщение размерной величины скорости потока в метрах в секунду является бесполезным.

Участвующие в безразмерных уравнениях безразмерные коэффициенты, составленные из размерных масштабов, называются параметрами подобия. Количество независимых параметров подобия определяется  $\pi$ -теоремой о параметрах подобия

$\pi$ -теорема: Пусть среди размерных масштабов величин  $\{a_i\}_{i=1}^n$ , характеризующих некоторый процесс, первые  $k$  имеют независимые размерности. Тогда с помощью этих  $k$  независимых размерных масштабов из остальных масштабов можно образовать систему  $n-k$  безразмерных параметров подобия

$$\Pi_i = \frac{a_{k+i}}{a_1^{q_1} a_2^{q_2} \dots a_k^{q_k}} \quad (i=1, \dots, n-k)$$

Значения безразмерных параметров подобия ответственны за математические свойства уравнений. Знание ожидаемого диапазона изменения параметров подобия важно как на стадии конструирования численного метода, так и в процессе нахождения численного решения. Например, сказать, что на графике показано решение задачи в момент времени, равный 15 секундам с начала процесса, это все равно, что не сказать ничего. Напротив, если сказано, что график

отвечает безразмерному моменту времени, равному 0.5, где масштабом времени является время распространения возмущения по области решения, то такое высказывание уже вполне конкретно и полезно. Из него следует, что фронт волны возмущения должен находиться на расстоянии половины максимального размера области решения от точки первоначального возмущения.

Явления, характеризуемые одними и теми же значениями параметров подобия являются подобными. Это означает, что в безразмерной форме подобные явления описываются одними и теми же значениями безразмерных физических переменных.

Рассмотрим пример обезразмеривания. В случае начально-краевой задачи для модельного уравнения конвекции-диффузии

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla A = \nabla \cdot (k \nabla A) + C(A)$$

безразмерные переменные можно ввести так:

$$\tilde{x} = x / x_*, \quad \tilde{t} = tu_* / x_*, \quad \tilde{u} = u / u_*, \quad \tilde{\nabla} = \nabla x_*, \quad \tilde{A} = A / A_*$$

где звездочки отмечают размерные константы, используемые в качестве масштабов переменных задачи, а тильды отмечают вводимые безразмерные переменные. Подставляя вместо размерных переменных их выражения, после несложных преобразований получаем запись уравнения в безразмерном виде:

$$\frac{\partial \tilde{A}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{u} \cdot \tilde{\nabla} \tilde{A} = \tilde{\nabla} \cdot \left( \frac{1}{\text{Re}} \tilde{\nabla} \tilde{A} \right) + \tilde{C}$$

где  $\text{Re} = \frac{u_* x_*}{k}$  - параметр подобия, называемый числом Рейнольдса,

а  $\tilde{C} = C \frac{x_*}{u_* A_*}$  - безразмерный источниковый член. Начальные и гра-

ничные условия аналогично преобразуются к безразмерному виду. Значки “тильда” над безразмерными переменными в дальнейшем, как правило, опускаются.

В безразмерных переменных уравнения сохраняют свою форму. Поэтому при написании алгоритмов и программ можно использовать исходную размерную форму уравнений, а безразмерные переменные использовать при проведении расчетов путем задания входных данных для коэффициентов уравнений и краевых условий в соответствии с принятым вариантом обезразмеривания переменных.

При написании научных отчетов и статей по результатам исследований хорошей практикой является представление числовых данных в безразмерной форме. Если способ обезразмеривания ука-

зан, то восстановление размерных значений величин для использования в технических приложениях не составляет большого труда.

## 12.8. Обзор методов решения

Любой численный алгоритм решения в конечном счете представим последовательностью вспомогательных нуль-мерных задач в виде арифметических действий над числами. Сведение сложных исходных задач к последовательности более простых вспомогательных задач является общим подходом для всех без исключения методов решения задач (а также для решения проблем во всех других областях человеческой деятельности). В качестве иллюстрации этого утверждения приведем ниже краткое описание идейной основы наиболее употребительных в вычислительной механике способов реализации этого общего подхода.

Заметим, что реальные методы решения начально-краевых задач представляют собой объединение целого ряда составляющих, касающихся выбора исходной формулировки задачи, метода аппроксимации решения, способа вывода дискретизированных уравнений и алгоритма их решения. Поэтому, например, выражение "задача решается методом конечных разностей" практически мало что сообщает о методе решения, ибо возможно множество различных вариантов реализации метода конечных разностей. Поэтому и те приемы, которые в данном разделе описываются, представляют лишь примеры таких общих составляющих, а не законченные описания методов решения, которым посвящены последующие главы.

### 12.8.1. Разделение переменных

Метод разделения переменных состоит в поиске решения исходной задачи среди функций частного вида:

$$A(x_1, x_2, x_3, t) = A_{(1)}(x_1)A_{(2)}(x_2)A_{(3)}(x_3)A_{(0)}(t)$$

Исходная задача при этом сводится к вспомогательным задачам меньшей пространственно-временной размерности для функций  $A_{(i)}(x_i)$  ( $i=1,2,3$ ) и  $A_{(0)}(t)$ . В следующих двух разделах приводятся примеры реализаций метода разделения переменных.

### 12.8.2. Сведение начально-краевых задач к начальным

Решение эволюционных задач часто ищется в виде разложения по заданному пространственному базису  $\varphi_k$  с неизвестными коэффициентами  $a_{(k)}(t)$ , зависящими от времени

$$A(x_1, x_2, x_3, t) = \sum \varphi_k(x_1, x_2, x_3) a_{(k)}(t)$$

Исходная начально-краевая задача проекционным методом (см. главу 1) сводится к задаче Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений по времени относительно коэффициентов  $a_{(k)}(t)$ . Трудности реализации связаны с построением базиса  $\varphi_k$  и удовлетворением граничным условиям в условиях сложной геометрии.

### 12.8.3. Покоординатная редукция уравнений

В методе покоординатной редукции уравнений вдоль одной из координат принимается упрощенная аппроксимация решения, что позволяет исключить эту координату из рассмотрения и понизить пространственную размерность уравнений задачи на единицу.

Метод покоординатной редукции часто используется не только для численного решения задач, но и для вывода упрощенных (редуцированных) уравнений для описания поведения таких объектов как, например, **оболочки** (упрощенный закон изменения смещений по толщине), **мелкие водоемы** (осреднение скоростей по глубине) и **пограничные слои** (фиксированное изменение скоростей поперек пограничного слоя).

Благодаря методу покоординатной редукции появились уравнения теории оболочек, теории мелкой воды, теории пограничного слоя.

Покоординатную редукцию уравнений удастся реализовать, если имеется априорная информация о зависимости решения от редуцируемой координаты  $x_i^*$  и если поверхности  $x_i^* = \text{const}$  составляют части границы области решения.

Примерами реализации метода покоординатной редукции являются метод прямых и метод интегральных соотношений

В методе прямых дискретизация решения вводится по пространственным координатам  $(\xi_1, \xi_2)$ , кроме одной  $(\xi_3)$ , и применяется неявная аппроксимация по времени  $t$ . На новом временном слое  $t = t^{n+1}$  исходная начально-краевая задача сводится к двухточечной краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений относительно неизвестных коэффи-

циентов, зависящих от координаты  $\xi_3$ . Метод применим к задачам с областями решения, допускающими введение регулярных сеток (односвязные области) и имеющими границы в виде координатных плоскостей.

В методе интегральных соотношений область интегрирования разрезается на некоторое число полос, равноотстоящих от границы области. Искомые функции заменяются в исходных уравнениях интерполяционными выражениями с узлами на границах полос. В результате интегрирования исходных уравнений поперек полос зависимость от поперечной координаты исключается и в двумерном случае получается упрощенная система обыкновенных дифференциальных уравнений по продольной координате относительно коэффициентов интерполяции, к которой присоединяются граничные условия (Дородницын, 1960; О.Белоцерковский, Чушкин, 1962).

#### 12.8.4. Методы расщепления

Рассмотрим решение нестационарного операторного уравнения

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu$$

где пространственный оператор правой части представим в виде суммы  $M$  более простых операторов

$$Lu = L_1u + L_2u + \dots + L_Mu$$

Пусть разностная аппроксимация исходного уравнения по времени имеет вид

$$u^{n+1} = (E + \tau L)u^n$$

тогда при решении задачи методом расщепления оператор правой части приближенно заменяется произведением  $M$  более простых операторов

$$u^{n+1} = (E + \tau L_1)(E + \tau L_2) \cdots (E + \tau L_M)u^n$$

погрешность такой замены равна  $O(\tau^2)$ , что проверяется сравнением исходного и измененного операторов правых частей. В процессе расщепления нужно удовлетворить краевым условиям.

В западной научной литературе метод расщепления называют методом факторизации. В зависимости от выбора простых

операторов различают схемы физического (по процессам) и геометрического (по направлениям) расщепления. Примерами **методов расщепления по физическим процессам**, могут служить метод крупных частиц в газодинамике, метод коррекции давления в гидродинамике, метод пластической коррекции в упруго-пластичности, которые рассматриваются далее.

Для стационарных задач выписанная выше общая схема расщепления применяется как итерационный процесс расщепления (в выписанных выше уравнениях метода расщепления в этом случае индекс "n" трактуется как номер итерации). Примерами могут служить итерационные **методы геометрического расщепления**, а именно, методы дробных шагов (Яненко) и переменных направлений (Дуглас-Рекфорд), в соответствии с которыми на первом полушаге итерации (или на промежуточном "временном" слое) производные по координате  $x$  определяются явно со старого слоя, а по координате  $y$  решаются двухточечные краевые задачи. На втором полушаге производные по координате  $y$  определяются явно по значениям с упомянутого промежуточного слоя, а по координате  $x$  для решений на новом "временном" слое ставятся двухточечные краевые задачи.

#### 12.8.5. Методы конечных разностей

Классический метод конечных разностей использует аппроксимацию исходных дифференциальных уравнений и начально-краевых условий на сеточных шаблонах (шаблон это узел и его соседи) с помощью разностных представлений производных искомых функций. Разностные аппроксимации производных определяются при этом методом неопределенных коэффициентов с использованием разложения решения в ряды Тейлора, методом естественной аппроксимации или методом якобианов.

Под именем метод конечных разностей скрывается обширное множество численных методов, поэтому выражение "задача решается методом конечных разностей" дает довольно неопределенную информацию.

Заметим, что имеется подмножество вариантов метода конечных разностей, основанных на выводе системы алгебраических уравнений дискретизированной задачи, исходя из вариационной формулировки исходной начально-краевой задачи. Это подмножество методов имеет групповое наименование вариационно-разностного метода.

История метода конечных разностей насчитывает по меньшей мере три столетия, начиная с основополагающих работ Ньютона, Лейбница и Эйлера.

## 12.8.6. Метод конечных объемов

Метод конечных объемов (или, в других терминологиях, интегро-интерполяционный метод, метод контрольных объемов) для задач конвекции-диффузии был впервые предложен в работах Годунова (1959), Тихонова и Самарского (1962). На Западе основополагающие работы по этому методу выполнены примерно в то же время Хиртом.

Метод конечных объемов основан на аппроксимации интегральной формы балансных уравнений задачи на конечных (контрольных) пространственно-временных объемах (ячейках), каждый из которых содержит окрестность определенного узла регулярной или нерегулярной сетки. Дискретизация интегральных уравнений проводится с использованием кусочно-полиномиальной или конечно-разностной аппроксимации решения. Рассмотрим принципиальную схему метода конечных объемов на примере общего балансного уравнения, выражающего некоторый закон сохранения.

Представим область решения  $V$  набором непересекающихся конечных (контрольных) объемов  $V = \bigcup_k V_{(k)}$ , каждый из которых ассоциирован со своим узлом сетки. Такое разбиение производится, например, по методу Вороного, в соответствии с которым в области решения размещается  $N$  узлов сетки, окруженными так называемыми ячейками Вороного, представляющими контрольные объемы, разделенные гранями, лежащими в плоскостях, перпендикулярных ребрам сетки и делящих ребра сетки пополам. Ребрами сетки называются отрезки прямых соединяющих соседние узлы. Таким образом ячейка Вороного для каждого узла представляет его окрестность. Прилегающие к границе контрольные объемы имеют в качестве некоторых граней участки граничной поверхности области решения, на которых ставятся граничные условия.

Закон сохранения в интегральной форме для каждого конечного объема имеет вид

$$\int_{V_{(k)}} (\partial_t Y + G(Y)) dV + \sum_{i=1}^3 \left( \sum_{l=1}^M \int_{S_{(k,l)}} F_i(Y) n_i dS \right) = 0,$$

где  $i=1, \dots, N$ . Интеграл по поверхности контрольного объема представлен суммой интегралов по всем его граням.

Детализация метода конечных объемов связана с введением интерполяционных формул для сеточных функций, применением тех, или иных формул численного дифференцирования при вычислении потоков  $F_i(Y)$ , формул численного интегрирования по объему и по граням, по способу регуляризации дискретизированной задачи, то

есть по способу модификации дискретного оператора с целью обеспечения требуемых свойств, в первую очередь, свойства сходимости приближенного решения к искомому, по способу решения системы дискретных уравнений, по способу численного интегрирования по времени, и так далее. Уже данное перечисление основных альтернатив показывает, что под наименованием метода конечного объема выступает обширное семейство численных методов, столь же неисчерпаемое, как и семейство метода конечных разностей. Подробнее метод конечных объемов рассматривается далее при описании конкретных численных алгоритмов континуальной механики.

Во многих случаях вместо пространственных конечных объемов используются пространственно-временные конечные объемы.

#### 12.8.7. Метод конечных элементов

Метод конечных элементов (МКЭ) представляет семейство проекционных методов с кусочно-полиномиальными финитными пробными функциями, носителями которых являются окрестности узлов нерегулярной сетки ячеек (конечных элементов). Для определения коэффициентов разложения решения по базисным функциям в методе конечных элементов применяются вариационные формулировки начально-краевых задач. В нелинейных задачах применяется вариационная формулировка Галеркина

$$\int_V (\partial_t Y + G(Y)) \Psi dV - \sum_{i=1}^3 \left( \int_V F_i \partial_{x_i} \Psi dV + \int_S F_i(Y) n_i \Psi dS \right) = 0$$

$$t = 0, x \in V : Y = Y_0(x)$$

$$t \geq 0, x \in S_Y : Y = Y_g(x, t)$$

$$t \geq 0, x \in S_F : F_i(Y) n_i = F_n(x, t)$$

где  $\Psi$  - произвольная достаточно гладкая функция,  $S_F = S \setminus S_Y$ ,  $S = \partial V$ . Здесь выписаны вариационное уравнение Галеркина, начальные условия, граничные главные и граничные естественные условия.

Решение ищется в виде разложения по кусочно-полиномиальным финитным пробным функциям аппроксимационного базиса

$$Y = \sum_{i=1}^N a_i(t) \varphi_i(x)$$

связанных с узлами и ячейками конечно-элементной сетки. Способы построения таких базисных функций рассматриваются в специальной литературе по методу конечных элементов. Наиболее употребительные кусочно-линейные и кусочно-квадратичные базисные функции рассмотрены в первой части настоящего курса.

Заметим, что нередко для кусочно-линейных пробных функций дискретные уравнения метода конечных элементов совпадают с дискретными уравнениями метода конечных объемов. При этом алгоритмы формирования уравнений отличаются только последовательностью операций.

### 12.8.8. Методы граничных элементов

Метод граничных элементов или метод граничных интегральных уравнений состоит в сведении краевой задачи для дифференциальных уравнений к интегральным уравнениям на границе области решения с последующим применением конечно-элементной (кусочно-полиномиальной) аппроксимации и решением системы алгебраических уравнений дискретизированной задачи. Сведение исходной задачи к граничной позволяет понизить пространственную размерность области решения на единицу, что упрощает алгоритм решения (сетка нужна только на границе!) и делает его более эффективным. Это качество метода граничных элементов рассматривается как основное его преимущество перед методами конечных разностей и конечных элементов.

При решении нелинейных задач применяются варианты метода итераций, основанные на выделении линейного оператора, допускающего сведение краевой задачи к граничному интегральному уравнению. Нелинейные члены при этом вычисляются по решению на предыдущей итерации и трактуются как распределенные по области источники. К сожалению, в нелинейных задачах преимущество, связанное с понижением пространственной размерности задачи, теряется из-за плохой сходимости итераций по нелинейности и из-за необходимости введения объемных сеток для учета распределенных по области решения источников.

### 12.8.9. Бессеточные методы

Классический метод Галеркина, использующий глобальные базисные функции, испытывает трудности, связанные с удовлетворением граничным условиям в случае областей решения сложной геометрии.

В методе конечных элементов упомянутые трудности, связанные со сложной геометрией, преодолеваются путем построения локальных полиномиальных базисных функций, удовлетворяющих

главных граничным условиям с использованием сетки конечных элементов. Однако, разработаны и бессеточные методы построения базисных функций и удовлетворения граничных условий. Перечислим ниже основные такие методы.

**В методе R-функций** Рвачева разработан алгоритм построения функций области (R-функций), принимающих положительные значения внутри области решения и отрицательные значения вне ее, а также предложены способы применения R-функций для адаптации произвольных систем глобальных базисных функций к граничным условиям при сложной геометрии.

**В бессеточных методах Галеркина** применяются финитные базисные функции, связанные со свободными узлами (частицами). Такие базисные функции строятся без объединения узлов в ячейки (то есть, без построения сетки), что позволяет использовать подвижные узлы для описания сложных движений сплошной среды и при этом исключить трудности, связанные с искажениями ячеек подвижных сеток.

**В бессеточных спектральных методах Галеркина** в качестве пробных функций используется набор собственных функций приближенного оператора задачи. Такой выбор базиса обеспечивает ускоренную сходимость приближенных решений с ростом числа базисных функций.

## Глава 13. Теоремы о сходимости решений

Здесь приводятся основные теоремы о сходимости решений при использовании приближенных методов решения. Хотя в реальных прикладных задачах проверка выполнения условий приводимых теорем, как правило, невозможна, все-таки на модельных задачах часто можно такой априорный теоретический анализ метода выполнить. Такой анализ позволяет понять, почему работает или не работает тот или иной приближенный метод, а также использовать это понимание для повышения эффективности и конструирования приближенных методов. Для лучшего понимания данного материала рекомендуется перечитать главу 1 из части 1 настоящего курса.

### 13.1. Аппроксимация

Пусть дискретизированная задача (разностная схема) представлена системой алгебраических уравнений

$$L_h u_h = f_h$$

где  $L_h$  - матрица системы алгебраических уравнений,  $u_h$  - сеточные значения искомой функции,  $f_h$  - вектор правых частей. При более

общем рассмотрении под  $u_h$  следовало бы понимать каркас приближенного решения, то есть набор дискретных параметров, которые не обязательно являются сеточными значениями искомой функции, а далее при сравнении приближенного и точного решений надо было бы перейти от каркаса приближенного решения к самому приближенному решению с помощью оператора восполнения. Такое более строгое изложение теории приближенных методов было сделано в главе 1 первой части данного курса. Здесь изложение упрощено для краткости в расчете на то, что читатель, желающий строгости, легко сопоставит это изложение с материалом главы 1 и внесет необходимые поправки в изложение самостоятельно.

Говорят, что разностная схема аппроксимирует дифференциальное уравнение

$$Lu = f$$

с порядком аппроксимации  $n > 0$ , если на решении исходной задачи  $u$  выполнено условие

$$\|L_h P_h u - P_h f\| = O(h^n)$$

где  $P_h$  - сеточный оператор проектирования.

### 13.2. Устойчивость

Под устойчивостью разностной схемы понимается ограниченность обратного оператора дискретизированной задачи  $\|L_h^{-1}\| \leq O(h^{-k})$ .

### 13.3. Сходимость

**Теорема Лакса:** Решение разностного уравнения сходится к сеточной проекции решения дифференциального уравнения

$$\|P_h u - u_h\| = O(h^m)$$

если разностное уравнение аппроксимирует дифференциальное

$$\|L_h P_h u - P_h f\| = O(h^n)$$

разностный оператор имеет ограниченный обратный

$$\|L_h^{-1}\| \leq O(h^{-k})$$

и

$$m = n - k > 0$$

**Доказательство.** Учитывая, что  $P_h f = f_h = L_h u_h$  получен

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \|P_h u - u_h\| = \|L_h^{-1} L_h (P_h u - u_h)\| \leq \\ &\leq \|L_h^{-1}\| \|L_h P_h u - P_h f\| = O(h^{m-k}) \end{aligned}$$

При  $m - k > 0$  и  $h \rightarrow 0$  ошибка  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

Для метода конечных элементов теорема о сходимости формулируется так (см. Стренг и Фикс, 1978): Приближенное решение метода конечных элементов сходится к решению исходной вариационной задачи, если система пробных функций полна в

пространстве решений, аппроксимация вариационного уравнения согласованна (т.е. интегрирование обеспечивает точное вычисление объемов, площадей и производных от базисных функций, входящих в вариационное уравнение) и матрица разрешающей системы алгебраических уравнений имеет ограниченную обратную.

### 13.4. Сходимость разрывных решений

Для слабых решений нелинейных задач, которые моделируют разрывы в решении узкими зонами больших градиентов, имеет место **теорема Лакса-Вендроффа**: *консервативность является достаточным условием сходимости устойчивой аппроксимирующей конечно-разностной схемы к слабому решению нелинейной системы уравнений.*

**Пояснение:** Разностная схема, аппроксимирующая закон сохранения, обладает свойством консервативности, если она поддерживает этот закон на дискретном уровне для каждого малого дискретного объема сетки.

Можно показать (см. [Azarenok, 2000]), что для консервативных устойчивых аппроксимирующих разностных схем приближенные решения вблизи скачков удовлетворяют соотношениям на скачках. Неконсервативные схемы таким свойством не обладают, поэтому приводят к искаженным картинкам движения и расположения разрывов, а также к неверным значениям величины скачков решения. На гладких решениях устойчивые аппроксимирующие неконсервативные схемы показывают хорошие результаты. Таким образом, теорема Лакса-Вендроффа обосновывает корректность применения консервативных схем сквозного счета разрывных решений.

Подробнее о теореме Лакса-Вендроффа можно прочитать в оригинальной статье [Lax, Wendroff, 1960].

## Глава 14. Исследование устойчивости

Ниже на примере ВВЦП-схемы (Вперед по Времени, Центральные разности по Пространству) для основного модельного уравнения

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^n - A_{i-1}^n}{2h} = v \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

рассмотрим основные приемы исследования устойчивости разностных схем.

### 14.1. Метод дискретных возмущений

При исследовании устойчивости схем для линейных уравнений в частных производных в произвольном узле сетки в некоторый момент времени вводится малое возмущение решения и прослеживается его влияние на решение во времени. Если возмущение растет, то схема неустойчива, если оно остается ограниченным, то устойчива. Если возмущение дополнительно сохраняет свой знак от шага к шагу, то схема называется монотонной.

Пример. Рассмотрим метод дискретных возмущений на примере явной схемы для параболического уравнения

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} = v \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

Если ввести начальное возмущение  $\delta A_i^n$  в точке  $x = x_i$  при  $t = t_n$ , то разностное соотношение для возмущения  $\delta A_i^{n+1}$  в той же пространственной точке на новом временном слое при  $t = t_{n+1}$  определяется из уравнения

$$\frac{(A_i^{n+1} + \delta A_i^{n+1}) - (A_i^n + \delta A_i^n)}{\tau_n} = v \frac{A_{i+1}^n - 2(A_i^n + \delta A_i^n) + A_{i-1}^n}{h^2}$$

Вычитая первое уравнение из второго, получаем

$$\frac{\delta A_i^{n+1} - \delta A_i^n}{\tau_n} = v \frac{-2\delta A_i^n}{h^2}$$

или

$$\frac{\delta A_i^{n+1}}{\delta A_i^n} = 1 - \frac{2\nu\tau_n}{h^2}$$

Для устойчивости необходимо

$$\left| \frac{\delta A_i^{n+1}}{\delta A_i^n} \right| \leq 1$$

Для монотонности необходимо

$$\frac{\delta A_i^{n+1}}{\delta A_i^n} \geq 0$$

Подставляя в эти условия соотношение для возмущений получаем окончательные условия устойчивости и монотонности

$$0 \leq 1 - \frac{2\nu\tau_n}{h^2} \leq 1 \quad \text{или} \quad 0 \leq \tau_n \leq \frac{h^2}{2\nu}$$

## 14.2. Метод гармонических возмущений

Метод гармонических возмущений Фурье-Неймана применяется при исследовании разностных схем для линейных уравнений в частных производных. Для этого

- 1) произвольное возмущение подставляется в каждую точку сетки в некоторый момент времени
  - 2) возмущение раскладывается в ряд Фурье
  - 3) отдельно прослеживается эволюция каждой гармоники Фурье.
- Если какая-либо гармоника растет, то схема неустойчива; если ни одна гармоника не растет, то схема устойчива.

Пример. Рассмотрим опять явную схему для параболического уравнения

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} = \nu \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

где  $i = 1, 2, \dots, N + 1$ . Вводим возмущения

$$\frac{(A + \delta A)_i^{n+1} - (A + \delta A)_i^n}{\tau_n} = \nu \frac{(A + \delta A)_{i+1}^n - 2(A + \delta A)_i^n + (A + \delta A)_{i-1}^n}{h^2}$$

вычитание уравнений дает уравнение для возмущений

$$\frac{\delta A_i^{n+1} - \delta A_i^n}{\tau_n} = \nu \frac{\delta A_{i+1}^n - 2\delta A_i^n + \delta A_{i-1}^n}{h^2}$$

разложение возмущения в ряд Фурье имеет вид

$$\delta A_i^n = \sum_{j=-m}^{j=m} \delta a_j^n \exp(ik_j x_i), \quad m = N/2, \quad k_j = \frac{\pi j}{mh}, \quad I = \sqrt{-1}$$

где длина волны  $\lambda_j$  и волновое число  $k_j$  связаны соотношением

$$\lambda_j = \frac{2\pi}{k_j}$$

Подставляя это разложение в уравнение для возмущений и учитывая, что

- 1)  $e^{ik_j x_{i\pm 1}} = e^{ik_j(x \pm h)} = e^{ik_j x} e^{\pm ik_j h}$ ,
  - 2) знак суммы в формуле Тейлора можно опустить, так как уравнение линейно и отдельные гармоники между собой не взаимодействуют,
  - 3)  $e^{I\varphi} = \cos \varphi + I \sin \varphi$ , где  $I = \sqrt{-1}$ ,
- получаем

$$\delta a_j^{n+1} = \delta a_j^n \left( 1 - 4 \frac{\alpha \tau_n}{h^2} \sin^2 \frac{k_j h}{2} \right)$$

Условие устойчивости имеет вид

$$\left| \frac{a_j^{n+1}}{a_j^n} \right| \leq 1 \Rightarrow -1 \leq 1 - 4 \frac{\nu \tau_n}{h^2} \sin^2 \frac{k_j h}{2} \leq 1$$

для всех  $j$ .

или

$$0 \leq 1 - \frac{2\nu\tau_n}{h^2} \leq 1 \quad \text{или} \quad 0 \leq \tau_n \leq \frac{h^2}{2\nu}$$

### 14.3. Спектральный метод

Для исследования разностных схем для линейных уравнений в частных производных также применяется матричный или, в другой терминологии, спектральный метод. В отличие от метода гармонических возмущений, этот метод позволяет учитывать влияние граничных условий, которые также предполагаются линейными.

В соответствии с матричным методом поступают так:

1) Разностная схема записывается в матричной форме

$$A^{(n+1)} = L \cdot A^{(n)} + b$$

где  $L$  - матрица перехода,  $A^{(n)}$  - вектор сеточных значений искомой функции на  $n$ -м временном слое,  $b$  - вектор правых частей. По рекурсии получаем другую запись разностной схемы:

$$A^{(n+1)} = L^{n+1} \cdot A^{(0)} + (L^n + L^{n-1} + \dots + I) \cdot b$$

где  $L^n$  обозначает  $n$ -ю степень матрицы  $L$ ,  $I$  - единичная матрица.

2) В начальный момент времени в каждую точку сетки вводится возмущение, связь возмущенных решений на  $n$ -м и  $(n+1)$ -м временных слоях устанавливается в соответствии с рассматриваемой разностной схемой

$$(A + \delta A)^{(n+1)} = L^{n+1} \cdot (A + \delta A)^{(0)} + (L^n + L^{n-1} + \dots + I) \cdot b$$

после вычитания невозмущенного уравнения для возмущения получается уравнение

$$\delta A^{(n+1)} = L^{n+1} \cdot \delta A^{(0)}$$

Если матрица  $L$  сжимающая ( $\|L\| < 1$ ), то схема устойчива ( $\|\delta A^{n+1}\| \leq \|\delta A^n\|$ ). Условие устойчивости может быть ослаблено

$$\|L\| < 1 + O(\tau)$$

где  $\tau$  - шаг по времени.

### 14.4. Метод дифференциальных приближений

В соответствии с методом дифференциальных приближений (Хирт, 1968; Шокин, 1974) значения сеточной функции в разностной схеме заменяются на значения соответствующей непрерывной функции в узлах сетки, а затем с помощью разложений в ряд Тейлора в окрестности рассматриваемого узла сетки восстанавливается дифференциальное уравнение. Восстановленное дифференциальное уравнение не совпадает с исходным уравнением, для которого была записана разностная схема, и содержит дополнительные члены ошибок аппроксимации. По свойствам восстановленного уравнения, называемого дифференциальным приближением разностной схемы, судят о свойствах разностной схемы. В отличие от предыдущих методов, метод дифференциальных приближений применим к нелинейным уравнениям.

Рассмотрим центрально-разностную схему для модельного уравнения конвекции-диффузии

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^n - A_{i-1}^n}{2h} = v \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

В соответствии со сказанным делается следующая замена

$$A_{i\pm 1}^{n\pm 1} \Rightarrow A(x_{i\pm 1}, t^{n\pm 1})$$

где

$$\begin{aligned} A(x_{i\pm 1}, t^{n\pm 1}) &= A|_{x=x_n}^{t=t^n} \pm \frac{\partial A}{\partial t} \Big|_{x=x_i}^{t=t^n} \Delta t_n \pm \frac{\partial A}{\partial x} \Big|_{x=x_i}^{t=t^n} h + \\ &+ \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} \Big|_{x=x_i}^{t=t^n} \frac{\Delta t_n^2}{2} \pm \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \Big|_{x=x_i}^{t=t^n} \frac{h^2}{2} + O(h^3, \Delta t_n^3) \end{aligned}$$

В результате подстановки данного разложения в разностное уравнение получается гиперболическая форма (Г-форма) восстановленного дифференциального уравнения задачи. В нашем примере Г-форма уравнения имеет вид

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} \frac{\Delta t}{2} + U \frac{\partial A}{\partial x} = v \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + O(h^2, \Delta t^2)$$

Затем с помощью исходного дифференциального уравнения исключаются все временные производные более высокого порядка, нежели присутствующие в исходном уравнении. В нашем случае

вторая производная по времени выражается через пространственные производные так

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = -U \frac{\partial}{\partial x} \left( -U \frac{\partial A}{\partial x} + v \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \right) + v \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left( -U \frac{\partial A}{\partial x} + v \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \right)$$

или

$$\frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = U^2 \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - 2Uv \frac{\partial^3 A}{\partial x^3} + v^2 \frac{\partial^4 A}{\partial x^4}$$

В результате замены получается параболическая форма (П-форма) восстановленного дифференциального уравнения задачи

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial t} + U \frac{\partial u}{\partial x} &= \left( v - \frac{U^2 \Delta t}{2} \right) \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \\ + Uv \frac{\partial^3 A}{\partial x^3} \Delta t - v^2 \frac{\partial^4 A}{\partial x^4} \frac{\Delta t}{2} &+ O(h^2, \Delta t^2) \end{aligned}$$

Восстановленные уравнения задачи в Г- и П- форме называются дифференциальными приближениями разностной схемы. Разностная схема наследует свойства ее дифференциального приближения, которые и подлежат анализу.

В общем случае П-форма дифференциального приближения имеет вид

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \sum_{p=0}^{\infty} \mu_{2p+1} \frac{\partial^{2p+1} A}{\partial x^{2p+1}} + \sum_{p=1}^{\infty} \mu_{2p} \frac{\partial^{2p} A}{\partial x^{2p}}$$

Решение восстановленного (возмущенного заменой производных разностями) уравнения ищется в виде некоторой Фурье компоненты

$$A(x, t) = \exp(\lambda t) \exp(ikx)$$

Подставляя это решение в П-форму и приравнивая мнимые и вещественные части, получим

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(\lambda) &= f(\mu_{2p}) = \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p k^{2p} \mu_{2p} \\ \operatorname{Im}(\lambda) &= f(\mu_{2p+1}) \end{aligned}$$

Члены с четными пространственными производными представляют диффузию ( $2p=2$ ) и диссипацию. Члены с нечетными производными отвечают за конвекцию ( $2p+1=1$ ) и дисперсию ( $2p+1=3$ ). Так как рост решения зависит только от  $\text{Re}(\lambda)$ , эта величина должна быть неположительной. Значит П-форма устойчива, если

$$\sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p k^{2p} \mu_{2p} \leq 0 \quad \text{для любого } k.$$

Упрощенный критерий устойчивости требует выполнения данного неравенства только для первого ненулевого члена низшего четного порядка.

Поясним, что *диффузия* сглаживает искомые функции. В реальных средах диффузия обусловлена хаотическим движением атомов и молекул в жидкостях и газах и межатомными взаимодействиями в (структурированных) твердых деформируемых средах. *Диссипацией* называется необратимый процесс рассеяния энергии. *Конвекцией* (или *адвекцией*) называется перенос сплошной среды относительно используемой системы координат упорядоченным потоком. *Дисперсией* называется зависимость скорости распространения гармонической (то есть, синусоидальной) волны от ее частоты.

В нашем примере для устойчивости центрально-разностной схемы необходимо, чтобы эффективный коэффициент диффузии  $\nu - U^2 \Delta t / 2$  (см. полученную выше параболическую форму дифференциального приближения) был неотрицателен, то есть

$$\Delta t_n \leq \frac{2\nu}{U^2}$$

Критерии устойчивости схемы, определяемые по методу дифференциальных приближений представляют необходимые, но недостаточные условия. Для устойчивости должны выполняться условия, полученные ранее методами возмущений.

## 14.5. “Замороживание” коэффициентов

В случае нелинейных уравнений и уравнений с переменными коэффициентами изложенные выше методы исследования устойчивости применяются не к исходным, а к соответствующим приближенным разностным уравнениям с постоянными коэффициентами. Такие приближенные уравнения имеют «замороженные» постоянные значения коэффициентов, которые определяются по их значениям в окрестности данной точки для локальных методов исследования или по некоторым наиболее неудачным для численного реше-

ния значениям этих коэффициентов в области решения. Обычно эти значения равны максимальным значениям коэффициентов и поэтому называются «мажорирующими».

## 14.6. Использование расщепления

В практических задачах исследование устойчивости для простоты часто проводится отдельно для различных подпроцессов задачи. Например, можно раздельно анализировать устойчивость аппроксимации уравнений движения, теплопроводности, переноса примеси и тому подобных.

## 14.7. Влияние свободных членов

В задачах с большими по норме свободными (недифференциальными) членами шаг по времени в явных схемах приходится дополнительно ограничивать. Такие свободные члены появляются в законах сохранения в виде источников импульса, энергии, примеси и так далее, а также, например, играют роль вязких членов в определяющих соотношениях теорий упруговязкопластичности и ползучести. Распространенным приемом, позволяющим избавиться от таких обременительных ограничений, является неявная аппроксимация свободных членов. Поскольку свободные члены не содержат пространственного дифференцирования, то такие неявные аппроксимации не нарушают порядок вычислений по явным схемам, так как каждое дискретизированное уравнение может быть отдельно от остальных явно разрешено относительно значения искомой функции на новом временном слое. Если свободные члены нелинейны, то они при этом квазилинеаризуются относительно приращений искомого решения на шаге по времени.

## 14.8. Коэффициент запаса

Поскольку в практических задачах исследование устойчивости всегда проводится приближенно, то приближенность априорного анализа компенсируется дополнительным уменьшением шага по времени путем умножения его приближенного теоретического значения на положительный и меньший единицы коэффициент запаса, значение которого подбирается эмпирически и лежит обычно в пределах 0.1-0.9. Этот коэффициент является характеристикой приближенности анализа устойчивости: чем точнее априорный анализ устойчивости, предсказывающий величины допустимого шага по времени, тем ближе коэффициент запаса к единице. Если схема плохая, то введение коэффициента запаса бесполезно.

## 14.9. Условие точности

Независимо от типа задачи и помимо условий устойчивости шаг по времени ограничивается еще и условиями точности. Условия точности заключаются в требовании малости изменения нормы решения на шаге по времени по сравнению с нормой самого решения. Часто условие точности можно увязать с априорными теоретическими оценками скорости изменения термомеханических параметров состояния моделируемых процессов. Например, в задачах механики деформируемого твердого тела роль условия точности исполняет требование малости приращений деформации на шаге по времени. При наличии источников большой интенсивности шаг по времени из соображений точности может быть во много раз меньше шага, обеспечивающего устойчивость, даже при использовании “безусловно устойчивых” неявных аппроксимаций.

## 14.10. Оценка шага по пространству

Рассмотрим вопрос об определении шагов неравномерной и нерегулярной пространственной сетки для использования в условиях устойчивости. Эту шаг можно определить с помощью формул дифференцирования. Пусть, например, дискретизированная формула дифференцирования по координате  $x$  для узла  $k$  или для ячейки  $k$  имеет вид

$$\left[ \frac{\partial f}{\partial x} \right]_k = \sum_{j \in \omega_k} d_{xj} f_j$$

где суммирование производится по узлам  $j \in \omega_k$  шаблона для узла  $k$  или по узлам  $j \in \omega_k$  ячейки  $k$ , тогда роль пространственного шага сетки по координате  $x$  в условиях устойчивости может с успехом играть величина

$$h_{x(k)} = \left( \sum_{j \in \omega_k} \max(d_{xj}, 0) \right)^{-1}$$

Расположение ребер сетки в пространстве для данной оценки пространственного шага роли не играет. Оценка записана без вывода, интуитивно.

## Глава 15. Классические схемы

Данная глава посвящена описанию основных классических разностных схем, предложенных для задач гидродинамики. Более детальная информация о классических схемах приводится в монографии Роуча (1980) по вычислительной гидродинамике.

### 15.1. Схема ВВЦП

Явная двухслойная центрально-разностная схема для уравнения конвекции-диффузии (схема ВВЦП - вперед по времени, центральная по пространству) имеет вид

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^n - A_{i-1}^n}{2h} = \alpha \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

Роль *схемной* или *аппроксимационной вязкости* играет в этой схеме член с отрицательным коэффициентом аппроксимационной вязкости  $v_s^n = -U^2 \tau_n / 2$ , который появляется в первом дифференциальном приближении:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + U \frac{\partial A}{\partial x} = (\alpha + v_s^n) \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + O(\tau_n^2, h^2)$$

Первое дифференциальное приближение показывает, что поведение численного решения описывается параболическим уравнением с коэффициентом эффективной вязкости  $v_e = \alpha + v_s^n$ . Для устойчивости шаг по времени должен обеспечивать положительность эффективной вязкости

$$\tau_n \leq \frac{2\alpha}{U^2}$$

Отсюда видно, что в отсутствие физической вязкости схема ВВЦП неустойчива для любого шага по времени. Отметим, что даже для устойчивого расчета эффективная вязкость всегда меньше физической, что снижает точность схемы до первого порядка  $O(\tau, h)$ .

При большой физической вязкости явное представление вязких членов накладывает дополнительное ограничение на шаг по времени

$$\tau_n \leq \frac{h^2}{2\alpha}$$

так что в присутствии конвекции и диффузии окончательное условие устойчивости принимает вид

$$\tau_n \leq \min\left(\frac{2\alpha}{U^2}, \frac{h^2}{2\alpha}\right)$$

## 15.2. ВВЦП-схема с искусственной вязкостью

Для уравнивания эффективной и физической вязкостей можно явно ввести в схему ВВЦП член с *искусственной вязкостью*  $v_a^n$ :

$$\frac{\partial A}{\partial t} + U \frac{\partial A}{\partial x} = (\alpha + v_s^n + v_a^n) \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + O(\tau_n^2, h^2)$$

Если потребовать, чтобы *эффективная (суммарная) вязкость*  $\alpha + v_s^n + v_a^n$  равнялась бы физической  $\alpha$ , то для коэффициента искусственной вязкости получаем  $v_a^n = -v_s^n > 0$ . Схема при этом приобретает второй порядок точности.

К сожалению, в реальных задачах из-за неравномерности сетки в дифференциальных приближениях появляется много дополнительных членов первого порядка точности, которые трудно представить аналитически (особенно в многомерном случае, да еще и на нерегулярных сетках) и невозможно исключить добавочными членами. Поэтому в общем случае уравнивать физическую и эффективную вязкости не удается.

## 15.3. Схема Лакса

Схемой Лакса или схемой Лакса-Фридрихса называется следующая разностная схема для уравнения конвекции-диффузии:

$$\frac{A_i^{n+1} - (A_{i-1}^n + A_{i+1}^n) / 2}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^n - A_{i-1}^n}{2h} = \alpha \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

Она отличается от схемы ВВЦП аппроксимацией временной производной. В этой схеме временная производная вычисляется с исполь-

зованием осредненного значения  $(A_{i-1}^n + A_{i+1}^n)/2$  вместо значения  $A_i^n$ . Благодаря такой замене в П-форме первого дифференциального приближения схемы Лакса появляется дополнительный вязкий член с положительным коэффициентом вязкости  $h^2/(2\tau_n)$

$$\frac{\partial A}{\partial t} + U \frac{\partial A}{\partial x} = (\alpha + v_a^n) \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + O(\tau_n^2, h^2), \quad v_a^n = \frac{h^2}{2\tau_n} - \frac{U^2 \tau_n}{2}$$

Условие устойчивости схемы Лакса имеет вид

$$\tau_n \leq \min\left(\frac{h}{|U|}, \frac{h^2}{2\alpha}\right)$$

где учтено требование равенства физической и эффективной вязкостей и диффузионное ограничение шага по времени для явных схем расчета диффузии.

Схема Лакса настолько проста и робастна, что при написании новой программы для решения задач о течениях сплошной среды по явной схеме часто сначала реализуют схему Лакса в качестве исходного варианта, чтобы заставить программу хоть как-то разумно работать. Такая программа дает отказ только при ошибках в записи разностных аппроксимаций исходных уравнений и граничных условий. Далее более точные схемы реализуются уже как модификации этой исходной программы.

Конечно, ожидать решений высокой точности от схемы Лакса не приходится: К существенным недостаткам схемы Лакса следует отнести то, что она очень быстро и сильно размывает не только распространяющиеся возмущения и ударные волны, но также контактные разрывы и межфазные границы. Применение сеток с большим числом узлов не дает заметного улучшения качества решений, поскольку скорость сходимости схемы Лакса очень медленная: ошибка убывает пропорционально первой степени шагов по времени и пространству.

## 15.4. ВВЦП-схема со сглаживанием

Еще один способ регуляризации схемы ВВЦП независимо от учета физической вязкости предоставляет *сглаживание решений*. При этом расчет шага по времени состоит из двух этапов: на первом этапе вычисляется по схеме ВВЦП предварительное решение на новом временном слое, а затем на втором этапе полученное предварительное решение подвергается сглаживанию. Порядок вычислений

может быть изменен: можно сначала сгладить решение на старом временном слое, а затем с его помощью по схеме ВВЦП найти решение на новом временном слое. Можно усмотреть, что схемы со сглаживанием реализуют расщепление схемы Лакса на оператор сглаживания и оператор схемы ВВЦП.

Обозначим значения сеточной функции на новом временном слое, посчитанные по схеме ВВЦП, как предварительные  $\tilde{A}_i^{n+1}$ . Следующий этап сглаживания записывается так

$$A_i^{n+1} = (1 - \omega)\tilde{A}_i^{n+1} + \omega(\tilde{A}_{i-1}^{n+1} + \tilde{A}_{i+1}^{n+1})/2.0$$

где  $0 \leq \omega \leq 1$  - параметр сглаживания. Границы изменения значений параметра сглаживания соответствуют условию устойчивости сглаживания. Процедура сглаживания может быть переписана так:

$$\frac{A_i^{n+1} - \tilde{A}_i^{n+1}}{\tau_n} = \frac{\omega h^2}{2\tau_n} \frac{\tilde{A}_{i+1}^{n+1} - 2\tilde{A}_i^{n+1} + \tilde{A}_{i-1}^{n+1}}{h^2}$$

откуда видно, что сглаживание эквивалентно явному интегрированию параболического уравнения с коэффициентом вязкости  $\omega h^2 / 2\tau_n$

Если применять сглаживание вместо явной искусственной вязкости и потребовать, чтобы эффективная вязкость равнялась бы физической, то для параметра сглаживания получим выражение

$$\omega = \frac{U^2 \tau_n^2}{h^2}$$

Ясно, что такая формула обеспечивает равенство физической и эффективной вязкости только для линейного модельного уравнения конвекции-диффузии при условии использования равномерной сетки.

## 15.5. Схема с разностями против потока

Причина появления членов с отрицательным коэффициентом вязкости в первых дифференциальных приближениях схем ВВЦП заключается в явной аппроксимации конвективных членов центральными разностями. Такие схемы для уравнения конвективного переноса не только неустойчивы в отсутствие регуляризаторов, но еще и нарушают свойство транспортности, то есть передают возмущения не только по направлению течения, как положено решениям уравнения переноса, но также против течения. Регуляризаторы

рами называют дополнительные члены в разностных уравнениях, обеспечивающие устойчивость разностной схемы,

Для обеспечения свойств транспортности и устойчивости расчета конвекции по явной схеме можно аппроксимировать производные в конвективных членах односторонними разностями против потока:

$$\begin{aligned} & \frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + \frac{(U + |U|)(A_i^n - A_{i-1}^n) + (U - |U|)(A_{i+1}^n - A_i^n)}{2h} = \\ & = \alpha \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2} \end{aligned}$$

где выбор левой или правой односторонней производной осуществляется в зависимости от знака конвективной скорости  $U$  (скорости потока).

Схему с разностями против потока можно переписать в следующем виде

$$\frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + U \frac{(A_{i+1}^n - A_{i-1}^n)}{2h} = \left( \alpha + \frac{|U|h}{2} \right) \frac{A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n}{h^2}$$

откуда видно, что схема с разностями против потока первого порядка на равномерной сетке совпадает с центрально-разностной схемой с коэффициентом искусственной вязкости  $|U|h/2$ . Интерпретация схем с разностями против потока как центрально-разностных схем со специальным выбором искусственной вязкости облегчает их обобщение и реализацию при использовании неравномерных и нерегулярных сеток, на которых наиболее просто реализуются симметричные по направлениям центрально-разностные аппроксимации.

Первые дифференциальные приближения схем с разностями против потока первого порядка точности имеют дополнительный вязкий член (регуляризатор) с положительным коэффициентом вязкости  $|U|h/2$ , который для достаточно малых шагов по времени обеспечивает неотрицательность эффективной вязкости и устойчивость аппроксимации конвективного члена:

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial t} + U \frac{\partial A}{\partial x} &= (\alpha + v_a) \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + O(\tau_n^2, h^2), \\ v_a &= \frac{|U|h}{2} - \frac{U^2 \tau_n}{2} \end{aligned}$$

Условие устойчивости, получаемое из требования неотрицательности аппроксимационной вязкости, и учитывающее ограничение на шаг по времени из-за явной аппроксимации диффузионного члена, имеет вид

$$\tau_n \leq \min\left(\frac{h}{|U|}, \frac{h^2}{2\alpha}\right)$$

Отметим, что для равномерной сетки и постоянной скорости потока при выборе шага по времени на границе области устойчивости и схема Лакса, и схема с разностями против потока имеют второй порядок точности.

В реальных задачах из-за неравномерности сеток и переменности скорости конвекции по пространству шаг по времени выбирается равным максимальному значению, удовлетворяющему условиям устойчивости для всех узлов сетки. В большинстве узлов неравномерной сетки при этом коэффициент аппроксимационной вязкости

$$v_a = \frac{|U|h}{2} - \frac{U^2\tau_n}{2}$$

не равен нулю. Поэтому такие схемы имеют только первый порядок точности и обладают избыточной эффективной вязкостью, что приводит к нефизичному излишнему сглаживанию решений.

## 15.6. Схемы расчета диффузии

Для больших значений коэффициента физической вязкости  $\alpha$  явные аппроксимации диффузионных членов приводят к тому, что диффузионное ограничение на шаг по времени

$$\tau_n \leq \frac{h^2}{2\alpha} \ll \frac{h}{|U|}$$

становится слишком обременительным. В многомерном случае это диффузионное ограничение становится еще более строгим, а именно, числовой коэффициент в знаменателе принимает значения  $2^N$ , где  $N$  - число пространственных переменных.

Один из возможных способов избавиться от диффузионного ограничения на шаг по времени заключается в применении неявной аппроксимации диффузионных членов, а именно

$$\begin{aligned} & \frac{A_i^{n+1} - A_i^n}{\tau_n} + U \frac{(A_{i+1}^n - A_{i-1}^n)}{2h} = \\ & = \left( \alpha + \frac{|U|h}{2} \right) \frac{(A_{i+1}^n - 2A_i^n + A_{i-1}^n)(1-\beta) + (A_{i+1}^{n+1} - 2A_i^{n+1} + A_{i-1}^{n+1})\beta}{h^2} \end{aligned}$$

При  $\beta \geq 0.5$  такая явно- неявная схема устойчива при обычном конвективном ограничении шага по времени:

$$\tau_n \leq \frac{h}{|U|}$$

Расчет диффузии при этом проводится по неявной схеме Эйлера первого порядка точности при  $\beta = 1$  и по схеме Кранка-Николсона второго порядка точности при  $\beta = 0.5$ .

## 15.7. Схема чехарда

Схема чехарда имеет вид

$$\frac{A_i^{(n+1)} - A_i^{(n-1)}}{2\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^{(n)} - A_{i-1}^{(n)}}{2h} = 0$$

Анализируя дифференциальные приближения, можно показать, что трехслойная схема чехарда имеет второй порядок аппроксимации. Для начала расчета первый шаг по времени надо рассчитать с помощью какой-либо разгонной двухслойной схемы (например по схеме Эйлера). К недостаткам схемы чехарда можно отнести то обстоятельство, что она порождает два семейства сеточных решений на четных и на нечетных шагах по времени, которые могут быть рассогласованы. Из-за этого возникают незатухающие колебания решения во времени. Анализ этого счетного эффекта имеется в книге Роуча (1980) по вычислительной гидродинамике.

Вязкость в схеме чехарда можно учесть, но устойчивая явная аппроксимация вязкого члена будет иметь место только, если его отнести к слою (n-1)

$$\frac{A_i^{(n+1)} - A_i^{(n-1)}}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^{(n)} - A_{i-1}^{(n)}}{2h} = \alpha \frac{A_{i+1}^{(n-1)} - 2A_i^{(n-1)} + A_{i-1}^{(n-1)}}{h^2}$$

при этом, конечно, надо учитывать конвективное и диффузионное ограничения на шаг по времени

$$\tau_n \leq \min\left(\frac{h}{|U|}, \frac{h^2}{4\alpha}\right)$$

## 15.8. Схема Дюфорты-Франкела

Схема Дюфорты-Франкела позволяет проводить устойчивый расчет диффузии по явной схеме и в то же время ослабить обременительное диффузионное ограничение шага по времени  $\tau_n \leq h^2 / (2\alpha)$ . Схема Дюфорты-Франкела (схема "ромб") имеет вид:

$$\frac{A_i^{(n+1)} - A_i^{(n)}}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^{(n)} - A_{i-1}^{(n)}}{2h} = \alpha \frac{A_{i+1}^{(n)} - (A_i^{(n)} + A_i^{(n+1)}) + A_{i-1}^{(n)}}{h^2}$$

где по сравнению с базисной ВВЦП схемой изменена аппроксимация диффузионного члена, а именно, как говорят, использована «чехарда со средней точкой». Аппроксимация диффузионного члена содержит черты неявности, но поскольку значение на новом временном слое записано только для центрального узла  $i$ , то схема не нарушает диагональности матрицы СЛАУ относительно новых значений на  $(n+1)$ -м слое и, таким образом, остается явной. Условие устойчивости ограничивает шаг по времени только скоростью конвекции

$$\tau_n \leq \frac{h}{|U|}$$

Первое дифференциальное приближение показывает, что схема Дюфорты-Франкела аппроксимирует уравнение гиперболического типа

$$\alpha \left(\frac{\tau_n}{h}\right)^2 \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{\partial A}{\partial t} + U \frac{\partial A}{\partial x} = \alpha \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + O(\tau_n^2, h^2)$$

Если приближенное решение определяется при стремлении шагов по пространству и времени к нулю, то при сохранении их отношения постоянным ( $\tau_n / h = \text{const}$ ) член со второй производной по времени не мал и может заметно исказить решение, придавая ему свойства гиперболичности. Поэтому для сходимости решений надо проводить расчет, устремляя шаг по времени к нулю с большей скоростью, нежели шаг по пространству:  $\tau_n / h \rightarrow 0$ . То есть, по-прежнему надо использовать диффузионное ограничение шага по вре-

мени  $\tau_n \leq h^2 / (2\alpha_*)$ , которое, однако, может быть не столь обременительным как диффузионное ограничение для явных схем  $\tau_n \leq h^2 / (2\alpha)$ , так как коэффициент  $\alpha_*$  может иметь произвольное значение, в частности,  $\alpha_* < \alpha$ .

Отметим, что схему Дюфорта Франкела можно легко реализовать как модификацию стандартной явной центрально-разностной схемы ВВЦП, добавив в нее член со второй производной по времени в соответствии с выписанным выше первым дифференциальным приближением:

$$\frac{A_i^{(n+1)} - A_i^{(n)}}{\tau_n} + \alpha \left( \frac{\tau_n}{h} \right)^2 \frac{A_i^{(n+1)} - 2A_i^{(n)} + A_i^{(n-1)}}{\tau_n^2} + U \frac{A_{i+1}^{(n)} - A_{i-1}^{(n)}}{2h} = \alpha \frac{A_{i+1}^{(n)} - 2A_i^{(n)} + A_{i-1}^{(n)}}{h^2}$$

## 15.9. Схема Лакса-Вендроффа

Лакс и Вендрофф предложили устойчивую явную схему второго порядка точности:

$$\frac{A_{i+1/2}^{(n+1/2)} - (A_i^{(n)} + A_{i+1}^{(n)})/2}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^{(n)} - A_i^{(n)}}{h} = 0$$

$$\frac{A_i^{(n+1)} - A_i^{(n)}}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1/2}^{(n+1/2)} - A_{i-1/2}^{(n+1/2)}}{h} = \alpha \frac{A_{i+1}^{(n)} - 2A_i^{(n)} + A_{i-1}^{(n)}}{h^2}$$

или, в другой записи:

$$\frac{A_i^{(n+1)} - A_i^{(n)}}{\tau_n} + U \frac{A_{i+1}^{(n)} - A_{i-1}^{(n)}}{2h} = \left( \frac{U^2 \tau_n}{2} + \alpha \right) \frac{A_{i+1}^{(n)} - 2A_i^{(n)} + A_{i-1}^{(n)}}{h^2}$$

Схема Лакса-Вендроффа имеет выписанные выше два представления: или в виде двухшаговой двухслойной схемы предиктор-корректор, или в виде одношаговой двухслойной схемы с явной искусственной вязкостью. В качестве предиктора используется схема Лакса для невязкой (конвективной) части уравнения, а на корректоре применяется схема чехарда для конвекции и явная схема для диффузии. Надо обратить внимание на то, что для устойчивости диффузия учитывается только на корректоре и вычисляется по значениям на исходном временном слое. Дополнительный учет диффу-

зии по явной схеме на предикторе приведет к неустойчивости (подробнее об этом см. Роч, 1980).

Для равномерных сеток схема Лакса-Вендроффа имеет второй порядок аппроксимации по времени и пространству на гладких решениях. При сквозном счете скачков (разрывных решений) она дает заброс и затухающие колебания решения за фронтом движущегося разрыва, то есть является немонотонной. Контактные разрывы эта схема размазывает только за счет физической вязкости, что является ее достоинством. Немонотонность схемы Лакса-Вендроффа для задач упругопластического деформирования приводит к дополнительным ошибкам в расчете истории напряженно-деформированного состояния из-за нефизических смен режимов нагружение-разгрузка за ударными волнами. Поэтому для исключения таких ошибок ее используют совместно с какими-либо процедурами дополнительной монотонизации решений, которые рассматриваются далее. Подчеркнем также необходимость обеспечения консервативности для сходимости результатов сквозного счета разрывных решений.

Отметим, что в окрестности скачков в невязких течениях решение недифференцируемо и, поэтому, погрешность аппроксимации любых схем сквозного счета в окрестности скачков имеет асимптотику  $O(1)$  и сходимость может иметь место только в смысле обобщенного решения в интегральных нормах.

## 15.10. Схема Мак-Кормака

Еще одна классическая явная схема второго порядка точности предложена Мак-Кормаком и имеет вид:

$$\frac{A_i^{(n+1/2)} - A_i^{(n)}}{\tau_n / 2} + U \frac{A_{i+1}^{(n)} - A_i^{(n)}}{h} = 0$$

$$\frac{A_i^{(n+1)} - A_i^{(n)}}{\tau_n} + U \frac{A_i^{(n+1/2)} - A_{i-1}^{(n+1/2)}}{h} = \alpha \frac{A_{i+1}^{(n)} - 2A_i^{(n)} + A_{i-1}^{(n)}}{h^2}$$

В отличие от схемы Лакса Вендроффа вместо осреднения Лакса на предикторе и центральных разностей здесь для стабилизации применены односторонние разности и на предикторе, и на корректоре, но в разные стороны. То есть на одном из таких полушагов схема заведомо неустойчива, а на другом наоборот обладает избыточным запасом устойчивости. В сумме двух шагов получается устойчивая для линейных уравнений схема второго порядка точности. Как и в схеме Лакса-Вендроффа диффузионный оператор учитывается только на корректоре по обычной центрально-разностной схеме.

Следует отметить, что в нелинейных задачах газовой динамики схема Мак-Кормака локально неустойчива в сверхзвуковых зонах разрежения и в дозвуковых зонах возвратно-циркуляционного течения.

Как и схема Лакса-Вендроффа схема Мак-Кормака немонотонна. Введением монотонизаторов ее можно заставить работать устойчиво. Отметим, что эквивалентная по дифференциальным приближениям схема с центрально-разностной аппроксимацией содержит дополнительную искусственную вязкость на предикторе и корректоре с альтернирующим по знаку коэффициентом искусственной вязкости  $\pm |U| h/2$ . Это означает, что на одном из шагов вводится дополнительная диффузия, а на другом – антидиффузия.

## 15.11. Методы характеристик

Для гиперболических уравнений в частных производных обширное семейство классических схем реализует варианты метода характеристик, в котором используются разностные аппроксимации характеристических соотношений.

Метод характеристик применяется для решения задач гиперболического типа, например, динамических задач упругопластичности, нестационарных задач газовой динамики, теории мелкой воды, стационарных задач о сверхзвуковых невязких течениях.

Кроме того, метод характеристик нередко включается в качестве составляющей общих методов расщепления при решении задач общего вида, например, при расчете вязких течений. При этом методом характеристик рассчитывается решение гиперболической части уравнений, получаемой отбрасыванием вязких членов. Иногда метод характеристик включается в состав конечно-разностных и конечно-элементных алгоритмов для уточненного расчета значений искомых функций на границах.

### 15.11.1. Прямой метод характеристик

В прямом методе характеристики и решение находятся одновременно. Сетку характеристик удастся построить только для двумерного случая (в координатах  $x$ - $y$  или  $x$ - $t$ ) при условии, что число различных собственных ненулевых значений матрицы системы не больше двух. Примеры применения прямого метода характеристик к задачам о деформации жестко-пластической среды можно найти, например, в книгах Соколовского и Ишлинского. Для упруговязкопластических сред примеры реализаций прямого метода характеристик даны в монографиях Новацкого и Кукуджанова. По-

сколькx прямой метод характеристик применим только к очень ограниченному классу двумерных гиперболических краевых задач, то более подробно он здесь не рассматривается.

### 15.11.2. Обратный метод характеристик

Обратно-характеристический метод представляет сочетание метода характеристик и метода конечных разностей. Классический вариант известен как метод Куранта-Изаксона-Риса (метод КИР). В явной схеме метода КИР из узлов пространственной сетки на новом временном слое назад по времени выпускаются характеристики до пересечения со старым временным слоем. Коэффициенты в уравнениях характеристик определяются значениями решения на старом временном слое. В точках "встречи" характеристик со старым временным слоем значения искомых функций определяются пространственной интерполяцией. Значения на новом временном слое для каждого узла определяются из системы уравнений, которая получается в результате аппроксимации характеристических соотношений вдоль характеристик, выпущенных из него назад по времени до пересечения со старым временным слоем. Формулы этого метода представляют собой разностную запись характеристических соотношений, уже рассмотренных в главе 13, и нет большого смысла их повторно выписывать здесь.

В системах уравнений для граничных узлов характеристические соотношения, отвечающие характеристикам, уходящим за границы области, заменяются граничными условиями. Для повышения точности часто применяется итерационное уточнение вновь найденного решения на новом временном слое путем уточнения положения характеристик по найденному решению и повторения расчета.

Наличие операций интерполяции решения в обратно-характеристических схемах вносит аппроксимационную вязкость и позволяет рассчитывать разрывные решения сквозным счетом без введения дополнительных вязких членов.

Для устойчивости шаг по времени должен быть ограничен условием Куранта-Фридрихса-Леви (КФЛ-условием, условием Куранта), требующим, чтобы точки пересечения характеристик со старым временным слоем не выходили бы за пределы окрестности рассчитываемого узла.

Следует иметь в виду, что метод характеристик неконсервативен. В двухшаговых схемах предиктор-корректор неконсервативный предиктор часто реализуется методом характеристик, а на корректоре применяются консервативные аппроксимации уравнений по методу конечных объемов или по методу конечных элементов.

## Глава 16. Расчет сжимаемых течений

Рассмотрим подробнее наиболее распространенные методы расчета сжимаемых течений.

### 16.1. Система уравнений и постановка задачи

Система уравнений для расчета однокомпонентных сжимаемых течений имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - \boldsymbol{\sigma}) &= \rho \mathbf{g} \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}(\rho E + \boldsymbol{\sigma}) + \mathbf{q}) &= \rho \mathbf{r} \\ \boldsymbol{\sigma} &= -p\mathbf{I} + \lambda_v(\mathbf{e} : \mathbf{I}) + 2\mu_v \mathbf{e} \\ p &= (\gamma - 1)\rho U \\ U &= c_v T \\ E &= U + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} / 2 \\ \mathbf{e} &= (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) / 2 \\ \mathbf{q} &= -k_T \nabla T \end{aligned}$$

где выписаны последовательно законы сохранения массы, импульса, полной энергии и определяющие соотношения для вязкого теплопроводного газа: соотношение для напряжений, закон сжимаемости, калорическое уравнение, выражения для полной энергии и скорости деформации и, наконец, закон теплопроводности Фурье.

Основными искомыми функциями обычно выбирают плотность  $\rho$  (или давление  $p$ ), скорость  $\mathbf{u}$  и температуру  $T$ . Остальные искомые величины можно найти по основным в любой момент времени. Под остальными искомыми величинами подразумеваются полная энергия  $E$ , внутренняя энергия  $U$ , давление  $p$  (плотность  $\rho$ ), скорость деформации  $\mathbf{e}$ , напряжение  $\boldsymbol{\sigma}$ , тепловой поток  $\mathbf{q}$ .

Следующие величины полагаются заданными функциями координат, времени и основных искомым функций:

ускорение внешних массовых сил  $\mathbf{g}$ ,  
внешние массовые источники тепла  $\mathbf{r}$ ,  
коэффициенты динамической вязкости  $\lambda_v$  и  $\mu_v$ ,

коэффициент теплопроводности  $k_T$ ,  
коэффициент теплоемкости при постоянном объеме  $c_V$  и  
показатель адиабаты  $\gamma$ . Единичный тензор обозначен  $\mathbf{I}$ .

Данная система уравнений называется уравнениями Эйлера в случае идеального газа (если коэффициенты вязкости и теплопроводности равны нулю) и уравнениями Навье-Стокса сжимаемого газа в противном случае.

Невязкие течения ( $\lambda_V = \mu_V = k_T = 0$ ) определяются следующими параметрами подобия:

- 1) число Маха, показывающим отношение скорости течения к скорости звука:  $M = |\mathbf{u}|/c$ , где квадрат скорости звука равен  $c^2 = \gamma(\gamma - 1)c_V T$ . Заметим, что течения называются сверхзвуковыми при  $M > 1$ , дозвуковыми при  $M < 1$ , трансзвуковыми при наличии в течении дозвуковых и сверхзвуковых зон и гиперзвуковыми при  $M \gg 1$ .
- 2) показателем адиабаты (отношением удельных теплоемкостей)  $\gamma = c_p / c_V$ .

Для вязких течений используются дополнительные параметры подобия:

- 3) число Рейнольдса, показывающее влияние динамической вязкости:  $Re = \rho |\mathbf{u}| L / \mu_V$ , где  $L$  – характерный размер области течения.
- 4) число Прандтля, характеризующее отношение коэффициентов вязкости и теплопроводности:  $Pr = \mu_V c_V / k_T$ .

Влияние внешних массовых сил характеризуется числами Рэлея и Грасгофа, которые будут определены в следующей главе при описании методов расчета термогравитационных течений. Дополнительные параметры подобия появляются по мере учета дополнительных физических эффектов.

## 16.2. Способы расчета разрывных течений

Различают следующие типы разрывов решения. Слабые разрывы это разрывы в производных. В гиперболических задачах разрывы производных распространяются по характеристикам, в параболических и эллиптических задачах разрывы производных имеют место на поверхностях разрыва коэффициентов уравнений, граничных и начальных условий, отвечающих контактному и межфазным границам.

Сильные разрывы (разрывы функции) с перетоком массы через поверхность разрыва называются ударными волнами в отличие от контактных разрывов, которые не сопровождаются перетоком

массы через поверхность разрыва. Сильные разрывы могут возникать как вследствие разрывов в начальных и граничных условиях, так и вследствие критических режимов невязкого течения при непрерывных коэффициентах уравнений и условий.

Локальные оценки погрешности численных решений основаны на предположениях о достаточной гладкости решения, поэтому на скачках такие оценки несправедливы. В идеальном алгоритме решения следовало бы применять сеточные методы в областях гладкого решения, а на поверхностях разрыва сопрягать такие гладкие решения с использованием соотношений на разрывах. В относительно простых случаях при наличии одной поверхности разрыва (например, одной головной ударной волны) такой подход к решению удается реализовать.

Однако, в реальных течениях благодаря взаимодействию ударных волн между собой и с границами число поверхностей разрыва катастрофически растет и может быть настолько большим, что ни одна вычислительная машина не справится с задачей их явного выделения и расчета. Поэтому априорное выделение (выделение заранее) разрывов в численном решении если и делается, то только для основного разрыва типа головной ударной волны, контактной или межфазной границы. Положение такого основного сильного разрыва определяется с использованием соотношений на скачке, соотношений на контактной границе или на фазовом переходе, соответственно. Вторичные ударные волны и контактные разрывы, возникающие при взаимодействии скачков между собой или с границами, размножаясь создают сложную картину взаимодействующих сильных разрывов, которая уже, как правило, рассчитывается по схемам сквозного счета, в которых сильные разрывы представлены узкими зонами больших градиентов решения.

В последнее время появились алгоритмы сквозного счета, реализующие автоматизированное выделение множественных движущихся сильных разрывов, обеспечивающие выполнение условий на скачках и заметно повышающие точность численных решений. Это консервативные схемы расчета на подвижных адаптивных сетках. Историю вопроса и примеры применения см. в статьях Азаренка (1996, 2006).

### **16.3. Схемы сквозного счета.**

Схемами сквозного счета называют такие схемы, в которых решение полагается непрерывным и сильные разрывы имитируются зонами больших градиентов решения. Такие схемы определяют обобщенные (слабые) решения начально-краевых задач.

В зонах больших градиентов, моделирующих разрывные решения, схемы сквозного счета содержат дополнительную аппроксимационную или явную искусственную вязкость, играющую роль регуляризатора, обеспечивающего устойчивость решения. Регуляризованные дополнительной вязкостью схемы сквозного счета называются также методами улавливания скачков.

На начальном этапе развития схем сквозного счета регуляризатором являлось искусственное вязкостное давление, которое явно добавлялось к шаровой части тензора напряжений. Часто такое вязкостное давление рассчитывалось по формуле приращения давления на шаге по времени

$$p_V = -K_1 \gamma p^n \Delta t_n \nabla \cdot \mathbf{u}$$

где  $0 \leq K_1 \leq 1$  положительный коэффициент, зависящий в общем случае от решения и шагов сетки,  $\Delta t_n$  - шаг по времени. Если вязкостное давление включать только в зонах сжатия, то

$$K_1 = K_1^0 H(-\nabla \cdot \mathbf{u})$$

где  $H(\dots)$  – функция Хевисайда, а коэффициент  $K_1^0$  подбирается эмпирически путем численных экспериментов.

Многие исследователи пробовали также добавлять и квадратичные члены  $K_2 (\Delta t_n \nabla \cdot \mathbf{u})^2$  в выражение вязкостного давления. Делались попытки применения тензорной вязкости, например, тензор искусственных вязких напряжений определялся по формуле (см. Поттер, 1975)

$$\sigma_V = K_{(3)} \Delta t_n^2 |\nabla u| \nabla u$$

Описание таких рецептов можно найти во многих учебниках, в частности, в книге Роча (1980). Отметим, что дополнительная вязкость может потребоваться не только на скачках, но и в зонах резкого разрежения.

Для корректного расчета ударных волн тепло, генерируемое искусственными вязкими напряжениями

$$Q_* = -p_V \nabla \cdot \mathbf{u} + \sigma_V : \nabla u$$

должно учитываться в балансе энергии. Присутствие искусственной вязкости влияет также и на условия устойчивости, и на выбор шага по времени.

Как уже было сказано выше, в первых классических методах улавливания скачков дополнительные диссипативные (вязкие) члены являлись обычно линейными и характеризовались постоянными значениями коэффициентов искусственной вязкости по всей сетке. Такие методы демонстрируют приемлемые по точности результаты только для гладких решений со слабыми скачками, но в присутствии сильных ударных волн дают неудовлетворительные результаты в виде сильно осциллирующих и даже неустойчивых по нелинейности решений. Неустойчивость по нелинейности часто проявляется не только на скачках, но и в сверхзвуковых зонах сильного разрежения, а также в дозвуковых зонах возвратно-циркуляционных течений.

К сожалению, подходящие значения коэффициентов искусственной вязкости сильно меняются, как от задачи к задаче, так и по области решения для одной и той же задачи, так как они очень сильно зависят от локального термомеханического состояния сплошной среды. В одних подобластях области решения вязкости может не хватать, вследствие чего там наблюдается немонотонное поведение решения и даже признаки локальной неустойчивости (рост нефизических возмущений решения), а в других подобластях вязкость наоборот оказывается избыточной, решение так сильно сглаживается, что скачки удовлетворительно рассчитать не удастся.

По указанным причинам в настоящее время явная искусственная вязкость с эмпирически определенными коэффициентами практически не используется. В современных методах улавливания скачков используют нелинейную вязкость, автоматически подстраивающуюся к решению. Первыми методами этого направления явились гибридные схемы, использующие нелинейный переключатель значений коэффициентов вязкости или даже переключатель типа вязкостного регуляризатора в зависимости от режима течения. Типичными переключателями служат число Маха, определяющее дозвуковое или сверхзвуковое течение, дивергенция скорости, определяющая разрежение или уплотнение, вектор скорости, определяющий направление течения, и так далее. Физически обоснованная адаптация разностной схемы к режиму течения предложена в схеме распада произвольного разрыва (Годунов (1959)).

## 16.4. Схема Годунова

Для практики важнейшим свойством численного метода является робастность, то есть его безотказная эффективная работа в широком диапазоне входных параметров. Для газодинамических задач первый робастный метод предложил Годунов (1959). Метод носит название “схема распада произвольного разрыва” и включает следующие основные составляющие:

- 1) консервативная аппроксимация интегральных законов сохранения (интегро-интерполяционный метод или метод контрольных объемов);
  - 2) описание поведения решения внутри ячеек интерполяцией;
  - 3) расчет потоков на границах ячеек с использованием решений задачи Римана о распаде произвольного разрыва;
  - 4) явное интегрирование по времени уравнений газовой динамики на шаге по времени по какой-либо из схем Рунге-Кутты (чаще всего методом предиктор-корректор).
- Рассмотрим эти составляющие подробнее.

#### 16.4.1. Консервативная аппроксимация законов сохранения

Изложение проведем для общего случая произвольно подвижных сеток. В семействе схем Годунова используется следующая интегральная форма закона сохранения:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V^*} Y dV + \int_{V^*} G(Y) dV + \int_{S^*} (\mathbf{F}(Y) + Y(\mathbf{u} - \mathbf{w})) \cdot \mathbf{n} dS = 0$$

где  $V^*$  - объем ячейки сетки (контрольный объем),  $S^*$  - граница ячейки,  $Y$  - консервативная переменная,  $G(Y)$  - объемный источник (сток) консервативной переменной,  $\mathbf{F}(Y)$  - диффузионный поток консервативной переменной,  $\mathbf{n}$  - вектор внешней единичной нормали к границе ячейки,  $\mathbf{u}$  - скорость материальной сплошной среды,  $\mathbf{w}$  - скорость произвольных подвижных координат (скорость узлов сетки). Обычно интегралы по границе ячейки вычисляются на промежуточном временном слое по значениям  $\tilde{Y}$ , найденным на стадии предиктора из решения задачи Римана о распаде разрыва решения между смежными ячейками.

Простейший вариант метода Годунова на произвольно движущейся сетке получается при аппроксимации искомых функций постоянными по пространству значениями в каждой ячейке и при использовании явной схемы первого порядка точности по времени. Такая простейшая схема Годунова записывается в виде:

$$\frac{(YV)_i^{n+1} - (YV)_i^n}{\Delta t_n} + (G(Y)V)_i^n + \sum_{j=1}^{m(i)} [(\mathbf{F}(Y) + Y(\mathbf{u} - \mathbf{w})) \cdot \mathbf{n} S]_j^{n+1/2} = 0$$

где нижний индекс указывает номер ячейки, верхний индекс обо-

значает номер временного слоя, суммирование проводится по границам, ограничивающим ячейку,  $m(i)$  – число граней для ячейки  $i$ , дробный верхний индекс обозначает значения величин на границе ячейки в момент времени  $t_n + \Delta t_n / 2$ , полученные из решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва искомых функций  $U$  на границе между ячейками. Описанный способ разностной аппроксимации законов сохранения называется интегро-интерполяционным методом или методом контрольных (конечных) объемов.

#### 16.4.2. Расчет значений на границах ячеек

Рассмотрим задачу Римана (см. Куликовский, Погорелов, Семенов, 2001) для одномерной гиперболической системы уравнений

$$\oint_L (U dx + F(U) dt) = 0$$

$$t = 0 : U = U_0(x) = \begin{cases} U_L & \text{при } x < 0 \\ U_R & \text{при } x > 0 \end{cases}$$

где  $U$  и  $F$  – векторы плотностей и потоков сохраняемых величин,  $L$  – контур области интегрирования контрольного “объема”  $S$  в плоскости  $t$ - $x$ :

$$S = \{(t,x): 0 \leq t \leq \Delta t, -\Delta x / 2 \leq x \leq \Delta x / 2\}.$$

Задача Римана имеет два элементарных решения. Первое отвечает движущемуся сильному разрыву, при этом решение определяется соотношениями на скачках

$$W[U] + [F(U)] = 0$$

где  $W$  – скорость распространения разрыва, скачки величин обозначены квадратными скобками.

Второе элементарное решение является непрерывно дифференцируемым и описывает распространение волн Римана. Это автомодельное решение ищется в виде  $U_k = U_k(\xi)$ , где  $\xi = x/t$  и получить его в общем случае нелинейных задач удастся только приближенно (см. книгу Куликовского, Погорелова, Семенова 2001). Точное решение имеется для линейной системы уравнений. Оно является комбинацией бегущих волн со скоростями  $\lambda_p$

$$U_p = \sum_{k=1}^n \Omega_{Rpk} w_k (x - \lambda_k t), \quad p = 1, \dots, n.$$

где

$$U = \{U_p\}_{p=1}^n, \quad w_k = \sum_{p=1}^n \Omega_{Lpk} U_{0p},$$

$$\Omega_R = \{\Omega_{Rpk}\}_{p,k=1}^n, \quad A = \partial_U F(U) = \Omega_L \Lambda \Omega_R,$$

$\Lambda = \{\lambda_{(p)} \delta_{pl}\}_{p,l=1}^n$  - диагональная матрица, составленная из собственных значений  $\lambda_p$  матрицы  $A$ ,  $\delta_{pl}$  - символы Кронекера,  $\Omega_L$  и  $\Omega_R$  - матрицы левых и правых собственных векторов матрицы  $A$ .

Реализация формул точного аналитического решения задачи Римана, если его удастся получить, для вычисления потоков на границах ячеек связано с большими затратами вычислительной работы. В зависимости от начальных значений решения по обе стороны от произвольного разрыва, общее решение задачи Римана представляется набором элементарных решений, описывающих движущиеся ударные волны, контактные разрывы и волны разрежения, разделенные областями с постоянными значениями искомым функций. Для уравнений со сложной физикой, в частности для уравнений, учитывающих влияние электро-магнитных эффектов, фазовых превращений, сложной реологии, например, пластичности, аналитическое решение задачи Римана затруднено и во многих случаях не найдено. Поэтому предложено большое число вариантов метода Годунова (десятки вариантов, см. Куликовский, Погорелов, Семенов, 2001), основанных на приближенных решениях задачи Римана.

Простейшим вариантом является метод Куранта-Изаксона-Риса (КИР) (Courant, Isaacson, Rees, 1952), который основан на приближенном решении задачи Римана для локально-линеаризованной исходной системы уравнений, состоящем из движущихся разрывов, которые разделяют области с постоянными значениями искомым функций.

Метод Роу (Roe, 1981) основан на точном решении задачи Римана для специальным образом линеаризованной исходной системы уравнений. Отличие этого решения от используемого в методе КИР состоит в том, что оно точно воспроизводит решение нелинейной задачи Римана для движущегося сильного разрыва.

Метод Ошера (Osher, 1981) основан на приближенном решении задачи Римана в виде комбинаций волн Римана.

Заметим, что различия в модификациях схемы Годунова проявляются только на нелинейных уравнениях. Для линейной системы гиперболических уравнений с постоянными коэффициентами, все модификации схемы Годунова одного и того же порядка точности эквивалентны и совпадают с какой-либо из классических конечно-разностных схем.

### 16.4.3. Повышение порядка точности

Построение схем более высокого порядка точности в методе Годунова достигается путем сочетания использования кусочно-полиномиальной аппроксимации решения внутри ячеек с различными схемами Рунге-Кутты интегрирования по времени. Отметим, что чаще всего используются кусочно-линейная аппроксимация решения по пространству и двухшаговая схема предиктор-корректор интегрирования по времени, обеспечивающие почти второй порядок точности по пространству и времени (van Leer, 1984; Borrel, Montagne, 1985; Родионов, 1987).

Первый этап, называемый предиктором ("предсказателем"), реализуется по некоторой обычной конечно-объемной схеме на полшаге по времени:

$$\frac{(YV)_i^{n+1/2} - (YV)_i^n}{\Delta t_n / 2} + (G(Y)V)_i^n + \sum_{j=1}^{m(i)} [(F(Y) + Y(\mathbf{u} - \mathbf{w})) \cdot \mathbf{nS}]_j^n = 0$$

Второй этап, называемый корректором ("исправителем"), представляет схему Годунова на полном шаге, в которой полученные на предикторе значения используются в качестве начальных данных для решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва на гранях и последующего вычисления граничных потоков:

$$\frac{(YV)_i^{n+1} - (YV)_i^n}{\Delta t_n} + (G(Y)V)_i^n + \sum_{j=1}^{m(i)} [(F(Y) + Y(\mathbf{u} - \mathbf{w})) \cdot \mathbf{nS}]_j^{n+1/2} = 0$$

Для дальнейшего повышения порядка точности метода Годунова используются более точные квадратурные формулы при аппроксимации интегралов и многошаговые процедуры Рунге-Кутты интегрирования по времени.

Явные схемы Годунова устойчивы при обычном для явных схем ограничении шага по времени. Это ограничение по гиперболичности, или КФЛ-условие, или условие Куранта, Фридрихса, Леви, или просто условие Куранта. Это условие определяет шаг по времени как отношение шага по пространству к скорости распространения возмущений.

#### 16.4.4. Расчет вязких течений

Изначально метод Годунова предназначен для гиперболических уравнений. Поэтому при решении уравнений с вязкостью, которые являются параболическими, применяется расщепление по физическим процессам. На первом этапе вычислений каждого шага по времени рассчитывается невязкая гиперболическая часть уравнений по схеме Годунова, а на втором этапе отдельно по явной или неявной схеме производится учет вязких членов уравнений. При расчете вязких членов по явной схеме учитывается диффузионное ограничение шага по времени

$$\Delta t_n \leq \frac{\rho h^2}{(D+1)\mu_\nu}$$

где  $D$  – число независимых пространственных переменных. В любом случае надо контролировать рост нормы решения с помощью условий точности.

### 16.5. Гибридные схемы

Как правило, схемы высокого порядка точности в окрестности разрывов дают решения с нефизическими осцилляциями в отличие от двухслойных схем первого порядка, которые могут быть монотонными в окрестности разрывов. Монотонные схемы при отсутствии источников членов не производят новых минимумов и максимумов решения (осцилляций).

Идея почти монотонных гибридных схем повышенной точности состоит в “скрещивании” немонотонных схем высокого порядка точности с монотонными схемами низкого порядка точности. При этом схемы высокого порядка используются в областях гладкого решения, а монотонные схемы низкого порядка точности применяются в окрестности разрывов.

По определению Годунова двухслойная монотонная линейная схема имеет вид:

$$Y_i^{n+1} = \sum_{j \in J(i)} \gamma_j Y_j^n, \quad \gamma_j \geq 0$$

где  $J(i)$  – множество номеров узлов, образующих шаблон для аппроксимации уравнения в узле  $i$  (множество соседей узла  $i$ ). В монотонной схеме положительное возмущение решения на старом слое  $\delta Y_j^n \geq 0$  ( $j \in J(i)$ ) вызывает положительное возмущение решения

на новом слое  $\delta Y_i^{n+1} \geq 0$ . Это свойство обеспечивается положительностью коэффициентов  $\gamma_j \geq 0$ .

Для уравнения переноса

$$\partial Y / \partial t + U \partial Y / \partial x = 0$$

типичным примером монотонной схемы служит схема с разностями против потока

$$Y_i^{n+1} = (1 - C)Y_i^n + CY_{i-1}^n, \quad C = \Delta t U / h$$

имеющая первый порядок точности. Годуновым (1959) было показано, что не существует линейных двухслойных схем второго порядка точности, обеспечивающих монотонное изменение решения.

Типичным примером немонотонной схемы может служить двухслойная одношаговая схема Лакса-Вендроффа второго порядка точности

$$Y_i^{n+1} = Y_i^n - C/2(Y_{i+1}^n - Y_{i-1}^n) + C^2/2(Y_{i+1}^n - 2Y_i^n + Y_{i-1}^n)$$

которую можно переписать так

$$Y_i^{n+1} = Y_i^n(1 - C^2) + C/2(C - 1)Y_{i+1}^n + C/2(C + 1)Y_{i-1}^n$$

Эта схема устойчива при  $C \leq 1$ , но немонотонна, то есть допускает образование нефизических осцилляций решения вблизи разрывов.

Для монотонизации, то есть для устранения нефизических осцилляций, в схемах высокого порядка точности необходимо использовать нелинейную вязкость, зависящую от поведения решения.

Гибридные схемы являются нелинейными схемами, которые образуются при сложении с весом (параметром гибридности) монотонной схемы первого порядка и немонотонной схемы повышенного порядка точности (например, схемы Лакса-Вендроффа). Складывая записанные выше схемы первого и второго порядков точности с весом  $0 \leq \gamma \leq 1$ , получаем простейшую гибридную схему квазивторого порядка точности:

$$Y_i^{n+1} = Y_i^n[(1 - C)\gamma + (1 - C^2)(1 - \gamma)] + \\ + C/2(C - 1)Y_{i+1}^n(1 - \gamma) + [(1 - \gamma)C/2(C + 1) + \gamma C]Y_{i-1}^n$$

которая при  $\gamma = 0$  имеет второй порядок точности и немонотонна, а при  $\gamma = 1$  имеет первый порядок точности и монотонна. В области мало меняющегося решения применяют схему второго порядка ( $\gamma = 0$ ), а в зоне больших градиентов переходят на схему первого порядка ( $\gamma = 1$ ). Поскольку окрестности ударных волн занимают малую часть области решения, то записанная гибридная схема имеет “почти второй порядок точности”.

Значения параметра гибридности зависят не только от нормы градиентов решения, но и от типа течения, то есть принимаются различными в зонах разрежения/сжатия и в зонах дозвукового/сверхзвукового течения.

Важный шаг в развитии гибридных схем был сделан в методе коррекции потоков (Wong, Book, 1973), которые предложили задавать коэффициент гибридности так, чтобы в численном решении не возникали новые экстремумы и чтобы уже существующие минимумы не уменьшались, а максимумы не возрастали. То есть повышение точности решения путем гибридизации надо производить так, чтобы не нарушить монотонность схемы.

Гибридные схемы часто имеют вид двухшаговых схем предиктор-корректор. При этом на предварительном шаге – предикторе (predict – предсказывать) используется заведомо монотонная схема, а на втором шаге – корректоре (correct – исправлять) используется антидиффузионная схема с отрицательным коэффициентом диффузии, устраняющая излишнюю диффузию, введенную предиктором. Для сохранения монотонности на корректоре антидиффузия ограничивается коэффициентами, называемыми лимитерами (ограничителями).

В дальнейшем идея гибридной схемы, обладающей свойством монотонности, была воплощена в семействах схем TVD, реализующих свойство “неувеличения полной вариации численного решения” (“Total Variation Diminution”, Harten, 1983). Далее были построены гибридные монотонные схемы высоких порядков точности семейства ENO. Подробное описание схем TVD и ENO дано в книгах Куликовского, Погорелова, Семенова (2001), Петрова, Лобанова (2007).

## 16.6. Схемы экспоненциальной подгонки

Самарский (1964) усовершенствовал схему с направленными разностями первого порядка точности, уменьшив физическую кинематическую вязкость  $\nu_V = \mu_V / \rho$ :

$$\frac{Y_i^{n+1} - Y_i^n}{\Delta t_n} + U \frac{Y_i^n - Y_{i-1}^n}{h} = \nu_V \frac{1}{1 + \nu_{V^*} / \nu_V} \frac{Y_{i+1}^n - 2Y_i^n + Y_{i-1}^n}{h^2}$$

где направленные разности записаны для  $U > 0$ . Аналогичное усовершенствование для центрально-разностной схемы, независимое от знака  $U$ , имеет вид

$$\frac{Y_i^{n+1} - Y_i^n}{\Delta t_n} + U \frac{Y_{i+1}^n - Y_{i-1}^n}{2h} = \left( \nu_V \frac{1}{1 + \nu_{V^*} / \nu_V} + \nu_{V^*} \right) \frac{Y_{i+1}^n - 2Y_i^n + Y_{i-1}^n}{h^2}$$

где  $\nu_{V^*} = 0.5 |U| h$  - аппроксимационная вязкость для схемы с направленными разностями и явная искусственная вязкость для центрально-разностной схемы. По предложению Самарского вместо физической вязкости  $\alpha$  в расчете используется уменьшенная («подогнанная») вязкость

$$\nu_{corr} = \nu_V \frac{1}{1 + \nu_{V^*} / \nu_V}$$

В результате схема сохраняет свойство монотонности и дает более точное решение в пограничных слоях.

Идея Самарского развита в семействе схем экспоненциальной подгонки [см. книгу Дулан, Миллер, Шилдерс, 1980]. Распространенный вариант скорректированной физической вязкости метода экспоненциальной подгонки дается выражением

$$\nu_{corr} = \nu_V \left( \frac{\nu_{V^*}}{\nu_V} \right) \operatorname{cth} \left( \frac{\nu_{V^*}}{\nu_V} \right) \cong \nu_V \left[ 1 + \frac{1}{3} \left( \frac{\nu_{V^*}}{\nu_V} \right)^2 - \frac{1}{45} \left( \frac{\nu_{V^*}}{\nu_V} \right)^4 + \dots \right]$$

Выше было показано, что направленные разности в методах экспоненциальной подгонки можно заменять центральными разностями. Надо только при этом добавлять явную искусственную вязкость, компенсирующую дестабилизирующие члены, возникающие в первом дифференциальном приближении центрально-разностной схемы.

Распространение центрально-разностного варианта схемы экспоненциальной подгонки на нерегулярные сетки и конечно-элементную аппроксимацию решения по пространственным переменным основывается на следующем вариационном уравнении Галеркина

$$\begin{aligned} \int_V ((Y^{n+1} - Y^n) / \Delta t_n + \mathbf{U} \cdot \nabla Y^n) \delta Y dV = \\ = - \int_V \tilde{\mathbf{v}}_V \nabla Y^n \cdot \nabla \delta Y dV + \int_S \tilde{\mathbf{v}}_V \mathbf{n} \cdot \nabla Y \delta Y dS \end{aligned}$$

где  $\tilde{\mathbf{v}}_V = \mathbf{v}_{corr} + \mathbf{v}_{V^*}$

Приведенное уравнение справедливо и для общего трехмерного пространственного случая, скорость течения  $\mathbf{U}$  при этом является вектором, а под  $h$  подразумевается характерный размер конечного элемента.

## 16.7. Схемы уравновешенной вязкости

Для расчета течений с сильными ударными волнами и пограничными слоями, характеризующимися наличием узких зон с большими градиентами искомых функций весьма эффективными, робастными и простыми в реализации являются схемы уравновешенной вязкости или SUPG-схемы (Streamline Upwind Petrov-Galerkin method) [Hughes, Brooks, 1979, 1982; Tezduyar, Hughes, 1982].

Название данной схемы на наш взгляд не отражает ее основной идеи. Действительно, направленные разности против потока в аппроксимациях конвективных членов применялись в качестве источника стабилизирующей аппроксимационной вязкости во многих предшествующих методах. Вариационная формулировка уравнений Петрова-Галеркина и конечно-элементная аппроксимация решения также применялась в разных вариантах и до рассматриваемого метода. Главная же идея метода в названии вообще не отражена. Главная идея метода SUPG состоит в том, что величина коэффициента стабилизирующей аппроксимационной или искусственной вязкости выбирается так, чтобы в каждом конечном элементе уравновесить по норме вклады от конвективных и диффузионных членов. Этот факт отражен в используемом здесь наименовании SUPG метода “метод уравновешенной вязкости”.

Заметим, что конечно-элементные схемы с кусочно-линейной аппроксимацией решения могут трактоваться как схемы

контрольных объемов, поскольку в обоих случаях дискретные уравнения совпадают. Границы контрольных объемов пересекаются в центрах конечных элементов, а сами контрольные объемы представлены приузловыми объемами конечно-элементных сеток.

Таким образом применительно к схемам методов контрольных объемов метод SUPG или метод уравновешенной вязкости состоит в корректировке величин диффузионных потоков на границах контрольных объемов для обеспечения равенства по норме вкладов от диффузионных и конвективных потоков.

Приведем ниже изложение конечно-элементного метода уравновешенной вязкости, следуя нашей работе (Бураго, Никитин, Якушев, 2016). По сравнению с оригинальной схемой SUPG алгоритм слегка изменен в сторону упрощения. Итак, применяется вариационная постановка задачи течения сплошной среды для определения слабого или обобщенного решения в произвольно подвижных координатах

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V A \delta AdV + \int_V (\mathbf{B} - A\mathbf{\Omega}) \cdot \nabla \delta AdV = \int_V f \delta AdV + \int_S (\mathbf{B} - A\mathbf{\Omega}) \cdot \mathbf{n} \delta AdS$$

Здесь  $A$  сохраняемая величина,  $\mathbf{B}$  поток величины  $A$ , обусловленный взаимодействием и хаотическими движениями молекул (упругость, вязкость, диффузия),  $A\mathbf{\Omega}$  - конвективный поток величины  $A$  (обусловленный упорядоченным движением материальной среды относительно координатной среды),  $f$  - источник/сток величины  $A$ ,  $V$  - область решения с границей  $S$ ,  $\mathbf{\Omega} = \mathbf{u} - \mathbf{w}$  - конвективная скорость,  $\mathbf{u}$  и  $\mathbf{w}$  - скорости материальной и координатной сред. Временная производная  $\partial / \partial t$  вычисляется вдоль траекторий произвольно подвижных координат (вдоль траекторий узлов подвижной сетки). В частности, в данной точке при  $\mathbf{w} = \mathbf{u}$  имеем лагранжев узел, при  $\mathbf{w} = 0$  имеем эйлеров узел.

Для закона сохранения массы в (3.1) полагаем  $A = \rho$ ,  $\mathbf{B} = v_{art}^{(1)} \nabla \rho$ ,  $f = 0$ ; для закона сохранения количества движения принимаем  $A = \rho \mathbf{u}$ ,  $\mathbf{B} = \boldsymbol{\sigma} + v_{art}^{(2)} (\nabla \otimes (\rho \mathbf{u}) + (\nabla \otimes (\rho \mathbf{u}))^T) / 2$ ,  $f = \rho \mathbf{g}$ ; для уравнения баланса энергии используем  $A = \rho e = \rho(U + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} / 2)$ ,  $\mathbf{B} = -\mathbf{q} + v_{art}^{(3)} \nabla(\rho e)$ ,  $f = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}) + \rho r$ . В этих выражениях  $\rho \mathbf{g}$  - внешние массовые силы,  $\rho r$  - внешние источники/стоки тепла,  $T$  - температура,  $U = c_V T$  - внутренняя энергия,  $c_V$  - теплоемкость при постоянном объеме. Вычисление

коэффициентов искусственной вязкости  $\nu_{art}^{(j)}$  ( $j=1,2,3$ ) рассмотрено далее.

Для задач гидрогазодинамики и упругопластичности определяющие соотношения для напряжений  $\boldsymbol{\sigma}$  и тепловых потоков  $\mathbf{q}$  можно записывать единообразно с использованием векторов и тензоров в актуальной конфигурации  $\{\mathbf{x}\}$ , подробное описание для различных сред дано в работе (Бураго, Глушко, Ковшов, 2000).

Например, для течений сжимаемой жидкости и газа определяющие соотношения имеют вид

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_v, \quad \boldsymbol{\sigma}_v = 2\mu_v(\mathbf{e} - (\mathbf{e} : \mathbf{I})\mathbf{I}/3), \quad p = (\gamma - 1)\rho U,$$

$$\mathbf{q} = -k_T \nabla T$$

где  $p$  - давление,  $\boldsymbol{\sigma}_v$  - девиатор вязких напряжений,  $\mu_v$  - коэффициент физической вязкости,  $\mathbf{e} = 0.5(\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T)$  - эйлеров тензор скоростей деформаций,  $\mathbf{q}$  - тепловой поток,  $k_T$  - коэффициент теплопроводности.

В численном методе можно использовать простейшие кусочно-линейные, билинейные и трилинейные аппроксимации решения в ячейках (конечных элементах). Интегралы вариационных уравнений также можно вычислять простейшими квадратурами Гаусса, которые в одномерном случае отвечают формуле трапеций для членов с временными производными и формуле прямоугольников для прочих членов вариационного уравнения. Из-за совпадения точек численного интегрирования с узлами конечно-элементной сетки при интегрировании членов с временными производными матрицы масс являются диагональными (Стрэнг, Фикс, 1980).

В зависимости от скорости процесса эволюционные задачи рассчитываются по явным, явно-неявным и неявным двухслойным схемам первого и квазивторого порядков точности. Для конвективных членов всегда применяется явная центрально-разностная аппроксимация, при этом для устойчивости вводится искусственная вязкость.

Консервативность алгоритмов обеспечивается приведенной выше проинтегрированной по частям вариационной формой Галеркина-Петрова применяемых законов сохранения и последующей конечно-элементной аппроксимацией решения. Локальная консервативность, то есть баланс потоков между приузловыми объемами обосновывается элементарно и является следствием вариационной записи и факта равенства нулю производных от константы. Глобальная консервативность определяется корректным заданием граничных условий.

Рассмотрим задание искусственной вязкости. Применяемая схема расчета по времени полностью аналогична центрально-разностным двухслойным схемам. Устойчивость таких явных центрально-разностных схем обеспечивается искусственной вязкостью. Искусственная вязкость определяется так, чтобы на границах между приузловыми объемами уравновесить по норме вклад от диффузионных членов и вклад от прочих членов однородной части уравнения. Поясним, что “на границах между приузловыми объемами” означает “в гауссовых точках используемых квадратур интегрирования потоковых членов вариационного уравнения”, расположенных в центрах конечных элементов (в принятой аппроксимации). Формулы для вычисления коэффициентов искусственной вязкости  $\nu_{art}^{(j)}$  имеют вид:

$$[\nu_{art}^{(1)}]_k = \alpha_k \frac{d_{1k}^{(1)}}{d_{2k}^{(1)}}, \quad [\nu_{art}^{(2)}]_k = \alpha_k \frac{d_{1k}^{(2)}}{d_{2k}^{(2)}}, \quad [\nu_{art}^{(3)}]_k = \alpha_k \frac{d_{1k}^{(3)}}{d_{2k}^{(3)}}$$

где  $k$  – номер конечного элемента, индекс временного слоя у всех переменных опущен, чтобы не загромождать записи. Параметр  $\alpha_k = 0.5$  при  $[\nabla \cdot \mathbf{u}]_k \Delta t < 0.1$ , иначе  $\alpha_k = 1.0$ . Шаг по времени  $\Delta t$  определяется условием устойчивости далее. Формулы для коэффициентов  $d_{1k}^{(j)}$  и  $d_{2k}^{(j)}$  ( $j=1,2,3$ ) имеют вид

$$\begin{aligned} (d_{1k}^{(1)})^2 &= ([\nabla \cdot (\rho \mathbf{\Omega})]_k)^2 / m, & (d_{2k}^{(1)})^2 &= \sum_{l=1}^m ([\nabla \rho]_k \cdot \nabla_{kl})^2 \\ (d_{1k}^{(2)})^2 &= [\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{\Omega}) + \nabla p]_k \cdot [\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{\Omega}) + \nabla p]_k / m \\ (d_{2k}^{(2)})^2 &= \sum_{l=1}^m ([\nabla(\rho \mathbf{u})]_k \cdot \nabla_{kl}) \cdot ([\nabla(\rho \mathbf{u})]_k \cdot \nabla_{kl}) \\ (d_{1k}^{(3)})^2 &= ([\nabla \cdot (\rho e \mathbf{\Omega} + p \mathbf{u})]_k)^2 / m, \\ (d_{2k}^{(3)})^2 &= \sum_{l=1}^m ([\nabla(\rho e)]_k \cdot \nabla_{kl})^2 \end{aligned}$$

Значения искоемых функций  $[A]_k$  в центре каждого элемента  $k$  вычисляются по формуле

$$[A]_k = \sum_{l=1}^m s_{kl}^0 A_{J(k,l)}$$

где  $s_{kl}^0 = 1/m$ ,  $m$  - число узлов в элементе,  $J(k,l)$  - глобальный номер узла с локальным номером  $l$  в элементе  $k$ . Пространственные производные вычисляются по формуле

$$[\nabla A]_k = \sum_{l=1}^m \nabla_{kl} A_{J(k,l)}$$

Свойство коэффициентов  $\nabla_{kl} : \sum_{l=1}^m \nabla_{kl} = 0$  определяет равенство нулю производной от константы и обеспечивает локальную консервативность. В зонах сильного разрежения, вызванного ускорением потока при  $[\nabla \cdot \mathbf{u}]_k \Delta t \geq 0.1$ , коэффициент

уравновешивающей искусственной вязкости специально увеличивается вдвое, что необходимо для устойчивости расчета в таких зонах.

Для вязких течений физическая вязкость уменьшается с ростом искусственной вязкости по методу экспоненциальной подгонки Самарского. Простейшая корректировка имеет вид:

$$\tilde{\mu}_v = \frac{\mu_v^2}{\mu_v + \rho v_{art}^{(2)}}, \quad \tilde{k}_T = \frac{k_T^2}{k_T + \rho v_{art}^{(3)}}$$

Для явных схем шаг по времени  $\Delta t$  определяется из условия устойчивости, которое имеет обычный вид

$$\Delta t \leq \min_k \beta \frac{h_k}{(c_k + |\Omega_k| + (D+1)! \max(\mu_v, k_T) / \rho / h_k)}$$

где  $h_k$  - размер  $k$ -го конечного элемента,  $D=1,2,3$  - число пространственных измерений в задаче,  $c_k$  - скорость звука,  $\beta$  - коэффициент запаса (обычно равный 0.3 - 0.6).

Если диффузионное ограничение на шаг по времени становится обременительным (большие коэффициенты  $\mu_v$  и  $k_T$ ) или если течение в значительной части дозвуковое ( $|\mathbf{u}| \ll c_k$ ), то условие устойчивости можно существенно ослабить применением неявных аппроксимаций для неконвективных потоков.

Ограничение шага по времени по конвекции (слагаемое  $|\Omega_k|$  в знаменателе условия устойчивости) из-за явной аппроксимации конвективных потоков должно выполняться в любом случае. В задачах упругопластичности с большими деформациями необходимо дополнительно ограничивать шаг по времени условием точности решения, а именно, требованием малости (раз в десять по крайней мере) изменения нормы деформаций по сравнению с характерной деформацией, отвечающей пределам текучести или прочности.

Предпочтение простым аппроксимациям отдано потому, что реализация аппроксимаций более высокой точности значительно усложняет работу по программированию, отладке и модификации алгоритмов, а выигрыш в точности не оправдывает требуемых затрат труда. Реально точность более эффективно обеспечивается адаптацией произвольно-подвижной сетки к решению и границам области решения.

Отметим, что в отличие от оригинальной схемы SUPG, использующей направленные разности, данная конечно-элементная реализация схем уравновешенной вязкости аналогична более простым в реализации центрально-разностным схемам. В результате

алгоритмы получаются очень гибкими, легко программируемыми и модифицируемыми при изменениях в постановках задач.

Реализация схемы возможна как с явной, так и с неявной по времени аппроксимацией правой части. Реализация неявных схем рассмотрена ниже.

## 16.8. Неявные схемы

Если недифференциальные по времени члены при записи разностных схем относятся к временному слою, отличному от старого, то есть к новому или промежуточному слоям, на которых значения искомых функций еще неизвестны, то разностная, конечно-элементная, конечно-объемная (и так далее) схемы называются неявными. В таких схемах искомые значения решения на новом временном слое приходится находить из решения систем уравнений с недиагональными матрицами. Удовольствие это достаточно дорогое, поскольку возрастает объем вычислительной работы, а также затраты времени на программирование и отладку более сложного (по сравнению с явными схемами) алгоритма. Но эти затраты нередко компенсируются повышенной устойчивостью неявных схем, позволяющей проводить устойчивый расчет с увеличенным шагом по времени.

Несмотря на формальную безусловную устойчивость полностью неявных разностных схем, шаг по времени при их использовании все же приходится ограничивать условиями точности, которые обычно сводятся к требованию малого относительного изменения нормы решения на шаге по времени. В тех случаях, когда определяемый из условий точности шаг по времени становится сравнимым по величине с временным шагом, обеспечивающим устойчивый расчет по явным схемам, для экономии вычислительных затрат имеет смысл предусмотреть переход к расчету по явной схеме. Этого можно не делать, если при реализации неявных схем воспользоваться эффективными итерационными методами. Для курантовских временных шагов число итераций для получения решения резко падает (до 1-3) и неявные итерационные схемы становятся столь же экономичными как и явные схемы.

Термин "эффективные итерационные методы" означает методы, приводящие к точному решению линеаризованных уравнений неявной схемы за конечное число итераций. Примером может служить семейство методов сопряженных градиентов. К нелинейным алгебраическим задачам метод сопряженных градиентов применяется как внутренний итерационный процесс в паре с методом квазилинеаризации Ньютона. Эти методы подробно обсуждались в первой части данного курса.

Итерационные методы имеют важную особенность, которая состоит в том, что при наличии хорошего начального приближения к искомому решению количество необходимых для отыскания решения итераций снижается. В нестационарных задачах механики сплошной среды решение на старом временном слое являются весьма неплохим начальным приближением к решению на новом временном слое, особенно, если шаг по времени достаточно мал. Поэтому при использовании итерационных неявных схем для быстрых процессов эти неявные схемы по затратам вычислительной работы нередко являются асимптотически эквивалентными явным схемам.

Имеется большое разнообразие неявных схем. В задачах гидродинамики часто конвективные члены аппроксимируются по явной схеме, а диффузионные и свободные члены - по неявной. Это делается постольку, поскольку диффузионное ограничение на шаг по времени при явных аппроксимациях может быть слишком сильным. Неявная аппроксимация позволяет избавиться от этого ограничения. При неявной аппроксимации вязких членов оператор задачи на каждом шаге по времени является эллиптическим, положительным, самосопряженным и, таким образом, достаточно просто обратимым. При этом коэффициенты вязкости определяются чаще всего по решению с предыдущего слоя.

Свободные недифференциальные члены большой интенсивности, зависящие от решения, при явной аппроксимации тоже требуют неприемлемых ограничений шага по времени и, поэтому, аппроксимируются неявно. При этом, возможно, шаг по времени все же придется ограничить с тем, чтобы не нарушить свойств эллиптичности оператора неявной схемы. Нелинейные вязкие и свободные члены квазилинеаризуются относительно приращений искомых функций на шаге по времени.

Что же касается конвективных членов, то их неявная аппроксимация применяется довольно редко, поскольку оператор неявной схемы на шаге по времени при этом становится нелинейным, несамосопряженным и знаконеопределенным, что делает его обращение довольно трудоемким делом. Применяя вариационную формулировку метода наименьших квадратов одновременно с ньютоновской квазилинеаризацией можно получить уравнения с неявной аппроксимацией конвективных членов, обладающие свойствами положительности и самосопряженности. Однако, обусловленность такой неявной схемы будет ухудшена и при ее реализации надо будет позаботиться о предобусловливании алгебраической задачи.

Большие шаги по времени обычно применяют в тех случаях, когда нестационарная постановка задачи введена для улучшения свойств решаемых уравнений с конечной целью определить стационарное решение. В этом случае можно не заботиться о физической адекватности промежуточных решений в процессе установления

стационарного решения. Однако, следует иметь в виду то, что с увеличением шага по времени может возрасти схемная вязкость и тогда достигнутое стационарное решение может быть искажено этой дополнительной вязкостью. Поэтому такие стационарные "решения" надо уточнять, продолжив расчет с уменьшенным шагом по времени.

## 16.9. Маршевые методы

Стационарные задачи газовой динамики для сверхзвуковых течений относятся к гиперболическому типу, причем роль гиперболической координаты играет пространственная переменная, вдоль которой газ движется со сверхзвуковой скоростью. Например, в окрестности обтекаемого тела, ограниченной с одной стороны поверхностью тела, а с другой стороны головной ударной волной, сверхзвуковой поток можно рассчитать решая гиперболическую начально-краевую задачу явным шаговым методом по гиперболической координате, направленной вдоль набегающего потока или вдоль образующей. Такой метод как бы марширует по этой координате в направлении потока, откуда и произошло название этой группы методов - маршевые. Маршевые методы были развиты начиная с 1960-х годов для расчета обтекания корпусов ракет и самолетов.

Для начала расчета надо стартовать с некоторого известного решения от границ сверхзвуковой зоны в головной части обтекаемого тела. Расчет продолжается, пока уравнения сохраняют гиперболическость, то есть до кормы, за которой наступает срыв потока и потеря гиперболическости в зонах возвратно-циркуляционного течения непосредственно за кормой.

Для реализации начальных условий надо располагать данными о стационарном течении в дозвуковой и трансзвуковой зонах головной части. Эти данные получают, решая в этой области вместо стационарной задачи соответствующую нестационарную задачу газовой динамики, решение которой на больших временах стремиться к решению стационарной задачи. Поскольку система уравнений газовой динамики для нестационарного течения принадлежит гиперболическому типу независимо от скорости течения, то ее стационарное решение получается по каким-либо явным схемам методом установления.

В принципе метод установления можно применить для определения стационарного решения во всей области течения: и около головной части, и около корпуса и за кормой. Это, однако, требует очень больших затрат вычислительной работы и применения высокопроизводительных ЭВМ.

Экономичный комплексный метод реализует расчет дозвуковых областей методом установления и, затем, использует полученное решение в качестве начальных данных для быстрых маршевых методов расчета зоны стационарного сверхзвукового течения. Затем к расчету дозвуковых зон в кормовой части опять применяется метод установления. Такая технология расчета позволила получить решение сложных стационарных задач о трехмерных невязких течениях на машинах малой производительности еще в 1960е годы (см. Бабенко, Воскресенский, Любимов, Русанов, 1964; Любимов, Русанов, 1967).

### 16.10. Схемы для течений мелкой воды

Несжимаемые течения воды в “мелких” водоемах вроде бассейнов, озер, морей и океанов, горизонтальные размеры которых много больше их вертикального размера (глубины) с хорошей точностью описываются теорией мелкой воды. Начально-краевые задачи этой теории относятся к гиперболическому типу и решаются теми же методами, что и соответствующие задачи газовой динамики.

Напомним основы теории мелкой воды. Уравнение неразрывности и уравнения движения несжимаемой идеальной (невязкой) жидкости в трехмерном случае имеют вид

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad \partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p / \rho - g \mathbf{e}_z$$

где  $g$  - ускорение силы тяжести,  $\mathbf{e}_z$  - орт вертикальной оси координат. В приближении мелкой воды в уравнении движения по вертикальной оси материальной производной по времени пренебрегают и после интегрирования для давления получают следующее представление

$$p = \rho g (\xi - z)$$

где  $z = \xi(x, y, t)$  является уравнением свободной поверхности и принято, что давление на свободной поверхности равно нулю. Далее вводятся обозначения для осредненных по глубине горизонтальных составляющих скорости

$$u = \frac{1}{h} \int_b^\xi v_x dz, \quad v = \frac{1}{h} \int_b^\xi v_y dz$$

где  $h = \xi - b$  - переменная глубина,  $z = b(x, y, t)$  - заданная функция уровня дна. Интегрированием по глубине исходные уравнения

неразрывности и движения несжимаемой жидкости приводятся к следующим уравнениям теории мелкой воды

$$\begin{aligned}\partial_t h + \partial_x(hu) + \partial_y(hv) &= 0 \\ \partial_t u + u\partial_x u + v\partial_y u &= -g\partial_x \xi \\ \partial_t v + u\partial_x v + v\partial_y v &= -g\partial_y \xi\end{aligned}$$

Консервативная форма уравнений мелкой воды имеет вид

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{E}(\mathbf{U}) + \partial_y \mathbf{G}(\mathbf{U}) = \mathbf{S}$$

где

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} h \\ hu \\ hv \end{bmatrix}, \quad \mathbf{E} = \begin{bmatrix} hu \\ hu^2 + gh^2/2 \\ huv \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} hv \\ huv \\ hv^2 + gh^2/2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ -gh\partial_x b \\ -gh\partial_y b \end{bmatrix}$$

Заметим, что если отождествить глубину водоема  $h$  с плотностью некоторой газообразной среды  $\rho$ , а величину  $gh^2/2$  с давлением в этой среде  $p$ , то получается система уравнений баротропной (давление является функцией плотности) двумерной газовой динамики с отношением теплоемкостей  $\gamma = C_p / C_v$  равным двум ( $p = \tilde{g}\rho^\gamma$  - давление пропорционально квадрату плотности). Система уравнений мелкой воды является гиперболической со скоростью распространения малых возмущений  $c = \sqrt{gh}$ .

Для решения задач теории мелкой воды применяются рассмотренные выше методы газовой динамики. Более подробно с методами расчета течений мелкой воды можно познакомиться по книгам (Куликовский, Погорелов, Семенов, 2001; Марчук, Чубаров, Шокин, 1983; Коннор, Бреббиа, 1979).

Определенные, но преодолимые, трудности реализации расчетов возникают при моделировании наводнений и затопления берегов волнами от приливов, цунами, разрушенных плотин и дамб с учетом рельефа дна и местности в окрестности водоемов и рек. В этих задачах область занимаемая мелкой водой является заранее неизвестной и переменной во времени. Решение таких задач проводится сквозным счетом уравнений мелкой воды во всей окаймляющей области возможных ее движений.

При этом первая трудность состоит в том, что при обращении глубины в нуль (незанятая мелкой водой местность) в уравнениях

мелкой воды при определении скоростей возникает деление на нуль. Поэтому во всех формулах, где глубина стоит в знаменателе, ее значение ограничивается снизу малой величиной. Для этого вместо  $h$  в знаменателе используется малое положительное число, например, такое  $\max(h_{,10} - 3)$ .

Вторая трудность состоит в обеспечении консервативности, которая неизбежно нарушается из-за погрешностей в определении положения свободной подвижной границы области, занятой мелкой водой. Для обеспечения консервативности вводятся специальные корректировочные процедуры, обсуждаемые подробно далее в главе про расчет течений со свободными границами.

### 16.11. Лагранжевы схемы на эйлеровых сетках

Для рассмотренных выше схем расчета течений использовались эйлеровы (неподвижные) пространственные координаты и произвольно подвижные координаты, то есть скорости сплошной среды и узлов сетки не совпадали. Из-за этого в уравнениях присутствовали конвективные члены.

Для устранения неустойчивости связанной с явной аппроксимацией конвективных членов в эти схемы вводилась дополнительная явная искусственная или неявная аппроксимационная вязкость.

Конвективные члены исчезают, если расчет проводится на лагранжевых сетках, которые движутся вместе со сплошной средой. В этом случае для обеспечения устойчивости требуется меньшая искусственная или аппроксимационная вязкость. В качестве искусственной вязкости, обеспечивающей устойчивость лагранжевых схем, обычно применяются добавки к тензору напряжений (или потоку импульса) и тепловому потоку, равные приращениям этих потоков на шаге по времени. Такие схемы расчета подробно рассмотрены далее в разделе, посвященном расчету упругопластических течений.

Подчеркнем, что лагранжевы схемы требуют меньшей дополнительной вязкости для обеспечения устойчивости и лучше описывают разрывные решения. В этом можно убедиться на пространственно одномерных задачах о распространении ударных волн, используя равномерные расчетные сетки. Это улучшение точности реализовано в семействе так называемых лагранжево-эйлеровых схем. Применение лагранжевых схем на эйлеровых сетках осуществляется расщеплением расчета каждого шага по времени на два этапа. На первом (лагранжевом) этапе зависимые переменные на новом временном слое рассчитываются по лагранжевой схеме и

узлы эйлеровой сетки временно смещаются в новые положения вместе со средой (они передвинуты как узлы лагранжевой сетки). На втором (эйлеровом) этапе окончательные значения решения в узлах исходной эйлеровой сетки на новом временном слое определяются интерполяцией решения, полученного на смещенной (как бы лагранжевой) сетке. Альтернативно в некоторых вариантах схем на втором этапе новые значения решения на эйлеровой сетке определяются из уравнения (конвективного) переноса. Характерным примером лагранжево-эйлеровых схем является метод крупных частиц (см. книгу О. Белоцерковского и Давыдова, 1982).

Ожидалось, что поскольку лагранжево-эйлеровы схемы стабилизируются меньшей добавочной вязкостью, то они должны лучше описывать (меньше размазывать) ударные волны и погранслои. К сожалению, упомянутые надежды не оправдались и заметного повышения точности численных решений на этом пути достигнуть не удалось.

## 16.12. Дифференциальные анализаторы ударных волн и контактных разрывов

При решении задач на грубых сетках методами, которые сильно размазывают ударные волны и контактные разрывы, определение положения этих скачков по результатам расчетов весьма затруднительно. Определение положения скачков требуется для их визуализации и реализации переключателей в выражениях стабилизирующих членов в методах сквозного счета. Поэтому для определения локализации сильных разрывов по результатам сквозного счета течений сплошной среды разрабатываются специальные добавки к алгоритмам решения, называемые дифференциальными анализаторами. Обзор начальных работ данного направления сделан Яненко, Анучиной, Петренко и Шокиным (1970). Более свежие обзоры работ данного направления имеются в работах (Osher, Fedkiw, 2001), (Бураго, Кукуджанов, 2005).

Наиболее простой способ определения положения ударных волн основан на том факте, что на ударных волнах сплошная среда подвержена сжатию, достигающему максимума на фронте волны. При сжатии дивергенция скорости  $\nabla \cdot \mathbf{u}$  отрицательна. Поэтому, чтобы получить изображение ударной волны достаточно нарисовать график изолиний функции  $\varphi = \max(-\nabla \cdot \mathbf{u}, 0)$ . На ударной волне эта функция имеет максимум и ее изолинии около волны сильно сгущаются.

Для визуализации и определения положения контактных разрывов используется аналогичный прием, но с мониторной

функцией  $\varphi = |\nabla \rho|$ , поскольку на контактном разрыве модуль градиентов плотности имеет максимум.

Заметим, что градиент плотности в окрестности фронта разрыва определяет нормаль к поверхности разрыва. Вторые производные плотности в направлении нормали на фронте ударных волн и контактных разрывов обращаются в нуль (точка перегиба).

Аналогичные способы используются для определения положения границ подвижных областей решения, ограниченных подвижными свободными, межфазными и контактными границами. При этом в качестве мониторинговых функций используют функции, принимающие определенные значения в каждой из участвующих в движении сплошных сред (“функции концентрации”, “функции цвета”). Изменение положения таких границ во времени определяется на основе рассчитанного поля скоростей из решения уравнения переноса.

При численном решении сквозным счетом межфазные и контактные границы размываются, поэтому в алгоритмы вводится дополнительная процедура антидиффузии, предотвращающая размывание границ и процедура обеспечения (восстановления) консервативности, необходимость которой следует из того факта, что из-за диффузии-антидиффузии мониторинговых функций поверхности разрывов определяются приближенно, что может нарушать законы сохранения даже в случае, когда для решения уравнения переноса используются консервативные схемы.

Эффективным приемом борьбы с размыванием межфазных контактных границ является метод функций уровня (описание метода и его истории дано в монографии Sethian, 1996). В методе функций уровня мониторинговая функция указывает для каждого момента времени и каждой точки кратчайшее расстояние до границы. Функция уровня подчинена уравнению переноса, имеет положительные значения для точек внутри области решения и отрицательные значения для точек вне области. На границе она принимает нулевое значение. Функции уровня при переходе границы меняются плавно, поэтому проблема размывания границ снимается.

Более подробное рассмотрение множества вариантов метода дифференциальных анализаторов разрывных решений выходит за рамки данной книги.

Кратко упомянутые конструкции дифференциальных анализаторов являются вполне работоспособными. Их более обстоятельные описания и обоснования можно найти в цитированных работах. Отметим, что данное направление продолжает развиваться и актуально в связи с расчетами технологических процессов с подвижными свободными, межфазными и контактными границами.



## Глава 17. Расчет несжимаемых течений

В несжимаемых средах плотность вдоль лагранжевых траекторий (вдоль траекторий движения материальной среды) является постоянной. Уравнение сохранения массы (уравнение неразрывности) показывает следующее

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

и распадается на два уравнения, уравнение переноса массы

$$\frac{d\rho}{dt} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0$$

и условие несжимаемости

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

Уравнение состояния вида  $p = p(\rho, T)$  для несжимаемых сред отсутствует. Спрашивается, а как же тогда определять давление в жидкости? Ответ такой: давление должно обеспечивать выполнение условия несжимаемости или определяться этим условием. Забегая немного вперед можно дать математический ответ на данный вопрос с позиций вариационного исчисления. Если трактовать уравнения движения несжимаемой жидкости как уравнения Эйлера для вариационного уравнения виртуальных работ, то условие несжимаемости является ограничением, обеспечивающим соленоидальность поля скоростей (поле скоростей с равной нулю дивергенцией скорости называют соленоидальным). В вариационном уравнении движения это ограничение учитывается по методу множителей Лагранжа, причем роль множителя Лагранжа играет давление. Подробности рассмотрены далее.

Скорость распространения малых возмущений в несжимаемой среде (скорость звука) бесконечна, поэтому сверхзвуковых течений и ударных волн в несжимаемых средах нет, а число Маха (отношение модуля скорости к скорости звука) равно нулю.

Из-за отмеченных особенностей методы расчета течений несжимаемых сред отличны от рассмотренных в предыдущей главе методов для сжимаемых сред.

### 17.1. Переменные скорость-давление

#### 17.1.1. Трехмерные нестационарные задачи.

В переменных скорость-давление несжимаемые вязкие течения описываются системой дифференциальных уравнений Навье-Стокса, содержащих условие несжимаемости, уравнение движения, уравнение распространения тепла и уравнение переноса примеси

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \rho_0(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) &= \nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_v) + \rho \mathbf{g} \\ \rho_0 c_v(\partial_t T + \mathbf{u} \cdot \nabla T) &= \boldsymbol{\sigma}_v : \nabla \mathbf{u} + \nabla \cdot [k_T \nabla T] + \rho_0 r_T \\ \partial_t C + \mathbf{u} \cdot \nabla C &= \nabla \cdot [v_c \nabla C] + r_c\end{aligned}$$

где  $\mathbf{u}$  - скорость,  $\rho$  - плотность,  $p$  - давление,  $\boldsymbol{\sigma}_v$  - тензор вязких напряжений,  $\mathbf{I}$  - тензорная единица,  $\mathbf{g}$  - ускорение, вызванное массовыми силами,  $T$  - температура,  $C$  - концентрация примеси,  $r_T$  - массовый источник/сток тепла,  $r_c$  - массовый источник примеси,  $k_T(T)$  - коэффициент теплопроводности,  $v_c$  - коэффициент диффузии примеси.

Уравнение переноса массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0$$

добавляется в систему уравнений при наличии в области решения подвижных контактных границ между несмешивающимися жидкостями разной плотности (в частности, при наличии свободных подвижных границ жидкости).

В русскоязычной литературе переменные скорость-давление часто называют “примитивными переменными”. Этот неверный термин возник в результате неправильного перевода английского выражения “primary variables”, которое на самом деле означает “первичные переменные” или “основные переменные”.

Выписанная система уравнений замыкается определяющими соотношениями, выражающими закон вязкости Ньютона-Кулона (или обобщенный закон вязкости Навье-Стокса)

$$\boldsymbol{\sigma}_v = \lambda_v (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + \mu_v (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$$

где  $\lambda_v$  и  $\mu_v$  - коэффициенты вязкости. Для несжимаемой жидкости второй коэффициент вязкости  $\lambda_v$  значения не имеет.

Для учета эффектов гравитационной конвекции, вызванных изменением плотности из-за изменений температуры и примеси в выражении для внешних сил используется соотношение слабой сжимаемости

$$\rho = \rho_0(1 + \beta_T(T - T_0) + \beta_C(C - C_0))$$

где  $\rho_0 = \text{const}$  - плотность несжимаемой жидкости при отсчетных температуре  $T_0$  и концентрации  $C_0$ ,  $\beta_T$  и  $\beta_C$  - коэффициенты, определяющие влияние изменений температуры и примеси на плотность. Массовые силы при учете записанных изменений называют силами плавучести, благодаря которым более холодная и более “солёная” жидкость, являясь более тяжелой, тонет, а теплая и менее “солёная”, являясь более легкой, всплывает. Уравнения Навье-Стокса, записанные с использованием сил плавучести, называются уравнениями Навье-Стокса-Буссинеска.

Система уравнений для несжимаемых течений дополняется начальными

$$t = 0, \mathbf{x} \in V: \mathbf{u} = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), T = T_0(\mathbf{x}), C = C_0(\mathbf{x})$$

и граничными условиями

$$t > 0, \mathbf{x} \in S_u: \mathbf{u} = \mathbf{u}_*(\mathbf{x}, t)$$

$$t > 0, \mathbf{x} \in S \setminus S_u: \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\sigma}_{n*}(\mathbf{x}, t)$$

$$t > 0, \mathbf{x} \in S_T: T = T_*(\mathbf{x}, t)$$

$$t > 0, \mathbf{x} \in S \setminus S_T: k \nabla T \cdot \mathbf{n} = q_{n*}(\mathbf{x}, t, T)$$

$$t > 0, \mathbf{x} \in S_C: C = C_*(\mathbf{x}, t)$$

$$t > 0, \mathbf{x} \in S \setminus S_C: k_C \nabla C \cdot \mathbf{n} = q_{C*}(\mathbf{x}, t, C)$$

где правые части помечены звездочками и полагаются заданными.

Конечно, приведенные граничные условия не охватывают все возможные случаи, в частности, условия на контактных и межфазных границах, которые рассматриваются далее отдельно в главе про расчет подвижных границ раздела.

Из условия несжимаемости и уравнения движения несложно получить уравнение Пуассона для давления:

$$\rho_0 \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \nabla p + \nabla \cdot (\rho \mathbf{g})$$

позволяющее по скоростям найти давление. На части границы при решении этого уравнения давление может быть задано (условие Дирихле), а на тех участках границы, где давление неизвестно, граничные условия получаются проектированием уравнения движения на нормаль к границе (условие Неймана)

$$\mathbf{n} \cdot (\rho_0 (\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})) = \mathbf{n} \cdot (\nabla \cdot (-p \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_v)) + \mathbf{n} \cdot (\rho \mathbf{g})$$

и учетом ограничений на проекции скорости на нормаль к границе.

Таким образом, первый (очевидный) вариант метода решения может быть основан на каких-либо устойчивых и аппроксимирующих схемах для уравнений движения и уравнения Пуассона для давления.

### 17.1.2. Двумерные нестационарные задачи.

Уравнения для двумерных плоских и осесимметричных течений. Обозначим пространственные переменные, используемые для описания двумерного течения, буквами  $r$  и  $z$ . Третью редуцированную пространственную переменную, от которой решение не зависит, назовем  $\theta$ . Для плоских течений  $\theta$  является декартовой координатой, для осесимметричных течений  $\theta$  является окружной цилиндрической координатой. В осесимметричных течениях помимо осевой  $w$  и радиальной  $u$  скоростей отличной от нуля может быть также и окружная скорость закрученного потока  $v$ .

В записанных ниже формулах параметр  $\alpha$  равен нулю для плоского течения и единице для осесимметричного течения. Система уравнений Навье-Стокса-Буссинеска в переменных “скорость – давление” состоит из уравнения неразрывности

$$\frac{\partial u}{\partial r} + \alpha \frac{u}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

уравнений движения

$$\rho_0 \left( \frac{du}{dt} - \alpha \frac{v^2}{r} \right) = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha \sigma_r) + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} - \alpha \frac{\sigma_\theta}{r} + \rho g_r$$

$$\rho_0 \left( \frac{dw}{dt} + g(\beta_T(T - T_0) + \beta_C(C - C_0)) \right) = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha \sigma_{rz}) + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z}$$

$$\rho_0 \left( \frac{dv}{dt} + \alpha \frac{uv}{r} \right) = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} (r^\alpha \sigma_{r\theta}) + \frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial z} + \alpha \frac{\sigma_{r\theta}}{r}$$

где оператор материальной производной имеет вид

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial r} + w \frac{\partial}{\partial z}$$

и определяющих уравнений для напряжений в ньютоновской жидкости

$$\begin{aligned}\sigma_r &= 2\rho v \frac{\partial u}{\partial r} - p, & \sigma_\theta &= 2\rho v \alpha \frac{u}{r} - p, & \sigma_z &= 2\rho v \frac{\partial w}{\partial z} - p, \\ \sigma_{rz} &= \rho v \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right) \\ \sigma_{r\theta} &= \alpha \rho v \left( \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r} \right), & \sigma_{z\theta} &= \alpha \rho v \frac{\partial v}{\partial z}\end{aligned}$$

После подстановки выражений для напряжений, уравнения движения принимают вид:

$$\begin{aligned}\frac{du}{dt} - \alpha \frac{v^2}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} &= \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^\alpha v \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( v \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \alpha v \frac{u}{r^2} + g_r \\ \frac{dw}{dt} + g\beta_T(\Gamma - T_0) + g\beta_C(C - C_0) + \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial z} &= \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^\alpha v \frac{\partial w}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( v \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ \frac{dv}{dt} + \alpha \frac{uv}{r} &= \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^\alpha v \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( v \frac{\partial v}{\partial z} \right) - \alpha v \frac{v}{r^2}\end{aligned}$$

В систему уравнений включаются также уравнения баланса для тепла и примеси, которые имеют вид:

$$\begin{aligned}c_v \frac{d\Gamma}{dt} &= \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^\alpha v_T \frac{\partial \Gamma}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( v_T \frac{\partial \Gamma}{\partial z} \right) + r_T \\ \frac{dC}{dt} &= \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^\alpha v_C \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( v_C \frac{\partial C}{\partial z} \right) + r_C\end{aligned}$$

где  $\Gamma$  - температура,  $c_v$  - теплоемкость при постоянном объеме,  $v_T$  - коэффициент диффузии тепла,  $r_T$  - внешний массовый источник тепла,  $C$  - концентрация примеси,  $v_C$  - коэффициент диффузии примеси,  $r_C$  - массовый источник примеси. Отметим, что диссипативный член  $\sigma_{\nu} : \nabla \mathbf{u}$  (см. трехмерное уравнение тепла) является пренебрежимо малым и потому опущен.

В уравнениях Навье-Стокса-Буссинеска полагается, что в выражениях массовых сил плотность жидкости зависит от температуры и концентрации. Эта зависимость определяется величиной коэффициентов  $\beta_T$  и  $\beta_C$ . Отклонения сил тяжести из-за изменений температуры и концентрации называются силами плавучести, вызывающими гравитационную и концентрационную конвекцию жидкости. Величина  $g_r$  является центробежным ускорением вращающейся жидкости для осесимметричных задач.

## 17.2. Методы искусственной сжимаемости

В сжимаемой среде дивергенция скорости  $\nabla \cdot \mathbf{u}$  положительна в зонах всестороннего разрежения и отрицательна в зонах всестороннего сжатия. В несжимаемой среде дивергенция скорости должна обращаться в нуль. Методы искусственной сжимаемости для расчета несжимаемых течений дают приближенное решение с дивергенцией скорости не равной, но близкой к нулю. Введение искусственной сжимаемости приводит к конечному значению скорости распространения малых возмущений (скорости звука)  $c$ . Для достаточной точности выполнения условия несжимаемости течение должно быть дозвуковым, причем число Маха должно быть много меньше единицы  $M = |\mathbf{u}|/c \ll 1$ .

Рассмотрим эти методы.

Метод Чорина. В работе (Chorin, 1967) условие несжимаемости было заменено условием слабой сжимаемости

$$\partial_t p + \rho_0 c^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

где  $c$  - фиктивная скорость звука (слабого возмущения). Такая замена обеспечивает эволюционное уравнение для давления и возможность применение явных схем расчета. При достижении установившегося (неизменного во времени) течения условие несжимаемости выполняется в методе Чорина точно. Метод дает приемлемые результаты (близкие к точному решению для несжимаемой среды) при  $t \gg L/c$ , где  $L$  - характерный пространственный размер области решения,  $L/c$  - время пробега слабого возмущения по области решения

Некоторые авторы записывают условие слабой сжимаемости с использованием материальной производной по времени от давления

$$dp/dt + \rho_0 c^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

Это неудачный способ решения, так как в такой формулировке условие слабой сжимаемости даже для стационарного (установившегося) состояния при  $\partial_t p = 0$  не обеспечивает выполнения условия несжимаемости из-за ненулевой конвекции давления ( $\partial p / \partial t = 0$ , но  $dp/dt = \partial p / \partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla p \neq 0$ ).

Метод Владимировой-Ладыженской-Яненко основан на представлении соотношения слабой сжимаемости в виде

$$p + \rho_0 c^2 \tau_0 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

где  $\tau_0$  - постоянная, имеющая размерность времени. Дивергенция скорости в этом методе стремится к нулю с увеличением коэффициента  $\rho_0 c^2 \tau_0$  (коэффициент штрафа за сжимаемость). Практически это означает, что фиктивная скорость звука  $c$  должна быть много больше максимальной скорости рассматриваемого несжимаемого течения ( $c^2 \gg \max |\mathbf{u}|^2$ ). К сожалению, обусловленность задачи с ростом скорости звука быстро ухудшается, что не позволяет использовать достаточно большие значения коэффициента штрафа.

Если уравнение движения записать в виде вариационного уравнения виртуальных работ

$$\begin{aligned} \int_V (\rho_0 (\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{u} + (-p \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_V) : \nabla \delta \mathbf{u} - \rho \mathbf{g} \cdot \delta \mathbf{u}) dV = \\ = \int_{S_u} \mathbf{n} \cdot (-p \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_V) \cdot \delta \mathbf{u} dS \end{aligned}$$

То ограничение (условие несжимаемости) вводится в вариационное уравнение виртуальных работ так

$$\begin{aligned} \int_V (\rho_0 (\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) \cdot \delta \mathbf{u} + (-p \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_V) : \nabla \delta \mathbf{u} - \rho \mathbf{g} \cdot \delta \mathbf{u}) dV = \\ = \int_V p \nabla \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_V \nabla \cdot \mathbf{u} \delta p dV + \int_{S_u} \mathbf{n} \cdot (-p \mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}_V) \cdot \delta \mathbf{u} dS \end{aligned}$$

Таким образом, с позиций вариационного исчисления оба рассмотренных выше метода можно трактовать как варианты методов множителей Лагранжа и штрафных функций, соответственно, а условие несжимаемости

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

при этом рассматривается как ограничение, для которого давление играет роль множителя Лагранжа, а коэффициент  $\rho_0 c^2 \tau_0$  является коэффициентом штрафа.

При практической реализации в уравнения искусственной сжимаемости для сглаживания давления нередко вводят малый эллиптический член с оператором Лапласа от давления

$$\partial_t p + \rho_0 c^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = \alpha \nabla^2 p$$

для метода множителей Лагранжа, и

$$p + \rho_0 c^2 \tau_0 \nabla \cdot \mathbf{u} = \alpha \tau_0 \nabla^2 p$$

для метода штрафных функций. Здесь  $0 < \alpha \ll h^2 / \Delta t$ ,  $h$  и  $\Delta t$  - характерные величины шагов по пространству и времени. Введение операторов Лапласа улучшает обусловленность дискретных уравнений и дает более гладкие распределения давления.

Методы искусственной сжимаемости сводят исходную задачу о течениях несжимаемой жидкости к задаче расчета сжимаемых звуковых течений.

### 17.3. Уравнение Пуассона для давления

Как уже говорилось, из уравнений движения и уравнения неразрывности несложно получить уравнение Пуассона для давления

$$\nabla^2 p = -\rho_0 \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\nabla \cdot (\mu_v \nabla \mathbf{u})) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{g})$$

Для плоских течений это уравнение принимает вид:

$$2\rho \left( \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} + \frac{\partial \rho g_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho g_y}{\partial y}$$

где вклады от вязких членов опущены, так как при постоянном коэффициенте вязкости эти вклады точно равны нулю, а при переменном коэффициенте вязкости эти вклады пренебрежимо малы. Записанное уравнение позволяет по распределению скорости определить распределение давления.

Граничные условия для давления на тех участках границы, на которых давление не задано, получаются проектированием векторного уравнения движения на нормаль к границе.

В случае, если давление не задано ни в одной из точек границы, имеем задачу Неймана и давление определяется с точностью до константы. Чтобы обеспечить единственность решения в этом случае требуется дополнительное условие, регуляризирующее задачу.

Например, можно задать давление в какой-либо точке области решения или, альтернативно, в левую часть уравнения Пуассона для давления ввести бесконечно малый дополнительный член, отбирающий решение с минимальной нормой:

$$\kappa \frac{p}{L^2} + 2\rho \left( \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2}$$

где  $L$  – характерный размер области решения,  $0 < \kappa \ll 1$  - малый

положительный безразмерный коэффициент.

Заметим, что в зависимости от дополнительного регуляризирующего условия определенное из уравнения Пуассона давление может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Если величина давления не представляет интереса, например, если важен только перепад давлений, то наличие отрицательных давлений вполне допустимо. Давление ведь определено с точностью до константы, которая не влияет на движение жидкости.

В задачах, в которых величина давления должна быть неотрицательной в силу физических требований, всегда присутствуют граничные условия для давления на входных, открытых или контактных границах, которые с одной стороны являются регуляризаторами краевой задачи для давления и с другой стороны обеспечивают физически корректные неотрицательные значения давления.

Таким образом, решение начально-краевой задачи о течении несжимаемой жидкости можно реализовать, записывая какие-либо устойчивые аппроксимирующие (согласованные) разностные схемы для уравнений движения и для уравнения давления.

В дифференциальной формулировке условие несжимаемости можно вывести как следствие из уравнения Пуассона для давления и уравнений движения. То есть, варианты дифференциальной формулировки задач с условием несжимаемости и с уравнением Пуассона для давления эквивалентны.

Однако для дискретизированных уравнений движения для скоростей и уравнения Пуассона для давления дискретизированное условие несжимаемости выполняется только приближенно, причем в процессе пошагового интегрирования по времени погрешность в условии несжимаемости при использовании рассмотренных алгоритмов может расти.

## 17.4. Метод коррекции давления

В работах (Chorin, 1968), (Temam, 1969), (Fortin, 1971), (Гущин, Щенников, 1974) были предложены варианты метода коррекции давления (pressure correction method, projection method), который позволяет обеспечить выполнение условия несжимаемости на дискретном уровне. Метод коррекции давления можно трактовать как расщепление по физическим процессам (Гущин, Щенников, 1974). На каждом шаге по времени расчет проводится в три этапа.

1-й этап. Определение новой “скорости”  $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$  без учета давления:

$$\frac{\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t_n} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n = \nabla \cdot \left( \frac{\mu_V}{\rho_0} \nabla \mathbf{u}^n \right) + \frac{\rho^n}{\rho_0} \mathbf{g}^n$$

где (важно!) на “скорость”  $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$  граничные условия не накладываются. Дело в том, что “скорость”  $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$  это просто обозначение суммы членов уравнения движения за исключением члена с градиентом давления, поэтому в слове скорость использованы кавычки и граничные условия на  $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$  накладывать нельзя.

2-й этап. Определение давления  $p^{n+1}$  из решения краевой задачи для уравнения Пуассона:

$$\frac{\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}}{\Delta t_n} = \nabla \cdot \left( \frac{1}{\rho_0} \nabla p^{n+1} \right)$$

с учетом главных граничных условий для давления (если давление задано на какой-то части границы  $S_p \subset S$ )

$$x \in S_p : p^{n+1} = p^*(\mathbf{x}, t_{n+1})$$

и естественных граничных условий для давления получаемых проектированием уравнения движения на нормаль к границе:

$$x \in S \setminus S_p : \mathbf{n} \cdot \nabla p^{n+1} = -\mathbf{n} \cdot \left( \rho_0 \frac{(\mathbf{u}^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}^{n+1})}{\Delta t_n} \right)$$

В граничных условиях для давления надо учитывать, что:

а) на входной границе должна быть задана или (!) проекция граничной скорости на нормаль к границе, или (!) давление

$$x \in S \setminus S_p = S_{un} : \mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}^*(\mathbf{x}, t_{n+1}) \cdot \mathbf{n} \text{ или } p^{n+1} = p^*(\mathbf{x}, t_{n+1})$$

так как одновременное задание этих условий переопределит задачу.

б) на стенках задана нормальная скорость и либо касательные скорости, либо соответствующие касательные проекции граничных сил трения.

в) на открытых границах условия для градиента давления получаются проектированием векторного уравнения движения на нормаль к границе с учетом условий продолжения решения (“мягких” граничных условий для искомых функций, выражающих равенство нулю нормальных производных от этих функций).

г) на свободных границах давление уравнивается с давлением во внешней (газовой) среде.

3-й этап. Определяется новая скорость  $\mathbf{u}^{n+1}$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}}{\Delta t_n} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p^{n+1}$$

с учетом главных (кинематических) граничных условий для скоростей

$$t > 0, \mathbf{x} \in S_u: \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}_*(\mathbf{x}, t_{n+1})$$

Уравнения 1-го и 3-го этапов в сумме аппроксимируют уравнения движения. Уравнение 2-го этапа является результатом скалярного умножения уравнения 3-го этапа на оператор пространственного дифференцирования с учетом условия несжимаемости  $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$ . Последнее соотношение и означает обещанное выполнение условия несжимаемости на дискретном уровне.

Очевидно, имеется бесконечное множество способов дискретизации и последующего решения уравнений описанного метода коррекции давления. Обсуждение нюансов и особенностей конкретных реализаций, присущих различным вариантам изложенного метода, здесь опущены.

Заметим, что можно включить в уравнение первого этапа член с градиентом давления  $\nabla p^n$  с n-го временного слоя, тогда на втором и третьем этапах вместо нового давления на (n+1)-м временном слое будет фигурировать поправка к давлению  $\Delta p^{n+1} = p^{n+1} - p^n$ . При этом граничные условия 2-го этапа также формулируются для приращений (поправки) давления.

## 17.5. Переменные “векторная функция тока – вихрь”

В переменных “вектор-функция тока – вихрь” скорость  $\mathbf{u}$  определяется через векторную функцию тока  $\Psi$  (операция ротор вектора)

$$\mathbf{u} = \nabla \times \Psi$$

благодаря чему условие несжимаемости  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$  удовлетворяется тождественно (“дивергенция ротора равна нулю”). Определение вихря

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u}$$

и уравнения движения в скоростях через функцию тока и вихрь переписываются в виде уравнений для функции тока и вихря соответственно

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \Psi) &= \boldsymbol{\omega} \\ \frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \mathbf{u} &= \nabla \cdot (\nu_v \nabla \boldsymbol{\omega}) + \nabla \times (\rho \mathbf{g} / \rho_0) \end{aligned}$$

где  $\nu_v = \mu_v / \rho_0$  - кинематическая вязкость. Эти два уравнения используются в формулировке “вектор-функция тока – вихрь” вместо уравнения неразрывности и уравнения движения.

Заметим, что давление в данной формулировке не входит в разрешающую систему уравнений для вектор-функции тока и вихря и, если надо, оно определяется отдельно после определения поля скоростей из уравнения Пуассона для давления

$$\nabla^2 p = -\rho_0 \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\nabla \cdot (\mu_v \nabla \mathbf{u})) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{g})$$

которое выводится с учетом условия несжимаемости скалярным умножением уравнения движения на оператор пространственного дифференцирования. При этом граничные условия для давления на той части границы, где оно неизвестно, определяются проектированием (скалярным умножением) векторного уравнения движения на нормаль к границе

$$\mathbf{n} \cdot \nabla p = \mathbf{n} \cdot [-\rho(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}_v) + \rho \mathbf{g}]$$

Граничные условия для функции тока и вихря имеют вид ограничений на значения этих функций или их нормальных к границе производных. Эти условия должны быть согласованы с распределением граничных скоростей, то есть на границе должно выполняться соотношение

$$\nabla \times \Psi = \mathbf{u}^*$$

которое позволяет переформулировать ограничения, накладываемые на граничные скорости, в виде ограничений на вектор-функцию тока. Граничные условия для вихря получаются аппроксимацией выражения

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u}$$

с учетом граничных условий для скорости и ее производных. При этом во избежание счетных колебаний решения во времени надо использовать релаксацию (ослабление) этих условий

$$x \in S_{\omega} : \quad \omega^{n+1} = \omega^n + \alpha_1 (\nabla \times \mathbf{u}^{n+1} - \omega^n)$$

где  $\alpha_1 \approx 0.1 \div 0.25$  - коэффициент релаксации. Граничные условия для вихря задаются на участках границы, служащих источниками вихрей, а именно на стенках и входных границах, а также на границах симметрии, где вихри, как правило, зануляются. На остальных границах ставятся “мягкие” условия продолжения решения, а именно, зануляются нормальные к границе производные от вихря.

Формулировка граничных условий для функции тока и вихря зависит от используемых формул дискретного представления производных в правых частях. Неоднозначность разностных представлений операций дифференцирования означает, что не существует единого подхода к записи данных граничных условий и они всегда являются приближенными (подробное описание распространенных вариантов дано в книге Роуча (1980)).

## 17.6. Плотность в несжимаемом течении

В неоднородной многофазной несжимаемой среде плотность может быть переменной в точке пространства в зависимости от того, какая фаза занимает данную точку пространства в данный момент времени. Подстановка условия несжимаемости в уравнение закона сохранения массы дает для плотности несжимаемой многофазной среды транспортное уравнение

$$\partial_t \rho + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0$$

Транспортное уравнение показывает, что значение плотности несжимаемой среды постоянно вдоль лагранжевых траекторий или траекторий материальных частиц ( $d\rho/dt=0$ ). Для однофазной среды постоянные значения плотности принимаются для всего объема занятого несжимаемой средой и уравнение переноса плотности удовлетворяется тождественно.

Однако, при рассмотрении многофазных несмешивающихся сред (в частности, течений со свободными границами) плотность несжимаемой среды может иметь разные значения для различных фаз и, поэтому, может претерпевать скачок на межфазных границах. В этом случае для расчета движения фаз и идентификации их взаимного положения необходимо интегрировать транспортное урав-

нение и отслеживать межфазные подвижные границы. В этом случае плотность, определяемая решением транспортного уравнения, может в численном решении принимать значения, отличные от номинальных значений для данной фазы. Несмотря на консервативность дискретных аппроксимаций и выполнение условия несжимаемости полем скоростей при этом баланс фазовых масс может нарушаться из-за погрешностей в определении положения и диффузного “размазывания” межфазных границ. Это требует контроля закона сохранения массы и введения в алгоритмы решения корректировок, обеспечивающих консервативность.

Безвихревые течения. Задачи для рассматриваемой системы уравнений сильно упрощаются в случае идеальной (невязкой) среды при отсутствии источников вихрей. В этом случае решается только уравнение для функции тока при заданных на границах области решения граничных условиях Дирихле (задана функция) или Неймана (задана нормальная к границе производная функции).

## 17.7. Переменные “функция тока – завихренность”

В случае двумерных течений отличными от нуля являются одна компонента вектора вихря

$$\omega_{\theta} = \omega = \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial r}$$

называемая завихренностью, и одна компонента векторной функции тока  $\Phi_{\theta} = \Phi$ , с помощью которой определяются компоненты скорости. В этом разделе для обозначения пространственных переменных двумерной задачи использованы обозначения  $r$  и  $z$ , которые в случае осесимметричных течений (параметр геометрии  $\alpha = 1$ ) означают радиальную и осевую координаты, а в случае плоских течений ( $\alpha = 0$ ) отвечают координатам  $x$  и  $y$ . Выражения для скоростей имеют вид:

$$u_r = u = \frac{1}{r^{\alpha}} \frac{\partial \Phi}{\partial z}$$

$$u_z = w = -\frac{1}{r^{\alpha}} \frac{\partial \Phi}{\partial r}$$

благодаря чему уравнение неразрывности удовлетворяется тождественно. Будучи подставленными в определение завихренности, вы-

ражения для скоростей дают двумерное уравнение для функции тока

$$\frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) = \omega$$

Двумерное уравнение для завихренности имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega}{\partial t} - \alpha \frac{\omega u}{r^\alpha} - \alpha \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{v^2}{r^\alpha} \right) - g\beta_T \frac{\partial T}{\partial r} - g\beta_C \frac{\partial C}{\partial r} = \\ = \frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left( v r^\alpha \frac{\partial \omega}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( v \frac{\partial \omega}{\partial z} \right) - \alpha v \frac{\omega}{r^2} \end{aligned}$$

Другой способ определения функции тока имеет вид:

$$\psi = \varphi / r^\alpha$$

где  $\psi$  - определенная по другому функция тока. Тогда скорости определяются соотношениями

$$u_r = u = \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad \text{и} \quad u_z = w = -\frac{\partial \psi}{\partial r} - \alpha \frac{\psi}{r}$$

и уравнение для другой функции тока выглядит так

$$\frac{1}{r^\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^\alpha \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) - \alpha \frac{\psi}{r^2} = \omega$$

Вопрос о том, какой из описанных способов введения функции тока применять на практике, однозначного ответа не имеет (“дело вкуса”). В литературе встречаются примеры применения обоих способов.

## 17.8. Методы в переменных “функция тока – вихрь”

Для реализации начально-краевых задач в переменных “функция тока – вихрь”, как правило, применяются варианты проекционных методов (сеточных или бессеточных). Конвекция вихрей рассчитывается чаще всего по какой-либо явной схеме, а для функции

тока и для диффузионных членов в уравнении для вихря применяются неявные аппроксимации. На каждом шаге по времени в нестационарных задачах или на каждой итерации в стационарных задачах решение меняется мало, поэтому часто применяется расщепление системы уравнений по физическим процессам: сначала интегрируется уравнение для вихря, а затем находится новое значение функции тока и новое поле скоростей.

Схема итерирования или интегрирования по времени в достаточно общем случае может быть представлена так

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\omega}^n &= \nabla \times (\nabla \times \Psi^{n+1}) \\ \mathbf{u}^{n+1} &= \nabla \times \Psi^{n+1} \\ \frac{\boldsymbol{\omega}^{n+1} - \boldsymbol{\omega}^n}{\Delta t^{(n)}} + \mathbf{u}^{n+1} \cdot \nabla \boldsymbol{\omega}^n - \boldsymbol{\omega}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1} &= \\ &= \nabla \cdot ((v_v + v_a^{n+1}) \nabla \boldsymbol{\omega}^{n+1}) + \nabla \times (\rho^n \mathbf{g} / \rho_0)\end{aligned}$$

откуда видно, что на каждом шаге по времени (или итерации) номер  $n$  надо решать краевые задачи для эллиптических уравнений с операторами Лапласа. Различные схемы отличаются, как правило, способом введения (явной или аппроксимационной) искусственной вязкости  $v_a^{n+1}$ . Операторы задач для функции тока и вихря при явной аппроксимации конвективных членов являются самосопряженными и положительно определенными, поэтому после пространственной дискретизации возникающие системы алгебраических уравнений решаются без особых затруднений. Уравнение для давления решается только в том случае, если его распределение надо учитывать в рассматриваемых процессах (например, в граничных условиях).

Можно неявно аппроксимировать и конвективные члены, а также не расщеплять систему уравнений, а решать сразу всю систему нелинейных уравнений, используя квазилинеаризацию или погружение. Примеры таких реализаций можно найти. Заметим, что при таком подходе объем вычислений сильно возрастет, а пользы от этого никакой не будет.

Поясним кратко особенности и трудности, имеющиеся в постановке граничных условий и в расчете дополнительных (“источниковых”) членов уравнений.

Задание на границе функции тока фиксирует расход (приток жидкости в единицу времени) и определяет профиль нормальной составляющей скорости. Поэтому одновременно давление и функцию тока на одном и том же участке границы задавать нельзя, чтобы не переопределить задачу. На границах с заданным давлением обычно реализуется задание мягких условий для функции тока (равенство нулю нормальной к границе производной), что

эквивалентно требованию равенства нулю тангенциальной составляющей скорости.

При наличии изолированных обтекаемых тел в потоке жидкости имеется неопределенность в задании значения функции тока на таких телах, поскольку заранее неизвестно распределение расходов при их обтекании.

Течения, вызванные перепадом давлений, не поддаются расчету в переменных функция тока – вихрь, поскольку давление исключено из разрешающей системы уравнений.

Для получения монотонно изменяющихся по времени решений в формулах граничных условий для вихря приходится вводить релаксацию (ослабление) этих условий следующего вида:

$$\omega^{n+1} = \omega^n + \alpha_* (\nabla \times (\nabla \times \Psi^{n+1}) - \omega^n)$$

или

$$\omega^{n+1} = \omega^n + \alpha_* (\nabla \times (\mathbf{u}^{n+1}) - \omega^n)$$

где  $\alpha_* \approx 0.25$  и  $n$  – номер временного слоя или итерации. Без релаксации возникают нефизические колебания во времени численного решения для вихря на границе. Главные условия для вихря задаются через производные функции тока на источниках вихрей, которыми являются поверхности обтекаемых тел и, возможно, входная граница.

В расчетах прикладных задач влияние дополнительных физических эффектов (например, электромагнитных) приводит к появлению в уравнении для переноса вихря дополнительных членов. Если они велики, то чтобы избежать потери точности интегрирования по времени приходится дополнительно ограничивать шаг по времени требованием достаточной малости изменения нормы решения в пределах временного шага. Если такие требования становятся обременительными, то их можно снять, путем неявной аппроксимации завихренности в дополнительных членах.

## 17.9. Методы дискретных вихрей

### 17.9.1. Основы метода

Семейство методов дискретных вихрей предназначено для расчета нестационарных течений несжимаемой идеальной (невязкой) среды. В основе методов дискретных вихрей лежит представление поля скоростей течения суперпозицией (наложением) потоков, обусловленных движущимися вместе с этим течением дискретными

вихрями (Розенхед (1931), С. Белоцерковский, Ништ (1978) и др.). Для невязкого течения уравнение для завихренности (в трехмерном случае, для вихря) принимает вид транспортного уравнения

$$\frac{d\omega}{dt} = 0$$

которое описывает сохранение завихренности вдоль лагранжевых траекторий  $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ . В невязком течении соответственно, сохраняются также и интенсивности дискретных вихрей  $\omega_i$  ( $i = 1, \dots, N$ )

$$\frac{d\omega_i}{dt} = 0$$

вдоль лагранжевых траекторий

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}_i, t), \quad \mathbf{x}_i|_{t=0} = \overset{\circ}{\mathbf{x}}_i$$

где  $\overset{\circ}{\mathbf{x}}_i$  и  $\mathbf{x}_i$  - начальный и текущий радиус-векторы дискретного вихря с номером  $i$ .

Поскольку невязкое потенциальное вихревое течение описывается линейными уравнениями для функции тока и вихря, для него справедлив принцип суперпозиции (наложения), в соответствии с которым поле скоростей, создаваемое несколькими вихрями, равно сумме полей скорости от каждого из этих вихрей.

Поэтому для двумерного случая в плоскости  $(x, y)$  суммарное поле скоростей  $\mathbf{u}(x, y, t)$ , создаваемое дискретными вихрями, описывается функцией тока, для которой имеется известное аналитическое представление

$$\begin{aligned} \varphi &= \sum_{i=1}^N \varphi_i \\ \varphi_i &= -\frac{1}{2\pi} k_i \ln r = -\frac{1}{4\pi} k_i \ln[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2] \end{aligned}$$

где  $\varphi_i$  функция тока поля скоростей от отдельного дискретного вихря бесконечного размаха по  $z$  и интенсивности (синонимами термина “интенсивность” вихря являются термины “напряженность” и “циркуляция”)  $k_i$ , расположенного в точке  $(x_i, y_i)$ .

Таким образом, суммарное поле скоростей  $(u_x, u_y)$  и лагран-

жевы траектории дискретных вихрей определяются формулами

$$\frac{dx_i}{dt} = u_x(x_i, t) = \frac{\partial \varphi}{\partial y} = -\frac{1}{2\pi} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \frac{k_i (y_j - y_i)}{r_{i,j}^2}$$

$$\frac{dy_i}{dt} = u_y(x_i, t) = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} = +\frac{1}{2\pi} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \frac{k_i (x_j - x_i)}{r_{i,j}^2}$$

где

$$r_{i,j} = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2$$

Интегрирование уравнений лагранжевых траекторий позволяет проследить и движение дискретных вихрей, и эволюцию поля скоростей.

В случае трехмерных нестационарных течений метод дискретных вихрей описан в работах (Hess, 1972; Leonard, 1985; Beale, Majda, 1985).

В методе дискретных вихрей имеются следующие трудности:

- 1) система дифференциальных уравнений по времени недостаточно устойчива из-за сингулярности полей скорости точечных вихрей, которая заключается в стремлении значений функции тока отдельного вихря к бесконечности в точке его расположения.
- 2) в исходном варианте метода, который первоначально использовался для моделирования поведения вихревых структур в безграничном пространстве, не учитываются какие-либо граничные условия на твердые границах (стенках). Учет таких условий требует доработки метода.

Первая из упомянутых трудностей, то есть недостаточная устойчивость уравнений движения свободных точечных вихрей устраняется (Чорин, Бернар, 1973) заменой точечных дискретных вихрей на вихри малого, но конечного радиуса  $\delta$ , для которых функция тока имеет вид

$$\varphi_i = -\frac{1}{2\pi} k_i \ln r \quad \text{для } |r| \geq \delta$$

$$\varphi_i = -\frac{1}{2\pi} k_i \frac{r}{\delta} \quad \text{для } |r| < \delta$$

Сходимость метода дискретных вихрей обоснована в работах (Hald, Mauceri del Prete, 1979; Beale, Majda, 1982; Cottet, 1987; Caish, Lowemgrub, 1989)

Для учета граничных условий на твердых границах однознач-

ного способа не существует. Отметим два способа имитации твердых границ, учитывающих, что твердые границы являются источниками завихренности: метод присоединенных вихрей и метод отражения.

Метод присоединенных вихрей, который подразумевает введение дополнительных, связанных с твердой границей, дискретных вихрей, движущихся или покоящихся вместе с твердой границей, и обеспечивающих приближенное выполнение условий непротекания в смысле обобщенного решения; и

Метод отражения, в котором условие непротекания на твердой границе приближенно обеспечивается введением зеркально отраженных относительно граничной плоскости вихрей, равной и противоположно направленной циркуляции по отношению к приграничным вихрям.

Имеются модификации метода дискретных вихрей, в которых предусмотрена генерация свободных вихрей на острых краях обтекаемых тел для моделирования вихревой пелены (вихревой поверхности), описание можно найти в книге (С.Белоцерковский, Ништ, 1978).

Имеются также модификации метода дискретных вихрей для вязких течений, в которых учитывается, что из-за вязкости интенсивности дискретных вихрей с течением времени релаксируют к нулю. Соответствующие варианты метода описаны в работах (Chorin, 1973; Koumoutsakos, Leonard, 1985; Choquin, Huberson, 1988; Cottet, Mas-Gallic, 1990).

#### 17.9.2. Метод "Облако в ячейке"

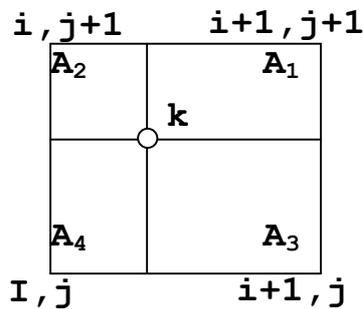
Как уже было сказано, применение метода дискретных вихрей осложняется с одной стороны источниками сингулярности, с другой стороны необходимостью использовать большое число дискретных вихрей для достижения достаточной точности. Подход, который заимствует лучшие черты метода дискретных вихрей и методов, использующих формулировку "функция тока - завихренность", предложен в работе (Roberts, Christiansen, 1972) под названием метод "облако в ячейке"

В методе "облако в ячейке", интегрируется уравнение траектории движения каждого дискретного вихря

$$\frac{dx_k}{dt} = \mathbf{u}_k$$

скорости вычисляются по значениям функции тока, которая в отличие от метода дискретных вихрей определяется не путем суммирования вкладов от отдельных дискретных вихрей, а из решения урав-

нения для функции тока с использованием сеточной функции завихренности, определенной путем осреднения вкладов дискретных вихрей по ячейке сетки. Сетка должна покрывать область движения дискретных вихрей. Вклады дискретного вихря расположенного в точке  $x_k, y_k$ , в значение завихренности в узлах прямоугольной ячейки  $(i, j)$ , в которой он находится (см. рисунок),



определяются следующими интерполяционными формулами, использующими площадные координаты

$$\begin{aligned}\Delta\omega_{i,j} &= \Omega_k A_1 / A, \\ \Delta\omega_{i+1,j} &= \Omega_k A_2 / A, \\ \Delta\omega_{i,j+1} &= \Omega_k A_3 / A, \\ \Delta\omega_{i+1,j+1} &= \Omega_k A_4 / A,\end{aligned}$$

где  $A = A_1 + A_2 + A_3 + A_4$ .

После учета вкладов всех дискретных вихрей завихренность оказывается определенной во всех узлах сетки и функция тока может быть найдена из уравнения

$$\nabla^2 \Psi = \omega$$

Затем определяется поле скоростей и для каждого дискретного вихря определяется его скорость

$$\mathbf{u}_k = (A_1 \mathbf{u}_{i,j} + A_2 \mathbf{u}_{i+1,j} + A_3 \mathbf{u}_{i,j+1} + A_4 \mathbf{u}_{i+1,j+1}) / A$$

и далее интегрированием по времени уравнения траекторий вихрей определяются их новые положения.

Метод "облако в ячейке" был успешно применен и оказался значительно более эффективным, нежели метод дискретных вихрей (при числе вихрей 1000 наблюдался выигрыш в объеме вычислений)

в 20 раз (Christiansen 1973; Milinazzo, Saffman, 1977).

### 17.9.3. Панельные методы

Панельные методы расчета течений с твердыми границами для решения уравнения Пуассона для функции тока используют его представление в виде граничного интегрального уравнения для функции потенциала и его дискретизации методом граничных элементов (панелей). В панельных методах также моделируется вихревая пелена введением цепочки подвижных дискретных вихрей в зоне отрыва потока от обтекаемого тела. Вихревая пелена вводится в расчет в рамках модели потенциального вихревого течения как поверхность разрыва функции потенциала и ее можно интерпретировать как подвижную поверхность, несущую поверхностную завихренность. Интенсивность вихревой пелены находится из условия Кутта-Жуковского, которое определяет скорость, с которой поверхностная завихренность высвобождается в поток с острых кромок поверхности обтекаемого тела.

Подробнее о панельных методах можно прочитать в сборнике статей (О.Белоцерковский (ред.), 1981)

## Глава 18. Методы для задач упругопластичности

В подавляющем большинстве работ по расчету деформаций упругопластических сред используется подход Лагранжа к описанию движения, то есть, используются материальные производные по времени (вдоль траекторий движения материальной среды). Это удобно, поскольку упругопластические среды являются структурированными и при их деформации соседство материальных точек остается неизменным. Таким образом конвективные члены в уравнениях учитывать нет нужды.

Тензорные переменные состояния при использовании подхода Лагранжа можно относить к начальной или к актуальной (в данный момент времени) конфигурации сплошной среды. Отнесение тензорных переменных к начальной конфигурации упрощает применение дифференцирования по времени, так как в этом случае объективные временные тензорные производные совпадают с обычными материальными временными производными.

Применение тензорных переменных в актуальной конфигурации связано с необходимостью учета дополнительных членов при дифференцировании по времени, исключающих влияние поворотов и деформаций малой окрестности материальной точки при изменении во времени актуальной конфигурации.

На вид и степень сложности решаемых уравнений сильное влияние оказывает выбор базисов криволинейных координат для представления тензорных компонент. Если для всех тензоров использовать общий базис криволинейной системы координат, то из-за его переменности от точки к точке пространственное дифференцирование реализуется ковариантными производными, содержащими добавочные члены с символами Кристоффеля. Уравнения становятся громоздкими и требуется аппроксимация решений повышенной гладкости (символы Кристоффеля определяются вторыми производными перемещений), что усложняет алгоритмы и затрудняет их отладку и модификации. Представление компонент тензоров первого ранга (векторов) в глобальном декартовом базисе при сохранении для компонент тензоров старших рангов представлений в локальных базисах криволинейных систем устраняет упомянутые сложности и неудобства.

В связи с потребностями расчетов сложных технологических процессов с участием твердых деформируемых, жидких и газообразных сплошных сред приходится отказываться от подхода Лагранжа к описанию движения и от использования в расчетах начальных конфигураций в пользу применения тензорных

переменных в актуальной конфигурации и произвольно подвижных адаптивных к решению координат.

Все эти черты методов рассматриваются подробно в этой и последующих главах.

## 18.1. Постановки задач упруго-пластичности

Система уравнений для расчета деформаций упруго-пластической среды в переменных Эйлера имеет вид:

вариационное уравнение движения

$$\int_V \rho \frac{dv}{dt} \cdot \delta v dV + \int_V \boldsymbol{\sigma} : \nabla \delta v dV = \int_{S_p} \mathbf{p} \cdot \delta v dS + \int_V \rho \mathbf{g} \cdot \delta v dV \quad (1a)$$

уравнение лагранжевых траекторий

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v} \quad (1b)$$

определение дисторсии  $\mathbf{F}$

$$\mathbf{F}^{-1} = \nabla \cdot \mathbf{x} \quad (1c)$$

определение тензора конечных деформаций Альманси

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\mathbf{I} - \mathbf{F}^{-T} \cdot \mathbf{F}^{-1}) / 2 \quad (1d)$$

определение средней деформации

$$\boldsymbol{\varepsilon}_m = \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{I} / 3 \quad (1e)$$

определение девиатора деформаций и, далее

$$\boldsymbol{\varepsilon}' = \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_m \mathbf{I} \quad (1f)$$

закон упругости для девиаторных составляющих тензора напряжений Коши

$$\boldsymbol{\sigma}' = 2\mu(\boldsymbol{\varepsilon}' - \boldsymbol{\varepsilon}_p') \quad (1g)$$

закон сохранения массы

$$\rho = \rho_0 \det(\mathbf{F}^{-1}) \quad (1h)$$

закон сжимаемости

$$p = p(\rho, T) \quad (1i)$$

разложение тензора напряжений Коши на шаровую и девиаторную части

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma}' \quad (1j)$$

определение тензора градиентов скоростей

$$\mathbf{L} = \nabla \mathbf{v} \quad (1k)$$

определение тензора скоростей деформаций

$$\mathbf{e} = (\mathbf{L}^T + \mathbf{L}) / 2 \quad (1l)$$

закон пластического течения

$$\mathbf{e}_p = \lambda_p \boldsymbol{\sigma}' \quad (1m)$$

коэффициент в законе пластического течения

$$\lambda_p = H(\boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}' - k_\sigma^2) H(\boldsymbol{\sigma}' : \mathbf{e}) \boldsymbol{\sigma}' : \mathbf{e} k_\sigma^{-2} \quad (1p)$$

калорическое уравнение

$$U = c_v T \quad (1n)$$

уравнение для внутренней энергии

$$\rho \frac{dU}{dt} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{e} + \nabla \cdot (\lambda_T \nabla T) + \rho r \quad (1o)$$

Обозначения традиционны. Отметим, что  $\nabla$  - оператор пространственного дифференцирования в актуальной конфигурации,  $H$  - функция Хевисайда,  $k_\sigma$  - предел текучести,  $\mu$  - модуль упругости сдвига.

При постановке начально-краевых задач система уравнений (1) дополняется начальными и граничными условиями. Начальные условия имеют вид

$$t = 0 : \mathbf{x} = \overset{\circ}{\mathbf{x}}, \mathbf{v} = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), \boldsymbol{\varepsilon}_p = \boldsymbol{\varepsilon}_p^0(\mathbf{x}), T = T_0(\mathbf{x}) \quad (2)$$

где  $\mathbf{x}, \mathbf{v}, \boldsymbol{\varepsilon}_p, T$  - минимальный набор зависимых переменных, позволяющий в любой данный момент времени определить все остальные переменные без дифференцирования по времени.

Кинематические граничные условия имеют вид

$$\mathbf{x} \in S_v \subset S : \mathbf{v} = \mathbf{v}_s(\mathbf{x}, t) \quad (3)$$

На остальной части границы заданы динамические граничные условия

$$\mathbf{x} \in S_p = S \setminus S_v : \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{P}_s(\mathbf{x}, t) \quad (4)$$

которые являются следствиями вариационных уравнений движения (1). Поэтому эти условия называются естественными граничными условиями. Подчеркнем, что эти условия уже учтены в вариационном уравнении (1).

Подвижная пространственная область решения  $V$  в общем случае состоит из нескольких, возможно разнесенных в пространстве, подобластей, представляющих взаимодействующие деформируемые тела. На части поверхности  $S_p^* \subset S_p$  заданы поверхностные нагрузки  $\mathbf{P}_s^*(\mathbf{x}, t)$ , характеризующие взаимодействие с теми внешними телами, которые в расчете не рассматриваются. На остальной, заранее

неизвестной, части поверхности  $S_c = S_p \setminus S_p^*$ , называемой поверхностью контакта, нагрузки  $P_c^*$  обусловлены взаимодействием рассматриваемых тел между собой. Эта поверхность контакта  $S_c$  определяется как множество всех точек  $\overset{o}{\mathbf{x}} \in \overset{o}{S}$  таких, что

$$\forall \overset{o}{\mathbf{x}}_+ \in \overset{o}{S}_c \exists \overset{o}{\mathbf{x}}_- \in \overset{o}{S}_c \mid \overset{o}{\mathbf{x}}_+ \neq \overset{o}{\mathbf{x}}_- \wedge \mathbf{x}(\overset{o}{\mathbf{x}}_+, t) = \mathbf{x}(\overset{o}{\mathbf{x}}_-, t)$$

Эта краткая математическая запись читается так: поверхность контакта  $S_c$  определяется как множество всех точек  $\overset{o}{\mathbf{x}} \in \overset{o}{S}$  таких, что для любой (знак  $\forall$ ) материальной точки ( $\overset{o}{\mathbf{x}}_+ \in \overset{o}{S}_c$ ) существует (знак  $\exists$ ) материальная точка ( $\overset{o}{\mathbf{x}}_- \in \overset{o}{S}_c$ ) такая, что (знак  $\mid$ ) их начальные радиус-векторы различны ( $\overset{o}{\mathbf{x}}_+ \neq \overset{o}{\mathbf{x}}_-$ ) и (знак  $\wedge$ ) их актуальные радиус-векторы совпадают ( $\mathbf{x}(\overset{o}{\mathbf{x}}_+, t) = \mathbf{x}(\overset{o}{\mathbf{x}}_-, t)$ ). Актуальные значит “в данный момент времени”.

Контактную границу можно также определить в терминах участков границы следующим образом

$$\overset{o}{S}_c = \overset{o}{S}_{c+} \cup \overset{o}{S}_{c-} \mid \overset{o}{S}_{c+} \cap \overset{o}{S}_{c-} = \emptyset \wedge S_{c+} = S_{c-}$$

Где знак  $\cup$  означает объединение множеств, знак  $\cap$  означает пересечение множеств, знак  $\emptyset$  обозначает пустое множество.

Попросту говоря, контактная граница образована теми различными материальными точками, актуальные положения которых совпадают.

Нагрузки  $\mathbf{P}$  и скорости  $\mathbf{v}$  на поверхности контакта  $\overset{o}{S}_c$  определяются условиями

$$(\mathbf{v}_- - \mathbf{v}_+) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{P}_+ = -\mathbf{P}_-, \quad (5a)$$

$$P_{\tau\alpha} = \mathbf{P}_+ \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha^+ = f(P_n, (\mathbf{v}_+ - \mathbf{v}_-) \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha^+) \quad (5b)$$

где  $\alpha = 1, 2$  - номер поверхностной координаты,  $\boldsymbol{\tau}_\alpha^+$  - базисные векторы поверхностных координат,  $\mathbf{n}^+$  - внешняя единичная нормаль к поверхности в актуальной конфигурации.

Условия (5) выражают непрерывность нормальной составляющей скорости, третий закон Ньютона о равенстве действия и проти-

водействия и закон трения, в соответствии с которым распределенные силы трения  $P_{\tau\alpha}^+$  зависят от величины нормального контактного усилия  $P_n = \mathbf{P}_+ \cdot \mathbf{n}^+$  и скачков тангенциальных скоростей. В контактных соотношениях надо принимать во внимание следующие соотношения для геометрических характеристик контактирующих граней:  $\mathbf{n}^+ = -\mathbf{n}^-$ ,  $\boldsymbol{\tau}_\alpha^+ = -\boldsymbol{\tau}_\alpha^-$ .

Задача состоит в том, чтобы в области

$$V_t = \{(\mathbf{x}, t) \mid \mathbf{x} \in V(t), t \geq 0\}$$

решить систему уравнений (1) при условиях (2)-(5).

Принятая здесь постановка задач упругопластичности является одной из множества возможных. Рассмотрим основные варианты изменения постановки задачи

## 18.2. Варианты постановок задач упругопластичности

Рассмотрим основные варианты постановок задач упругопластичности в том порядке, в каком выбор варианта обычно реализуется при решении конкретных задач.

1. Выбор способа описания движения среды. В принятой постановке задач использованы материальные временные производные, то есть производные вдоль траекторий материальных частиц. Это предполагает использование лагранжевых расчетных сеток, узлы которых движутся вместе со средой (подход Лагранжа к описанию движения сплошной среды). Можно перейти к эйлеровым временным производным с целью решения задач на эйлеровых (неподвижных) сетках (подход Эйлера), для этого надо перейти от производных по времени для материальной частицы ( $d/dt$ ) к производным по времени в фиксированной точке пространства ( $\partial/\partial t$ ) по формуле

$$d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla$$

Второе слагаемое в правой части описывает конвективную (адвективную) составляющую производной по времени, описывающую упорядоченное движение сплошной среды относительно системы координат.

В случае произвольно подвижных сеток переход к временным производным вдоль траекторий таких узлов производится по формуле

$$d/dt = \partial/\partial t + (\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \nabla$$

где  $\mathbf{w}$  - скорость произвольно подвижных узлов сетки. Дополнительные конвективные члены  $(\mathbf{u} - \mathbf{w}) \cdot \nabla$  описывают упорядоченное движение материальной среды сквозь расчетную сетку. В разные моменты времени один и тот же узел сетки может вести себя как лагранжев, как эйлеров и как произвольно движущийся.

2. Выбор независимых пространственных переменных. В качестве независимых пространственных координат в принятой постановке задач использованы актуальные (отнесенные к текущему моменту времени) координаты материальных точек

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{x}^0, t)$$

Записанный искомым закон движения материальной среды определяет отображение начальной конфигурации сплошной среды в актуальную конфигурацию. Взаимная однозначность отображения гарантируется положительностью якобиана  $J = \det(\partial x / \partial x^0) > 0$ . Основными пространственными координатами могут также служить подвижные координаты  $\tilde{\mathbf{x}}$ , которые взаимно однозначно связаны с начальными  $\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{x}}(\mathbf{x}^0, t)$  или актуальными координатами  $\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, t)$ .

3. Выбор зависимых тензорных переменных. Зависимые переменные тензорной природы определяются диадиками ( $\mathbf{A} = a^{ij} \mathfrak{E}_i \mathfrak{E}_j$  и так далее) с помощью базисных векторов,

$$\mathfrak{E}_i = \partial \bar{\mathbf{x}} / \partial \xi_i$$

определенных в какой-либо из конфигураций сплошной среды. Для этого радиус-вектор материальной точки пространства  $\bar{\mathbf{x}}$  можно связать с начальной конфигурацией  $\overset{o}{\mathbf{x}}$ , актуальной конфигурацией  $\mathbf{x}$  или произвольно-подвижной конфигурацией  $\tilde{\mathbf{x}}$ .

В механике деформируемого твердого тела нередко базисные векторы определяются в начальной конфигурации (тензор деформаций Грина, симметричный тензор напряжений Кирхгофа второго рода).

В задачах аэрогидромеханики базисные векторы определяются в актуальной конфигурации (тензор деформаций Альманси, тензор напряжений Коши). Базис актуальной конфигурации удобен при решении совместных задач о взаимодействии твердых, жидких и газообразных сред.

Случаев применения базисов произвольно-подвижной конфигурации, что принципиально возможно, в литературе не встречалось.

Заметим, что, как уже сказано выше, независимые пространственные переменные  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  в свою очередь можно связать с

начальной конфигурацией  $\xi_i = \xi_i^0(\mathbf{x})$ , актуальной конфигурацией  $\xi_i = \xi_i(\mathbf{x})$  или произвольно-подвижной конфигурацией  $\xi_i = \xi_i(\tilde{\mathbf{x}})$  и сделать их декартовыми или криволинейными.

Пространственные координаты начальной конфигурации для гидрогазодинамики пригодны только на очень малых временах, так как в отличие от структурированных твердых деформируемых сред соседство материальных точек в газах и жидкостях не сохраняется. Поэтому пространственные координаты начальной конфигурации применяются в основном в задачах механики твердых деформируемых тел (лагранжевы координаты).

Актуальные пространственные (эйлеровы) координаты широко применяются в задачах гидрогазодинамики и в задачах о взаимодействиях сред различной природы.

Пространственные координаты произвольно-подвижной конфигурации применяются все более широко в связи с развитием методов адаптивных произвольно-подвижных сеток, которые рассматриваются подробно далее.

В системе уравнений (1) движение сплошной среды рассматривается в актуальной конфигурации с использованием обычных эйлеровых тензорных зависимых переменных.

Подчеркнем, что эйлеровы зависимые переменные являются наиболее удобными, так как они давно используются и являются привычными и поскольку они применимы не только к задачам о твердых деформируемых телах, но и к задачам механики жидкости и газа. Особенно эйлеровы переменные предпочтительны в задачах с фазовыми переходами газ-жидкость-твердое тело, при которых одна и та же материальная частица может пребывать в различных агрегатных состояниях.

Кроме того, уравнения (1) записаны в эйлеровых переменных с использованием абстрактной тензорной нотации (без использования компонент тензоров, систем независимых координат и базисов). Вид уравнений в абстрактной тензорной нотации не зависит от выбора независимых пространственных переменных и базиса, а лишь от того, к какой конфигурации отнесены векторные и тензорные переменные.

Заметим, что совпадающие по виду уравнения, записанные в абстрактной тензорной нотации и в компонентной нотации, могут выражать различные математические связи.

**4. Выбор базиса для зависимых переменных.** После выбора независимых переменных остается произвол в выборе базиса для различных групп зависимых тензорных переменных.

В первом варианте выбора можно определить все зависимые переменные (перемещения, скорости, деформации, напряжения и

так далее) в едином для всех переменных локальном базисе некоторой используемой криволинейной системы координат.

Во втором варианте выбора можно компоненты тензоров второго ранга и выше определить в локальном базисе криволинейной системы, а компоненты векторов (тензоров первого ранга) определить в глобальном декартовом базисе.

Разницу между вариантами выбора поясним на примере уравнений теории оболочек.

В большинстве теорий оболочек уравнения формулируются в криволинейных системах координат, связанных с геометрией оболочек. Геометрия оболочек может быть весьма сложной, так что это криволинейные системы координат общего вида. Криволинейные координаты, связанные с геометрией оболочки позволяют использовать упрощенное представление зависимых переменных трехмерной теории деформирования в направлении нормали к поверхности оболочки и, тем самым, совершить редукцию (упрощение) уравнений по координате, направленной вдоль нормали. Так совершается переход от трехмерных уравнений теории упругопластичности к двумерным уравнениям теории оболочек.

Платой за такой переход является использование зависимых переменных (перемещений, скоростей, тензоров деформаций и напряжений) в виде компонент, являющихся проекциями тензоров на локальный базис криволинейной системы координат.

Поскольку локальный базис меняется от точки к точке, то уравнения теории оболочек содержат пространственные ковариантные производные, содержащие дополнительные слагаемые с символами Кристоффеля. Уравнения получаются сложными и предъявляют повышенные требования к дифференцируемости решений, поскольку при вычислении символов Кристоффеля требуется вычисление производных второго порядка от перемещений.

Однако указанного усложнения можно избежать. Известны варианты теории оболочек, в которых необходимость ковариантного дифференцирования исключается, а уравнения теории значительно упрощаются. Это достигается тем, что для деформаций и напряжений используется локальный базис криволинейной системы координат, а перемещения и скорости проектируются на глобальный (неизменный в пространстве) базис декартовой системы координат трехмерного пространства, содержащего оболочку. Примером может служить известная нелинейная теория непологих оболочек (Рейсснер, 1947).

Другим примером может служить задача управления произвольно подвижными адаптивными сетками. Критерии управления удобно формулировать с использованием мер деформации сеток в локальных базисах, связанных с переменной формой и размером

ячеек сетки. Уравнения управления сеток значительно упрощаются, если при этом перемещения и скорости узлов сеток проектируются на неизменный во времени и пространстве базис декартовой системы координат. Это будет подробно рассмотрено далее в главе про сетки.

5. Вывод из обзора формулировок. Из приведенного описания видно, что существует большое разнообразие возможных постановок задач упругопластичности и задач механики сплошных сред вообще. Надо понимать, что при аккуратной записи все варианты постановок на уровне интегро-дифференциальных уравнений математически эквивалентны и переходят одна в другую с помощью взаимно однозначных замен переменных. Однако разные варианты постановок задачи приводят к неэквивалентным дискретным моделям. Неудачный с самого начала выбор формулировки задачи может создать абсолютно ненужные сложности в численных решениях, ухудшить их точность и катастрофически увеличить затраты времени и труда на их разработку, реализацию и применение.

6. Объективные временные тензорные производные. Отметим, что в задачах упругопластичности имеется дополнительный произвол в формулировке законов пластического течения, связанный с выбором объективных тензорных временных производных. Вопрос этот подробно рассматривается в трактатах по нелинейной континуальной механике, но так и не имеет однозначного разрешения. Подробности можно найти в книгах (Астрарита, Маруччи, 1979; Коларов, Балтов, Бончева, 1980). Тем не менее, если в одном из вариантов постановки задач такой выбор сделан, то эквивалентные постановки задач в других переменных получаются путем аккуратной замены переменных.

7. Наиболее правильные тензорные переменные. В 20-м веке делались многочисленные попытки введения “наиболее правильных” тензорных переменных для процессов в сплошной среде. Однако, этот выбор субъективен и не имеет шансов на однозначное разрешение. Все возможные наборы зависимых переменных для определенной теории в механике сплошных сред обязаны быть взаимно однозначно связанными между собой. Так что выбор переменных это скорее просто вопрос удобства их применения.

При решении задач взаимодействия твердых, жидких и газообразных сред нежелательно использование тензоров, определяемых в базисах начальной конфигурации. Такие базисы для жидких и газообразных сред ввести и использовать невозможно, поскольку это неструктурированные среды и соседство материальных точек в них не сохраняется во времени. Поэтому такой выбор создаст ненужные осложнения при рассмотрении задач для многофазных сред.

8. Выбор формулировки задач упругопластичности. По указанным выше причинам описываемая здесь постановка общей задачи упругопластичности находится в согласии с формулировками задач в гидрогазодинамике. Отличие принятой формулировки задач для твердых тел от формулировки задач гидрогазодинамики состоит только в появлении дополнительных зависимых переменных.

Дополнительно для упругопластических сред определяются перемещения, упругие и пластические деформации, консервативные (упругие) напряжения. Далее по мере расширения постановок задач на процессы упрочнения, разрушения и консолидации в число зависимых переменных будут включены пластическая работа, повреждаемость, пористость. Подчеркнем, что все векторные и тензорные величины отнесены к актуальной конфигурации.

9. Переход к компонентной записи уравнений. Итак, при решении задач сначала конкретизируются независимые пространственные переменные и базисные векторы. Затем диадные представления зависимых переменных подставляются в уравнения. Наконец, скалярным умножением уравнений на базисные векторы осуществляется переход к компонентной форме уравнений.

10. Абстрактная тензорная нотация. Описание используемой здесь абстрактной тензорной нотации дается в курсах тензорного анализа и механики сплошных сред. Основные формулы абстрактной тензорной нотации и выражения основных операторов в декартовых, цилиндрических и сферических координатах приведены в приложении.

Сделанные замечания по постановкам задач упругопластичности полезно иметь в виду при подробном изучении нелинейной механики сплошных сред (МСС). Знакомство с МСС необходимо для понимания особенностей излагаемых численных алгоритмов.

11. Типы математических формулировок задач МСС. К разнообразию отмеченных формулировок исходной начально-краевой задачи следует добавить еще и возможности различной математической формулировки основных уравнений, а именно, уравнения можно формулировать:

- 1) в вариационной форме (как это принято здесь для уравнений движения), возможно, в различных вариантах в соответствии с различными вариационными принципами;
- 2) в интегральной форме законов сохранения;
- 3) в интегральной форме методов граничных интегральных уравнений;
- 4) в дифференциальной форме;
- 5) в форме уравнений для представляющего сплошную среду множества дискретных материальных элементов (например, частиц), получаемых напрямую с учетом законов сохранения массы, импульса, энергии и законов взаимодействия упомянутых элементов, минуя стадию интегро-дифференциальных уравнений.

Так что простор для развития и приложения различных подходов является воистину необъятным.

### 18.3. Пространственные КЭ аппроксимации

Намереваясь реализовать вариант метода конечных элементов (МКЭ), в области  $V$  введем сетку элементов (ячеек), состоящую: из тетраэдров, призм или параллелепипедов в трехмерном случае; из треугольников и четырехугольников в двумерном случае; из отрезков в одномерном случае.

Пусть  $\mathbf{x}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N_V$ ) – координаты узлов. Здесь ясное число  $N_V$  обозначает число узлов.

Целый массив  $C(k, l)$ , ( $k = 1, 2, \dots, N_C; l = 1, 2, \dots, M_C$ ) содержит номера узлов в элементах.  $N_C$  обозначает число ячеек.  $M_C$  обозначает число узлов в ячейке.

Целый массив  $B(k, l)$ , ( $k = 1, 2, \dots, N_B; l = 1, 2, \dots, M_B$ ) содержит номера узлов в граничных ячейках,  $N_B$  – число граничных ячеек;  $M_B$  – число узлов в граничной ячейке.

На временном слое  $n$  введем зависимые переменные в узлах: скорости  $\mathbf{v}_i^n$  и координаты узлов  $\mathbf{x}_i^n$ .

Введем зависимые переменные в центрах ячеек: деформации  $\boldsymbol{\epsilon}_k^n$ , пластические деформации  $\boldsymbol{\epsilon}_{pk}^n$ , напряжения  $\boldsymbol{\sigma}_k^n$ , пластическую работу  $\alpha_{pk}^n$  и внутреннюю энергию  $U_k^n$ .

Обозначим через  $\Omega$  множество номеров узлов сетки, через  $\Omega_V$  множество номеров граничных узлов, в которых заданы кинематические условия (скорости или перемещения), через  $\Omega_E$  множество номеров элементов (ячеек) сетки.

Здесь и далее используются нижние буквенные индексы, которые имеют следующий смысл: "C" – cell (ячейка), "V" – vertex (узел), "B" – boundary (граница), "E" – element (элемент).

Используем обычную полилинейную аппроксимацию координат перемещений и скоростей на сетке конечных элементов (см. главу про интерполяцию).

Остальные переменные (напряжения, деформации, ...) аппроксимируем кусочно постоянными функциями со значениями в центрах элементов.

Интегралы с производными по времени от скоростей в вариационных уравнениях (1) вычислим с помощью квадратурных формул трапеций с точками интегрирования в узлах сетки.

Остальные объемные и поверхностные интегралы вычислим по формулам прямоугольников с точками интегрирования в центрах элементов (ячеек).

## 18.4. Явные лагранжевы схемы

Рассматривая ниже явная лагранжева схема в основном соответствует известной и знаменитой явной схеме Уилкинса (1967). В соответствии с этой схемой каждый шаг по времени рассчитывается в три этапа.

На первом этапе материал считается упругим, по центрально-разностной явной двухслойной схеме определяются новые скорости и координаты узлов на (n+1)-слое. Здесь схеме дана конечно-элементная трактовка.

На втором этапе учитывается влияние контактных взаимодействий на скорости и координаты узлов.

На третьем этапе в соответствии с уравнениями теории пластичности определяются напряжения, пластические деформации и внутренняя энергия.

### 18.4.1. Первый этап

Соотношения первого этапа имеют вид:

$$M_i(\mathbf{v}_i^{n+1} - \gamma_i^n \mathbf{v}_i^n - (1 - \gamma_i^n) \tilde{\mathbf{v}}_i^n) = \mathbf{F}_i^n \Delta t_n \quad (i \in \Omega \setminus \Omega_V) \quad (6)$$

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_{*i}^{n+1}, \quad (i \in \Omega_V) \quad (7)$$

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \mathbf{v}_i^{n+1} \Delta t_n, \quad (i \in \Omega) \quad (8)$$

где

$$M_i = \sum_{k=1}^{N_C} \sum_{l=1}^{M_C} V_k^0 [\rho]_k^0 M_C^{-1} \tilde{H}(i - C(k, l)), \quad (i \in \Omega) \quad (9)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_i^n = 0.5(\max_{j \in \Omega_i} \mathbf{v}_j^n + \min_{j \in \Omega_i} \mathbf{v}_j^n) \quad (i \in \Omega) \quad (10)$$

$$\gamma_j^n = \min(1, a_1 + a_2 |\tilde{\mathbf{v}}_j^n - \mathbf{v}_j^n|) \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i^n = & \sum_{k=1}^{N_C} \sum_{l=1}^{M_C} [V]_k^n [\boldsymbol{\sigma}]_k^n \cdot \nabla_{kl} \tilde{H}(i - C(k, l)) + \\ & + \sum_{k=1}^{N_B} \sum_{l=1}^{M_B} M_B^{-1} [\mathbf{P}]_k^n S_k^n \tilde{H}(i - B(k, l)) \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь (9) – формула для определения "узловых масс"  $M_i$ , (10) – формула для осреднения скорости узла  $i$  по шаблону, (11) – формула

для коэффициента гибридности, (12) – формула для определения "узловых сил".

Поясним приведенные расчетные формулы. Знаки сумм соответствуют циклам в программе для ЭВМ. В формуле (9) вычисляется масса каждой ячейки номер  $k$  делится поровну между приузловыми объемами и полученные вклады разносятся по этим приузловым объемам. Множитель  $\tilde{H}(i - C(k, l))$  равен единице, если аргумент нуль и равен нулю в противном случае. Он указывает, что доля от массы ячейки  $k$  должна быть добавлена в приузловую массу с локальным номером  $l$  и глобальным номером  $C(k, l)$ . После прохода по всем элементам массив  $\{M_i\}_{i \in \Omega}$  будет содержать приузловые массы.

Аналогично устроена формула (12) для подсчета "узловых сил": в центре объемной ячейки вычисляется напряжение, умножается на объем ячейки и на коэффициент дифференцирования, получается порция импульса передаваемая приузловой массе с глобальным номером  $C(k, l)$ , соответствующем локальному номеру этого узла  $l$  в ячейке  $k$ .

В центре поверхностной ячейки поверхностная интенсивность внешней силы умножается на площадь ячейки и делится поровну между приузловыми массами ячейки  $M_B^{-1}[\mathbf{P}]_k^n S_k^n$ , получается порция внешнего импульса, передаваемая приузловой массе с глобальным номером  $B(k, l)$ , соответствующем локальному номеру этого узла  $l$  в поверхностной ячейке  $k$ . Множитель  $\tilde{H}(i - C(k, l))$  как и раньше указывает адрес рассылки вкладов в импульсы по узлам сетки.

Поясним формулу для коэффициента гибридности. Модуль разности  $|\tilde{\mathbf{v}}_j^n - \mathbf{v}_j^n|$  пропорционален второй производной от скоростей по пространственным переменным в окрестности узла  $i$ , коэффициенты  $a_1$  и  $a_2$  принимались равными  $a_1 = v_s / c$  и  $a_2 = (0.2v_s)^{-1}$ , где  $v_s = \max_{i \in \Omega} |\mathbf{v}_i^n| - \min_{i \in \Omega} |\mathbf{v}_i^n|$  - диапазон изменения модуля скорости в области решения,  $c = \sqrt{dp / d\rho + 4/3\mu / \rho}$  - скорость звука.

В соответствии с формулой (11) сглаживание производится в узлах с сильным отклонением вычисленного значения скорости от среднего по шаблону значения.

Поясним значения новых величин в формулах (6)-(12):  $[S]_k^n$  - площадь граничного элемента  $k$ , определяемого узлами  $B(k, l)$ ,  $[V]_k^n$  - объем  $k$ -й ячейки в актуальной конфигурации. Векторы  $\nabla_{kl}^n$

представляют дискретный оператор пространственного дифференцирования в актуальной конфигурации. Величины  $M_i$  обозначают приузловые массы, вычисляемые один раз перед началом расчета;  $[V]_k^0$  - начальный объем элемента (ячейки);  $M_C$  - число узлов в элементе;  $N_C$  - число элементов; функция  $\tilde{H}$  равна единице для нулевого значения аргумента и нулю в противном случае, она указывает адрес рассылки вкладов от массы элемента в приузловые массы. Множество номеров узлов соседей узла  $i$  (шаблон узла  $i$ ) обозначено  $\Omega_i$ .

#### 18.4.2. Второй этап

На втором этапе сначала определяется зона контакта. Для этого исследуется положение каждого граничного узла по отношению к каждой граничной ячейке. Пара граничный узел – граничная ячейка образует кандидат в контактные элементы. По знаку его объема устанавливается положение узла (снаружи-внутри) по отношению к граничной ячейке. Если по результатам первого этапа расчета граничный узел проник сквозь граничную ячейку внутрь деформируемого тела, то это явилось следствием того, что в расчете не были приняты во внимание контактные силы. Кандидат становится контактным элементом (контактной парой). Контактные силы определяются так, чтобы при учете их влияния на скорость и положение данного узла и граничной ячейки устранить обнаруженное счетное проникание.

Определение зоны контакта состоит в определении множества контактных пар  $k \in \Omega_{cont}$ . Имеются в виду пары "граничный узел ( $C(k,0)$ ) – граничная ячейка ( $C(k,1), C(k,2), C(k,3)$ )", где  $C(k,i)$  – номера узлов в контактных парах. Алгоритм поиска контактных пар в упрощенной форме имеет вид:

“цикл по граничным узлам

цикл по плоским граничным ячейкам

- если номер узла совпадает с номером узла в ячейке, то контакта (узла с ячейкой) нет, идти на метку1;

- если узел находится от центра ячейки далее чем характерный размер ячейки по одной из осей координат, то контакта нет, идти на метку1;

- если объем пространственной ячейки образованный граничным узлом и граничной ячейкой больше нуля, то контакта нет, идти на метку1;

- если нормаль, опущенная из узла на плоскость граничной ячейки, не пересекает ячейку, то контакта нет, идти на метку1;

- граничный узел и граничная ячейка образуют контактную пару.

Метка1: конец цикла по граничным ячейкам  
конец цикла по граничным узлам”

Расчет контакта. Нелинейная система уравнений для определения скоростей, координат и нормальных контактных усилий имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{C(k,i)}^{n+1} &= \mathbf{v}_{0C(k,i)}^{n+1} + \mathbf{F}_{kC}^{n+1} L_i^{(k)} / M_{C(k,i)} \Delta t_n \quad (k \in \Omega_{cont}; i = 0, 1, 2, 3) \\ \mathbf{x}_{C(k,i)}^{n+1} &= \mathbf{x}_{C(k,i)}^n + \mathbf{v}_{C(k,i)}^{n+1} \Delta t_n \quad (k \in \Omega_{cont}; i = 0, 1, 2, 3) \\ [(\mathbf{x}_{C(k,2)}^{n+1} - \mathbf{x}_{C(k,1)}^{n+1}) \times (\mathbf{x}_{C(k,3)}^{n+1} - \mathbf{x}_{C(k,1)}^{n+1})] \cdot (\mathbf{x}_{C(k,0)}^{n+1} - \mathbf{x}_{C(k,1)}^{n+1}) &= 0 \quad (k \in \Omega_{cont}) \end{aligned}$$

где контактное усилие представлено нормальными и касательными к границе составляющими

$$\mathbf{F}_{kC}^{n+1} = F_{kN}^{n+1} \mathbf{n}_k^{n+1} + F_{kT1}^{n+1} \boldsymbol{\tau}_{k1}^{n+1} + F_{kT2}^{n+1} \boldsymbol{\tau}_{k2}^{n+1}$$

Усилия контактного трения  $F_{kT1}^{n+1}$  и  $F_{kT2}^{n+1}$  определяются скачком касательной скорости и контактным давлением по закону трения, а контактное давление  $F_{kN}^{n+1}$  определяется из условия непроникания (из равенства нулю объема контактного элемента).

В алгоритме решения совершается обход контактной границы и условие непроникания линеаризуется по неизвестным нормальным контактным усилиям с учетом малости контактных поправок координат узлов по сравнению со значениями самих координат. Условие непроникания разрешается по очереди для каждого контактного элемента. Таким образом, используются итерации Гаусса-Зейделя вместе с методом Ньютона. Соответствующие найденным контактным усилиям поправки вносятся тут же в величины координат и скоростей контактных узлов. Итерирование контактных усилий оканчивается при устранении счетного проникания. В явных схемах для этого достаточно двух обходов контактной границы.

#### 18.4.3. Третий этап

На третьем этапе в каждой ячейке к области решения определяются новые скорости деформаций, напряжения, пластическая работа и внутренняя энергия:

$$[\mathbf{L}]_k^{n+1} = \sum_{l=1}^{M_C} \nabla_{kl}^n \mathbf{v}_{C(k,l)}^{n+1}, \quad [\mathbf{e}]_k^{n+1} = 0.5([\mathbf{L}]_k^{n+1} + [\mathbf{L}^T]_k^{n+1}) \quad (13a)$$

$$[\mathbf{e}_m]_k^{n+1} = [\mathbf{e}]_k^{n+1} : \mathbf{I} / 3, \quad [\mathbf{e}']_k^{n+1} = [\mathbf{e}]_k^{n+1} - [\mathbf{e}_m]_k^{n+1} \mathbf{I} \quad (13b)$$

$$[\tilde{\boldsymbol{\sigma}}]_k^{n+1} = [\boldsymbol{\sigma}]_k^n + 2\mu[\mathbf{e}]_k^{n+1} \Delta t_n, \quad [\boldsymbol{\sigma}]_k^{n+1} = [\tilde{\boldsymbol{\sigma}}]_k^{n+1} \alpha_k^{n+1} \quad (13c)$$

$$\alpha_k^{n+1} = \sigma_s / \sqrt{[\tilde{\boldsymbol{\sigma}}]_k^{n+1} : [\tilde{\boldsymbol{\sigma}}]_k^{n+1}}, \quad [a_p]_k^{n+1} = [a_p]_k^n + \sigma_s (1 - \alpha_k^{n+1}) \alpha_k^{n+1} \quad (13d)$$

$$[U]_k^{n+1} = [U]_k^n + [\boldsymbol{\sigma}]_k^{n+1} : [\mathbf{L}]_k^{n+1} \Delta t_n / [\rho]_k^n \quad (k \in \Omega_C) \quad (13e)$$

Расчет по формулам (13) напряжений, пластических деформаций и пластической работы был предложен Уилкинсом (1967) и известен как алгоритм “посадки напряжений на круг текучести”.

Метод Уилкинса устойчив при выполнении критерия Куранта

$$\Delta t_n = \min_{k \in \Omega_C} \left( \frac{1}{c_k^n \max_l (|\nabla_{kl}^n \cdot \mathbf{e}_1|, |\nabla_{kl}^n \cdot \mathbf{e}_2|)} \right) \quad (14)$$

и условия точности, выражающего требование достаточной малости приращений деформации

$$\Delta t_n \leq \Delta \varepsilon_{\max} \left( \max_{k \in \Omega_C} ([\mathbf{e}]_k^n : [\mathbf{e}]_k^n)^{1/2} \right)^{-1} \quad (15)$$

где  $\Delta \varepsilon_{\max} = 0.1 \varepsilon_Y$  - максимально допустимое приращение деформации на шаге по времени,  $\varepsilon_Y$  - деформация, отвечающая пределу текучести.

В оригинальной схеме Уилкинса для устранения мелкомасштабных осцилляций решения используется явная искусственная вязкость в виде вязкостного давления. Эта вязкость требует подбора коэффициентов в зависимости от решаемой задачи. Поэтому здесь она заменена не требующим регулировки нелинейным лапсовым сглаживанием.

В оригинальной схеме Уилкинса дискретизированные уравнения движения получены исходя из интегральной формулировки уравнений сохранения импульса и внутренней энергии интегро-интерполяционным методом (методом контрольных объемов). Результирующие уравнения практически совпадают с уравнениями, приведенными здесь. Отличается только порядок вычислений. Можно сказать, что здесь контрольными объемами являются приузловые объемы и обход производится непосредственно по границам контрольных объемов, расположенным внутри конечных элементов. При этом каждый пункт обмена потоками между контрольными объемами (центры элементов) обчисляется один раз. В схеме кон-

трольных объемов обход совершается по шаблонам узлов, расположенных в центрах контрольных объемов.

## 18.5. Варианты явных лагранжевых схем

### 18.5.1. Схема квазивторого порядка точности

В качестве варианта рассмотренной схемы приведем схему квазивторого порядка точности. Для гиперболического уравнения переноса она описана в книге Поттера (1975). Она отличается от схемы Уилкинса расчетом первого этапа, который в этом случае имеет вид:

$$M_i(\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_i^n) = ((1 + \gamma)\mathbf{F}_i^n - \gamma\mathbf{F}_i^{n-1})\Delta t_n \quad (i \in \Omega \setminus \Omega_V) \quad (16a)$$

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_{*i}^{n+1}, \quad (i \in \Omega_V) \quad (16b)$$

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \mathbf{v}_i^{n+1}\Delta t_n, \quad (i \in \Omega) \quad (16c)$$

где  $0.0 < \gamma \leq 1.0$  - малое положительное число. Аналогом этой схемы интегрирования по времени для случая задач Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений является схема Адамса-Башфорта (трехслойная схема). Условия устойчивости для этой схемы, как показывает анализ Фурье для модельной задачи с уравнением переноса, требуют вдвое меньшего шага по времени, нежели условия Куранта (13). Достоинством схемы является простота управления вязкостью, осуществляемая единственным параметром  $\gamma$ . При этом не надо изменять вид вязких членов и значения коэффициентов искусственной вязкости в зависимости от условий задачи. Дополнительно требуется держать в памяти ЭВМ вектор узловых сил со старого слоя  $\mathbf{F}_i^{n-1}$ . На первом шаге по времени ( $n=0$ ) полагают  $\mathbf{F}_i^{-1} = \mathbf{F}_i^0$ . Для коэффициента  $\gamma = 0.5$  схема имеет второй порядок точности.

### 18.5.1. Полностью консервативная схема Самарского-Попова

Другим примером видоизменения явной лагранжевой схемы Уилкинса является полностью консервативная явная схема, предложенная Самарским и Поповым (1980) применительно к задачам лагранжевой газовой динамики и выведенная для расчета упругопластических сред Тишкиным (1984) из вариационного принципа наименьшего действия Гамильтона. В наших обозначениях она может быть записана в следующем виде:

$$M_i(\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_i^n) = \mathbf{F}_i^n \Delta t_n \quad (i \in \Omega \setminus \Omega_V) \quad (17a)$$

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_{*i}^{n+1}, \quad (i \in \Omega_V) \quad (17b)$$

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \mathbf{v}_i^{n+1/2} \Delta t_n, \quad (i \in \Omega) \quad (17c)$$

$$k \in \Omega_C:$$

$$[\tilde{\sigma}]_k^{n+1} = [\sigma]_k^n + 2\mu[\mathbf{e}]_k^{n+1/2} \Delta t_n, \quad [\sigma]_k^{n+1} = [\tilde{\sigma}]_k^{n+1} \alpha_k^{n+1} \quad (17d)$$

$$\alpha_k^{n+1} = \sigma_s / \sqrt{[\tilde{\sigma}]_k^{n+1} : [\tilde{\sigma}]_k^{n+1}}, \quad (17e)$$

$$[a_p]_k^{n+1} = [a_p]_k^n + \sigma_s (1 - \alpha_k^{n+1}) \alpha_k^{n+1} \quad (17f)$$

$$[U]_k^{n+1} = [U]_k^n + [\sigma]_k^{n+1/2} : [\mathbf{L}]_k^{n+1/2} \Delta t_n / [\rho]_k^n \quad (17g)$$

где дробный верхний индекс подразумевает следующее действие

$$[f]^{n+1/2} = ([f]^{n+1} + [f]^n) / 2 \quad (18)$$

Для устойчивости в схеме используется малая искусственная вязкость в виде тензора вязких напряжений:

$$[\sigma_v]_k^n = -\mathbf{I}[p_v]_k^n + [\sigma'_v]_k^n, \quad [p_v]_k^n = -K[\nabla \cdot \mathbf{v}]_k^n \Delta t_n / 2 \quad (19a)$$

$$[\sigma'_v]_k^n = 2\mu[\mathbf{e}'_v]_k^n \Delta t_n / 2 \quad (19b)$$

Устойчивость схемы при наличии вязких членов легко устанавливается из анализа первого дифференциального приближения, который и подсказывает вид выражений (19).

Отметим, что при больших скоростях удара в схемы (15),(16) на ударных волнах для устранения осцилляций приходится вводить лаково сглаживание (см. формулы (6)-(11)).

## 18.6. Неявные лагранжевы схемы

Простейшая неявная схема для задач упругопластичности, основанная на квазилинеаризации исходных нелинейных уравнений и использующая на каждом шаге по времени одну итерацию по методу Ньютона, имеет вид (обозначения, принятые для явных схем, здесь сохраняются):

$$M_i(\mathbf{v}_i^{n+1} - \mathbf{v}_i^n) / \Delta t_n = (\mathbf{F}_i^n + [\mathbf{F}_t]_i^{n+1} \Delta t_n) \quad (i \in \Omega \setminus \Omega_V) \quad (20a)$$

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_{*i}^{n+1}, \quad (i \in \Omega_V) \quad (20b)$$

$$[\boldsymbol{\varepsilon}_p]_k^{n+1} = [\boldsymbol{\varepsilon}_p]_k^n + (\lambda_k^{n+1} [\boldsymbol{\sigma}_k^n] - [\boldsymbol{\varepsilon}_p]_k^n \cdot [\mathbf{L}]_k^{n+1} - [\mathbf{L}^T]_k^{n+1} \cdot [\boldsymbol{\varepsilon}_p]_k^n) \Delta t_n \quad (k \in \Omega_C) \quad (20c)$$

$$[U]_k^{n+1} = [U]_k^n + [\boldsymbol{\sigma}_k^n : [\mathbf{L}]_k^{n+1} \Delta t_n / [\rho]_k^n \quad (k \in \Omega_C) \quad (20d)$$

$$[a_p]_k^{n+1} = [a_p]_k^n + [\lambda]_k^{n+1} [\boldsymbol{\sigma}_k^n : [\boldsymbol{\sigma}_k^n] \Delta t_n, \quad (k \in \Omega_C) \quad (20e)$$

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \mathbf{v}_i^{n+1} \Delta t_n, \quad (i \in \Omega) \quad (20f)$$

где

$$[\mathbf{L}]_k^{n+1} = \sum_{l=1}^{M_C} \nabla_{kl}^n \mathbf{v}_C^{n+1}$$

$$\lambda_k^{n+1} = H([\boldsymbol{\sigma}_k^n : [\boldsymbol{\sigma}_k^n] - [k_p^2]_k^n) H([\boldsymbol{\sigma}_k^n : [\mathbf{L}]_k^n) [\boldsymbol{\sigma}_k^n : [\mathbf{L}]_k^{n+1} [k_p^{-2}]_k^n$$

$$[\mathbf{F}_t]_i^{n+1} = \sum_{k=1}^{N_C} \sum_{l=1}^{M_C} [\mathbf{g}_C]_{kl}^{n+1} \tilde{H}(i - C(k, l)) + \sum_{k=1}^{N_B} \sum_{l=1}^{M_B} [\mathbf{g}_B]_{kl}^{n+1} \tilde{H}(i - B(k, l))$$

$$[\mathbf{g}_C]_{kl}^{n+1} = \Delta t_n [V]_k^n [\boldsymbol{\sigma}_v]_k^{n+1} \cdot \nabla_{kl}^n$$

Схема (20) имеет почти второй порядок точности и безусловно устойчива. Шаг по времени, тем не менее, ограничен условием точности

$$\Delta t_n \leq \Delta \varepsilon_{\max} \left( \max_{k \in \Omega_C} ([\mathbf{e}]_k^n : [\mathbf{e}]_k^n)^{1/2} \right)^{-1} \quad (21)$$

где  $\Delta \varepsilon_{\max}$  - максимально допустимое приращение деформации на шаге по времени. В практических расчетах можно принять  $\Delta \varepsilon_{\max} = 0.1 \varepsilon_Y$ , где  $\varepsilon_Y$  - деформация, отвечающая пределу текучести.

Порядок вычислений по схеме (20) почти таков же, как и для явных схем. В случае невной схемы приращения координат  $\Delta \mathbf{x}_i^{n+1}$  (или скорости  $\mathbf{v}_i^{n+1} = \Delta \mathbf{x}_i^{n+1} / \Delta t_n$ ) определяются из решения вспомогательной линеаризованной краевой задачи, которая в соответствии с принятыми аппроксимациями представлена *системой линейных алгебраических уравнений* (СЛАУ):

$$M_i \frac{1}{\Delta t_n} \left( \frac{\Delta \mathbf{x}_i^{n+1}}{\Delta t_n} - \mathbf{v}_i^n \right) = \mathbf{F}_i^n + [\mathbf{F}_t]_i^{n+1} \Delta t_n / 2, \quad (i \in \Omega \setminus \Omega_V) \quad (22)$$

$$\Delta \mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^{n+1} \Delta t_n \quad (i \in \Omega_V) \quad (23)$$

где приращения узловых сил  $[\mathbf{F}_i]_i^{n+1} \Delta t_n$ , как видно из формул (20)-(23), являются линейными функциями приращений координат  $\Delta \mathbf{x}_i^{n+1}$ .

Разрешающая система уравнений (22)-(23) может быть записана кратко в стандартной форме

$$A\mathbf{y} = \mathbf{b} \quad (24)$$

где  $\mathbf{y} = \{\Delta \mathbf{x}_i^{n+1}\}_{i=1}^{N_V}$ ,  $A$  - матрица "жесткости",  $\mathbf{b}$  - известный вектор правых частей. Число неизвестных равно числу узловых компонентов перемещений или скоростей  $mN_V$ , где  $m$  - пространственная размерность исходной задачи. Традиционный МКЭ подразумевает явное формирование СЛАУ (24), а именно определение матрицы СЛАУ ("конденсация матрицы жесткости") с последующей борьбой с известными проблемами минимизации памяти, требуемой для хранения этой матрицы, оптимизации ее заполнения с целью получения ленточной структуры матрицы путем оптимальной перенумерации узлов сетки, далее следуют проблемы построения алгоритма обращения матрицы, оптимизации обменов с внешней памятью и так далее. Все эти проблемы исчезают при безматричном способе решения.

## 18.7. Безматричная реализация неявных схем

Рассмотрим безматричный способ решения задачи (22)-(23) (Бурого, Кукуджанов, 1988). Матрицу жесткости  $A$  специально формировать и запоминать не потребуется, если воспользоваться каким-либо итерационным методом решения, использующим невязки уравнений (24):

$$\mathbf{g} = A\mathbf{y} - \mathbf{b} = \left[ M_i \frac{1}{\Delta t_n} \left( \frac{\Delta x_i^{n+1}}{\Delta t_n} - \mathbf{v}_i^n \right) - \mathbf{F}_i^n - [\mathbf{F}_i]_i^{n+1} \Delta t_n / 2 \right]_{i=1}^{N_V} \quad (25)$$

Действительно, вычисление невязок  $\mathbf{g}(\mathbf{y})$  для любого заданного приближенного решения  $\mathbf{y}$  можно выполнить напрямую без матриц. Пусть вектор приближенного решения  $\mathbf{y} = \{\Delta \mathbf{x}_i^{n+1}\}_{i=1}^{N_V}$  задан. Тогда в каждой ячейке (элементе) с номером  $k = 1, 2, \dots, N_C$  по формулам (19) - (20) последовательно вычисляем величины:  $\mathbf{L}_k^{n+1}$ ,  $\lambda_k^{n+1}$ , ...,  $\mathbf{F}_k^n$ ,

$[F_t]_k^{n+1}$  и заносим вклады от каждой ячейки в вектор невязки в соответствии с соотношениями (25).

Столь же просто и безматрично при обходе ячеек определяется и однородная часть невязки  $\tilde{\mathbf{g}}(\mathbf{y}) = A\mathbf{y}$  :

$$\tilde{\mathbf{g}} = A\mathbf{y} = \left[ M_i \frac{1}{\Delta t_n} \left( \frac{\Delta x_i^{n+1}}{\Delta t_n} \right) - [F_t]_i^{n+1} \Delta t_n / 2 \right]_{i=1}^{N_f} \quad (26)$$

С помощью невязок итерационные методы последовательно от итерации к итерации уточняют приближенные решения. Ясно, что среди множества итерационных методов желательно выбрать наиболее эффективный и простой в реализации. На наш взгляд таким методом является метод сопряженных градиентов (см. Хестенес, Штифель, 1952). Этот итерационный алгоритм стартует с некоторого начального приближения  $\mathbf{y}_0$  к искомому решению  $\mathbf{y}$  :

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_0 &= A\mathbf{y}_0 - \mathbf{b} \\ \mathbf{p}_0 &= \mathbf{g}_0 \end{aligned} \quad (27)$$

и далее подразумевает следующие вычисления для итераций  $s = 1, 2, \dots$  :

$$\begin{aligned} \alpha_s &= (\mathbf{g}_{s-1} \cdot \mathbf{g}_{s-1}) / (A\mathbf{p}_{s-1} \cdot \mathbf{p}_{s-1}) \\ \mathbf{y}_s &= \mathbf{y}_{s-1} - \alpha_s \mathbf{p}_{s-1} \\ \mathbf{g}_s &= \mathbf{g}_{s-1} - \alpha_s A\mathbf{p}_{s-1} \\ \beta_s &= (\mathbf{g}_s \cdot \mathbf{g}_s) / (\mathbf{g}_{s-1} \cdot \mathbf{g}_{s-1}) \\ \mathbf{p}_s &= \mathbf{g}_s - \beta_s \mathbf{p}_{s-1} \end{aligned} \quad (28)$$

где  $\mathbf{g}_s$  и  $\mathbf{p}_s$  - векторы градиента и сопряженного "направления поиска". Метод сопряженных градиентов вырабатывает базисные векторы  $\mathbf{p}_s$ ,  $s = 1, 2, \dots$  в конечномерном арифметическом пространстве векторов  $\mathbf{y}$ . При точной реализации арифметических операций число итераций, необходимых для отыскания решения, не превышает числа искомых компонент вектора  $\mathbf{y}$ .

Из-за ограниченной точности представления чисел в компьютерах для плохо обусловленных систем уравнений сходимость итерационного процесса (27) - (28) может быть нарушена. Чтобы этого не произошло, для улучшения обусловленности применяется продобусловливание путем домножения системы уравнений (в данном случае, домножения невязок) на приближенную обратную матрицу

$B^{-1} \approx A^{-1}$ . Обобщенный таким образом метод сопряженных градиентов имеет следующий вид:  
для  $s = 0$  полагается

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_0 &= A\mathbf{y}_0 - \mathbf{b} \\ \mathbf{h}_0 &= B^{-1}\mathbf{g}_0 \\ \mathbf{p}_0 &= \mathbf{h}_0 \end{aligned} \quad (29)$$

для  $s = 1, 2, \dots$  имеем

$$\begin{aligned} \alpha_s &= (\mathbf{g}_{s-1} \cdot \mathbf{h}_{s-1}) / (A\mathbf{p}_{s-1} \cdot \mathbf{p}_{s-1}) \\ \mathbf{y}_s &= \mathbf{y}_{s-1} - \alpha_s \mathbf{p}_{s-1} \\ \mathbf{g}_s &= \mathbf{g}_{s-1} - \alpha_s A\mathbf{p}_{s-1} \\ \mathbf{h}_s &= B^{-1}\mathbf{g}_s \\ \beta_s &= (\mathbf{g}_s \cdot \mathbf{h}_s) / (\mathbf{g}_{s-1} \cdot \mathbf{h}_{s-1}) \\ \mathbf{p}_s &= \mathbf{h}_s - \beta_s \mathbf{p}_{s-1} \end{aligned} \quad (30)$$

В качестве приближенной матрицы  $B$  можно использовать диагональную матрицу, составленную из диагональных элементов матрицы  $A$ , которая легко определяется и запоминается. Такая диагональная матрица  $B$  легко обращается один раз перед началом процесса итераций (29)-(30). Операция  $B^{-1}\mathbf{g}_s$  сводится к покомпонентному умножению двух векторов.

Итерационный процесс (29)-(30) останавливается, если выполнен следующий критерий:

$$(\mathbf{g}_s \cdot \mathbf{h}_s) < \varepsilon_*^2 \vee (\mathbf{p}_{s-1} \cdot \mathbf{p}_{s-1})\alpha_s^2 < \varepsilon_*^2 \quad (31)$$

где величина  $\varepsilon_*$  является максимальным числом, добавление которого к единице дает в результате единицу для типичной компьютерной арифметики с ограниченным числом разрядов для представления чисел. Это число называется "машинным эpsilon" (Меткалф, 1985) и приближенно равно  $10^{-6}$  для ЭВМ с четырехбайтовой арифметикой.

Особыми случаями являются: 1) при  $(A\mathbf{p}_{s-1} \cdot \mathbf{p}_{s-1}) < \varepsilon_*^2$  метод дает отказ из-за того, что задача вырождена; 2) при невыполнении условий (31) для  $s > 2N$  ( $N$ - число неизвестных) задача признается плохо обусловленной. В этих особых случаях метод (29)-(30) не позволяет определить решение либо в силу неединственности решения

(точка ветвления), либо в силу очень плохой обусловленности задачи. Практически же в этих ситуациях отказ метода решения может быть вызван некорректным заданием входных данных для свойств материала или для краевых условий. Такое может вполне случиться, например, если случайно или намеренно (из озорства) задать отрицательные константы упругости или не закрепить деформируемое тело в задаче статики (в расчете без сил инерции).

## 18.8. Обзор схем расчета контакта деформируемых тел

Рассмотрим основные математические модели для расчета контактных границ в рамках методов подвижных лагранжевых сеток.

**Модель идеального контакта на согласованных сетках.** В этой модели в каждом из контактирующих тел вводится своя лагранжева сетка и предполагается, что на всем интервале контактного взаимодействия зона контакта известна и остается неизменной. В зоне контакта сетки тел сшиваются "узел в узел" путем отождествления совпадающих узлов и, таким, образом реализуются условия идеального контакта, то есть условия непрерывности перемещений и скоростей на контактной границе.

Модель идеального контакта применима только в случае постоянной зоны контакта.

**Модель идеального контакта на несогласованных сетках.** В этой модели на контактной границе сетки контактирующих тел несогласованы и имеют несовпадающие узлы. Для каждого узла  $\mathbf{x}^+$  одного тела на контактной границе вводится фиктивный узел  $\mathbf{x}_*^-$  в другом теле, имеющий то же положение  $\mathbf{x}^+ = \mathbf{x}_*^-$  и требуется выполнение условий идеального контакта  $\mathbf{u}^+ = \mathbf{u}_*^-$ , где вектор перемещений  $\mathbf{u}_*^-$  в фиктивном узле выражается через узловые перемещения второго тела интерполяцией. Обычно эти условия учитываются методом штрафа путем добавления в вариационное уравнение виртуальных работ члена

$$\int_{S_c} \lambda (\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}_*^-) \cdot (\delta \mathbf{u}^+ - \delta \mathbf{u}_*^-) dS \quad (32)$$

где  $S_c$  - контактная поверхность,  $\lambda \gg 1$  коэффициент штрафа.. Модель идеального контакта на несогласованных сетках предложена Баженовым (1984, 1994) и также реализована в работе Felippa (2001). Эта модель позволяет обеспечить условия непрерывности решения

на границах между подобластями и избежать необходимости согласования сеток на контактной границе.

**Модель буферной среды.** В этой модели в зоне возможного контакта между взаимодействующими телами вводится дополнительный слой ячеек. Таким образом расчет контакта проводится по модели идеального контакта на согласованных сетках, но с участием третьего тела, представленного буферными ячейками. Благодаря буферному слою допускается скольжение и отлипание контактирующих тел, то есть зона контакта является переменной и возможен учет различных моделей закона поверхностного трения подбором свойств буферного слоя.

Модель буферной среды развита в серии работ Зернова (1997). Надо заметить, что во избежание нефизических эффектов кумулятивных струй буферного материала, слой буферных элементов не должен содержать узлов, не принадлежащих контактирующим телам.

**Модель хозяин-слуга.** В этой модели буферный слой генерируется по мере надобности в процессе решения. Для каждого узла ("хозяина") одного тела находится подчиненная поверхностная ячейка другого тела, такая, что нормаль из "хозяина" ее пересекает и по результатам предварительного расчета без учета контакта "хозяин" пересекает подчиненную ячейку или находится гораздо ближе к ней, чем величина данной поверхностной ячейки. Пары "хозяин – подчиненная ячейка" образуют буферный слой, после чего расчет проводится как в методе буферной среды или путем удовлетворения контактным условиям, включаемых в вариационное уравнение виртуальных работ методом штрафа или методом множителей Лагранжа. Иногда используются упрощенные схемы расчета буферных ячеек, основанные на осреднении импульсов узлов буферного элемента так, как если бы они были соударяющимися частицами, слипающимися после удара (модели "неупругого удара").

Самостоятельная проблема в методе "хозяин-слуга" связана с поиском буферных элементов, для решения которой предложен целый ряд алгоритмов быстрого перебора граничных узлов и ячеек, обзор которых дан в работе [Бураго, Кукуджанов, 2005]. Впервые модель "хозяин-слуга" описана Уилкинсом [1964] и Холлквистом [1973]

## 18.9. Расчет процессов разрушения

### 18.9.1. Описание проблемы разрушения

При достижении критического напряженно-деформированного состояния структурированная сплошная среда начинает разрушаться, то есть терять способность к сопротивлению деформации.

Критическое состояние определяется по критериям разрушения, например, по достижению нормой деформации критического значения. При простейшем анализе опасности разрушения тел используются обычные методы расчета напряженно-деформированного состояния и проверяются критерии разрушения.

Во многих случаях интересным является расчет процессов разрушения, поскольку выполнение критерия разрушения в какой-либо части конструкции еще не означает, что она разрушена. Она может еще какое-то время сохранять способность выполнять свое предназначение. Для моделирования процессов разрушения надо учитывать обратное влияние разрушений в материале на его прочностные свойства. Это учитывается в теориях континуального разрушения, которые феноменологически описывают постепенную потерю материалом свойства упругости из-за накопления микронарушений сплошности, таких как микропоры и микротрещины.

Образование и накопление микроповреждений может происходить при достижении критического напряженно-деформированного состояния, критических температур, а также из-за причин и воздействий нетермомеханической природы, таких как лазерное излучение, химические реакции и тому подобных. Поэтому разрушение трактуется как термодинамически независимый процесс и для его описания в [1,2] была введена специальная зависимая переменная – параметр повреждаемости, равная нулю для неповрежденного материала и растущая по мере накопления микроповреждений. Характеристиками упругости материала являются модули упругости и предел текучести, определяющий область упругого деформирования. С ростом повреждаемости (или поврежденности) характеристики упругости материала уменьшаются вплоть до нуля, что означает полное разрушение структурированного материала с образованием новых макро-поверхностей разрыва сплошности (макротрещин), рост которых приводит к распаду тела из структурированного материала на отдельные части. Обзоры исследований и подробное обсуждение вариантов теории повреждаемости можно найти в работах [3-13]. Основные факты состоят в следующем.

Потеря свойств упругости описывается на диаграммах деформирования участками разупрочнения, на которых рост деформации приводит к уменьшению напряжения. Описание такого поведения материала в рамках обычных инкрементальных теорий упругости и упругопластичности заканчивается крахом. Причина этого состоит в том, что использование диаграмм деформирования с участками разупрочнения в качестве характеристик материала приводит к математически некорректным краевым задачам. В режиме разупрочнения матрица касательных модулей упругости теряет свойство положительной определенности. Это приводит к потере системой уравнений свойства эллиптичности в статике и гиперболичности в динамике. Краевые задачи при этом становятся некорректными по Ада-

мару и численные методы их решения не работают и дают бессмысленные результаты, демонстрирующие потерю сходимости решений.

Введение независимого термодинамического параметра поврежденности, как причины уменьшения величины параметров упругости, устраняет проблему некорректности краевых задач при разупрочнении. На каждом шаге инкрементальных методов при этом используются уравнения упругости и пластичности с диаграммами деформирования без участков разупрочнения. При этом значения модулей упругости и предела текучести зависят от поврежденности. Эффект разупрочнения не закладывается в математическую модель в виде зависимости предела текучести от деформации, а получается путем решения задачи в расширенном (поврежденностью) пространстве зависимых переменных, как результат роста поврежденности и соответствующей деградации упругих свойств материала. То есть, с математической точки зрения введение поврежденности является эффективной регуляризацией краевых задач упругопластичности.

В теориях поврежденности при развитии зон пониженного упругого сопротивления материала, в которых интенсивность деформаций и поврежденность показывают всплеск, а перемещения и скорости претерпевают скачкообразное изменение, описывающее расхождение берегов макротрещины, краевые задачи являются корректными. Но обусловленность задач с появлением зон разрушения ухудшается, что может приводить и приводит, если не принимать превентивных мер, к патологической зависимости результатов численного моделирования от параметров дискретизации, таких как форма и размеры расчетных ячеек в сеточных методах или распределение частиц в бессеточных методах. Конечно, результаты численного моделирования всегда зависят от параметров дискретизации, но при измельчении сеток или при наращивании числа базисных функций эти решения должны демонстрировать сходимость решений к определенным пределам. Численные модели процессов разрушения, как правило, показывают отсутствие сходимости в малом. Это, надо заметить, свойственно и физическим экспериментам. Однако, для интегральных характеристик процесса (например, интегральных диаграмм деформирования) зависимость от параметров дискретизации и в экспериментах, и в численных решениях должна демонстрировать сходимость. Поэтому в численном моделировании надо принимать все меры для улучшения обусловленности решаемых задач, не искажая по возможности регуляризацией самого решения.

Улучшение обусловленности начально-краевых задач достигается в градиентных теориях повреждаемых упругопластических материалов путем физически обоснованного пространственного осреднения зависимых переменных (напряжений, деформаций и поврежденности) в малой окрестности каждой точки. Такое осредне-

ние эквивалентно сглаживанию решений путем введения искусственной диффузии в уравнения инкрементальных теорий повреждаемости.

Помимо этого на режимах фрагментации, когда деформируемое тело делится зонами разрушения на невзаимодействующие части, статические краевые задачи становятся некорректными для частей, лишенных закреплений. Поэтому учет инерции, который устраняет эту некорректность, надо предусматривать в математических моделях расчета разрушения с самого начала независимо от скорости нагружения.

К числу основных проблем, связанных с обеспечением физической достоверности расчетов разрушения, относятся также вопросы, связанные с формулировкой (специфических счетных) критериев разрушения и кинетики накопления поврежденности.

При этом зависимость результатов численного моделирования от параметров дискретизации должна быть минимизирована.

Несмотря на обилие (многие тысячи!) работ, посвященных моделированию континуального разрушения, ясности с выбором математической модели и методов ее регуляризации и реализации пока нет (2007 г.) и имеется больше вопросов, чем ответов.

### 18.9.2. Постановка задач о разрушении

Полная система уравнений для моделирования разрушения, используемая в настоящей работе, является модифицированной системой уравнений теории упругопластического течения.

Система уравнений дополнена кинетическим уравнением для поврежденности и зависимостью модулей упругости и предела текучести от поврежденности.

Эта система уравнений в абстрактных тензорных обозначениях имеет вид

$$\begin{aligned} \rho \partial_t^2 \mathbf{U} &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{E}(\gamma) : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_p), \quad \boldsymbol{\varepsilon} = 1/2(\nabla \otimes \mathbf{U} + (\nabla \otimes \mathbf{U})^T) \\ \partial_t \boldsymbol{\varepsilon}_p &= \lambda_p \frac{\partial F_p}{\partial \boldsymbol{\sigma}} H(F_p) H(\boldsymbol{\sigma} : \partial_t \boldsymbol{\varepsilon}), \quad F_p(\boldsymbol{\sigma}) = 3/2(\boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\sigma}') / \sigma_p^2 - 1 \\ \partial_t \gamma &= H(F_d) \Gamma(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_p, \gamma) + r_\gamma, \quad F_d = F_d(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_p, \gamma) \end{aligned} \quad (33)$$

где  $\rho$  - плотность;  $\mathbf{U}$  - вектор перемещений;  $\boldsymbol{\sigma}$  - напряжение;  $\boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{\sigma} - (\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{I})\mathbf{I}/3$  - девиатор напряжения;  $\mathbf{E}(\gamma)$  - тензор модулей упругости, зависящий от поврежденности  $\gamma$ ;  $\boldsymbol{\varepsilon}$  - деформация,  $\boldsymbol{\varepsilon}_p$  - пластическая деформация;  $\lambda_p$  - коэффициент закона пластического течения, определяемый условием пластичности. Далее обозначено:

$F_p$  - функция нагружения;  $H$  - функция Хевисайда, равная нулю для отрицательных значений аргумента и единице в противном случае;  $\sigma_p$  - предел текучести;  $\mathbf{I}$  - тензорная единица. Неотрицательные значения функции условия разрушения  $F_d$  разрешают накопление поврежденности;  $r_\gamma$  - нетермомеханический источник поврежденности.

Система уравнений дополняется главными граничными условиями

$$U_\alpha|_{x \in \partial V_{u\alpha}} = U_\alpha^*(x, t), \quad U_n|_{x \in \partial V_{un}} = U_n^*(x, t) \quad (34)$$

естественными граничными условиями

$$\sigma : \mathbf{n} \otimes \tau_\alpha|_{x \in \partial V_{\tau\alpha} = \partial V \setminus \partial V_{u\alpha}} = p_\alpha^*(x, t), \quad (35)$$

$$\sigma : \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}|_{x \in \partial V_n = \partial V \setminus \partial V_{un}} = -p_n^*(x, t) \quad (36)$$

где  $\alpha = 1, 2$ .

и начальными условиями

$$\mathbf{U}|_{t=0} = \partial_t \mathbf{U}|_{t=0} = \varepsilon_p|_{t=0} = \gamma|_{t=0} = 0 \quad (37)$$

где  $\omega_0 > 0$  - начальная пористость,  $\mathbf{n}$  и  $\tau_\alpha$  орты нормали и касательных к границе. Заданные функции отмечены звездочками. В каждой точке границы заданы либо главные (кинематические), либо естественные (динамические) граничные условия.

Данная математическая модель не содержит дискретных математических конструкций, непосредственно связанных с описанием физики процесса разрушения. Это не привязывает ее к какому-либо конкретному методу решения и позволяет проводить оценки достоверности получаемых численных решений чисто математическими средствами, используя тестирование на аналитических (искусственных, например) решениях, прослеживая сходимость при наращивании базисных элементов дискретизации, используя стандартные критерии сходимости численных методов.

Это замечание критикует те численные модели процессов разрушения, которые существенно используют математические конструкции, реализуются и существуют только в рамках частных методов решения. Например, в методе конечных элементов созданы специальные функции формы для разрушенных элементов. Их применение необоснованно заведомо исключает применение других мето-

дов реализации и делает невозможным проведение сравнительных расчетов. Отметим, что во многом из-за использования в алгоритмах неформальных эвристических приемов, искажающих исходную формулировку задач, проведение сравнений расчетов разрушения по различным моделям и методам затруднено и в имеющейся литературе встречается крайне редко.

### 18.9.3. Методы расчета разрушения

Отметим некоторые особенности метода решения, обусловленные спецификой задач континуального разрушения. Рассматриваемые процессы до разрушения происходят довольно медленно. Поэтому влиянием инерции в уравнениях движения можно было бы пренебречь. Однако, с появлением зон разрушения процесс деформирования может резко ускоряться, становясь в окрестности таких зон динамическим. Заранее предсказать время появления зон разрушения без проведения расчета невозможно, поэтому учет инерционных членов в алгоритме решения необходим с самого начала. Учет инерции позволяет сохранить корректность краевых задач в тех случаях, когда зоны разрушения охватывают значительную часть области решения и, имитируя макротрещины, делят область решения на неразрушенные части. Взаимовлияние таких частей близко к нулю, что означает разрушение фрагментацией или раскалыванием на части. Алгоритмы, не учитывающие силы инерции в этих условиях, теряют не только точность, но также математическую устойчивость и корректность, поскольку фрагментация приводит к нарушению запрета на движение деформируемых тел как жесткого целого, необходимого для корректности квазистатических задач.

Обилие нелинейных членов в уравнениях и приближенное решение нелинейных задач итерациями ("недоитерированность") приводят к тому, что искомые функции претерпевают нефизические мелкомасштабные осцилляции в пространстве и времени. Признаком нефизических осцилляций (немонотонностей) решения является появление в решении колебаний с длинами полуволн, равных шагам пространственно-временной сетки. Такие немонотонности можно обнаружить по смене знака вторых производных от решения в пределах одного ребра сетки (ребро не обязательно расположено вдоль координатной линии). Такие нефизические немонотонности должны немедленно устраняться, иначе в условиях плохой обусловленности задач на режимах разрушения, то есть в условиях повышенной чувствительности решения к малым возмущениям, такие немонотонности могут исказить численное решение, что выразится в появлении ложных зон разрушения.

Монотонизация решений проводилось в два этапа. На первом этапе использовался "физический" способ сглаживания, основанный на введении в эволюционные определяющие уравнения для пласти-

ческих деформаций и поврежденности малых сглаживающих вязких членов, что обосновывается градиентной теорией повреждающейся упругопластической среды

$$\partial_i \varepsilon_p = \lambda_p \frac{\partial F_p}{\partial \sigma} H(F_p) H(\sigma : \partial_i \varepsilon) + \nabla \cdot (v \nabla \varepsilon_p) \quad (38)$$

$$\partial_i \gamma = H(F_d) \Gamma(\varepsilon, \varepsilon_p, \gamma) + r_\gamma + \nabla \cdot (v \nabla \gamma) \quad (39)$$

где  $v$  - коэффициент вязкости. Вопрос о выборе коэффициента вязкости  $v$  однозначного ответа не имеет ни из теории, ни из эксперимента. Можно ожидать, что экспериментальные физические значения коэффициента вязкости будут слишком малыми для обеспечения эффективной монотонизации решения при реально используемых грубых дискретизациях.

На примере пространственно одномерных модельных задач не сложно найти минимальные значения коэффициента вязкости, необходимые для уменьшения осцилляций численных решений в линейном случае. Для явных схем минимальное значение коэффициента искусственной вязкости равно  $v = c^2 \Delta t / 2$ , что и использовалось в нашей неявной схеме. Заметим, что эта вязкость уменьшает осцилляции, но не гарантирует их отсутствие. Поэтому далее решение подправлялось дополнительно.

На втором этапе использовался “математический” способ сглаживания, заключающийся в устранении вновь появляющихся немонотонностей нелинейным сглаживанием. В конце каждого шага по времени для каждой сглаживаемой функции  $f$  определялись ее вторые производные  $f_{xx}$  по каждому координатному направлению  $x$  из решения следующих вспомогательных задач

$$\int_V (\nabla f \cdot \nabla \delta f_{xx} + f_{xx} \delta f_{xx}) dV = 0 \quad (40)$$

$$f_{xx} \Big|_{\partial V} = 0 \quad (41)$$

то есть, вторые производные таким способом определяются в условиях простейшей аппроксимации решения кусочно-линейными функциями. При использовании квадратурных формул с точками интегрирования в узлах сетки матрица системы уравнений получается диагональной и легко обращается.

Если на некотором ребре сетки величина  $f_{xx}$  меняет знак, значит в соседних узлах, определяющих данное ребро, надо провести локальное сглаживание решения путем сдвига узлового значения функции  $f_i$  к ее среднему значению по направлению  $x$

$$f_i := (f_i + (f(x_i - h) + f(x_i + h))/2)/2 \quad (42)$$

где  $h$  – малое приращение координаты  $x$ , величины  $f(x_i - h)$  и  $f(x_i + h)$  определялись интерполяцией. Второй способ в отличие от первого в зонах монотонного решения никакого сглаживания не производит. Если нет явных физических доводов в пользу первого способа, то из процедуры сглаживания первый этап можно исключить.

Для описания упругих свойств материала принята упрощенная форма закона Гука, полученная в предположении начальной изотропии свойств материала:

$$\sigma = \lambda \mathbf{I}(\varepsilon - \varepsilon_p) : \mathbf{I} + 2\mu(\varepsilon - \varepsilon_p) \quad (43)$$

где параметры упругости Лямэ и предел текучести, определяющий границы упругого поведения материала, зависят от поврежденности следующим образом

$$\lambda = \lambda_0 e^{-1000\gamma}, \quad \mu = \mu_0 e^{-1000\gamma}, \quad \sigma_p = \sigma_{p0} e^{-1000\gamma} \quad (44)$$

и нуликами помечены значения для неповрежденного материала. Локальным критерием разрушения является достижение максимальной главной деформацией положительного критического значения  $\varepsilon_d$ . Максимальная главная деформация при этом является деформацией растяжения. Условие разрушения имеет вид:

$$F_d = \frac{1}{2} \max \left[ (\varepsilon_x + \varepsilon_y) \pm \left( (\varepsilon_x - \varepsilon_y)^2 - 4\varepsilon_{xy}^2 \right)^{1/2} \right] M - \varepsilon_d \geq 0 \quad (45)$$

где величина

$$M = \sqrt{\frac{\min(h_x, h_y)}{\max[(x_{\max} - x_{\min}), (y_{\max} - y_{\min})]}} \quad (46)$$

является безразмерным масштабным множителем, с помощью которого учтена корневая особенность, присущая концентрации деформаций у кончика трещины в упругом материале, что позволяет трактовать данный локальный критерий как приближенное представление обычного критерия разрушения механики хрупкого разрушения в терминах коэффициентов концентрации деформаций.

Критерий разрушения с масштабным множителем улучшает или, правильнее будет сказать, обеспечивает сходимость численных значений интегральных критических нагрузок разрушения при измельчении сетки. Иначе получается так, что чем мельче сетка, тем раньше наступает разрушение, поскольку на более мелкой сетке концентрация деформаций описывается все лучше и критические уровни деформации достигаются все раньше, при меньших значениях приложенной нагрузки. Конечно, зависимость критических нагрузок от сеточного разрешения должна быть, но она должна сходиться к некоторому предельному значению критической нагрузки, что и обеспечивает масштабный множитель. Введение данного множителя не является окончательным решением проблемы сходимости расчетных критических нагрузок разрушения, но оно подчеркивает проблему, связанную с расчетными критериями разрушения, и показывает направление к возможному ее решению. Может быть кто-то сможет придумать лучшую регуляризацию критерия разрушения.

Обратим внимание на то, что принятый критерий разрушения различает растяжение и сжатие, реагирует на сдвиг, так как сформулирован в главных осях. То есть критерий не так тривиален, как может показаться. Как следует из расчетов, он работает лучше, нежели критерии для первых и вторых инвариантов тензоров деформаций или напряжений. Еще одна особенность критерия связана с тем, что он сформулирован в терминах коэффициентов концентрации полной деформации. Это лучший выбор, так как полная деформация в отличие от напряжений, упругих и пластических деформаций не корректируется в расчетах определяющих соотношений, а однозначно определяется кинематикой процесса деформирования.

В условиях отсутствия конкретных сведений о кинетике повреждаемости кинетическое уравнение для повреждаемости принималось в простейшей форме

$$\partial_t \gamma = 1000N(F_d) \quad (47)$$

где  $N$  – функция Хевисайда. Это уравнение обеспечивает быструю, но конечную скорость ее роста, при которой способность упругого сопротивления деформации при разрушении теряется за несколько временных шагов. Это позволяет рассматривать применяемую здесь математическую модель разрушения как регуляризованный вариант известной модели Маенчена-Сака [15], в которой напряженно-деформированное состояние при разрушении корректируется на одном временном шаге скачком. Мгновенная корректировка по Маенчену-Саку приводит к появлению в численном решении нефизических осцилляций



## Глава 19. Генерация и использование сеток

Теория генерации сеток является разделом вычислительной математики, описанию которого посвящены монографии Лисейкина (1999), Гильманова (1999), Иваненко (1997), Ковени, Яненко (1981), Сони, Томпсона (2002) и ряд других. Приведенное здесь краткое изложение основных методов генерации сеток составлено на основе указанных источников.

### 19.1. Основные типы сеток

Сеткой называется пронумерованное множество узлов с информационными массивами соседства, определяющими шаблоны или ячейки. Шаблон для каждого узла задает номера соседних узлов. Ячейка задается номерами ее узлов.

Причем информационные массивы соседства (шаблоны или ячейки) должны быть заданы отдельно для внутренних узлов и для граничных узлов. Ячейки сетки должны быть непересекающимися и иметь общие границы между ячейками.

В идеальном случае объединение ячеек должно дать область решения. Поскольку в реальных задачах объединение ячеек может не совпадать тождественно с областью решения, то говорят, что сетка (сеточная область) аппроксимирует (приближенно представляет) область решения.

Самыми простыми являются прямоугольные, равномерные и, одновременно, регулярные сетки. Прямоугольные сетки состоят из узлов, расположенных вдоль координатных линий прямоугольной (декартовой) системы координат. Равномерные сетки состоят из одинаковых по форме и размеру ячеек. Регулярные сетки допускают  $i$ - $j$ - $k$  нумерацию узлов, где каждый индекс отвечает своей пространственной (возможно криволинейной) координате. Для регулярных сеток информационные массивы соседства заменяются простыми правилами определения соседних узлов, например, для внутреннего узла  $(i, j, k)$  соседями являются узлы  $i \pm 1, j \pm 1, k \pm 1$ .

Указанные свойства могут сочетаться во всевозможных комбинациях, которые определяют основные типы сеток: (не)прямоугольные, (не)равномерные, (не)регулярные сетки.

Отметим, что регулярные сетки в другой терминологии называются структурированными сетками. Непрямоугольные сетки с узлами, расположенными на координатных линиях криволинейной системы координат, называются криволинейными сетками. В зависимости от формы ячеек различают сетки треугольные, четырех-

угольные, тетраэдральные и так далее. Сетки, содержащие ячейки различной формы, называют смешанными. Ребром называют линию, соединяющую соседние узлы. Гранью называют поверхностную ячейку, являющуюся частью границы объемной ячейки. Валентностью узла называют число ребер, исходящих из данного узла.

Сетки различаются также множеством других свойств, например, типом движения узлов (лагранжевы, эйлеровы, произвольно подвижные), способом адаптации к решению (встраиваемые, наложенные, окаймляющие, динамически и геометрически адаптивные) и так далее. Определения этих свойств вводятся далее по мере необходимости и могут быть найдены в тексте с помощью предметного указателя.

## 19.2. Регулярные сетки

Прямоугольные, равномерные и регулярные сетки имеют узлы, положение которых в декартовой прямоугольной системе координат задано соотношениями

$$\begin{aligned}x_{ijk} &= a_1 + i(b_1 - a_1) / N_1 \\y_{ijk} &= a_2 + j(b_2 - a_2) / N_2 \\z_{ijk} &= a_3 + k(b_3 - a_3) / N_3\end{aligned}\tag{48}$$

где  $i = 0, 1, \dots, N_1; j = 0, 1, \dots, N_2; k = 0, 1, \dots, N_3$ . Такая сетка определяет область решения в виде параллелепипеда

$$V = \{(x, y, z) : x \in [a_1, b_1], y \in [a_2, b_2], z \in [a_3, b_3]\}$$

Информационные массивы, определяющие внутренние и граничные шаблоны или ячейки, для прямоугольной, равномерной и регулярной сетки задавать не нужно, так как имеются простые правила их определения. Например, шаблон любого внутреннего узла  $i, j, k$  ( $0 < i < N_1; 0 < j < N_2; 0 < k < N_3$ ) состоит из узлов с номерами  $i \pm 1, j \pm 1, k \pm 1$ . Так же просто для регулярных сеток описываются шаблоны граничных узлов и определяются номера узлов во внутренних (параллелепипедах) и граничных (прямоугольниках) ячейках. Достоинством равномерной, прямоугольной и регулярной сетки является то, что для ее задания достаточно иметь минимум параметров: границы изменения координат  $a_1, b_1, a_2, b_2, a_3, b_3$  и параметры числа узлов  $N_1, N_2, N_3$ . Не надо запоминать ни координаты узлов, ни информационные массивы соседства.

Криволинейные, регулярные и квазиравномерные сетки получаются путем задания регулярной, прямоугольной и равномерной сетки в арифметическом пространстве криволинейных координат. Пусть, например,  $\xi_i (i = 1, 2, 3)$  - криволинейные координаты, связанные с декартовыми прямоугольными координатами  $x_i (i = 1, 2, 3)$  соотношениями

$$x_l = x_l(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \quad (l = 1, 2, 3)$$

В арифметическом пространстве криволинейных координат равномерная регулярная прямоугольная сетка задается соотношениями

$$\begin{aligned} \xi_{1ijk} &= a_1 + i(b_1 - a_1) / N_1 \\ \xi_{2ijk} &= a_2 + j(b_2 - a_2) / N_2 \\ \xi_{3ijk} &= a_3 + k(b_3 - a_3) / N_3 \end{aligned} \quad (49)$$

Тогда в области решения с декартовыми прямоугольными координатами получается криволинейная, регулярная и квазиравномерная сетка с узлами

$$x_{lijk} = x_l(\xi_{1ijk}, \xi_{2ijk}, \xi_{3ijk}) \quad (l = 1, 2, 3)$$

Нередко прямоугольные, равномерные и регулярные сетки применяются к расчету процессов в подвижных областях сложной формы и переменной связности. Это делается в методах сквозного счета в подходах фиктивных областей, маркеров и маркер-функций, использующих обобщенные постановки задач, в которых граничные условия учитываются как дополнительные ограничения. Рассмотрению таких подходов посвящена глава про расчет подвижных границ раздела.

## 19.2. Нерегулярные сетки

Пусть имеется (многосвязная) область решения сложной формы. Самыми простыми являются нерегулярные сетки идентичных (одинаковых) ячеек. Область решения покрывается равномерной, прямоугольной и регулярной сеткой. Такая сетка заведомо покрывает (или, как говорят, окаймляет) заданную область решения. Затем вводится информационный массив признаков расчетных ячеек, в котором каждой ячейке, центр которой попал в заданную область решения, присваивается число 1, а в противном случае ей дается число 0. В результате получается грубая аппроксимация области решения множеством идентичных ячеек с признаком 1. Точность такой ап-

проксимации области решения будет повышаться по мере увеличения числа узлов  $N_1, N_2, N_3$  по пространственным направлениям.

Сетки с дробными ячейками. Ячейки окаймляющей сетки, которые пересекаются границей заданной области решения, называются приграничными. Отбрасывая не принадлежащие области решения части приграничных ячеек, получают усеченные или, как говорят, дробные ячейки. Для описания дробных ячеек надо вводить массивы координат дополнительных узлов в точках пересечения ребер с заданной границей и дополнительные массивы номеров узлов в дробных ячейках. Сетки с дробными ячейками лучше аппроксимируют область решения и позволяют более точно поставить граничные условия.

Маленькие дробные ячейки создают трудности для применения явных схем в нестационарных задачах, так как приводят к неприемлемым ограничениям шага по времени.

Сетки со "схлопнутыми" дробными ячейками получаются путем перемещения внутренних узлов, принадлежащих дробным ячейкам, вдоль ребер на границу, что означает "схлопывание" дробных ячеек. В результате получаются нерегулярные сетки с отличными по форме приграничными ячейками. При этом трудности, вызванные маленькими дробными ячейками, снимаются.

Трансляционные (слоистые) сетки получаются трансляцией (пошаговым переносом) плоской сетки (две координаты) вдоль заданной кривой (третья координата) так, что касательная к кривой является нормалью к плоской сетке. После каждого шага переноса плоской сетки образуется слой пространственных ячеек.

Блочные сетки получаются объединением подобластей с регулярными сетками.

Составные сетки образуются объединением подобластей с сетками общего вида.

Объединение сеток состоит в 1) перестройке сеток на границах подобластей для получения одинаковых поверхностных сеток в зоне сращивания, 2) глобальной перенумерации узлов в подобластях, 3) отождествлении совпадающих узлов на границах подобластей, 4) обновлении массивов номеров узлов в ячейках или шаблонах в соответствии с новой глобальной нумерацией узлов..

В общем случае нерегулярные сетки описываются массивами координат узлов, массивами соседства для объемных ячеек и отдельно для поверхностных граничных ячеек (или шаблонами внутренних и граничных узлов). Именно эти массивы представляют сетки в наборах исходных данных для программ решателей (солверов) и постпроцессоров – обработчиков численных решений используемых для построения таблиц и рисунков.

Наиболее распространенным методом генерации нерегулярных сеток являются метод "нарезания пирога". Метод состоит в последо-

вательной генерации внутренних узлов и объемных ячеек продвижением от границы слоями вглубь области решения.

Упростить упомянутый выше процесс генерации сеток позволяют методы изоповерхностей функции расстояния до границы, а также методы дробных и схлопнутых дробных ячеек.

Важной характеристикой генераторов нерегулярных сеток является простота и краткость исходных данных, описывающих область решения. Часто такие исходные данные производятся интерактивными (диалоговыми) САД системами (программами автоматизированного проектирования). Сетки, генерируемые такими системами, как правило, непригодны для расчета и служат входными данными для программ генерации сеток.

### 19.3. Генерация сеток отображениями

Пусть в некоторой области (прообразе) введена сетка. Отобразив эту область на область решения (образ), тем самым получаем сетку в области решения. Имеется соответствующая теория генерации сеток с помощью отображений, развивающаяся с момента появления вычислительных машин по настоящее время. Эта теория имеет много общего с теорией нелинейной упругости, поскольку обе теории изучают отображения одной области на другую, удовлетворяющие сходным наборам требований: помимо существования и единственности отображения требуется положительность якобиана отображения, гарантирующая отсутствие выворачивания элементарных объемов, инвариантность уравнений по отношению к преобразованиям системы координат и ортогональным преобразованиям (поворотам) конфигураций образа и прообраза, обратимость и возможность управления деформацией. Наличие указанного сходства отмечалось во многих работах [4,6,7,8,9]. Поэтому имеет смысл изложение уравнений для построения сеток отображениями сделать с позиций теории упругости.

Вариационная запись уравнений термоупругости имеет вид

$$\delta \int_{\tilde{V}} \psi(\boldsymbol{\varepsilon}, T) d\tilde{V} = 0, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = ((\tilde{\nabla} \mathbf{x}) \cdot (\tilde{\nabla} \mathbf{x})^T - \mathbf{I}) / 2$$

где  $\delta$  - знак вариации,  $\psi(\boldsymbol{\varepsilon}, T) \geq 0$  - энергия деформации, зависящая от деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и температуры  $T$ ,  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\tilde{\mathbf{x}}, t)$  - искомое отображение исходной области  $\tilde{V}$  (начальная недеформированная конфигурация при  $t = 0$ ) на подвижную область решения  $V$  (деформированная конфигурация при  $t \geq 0$ ), которое удовлетворяет граничным условиям

$$\tilde{\mathbf{x}} \in \partial\tilde{V}, \quad t \geq 0: \quad \mathbf{x}(\tilde{\mathbf{x}}, t) = \mathbf{x}^*(\tilde{\mathbf{x}}, t)$$

где  $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*(\tilde{\mathbf{x}}, t)$  - заданная функция, определяющая отображение границы,  $t$  - время,  $\tilde{\nabla}$  - оператор пространственного дифференцирования в начальной конфигурации, операция транспонирования обозначена  $(\dots)^T$ .

Запись вариационного уравнения нелинейной теории упругости является общей формой представления уравнений для определения отображений одной области на другую. Так что эта форма записи включает и все варианты сеточных уравнений, удовлетворяющие требованиям инвариантности по отношению к преобразованиям систем координат и инвариантности по отношению к ортогональным преобразованиям начальной и деформированной конфигураций.

Требование инвариантности относительно смены системы координат означает, что энергия деформации должна быть скалярной функцией тензорного аргумента в смысле тензорного исчисления, то есть она должна зависеть только от инвариантов тензора деформации. Для изотропных отображений это означает зависимость от первого, второго и третьего инвариантов, которые имеют вид:

$$\varepsilon_I = \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{I}, \quad \varepsilon_{II} = \boldsymbol{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \varepsilon_{III} = \det(\boldsymbol{\varepsilon})$$

В случае анизотропных отображений энергия деформации зависит от инвариантов общего вида, например,  $\mathbf{C} :: \boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}$ , где  $\mathbf{C}$  - тензор четвертого ранга, являющийся тензорной функцией деформаций.

Требование инвариантности относительно ортогональных преобразований (поворотов) начальной и деформированной конфигураций означает, что энергия деформации не должна зависеть от преобразований поворота. По теореме о полярном разложении (см. курс тензорного анализа) преобразования поворота представлены тензором поворота  $\mathbf{R}$ , который является составной частью тензора градиента деформации  $\tilde{\nabla}\mathbf{x}$ :

$$\tilde{\nabla}\mathbf{x} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{R} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{V}$$

где тензоры  $\mathbf{U}$  и  $\mathbf{V}$  являются соответственно левым и правым тензорами чистой деформации. Тензор поворота подчиняется соотношению:

$$\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{R}^T = \mathbf{I}$$

Использование в качестве аргумента энергии деформации тензора деформаций гарантирует инвариантность уравнений относительно преобразований поворота, так как

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon} &= ((\tilde{\nabla}\mathbf{x}) \cdot (\tilde{\nabla}\mathbf{x})^T - \mathbf{I}) / 2 = (\mathbf{U} \cdot \mathbf{R} \cdot (\mathbf{U} \cdot \mathbf{R})^T - \mathbf{I}) / 2 = \\ &= (\mathbf{U} \cdot \mathbf{R} \cdot (\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{U}^T) - \mathbf{I}) / 2 = (\mathbf{U}^2 - \mathbf{I}) / 2\end{aligned}$$

В природе имеются материалы, сохраняющие свойство обратимости деформаций (то есть подчиняющиеся уравнениям нелинейной теории упругости) при очень больших деформациях, например, резиноподобные материалы. Для описания деформаций таких материалов теория упругости располагает большим набором хорошо изученных на дифференциальном уровне уравнений, которые можно использовать для построения сеточных отображений.

Не следует, однако, переоценивать возможности использования опыта теории упругости в алгоритмах генерации и управления движением адаптивных сеток, так как расчет больших деформаций упругих тел до сих пор является трудной проблемой, несмотря на наличие множества пакетов прикладных программ, которые такой расчет должны осуществлять.

Дискретизированные уравнения не наследуют автоматически свойства дифференциальных, интегральных и вариационных уравнений. Поэтому формулировка дискретных условий, эквивалентных требованию положительности якобиана отображения на дифференциальном уровне, не является очевидной и до сих пор является предметом исследования.

Существенный прогресс в формулировке и реализации дискретных условий невырожденности сеток достигнут в работах Иваненко, Чарахчяна (1987), Ушаковой (2006), Азаренка (2008). В основе дискретных условий невырожденности лежит идея замены шестигранных ячеек сетки каким-либо набором трехгранных ячеек, который аппроксимирует шестигранную ячейку, с последующим учетом положительности якобиана отображения для каждой трехгранной ячейки, как дополнительного условия.

Явление выворачивания ячеек сетки при использовании недостаточно точных формул численного интегрирования сеточных функционалов на шестигранных ячейках имеет ту же природу, что и неустойчивость "песочных часов" в лагранжевых методах конечных элементов, которая также приводит к вырождению сетки. Недостаточная точность численного интегрирования приводит к появлению ненулевых решений, не дающих вклада в сеточные функционалы, то есть, обладающие "нулевой энергией". Такие решения пропорциональны значениям +1 и -1 на каждом ребре сетки и их производные равны нулю в центрах шестигранных ячеек.

Введение дискретных условий невырожденности шестигранных ячеек обеспечивает необходимую точность численного интегрирования сеточных функционалов, требуемую для сходимости применяемых кусочно-три-линейных аппроксимаций. Вид таких дискретных условий будет зависеть от применяемых аппроксимаций решения сеточных функционалов. В настоящее время дискретные условия невырожденности получены только для кусочно-три-линейных аппроксимаций решения.

Коль скоро условия невырожденности сеточных отображений сформулированы, их учитывают методом барьерных штрафных функций как дополнительные ограничения в формулировках вариационных задач генерации сеток.

Предотвратить появление решений нулевой энергии в общем случае можно. Для этого надо вычислять интегралы сеточных функционалов по квадратурным формулам Гаусса достаточной точности с достаточным числом гауссовых точек так, как это делается в алгоритмах метода конечных элементов для нелинейной теории упругости. Теоремы о точности численного интегрирования функционалов, необходимой для сходимости решений, можно найти в книге (Стренг и Фикс, 1980).

## 19.4. Динамически адаптивные сетки

Локальные ошибки аппроксимации пропорциональны норме производных от решения и некоторой степени шага сетки. В зоне ударных волн, контактных разрывов, межфазных границ и пограничных слоев при неизменном шаге пространственной сетки может иметь место резкий всплеск нормы производных и, следовательно, нормы ошибок аппроксимации, что ведет к потере точности решения. Для подавления этих всплесков ошибок аппроксимации требуется сгущение сеток в зонах больших градиентов решения.

Сгущать сетки можно двумя способами:

- 1) путем введения дополнительных узлов и ячеек, который называется методом встраиваемых сеток. Этот метод требует работы с переменными списками узлов в шаблонах или ячейках;
- 2) путем сдвига узлов в зону больших градиентов, что требует разработки специальных алгоритмов управления сеткой. И в том, и в другом случаях требуется алгоритм вычисления решения во вновь введенных или передвинутых узлах. И в том, и в другом случаях нужны индикаторы необходимости сгущения/разрежения сетки, называемые адаптационными функциями. Адаптационные функции являются характеристиками ошибок аппроксимации и определяются как некоторая норма пространственных производных от решения. Имеется специальное направление исследований по оценке ошибок аппроксимации приближенных решений (error estimate investigation)

Простейший алгоритм адаптивных сеток имеет вид:

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \alpha_i^n \mathbf{d}_i^{n+1} \Delta t_n$$

$$\mathbf{d}_i^n = \left( \sum_{k \in \Omega_i} (1 + \phi_k^n) \right)^{-1} \sum_{k \in \Omega_i} \mathbf{x}_k^n (1 + \phi_k^n) - \mathbf{x}_i^n$$

где  $\mathbf{x}_i^n$  - радиус-вектор узла  $i$  на  $n$ -м временном слое,  $\Omega_i$  - множество номеров соседних узлов для узла  $i$ ,  $\phi_i^n \geq 0$  - узловые значения адаптационной функции,  $0 \leq \alpha_i^n \leq 1$  - параметр релаксации.

Если адаптационная функция равна нулю (решение не зависит от координат), то записанный простейший алгоритм реализует обычное сглаживание сетки, делая ее более равномерной и сдвигая каждый узел в сторону центра относительно его соседей. Если адаптационная функция не равна нулю, то узел получает дополнительное смещение в сторону возрастания адаптационной функции. Где больше значение адаптационной функции, там сетка становится более мелкой, что и уменьшает ошибки аппроксимации.

Коэффициент  $\alpha_i^n$  выбирается из условий устойчивости явного интегрирования параболического уравнения управления сеткой, которое можно получить как дифференциальное приближение записанных уравнений движения сетки, рассматривая адаптационный алгоритм как разностную схему. В одномерном случае это дифференциальное приближение имеет вид:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x^0} \left( \frac{\alpha}{2} \frac{\partial x}{\partial x^0} \right) + \frac{\alpha}{2} \frac{\partial x}{\partial x^0} \frac{\partial \phi}{\partial x^0} + O((\Delta x^0)^4, (\Delta t)^2)$$

Видно, что уравнение управления адаптивной сеткой реализует явную двухслойную схему для данного параболического уравнения, которая устойчива при  $\alpha_i^n \Delta t_n \leq (\Delta x^0)^2$ .

Заметим, что в расчетных формулах алгоритма адаптации шаг сетки прообраза  $\Delta x^0$  выбран равным единице, поэтому условие устойчивости имеет вид:  $\alpha_i^n \Delta t_n \leq 1$ .

В расчетах обычно принимается  $\alpha_i^n \Delta t_n = 0.5$ . При этом данный узел сдвинется к ближайшему соседу не более чем на половину расстояния между ними. Сближение узлов прекращается ( $\alpha_i^n \Delta t_n = 0$ ), если достигнут минимально допустимый размер ребра.

Новые узловые значения искомых функций задачи  $y_i^n$  можно определять двумя способами. Первый способ состоит в решении уравнений "сеточной конвекции"

$$\frac{\partial y}{\partial t} - \mathbf{w} \cdot \nabla y = 0$$

где оператор градиента относится к деформированной конфигурации, а  $\mathbf{w} = \partial \mathbf{x} / \partial t$  - скорость подвижной сетки. Знак минус при конвективном члене правильный. Уравнения сеточной конвекции интегрируются по явной схеме.

Второй способ состоит в использовании интерполяции решения на адаптированную сетку. Это требует большего объема вычислений, чем в первом способе, из-за поиска интерполяционных ячеек.

Для стационарных задач алгоритм адаптивных функций можно интерпретировать как итерационный процесс ( $\Delta t_n = 1.0$ ).

Конечно, сгущение сеток и подавление ошибок аппроксимации в зонах больших градиентов зависит от выбора адаптивной функции. Этот выбор подсказывается локальными оценками ошибок сеточного метода. Во многих случаях из-за сложности уравнений такие оценки отсутствуют и адаптивная функция задается интуитивно, а именно, в качестве адаптивной функции применяется какая-либо полунорма решения, имеющая всплеск в погранслоях и на скачках (норма дивергенции скорости, градиентов плотности или завихренности).

Описанный простейший алгоритм не гарантирует корректность подвижной сетки (не гарантирует отсутствие выворачивания ячеек).

## 19.5. Вложенные сетки

Вложенной сеткой называется сетка, получаемая из исходной сетки введением дополнительных ячеек с помощью дополнительных узлов на серединах ребер-отрезков (одномерный случай); на серединах ребер треугольных элементов (двумерный случай) и на серединах ребер тетраэдров (трехмерный случай).

Для ячеек четырехузловых в двумерном случае и для шестигранных ячеек в трехмерном случае на вложенной сетке дополнительные узлы вводятся на серединах ребер и в центрах ограничивающих ячейку граней.

Вложенные сетки используются:

- 1) для ускорения итерационных алгоритмов решения,
- 2) для реализации уточнения решений экстраполяцией Ричардсона,
- 3) для получения распределения погрешности решения.

Ускорение сходимости итерационных процессов (Федоренко, 1973) достигается за счет того, что итерации на грубой начальной сетке сходятся быстро (дают длинноволновую составляющую решения). Это решение переносится интерполяцией на вложенную сетку и используется в качестве хорошего начального приближения для продолжения итераций на вложенной сетке. В результате получается ощутимый выигрыш в потребном для получения решения объеме вычислительной работы.

В алгоритмах экстраполяции Ричардсона используется априорная информация об асимптотической скорости убывания погрешности (подробности см в книге Марчука, 1979); Метод Ричардсона позволяет вычислять уточненное решение путем сложения с весами решений, полученных на вложенных сетках, с целью экстраполяции решения на сетку с "нулевым" шагом. Этот метод часто используется для апостериорной оценки точности численных решений, а также для построения мониторинговых функций погрешности решения в методах адаптивных сеток.

Имеется возможность повышения точности решений "фиктивной интерполяцией" решения на локальную измельченную сетку с последующим использованием невязок на измельченных шаблонах для определения уточняющих поправок к решению (Брандт, 1980). Этот метод "фиктивных вложенных сеток" Брандта выгоден в условиях малой памяти компьютера, когда нет возможности разместить в памяти ЭВМ решение на измельченной вложенной сетке.

Заметим, что имеются попытки введения вложенных сеток дроблением ребер не на две, а на три и более частей (Мартыненко, 2001). Это приводит к значительному увеличению скорости роста числа узлов от одной вложенной сетки к другой и вызывает резкое повышение требований к быстродействию и памяти ЭВМ, что ставит под сомнение целесообразность такого дробления, так как его преимущества неочевидны.

Помимо экономичности по памяти и быстродействию обычные вложенные сетки, полученные дроблением ребер на две части, обладают также преимуществом точности. Это обусловлено тем, что середины ребер являются при интерполяции решения на вложенную сетку точками сверхсходимости, в которых погрешность кусочно-линейной интерполяции пропорциональна квадрату длины ребра.

## Глава 20. Расчет подвижных границ раздела

В этой главе рассматриваются методы решения задач о многофазных несмешивающихся сплошных средах с подвижными границами раздела фаз. Обилие методов показывает, что ни один из них не идеален. У всех есть свои плюсы и минусы.

### 20.1. Типы подвижных границ раздела

Подвижные границы могут быть контактными границами, свободными границами и границами фазового перехода.

Контактные границы представляют собой поверхности соприкосновения несмешивающихся сред различной природы. Свободные границы отделяют конденсированную среду от пустого пространства. Контактные и свободные границы являются лагранжевыми и движутся со скоростью сплошной среды.

Границы фазового перехода являются поверхностями, на которых происходит превращение одной фазы в другую. Границы фазового перехода являются нелагранжевыми, так как движутся со скоростями, отличными от скоростей материальной среды и определяемыми условиями фазового перехода.

Основными методами расчета подвижных границ раздела являются следующие: метод лагранжевых сеток; метод лагранжевых перестраивающихся сеток; метод произвольно подвижных сеток; методы непрерывных и дискретных маркеров; методы частиц. Рассмотрим эти методы ниже.

### 20.2. Лагранжевы сетки

Лагранжевы сетки движутся вместе со средой. При сильных искажениях начальной формы границ подход лагранжевых сеток становится неэффективным из-за искажения внутренних и поверхностных ячеек сетки, которое приводит к потере точности. Кроме того, подход лагранжевых сеток встречает большие трудности при моделировании процессов фрагментации (разделения деформированного тела на части) и объединения тел, так как это связано с необходимостью переопределять списки узлов в ячейках, что в трехмерных задачах практически нереализуемо. В зонах сжатия лагранжевы сетки содержат избыточное количество узлов, и наоборот, в зонах разрежения может ощущаться нехватка узлов лагранжевой сетки. Уменьшение размера ячеек лагранжевой сетки в зонах силь-

ного сжатия среды может послужить причиной так называемой "пробуксовки" алгоритма решения, при которой отсчитывается большое количество временных шагов, а фактического продвижения по физическому времени рассчитываемого процесса не происходит, так как значения шага по времени, определенные условием устойчивости, слишком малы.

### 20.3. Перестраиваемые лагранжевы сетки

При появлении значительных искажений начальной формы и размеров ячеек лагранжевой сетки производят перестройку лагранжевых сеток в процессе решения.

Перестройку сетки можно реализовать, сохраняя узлы прежней сетки и только переопределяя отношения соседства (шаблоны или ячейки). Этот подход носит название метода свободных точек (Дьяченко, 1967) и реализован в методике "Медуза", описанной в книге (Бабенко и др., 1979).

В общем случае граничные узлы старой сетки используются для определения формы области решения, а сетка генерируется заново с новыми граничными и внутренними узлами. При этом приходится переинтерполировать решение со старой сетки на новую. Поскольку такая перестройка сетки трудоемка, она производится не на каждом шаге по времени, а только тогда, когда старая подвижная лагранжева сетка становится непригодной для продолжения вычислений.

### 20.4. Произвольно подвижные сетки

Избежать неприемлемых искажений подвижной сетки при сохранении числа узлов и отношений соседства (шаблонов или ячеек) удастся при использовании произвольно-подвижных (лагранжево-эйлеровых) сеток, геометрически адаптированных к каждой из сред (фаз). В этом случае узлы сетки движутся независимо от сплошной среды и в уравнениях из-за разности в скоростях сетки и среды приходится или учитывать конвективные члены, или производить переинтерполяцию решения на каждом временном шаге.

Уравнения движения сеток получают минимизацией целевых функционалов, требующих, как правило, выпуклости ячеек и адаптации их размеров к решению. Нередко применяют и более простое управление подвижными сетками, обеспечивающее их равномерность, что повышает эффективность явных схем в условиях курантовского ограничения на шаг по времени.

## 20.5. Перекрывающиеся сетки

Перекрывающиеся сетки служат эффективным средством моделирования сложных комплексных задач взаимодействия сред, учета сложной, переменной во времени формы области решения, задания граничных условий.

Примером может служить задача взаимодействия газа или жидкости с деформируемыми твердыми телами. Первая основная (окаймляющая) сетка вводится в области занятой движущимся газом или жидкостью. Эта сетка занимает всю область возможных движений рассматриваемых сред и часто является равномерной, регулярной и прямоугольной. Вторая сетка (лагранжева) вводится в подвижном деформируемом твердом теле и является лагранжевой. Вторая сетка накладывается на первую (отсюда происходит название сеток – перекрывающиеся) и далее организуется их взаимодействие.

На каждом шаге по времени сначала по значениям решения на эйлеровой сетке в точках границы лагранжевой сетки интерполяцией определяются действующие на деформируемое тело силы. По действующим силам на шаге по времени рассчитывается новое положение деформируемого тела. Затем производится расчет течения на эйлеровой сетке, при этом учитывается, что ячейки эйлеровой сетки, на которые наложилась лагранжева сетка запретны для течения газа и скорости течения газа в них зануляются. Аналогично происходит обмен информации между наложенными сетками и для постановки граничных условий для уравнения энергии, переноса примеси и других.

Нередко наложенная сетка используется просто для того, чтобы выполнить расчет по методу фиктивных областей и используется для задания формы границ и граничных условий.

Окаймляющая сетка не обязательно должна быть эйлеровой, она вполне может быть произвольно подвижной и адаптивной.

Метод наложенных сеток позволяет избежать необходимости генерации сеток в областях сложной формы, простить структуру входных данных, ускорить и упростить разработку алгоритмов для задач со сложной физикой и геометрией.

Эффективное использование метода наложенных сеток требует применения сеток высокого разрешения и мощных ЭВМ.

## 20.6. Непрерывные маркеры

Непрерывным лагранжевым маркером называют функцию, принимающую заданные значения для каждой фазы и определяющую поверхность раздела как поверхность равного уровня маркер-функ-

ции. Маркер-функция  $\varphi(\mathbf{x}, t)$  подчиняется транспортному уравнению

$$\frac{d\varphi(\mathbf{x}, t)}{dt} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial\varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla\varphi(\mathbf{x}, t) = 0$$

Градиент маркер-функции на границе раздела указывает направление нормали к границе, кривизна границы выражается через вторые производные маркер-функции.

Расчет движения сред и эволюции функции непрерывного маркера реализуется сквозным счетом на сетках, покрывающих пространственную область движения рассматриваемых сред. В усовершенствованных вариантах расчет выполняется с использованием произвольно-подвижных сеток, адаптирующихся к поведению решения и к геометрии взаимодействующих сред.

В алгоритмах метода жидких объемов (метод VOF – Volume of Fluid или Volume of Fraction) роль маркер-функции играет функция заполнения ячейки жидкостью, то есть отношение заполненной жидкостью части объема ячейки к ее полному объему. Параметры геометрии границы раздела определяются по функции заполнения специальным алгоритмом. При образовании множественных частично-заполненных ячеек определение границ раздела в этом методе может стать невозможным.

В методах функций концентрации или функций цвета маркер-функция принимает постоянные для каждой фазы значения и на границе раздела меняет эти значения скачком. При интегрировании уравнений для маркер-функции в этом случае надо предусматривать меры по предотвращению счетной диффузии маркер-функции на границе раздела.

В методе функций расстояния (Level Set method) маркер-функция определяет расстояние от данной точки до границы раздела, которое является положительным для точек в жидкости и отрицательным для точек пустого пространства. Благодаря плавному изменению этой функции при переходе через границу раздела эффект диффузии маркер-функции на границе раздела является несущественным, однако на больших временах значения функции уже теряют свой смысл как расстояния до границы и время от времени расстояния до границы переопределяют в процессе расчета.

Во всех методах непрерывных маркер функций имеется проблема, связанная с нарушениями консервативности из-за погрешностей в определении границ областей фаз, которая на больших временах может приводить к потере численным решением физического смысла.

Граничные условия учитываются в дифференциальной формулировке включением в исходные уравнения интегральных

членов с дельта-функциями. [C.S.Peskin, 1977].. При численной реализации участвующая в уравнениях дельта-функция аппроксимируется обычной функцией-шапочкой, при этом границе раздела приписывается конечная толщина., что позволяет обеспечить устойчивость и гладкость решения в окрестности границы.

## 20.7. Граничные дискретные маркеры

В методе граничных дискретных маркеров на границе раздела сред вводится подвижная сетка поверхностных ячеек. Расчет движения сред как и в подходе непрерывных маркеров проводится на эйлеровой сетке, покрывающей область движения сред.

Впервые сетка поверхностных дискретных маркеров была введена в работе [Нох, 1964]. Подробный анализ возможностей этого подхода выполнен в работе [Unverdi, Tryggvason, 1992].

Отслеживание изменений топологии фаз при разделении или слиянии фрагментов среды в двумерном случае еще удается реализовать, хотя уже в этом случае логика алгоритмов генерации поверхностных сеток для границ раздела становится чрезмерно сложной. В трехмерном случае реализация переменной топологии наталкивается на непреодолимые трудности реализации.

## 20.8. Дискретные маркеры

Метод дискретных маркеров идентифицирует положение фаз лагранжевыми дискретными маркерами, покрывающими область пространства, занятую средой, и движущимися вместе со средой. Маркер характеризуется значениями координат, указывающими его положение в пространстве и номером, определяющим тип среды или фазы, к которой относится данный маркер. Расчет движения и термомеханического состояния сред проводится на сетке, покрывающей возможную область движения сред. В большинстве реализаций дискретные маркеры не объединяются в сетки, поэтому реализация сложных граничных условий с использованием нормалей и кривизн не предусматривается. Принципиальных трудностей в определении этих параметров геометрии границ раздела нет, но такое определение связано с анализом соседства маркеров, что потребует очень большого объема вычислений.

Совместное использование дискретных маркеров и маркер-функций позволяет улучшить описание границ раздела и учесть сложные граничные условия..

## 20.9. Метод гладких частиц

Гидродинамический метод гладких частиц (SPH - Smoothed particle hydrodynamics) предложен в работе [Gingold, Monaghan, 1977] является лагранжевым методом частиц используемым для описания гидродинамических явлений в областях решения, имеющих переменную связность и подвижные границы. Подробное обсуждение метода можно найти в обзоре Монагана (Monaghan, 1992). Чтобы дать представление о методе гладких частиц ниже приведен современный вариант расчетной схемы метода. Выкладки по выводу формул опущены, их можно найти в цитированных источниках.

Рассматривается течение идеального газа

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \quad (2)$$

$$\frac{dU}{dt} = -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (3)$$

$$p = (\gamma - 1)\rho U \quad (4)$$

где использованы традиционные обозначения.

В методе гладких частиц газ моделируется системой лагранжевых частиц, каждая из которых имеет свою массу  $m_i$ , скорость  $\mathbf{v}_i$  и внутреннюю энергию  $U_i$ . Эти дискретные параметры  $f_i$  связаны со значениями соответствующих непрерывных искомым функций  $f$  следующими аппроксимационными формулами.

$$f_i \approx \langle f \rangle (\mathbf{x}_i) = \int f(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, h) d\mathbf{x} = \sum_{j \in \omega_i} \Delta f_{i,j} \quad (5)$$

$$W(\mathbf{x}, h) = \left[ \frac{1}{h\sqrt{\pi}} \right]^d e^{-|\mathbf{x}|^2/h^2} \quad (6)$$

$$\Delta f_{i,j} \approx m_j \frac{f(\mathbf{x}_j)}{\rho(\mathbf{x}_j)} W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) \quad (7)$$

где  $\omega_i$  - номера соседей частицы  $i$ ,  $h$  - радиус сглаживания,  $d$  - число пространственных координат,  $W$  - гауссова нормированная сферически симметричная функция ядра (возможны другие определения), обладающая следующими свойствами

$$W(\mathbf{x}, h) = W(-\mathbf{x}, h) \quad (8)$$

$$\int W(\mathbf{x}, h) d\mathbf{x} = 1 \quad (9)$$

Таким образом, плотность в окрестности точки  $\mathbf{x}_i$  определяется соотношением

$$\rho_i = \sum_{j \in \omega_i} m_j W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h) \quad (10)$$

Сверткой уравнений движения и уравнения энергии с ядром  $W$  исходные уравнения приводятся к дискретным уравнениям лагранжевых траекторий частиц и к уравнениям эволюции внутренней энергии частиц

$$\frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = - \sum_{j \in \omega_i} m_j p^* [V_{i,j}^2(h_i) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_i) + V_{i,j}^2(h_j) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_j)] \quad (11)$$

$$\frac{dU_i}{dt} = - \sum_{j \in \omega_i} m_j ([p\mathbf{v}]^* - p^* \frac{d\mathbf{x}_i}{dt}) [V_{i,j}^2(h_i) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_i) + V_{i,j}^2(h_j) \nabla W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, \sqrt{2}h_j)] \quad (12)$$

где полагается, что радиус сглаживания  $h$  не очень сильно меняется для соседних частиц,  $p_{ij}^*$  и  $[p\mathbf{v}]_{ij}^*$  - значения в середине ребра  $(i,j)$ :  $s_{i,j}^*$ ,  $s$  - локальная координата на ребре  $(i,j)$ .

Поскольку слагаемые в правых частях дискретных уравнений антисимметричны по номерам частиц, то при суммировании по всем частицам их вклады взаимно уничтожаются. Поэтому при отсутствии физических источников дискретные уравнения обеспечивают сохранение массы, импульса и полной энергии для рассматриваемой системы частиц

$$\sum_i m_i d\mathbf{v}_i / dt = 0 \quad \text{и} \quad \sum_i m_i \frac{d}{dt} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \right)^2 + U_i \right] = 0$$

Масса системы частиц сохраняется так как масса каждой частицы и их число неизменны.

Подобно схеме Годунова для вычисления потоков в средних точках ребер между соседними частицами  $i$  и  $j$  величины  $p^*$  и  $[p\nu]^*$  в эволюционных уравнениях для скорости и внутренней энергии определяются из решения задачи Римана о распаде произвольного разрыва.

Подобно схемам коррекции потоков для устойчивого расчета разрывов вводятся монотонизирующие ограничители градиентов физических величин. Численные эксперименты показывают, что монотонизирующий ограничитель требуется только для градиентов скорости. Таким образом, ограничение по монотонности имеет вид

$$\left(\frac{\partial v}{\partial s}\right)_i = \left(\frac{\partial v}{\partial s}\right)_j = 0 \text{ при } \left(\frac{\partial v}{\partial s}\right)_i \left(\frac{\partial v}{\partial s}\right)_j < 0$$

где  $s$  – координата вдоль ребра  $(i,j)$ . Численная схема должна иметь первый порядок по пространству на скачке. Соответствующий переключатель имеет вид

$$\left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)_i = \left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)_j = 0 \text{ при } c_{shock} \mathbf{e}_{i,j} \cdot (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) > \min(c_{s,i}, c_{s,j})$$

где  $f = \rho, p, \nu$  и  $c_{shock}$  является счетной постоянной, отвечающей числу частиц в окрестности скачка,  $\mathbf{e}_{i,j}$  – единичный вектор вдоль ребра  $(i,j)$ ,  $c_{s,i}$  и  $c_{s,j}$  – скорости звука в точках  $\mathbf{x}_i$  и  $\mathbf{x}_j$ . Обычно полагается  $c_{shock} = 3$ .

Радиус сглаживания определяется формулой

$$h_i = \eta \left[ \frac{m_i}{\rho_i^*} \right]^{1/d}$$

где функция  $\rho^*$  более гладкая, чем  $\rho$  при  $c_{smooth} > 1$ :

$$\rho_i^* = \sum_{j \in \Omega_i} m_j W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h_i^*), \quad h_i^* = h_i c_{smooth}$$

Численные эксперименты показывают, что  $\eta \approx 1$  с  $c_{smooth} = 2$  дают хорошие результаты. Эффективное число соседей около каждой частицы зависит от отношения радиуса сглаживания к среднему расстоянию до соседней частицы. Например, взаимными вкладами

частиц  $i$  и  $j$  можно пренебрегать, если  $|x_i - x_j| > 3 \min(h_i, h_j)$ , так как входящий в функцию ядра множитель  $\exp(-3^2) \approx 1.234 \cdot 10^{-4}$  мал. Таким образом число соседей равно  $6\eta C_{smooth}$  при  $d=1$ ,  $28\eta^2 C_{smooth}^2$  при  $d=2$  и  $128\eta^3 C_{smooth}^3$  при  $d=3$ .

## Глава 21. Метод граничных элементов

### 21.1. Граничные интегральные уравнения

Рассмотрим метод граничных интегральных уравнений на примере смешанной краевой задачи для уравнения Лапласа

$$\Delta \varphi = 0 \text{ внутри } \Omega$$

с граничными условиями

$$\varphi = f_* \text{ или } \partial \varphi / \partial n = g_* \text{ на } \partial \Omega$$

Уравнение Лапласа имеет сингулярное (фундаментальное) решение  $1/(4\pi r(p, q))$ . Здесь  $r(p, q)$  является расстоянием между произвольными точками  $p$  и  $q$  в области решения. Это решение отвечает единичному возмущению (точечному источнику единичной интенсивности), приложенному в точке  $q$ :

$$\Delta \varphi = \delta(r(p, q))$$

где  $\delta(r(p, q))$  - дельта-функция Дирака, определяемая соотношением

$$\int_{\Omega} \Phi(p) \delta(r(p, q)) d\Omega(p) = \Phi(q)$$

Убедиться в справедливости этого решения для точек с  $r(p, q) \neq 0$  можно непосредственной его подстановкой в уравнение Лапласа, которое в полярной системе координат для центрально-симметричного и зависящего только от радиальной координаты  $r = |x_p - x_q|$  решения принимает вид

$$\frac{\partial^2 u^*}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u^*}{\partial r} - \delta(r) = 0$$

При  $r(p, q) = 0$  решение имеет особенность и трактуется в смысле обобщенного решения в соответствии с определением Дирака.

Умножая уравнение Лапласа на произвольную функцию  $w$  и интегрируя его по частям, получаем

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega} \nabla^2 \varphi w d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\nabla \varphi w) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot \nabla w d\Omega = \\ &= \int_S \mathbf{n} \cdot \nabla \varphi w dS - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\varphi \nabla w) d\Omega + \int_{\Omega} \varphi \nabla^2 w d\Omega \end{aligned}$$

или

$$\int_{\partial\Omega} \mathbf{n} \cdot \nabla \varphi w ds - \int_{\partial\Omega} \varphi \mathbf{n} \cdot \nabla w d\Omega + \int_{\Omega} \varphi \nabla^2 w d\Omega = 0$$

Подставляя сюда вместо  $w$  сингулярное решение получаем исходное интегральное тождество метода граничных интегральных уравнений:

$$\varphi(p) = \frac{1}{4\pi} \int_{\partial\Omega} \left\{ g(Q) \frac{1}{r(p, Q)} - f(Q) \frac{\partial}{\partial n} \left[ \frac{1}{r(p, Q)} \right] \right\} ds(Q)$$

где  $p \in \Omega$ ,  $Q \in \partial\Omega$ ,  $g(Q) = \mathbf{n} \cdot \nabla \varphi|_Q$ ,  $f(Q) = \varphi|_Q$ . Устремлением  $p \rightarrow P \in \partial\Omega$  это тождество сводится к интегральному граничному уравнению

$$f(P) = \frac{1}{2\pi} \int_{\partial\Omega} \left\{ g(Q) \frac{1}{r(P, Q)} - f(Q) \frac{\partial}{\partial n_Q} \left[ \frac{1}{r(P, Q)} \right] \right\} ds(Q)$$

где  $f(P) = \lim \varphi(p)$  при  $p \rightarrow P$ . Это уравнение устанавливает связь между  $f$  и  $g$ , а также обеспечивает соответствие обеих этих функций одной и той же гармонической функции  $\varphi$ . В каждой точке границы задана одна из функций  $f$  или  $g$ , а другая подлежит определению. После решения этого уравнения решение  $\varphi$  в области  $\Omega$  определяется с помощью исходного интегрального тождества.

## 21.2. Численная реализация

Граница представляется набором  $N$  граничных элементов (отрезков). Значения функций  $f$  и  $g$  ищутся в классе кусочно-постоянных функций, принимающих постоянные значения на каждом из отрезков. Интегральное уравнение записывается для каждого из отрезков. На каждом отрезке искомым является значение одной

из функций  $f$  или  $g$ , в то время как другое задано граничными условиями.

Основанная на этих предположениях запись интегрального уравнения в точке  $P_i$  имеет вид

$$\left\{ \delta_{ij} + \frac{1}{2\pi} \int_{\partial\Omega_j} \frac{\partial}{\partial n(Q)} \left[ \frac{1}{r(P_i, Q)} \right] ds(Q) \right\} f_j = \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{\partial\Omega_j} \left( \frac{1}{r(P_i, Q)} \right) ds(Q) \right\} g_j$$

где  $\partial\Omega_j$  - граничный элемент,  $i, j = 1, \dots, N$ . Краткая форма записи системы уравнений имеет вид

$$A_{ij} f_j = B_{ij} g_j$$

Здесь матрицы  $A_{ij}$  и  $B_{ij}$  размера  $N \times N$  содержат интегралы, указанные в записи интегрального уравнения выше. На каждом граничном элементе одно из значений  $f_i$  и  $g_i$  задано в соответствии с граничными условиями задачи, а другое определяется выписанной системой алгебраических уравнений. Искомая функция  $\varphi(p)$  в любой внутренней точке  $p$  определяется затем при помощи подстановки полученных граничных значений  $f_i$  и  $g_i$  в исходное интегральное тождество

$$\varphi(p) = \frac{1}{4\pi} \int_{\partial\Omega} \left\{ g(Q) \frac{1}{r(p, Q)} - f(Q) \frac{\partial}{\partial n} \left[ \frac{1}{r(p, Q)} \right] \right\} ds(Q)$$

Производные от решения определяются непосредственным дифференцированием интегрального тождества (дифференцируются подынтегральные выражения, содержащие  $r(p, Q)$ ).

Описанный способ решения носит название метода граничных интегральных уравнений (метода ГИУ) или метода граничных элементов (МГЭ). Для большинства задач он хорошо работает при малом числе  $N$  даже для самых простых аппроксимаций функций  $f$  и  $g$ . Повышение точности достигается за счет увеличения числа элементов  $N$  и за счет применения аппроксимаций более высокого порядка точности (линейных, квадратичных, кубических и так далее). Интегралы в выражениях для коэффициентов алгебраических уравнений метода определяются численно с использованием квадратурных формул. Матрицы МГЭ являются полностью заполненными с диагональным преобладанием. С ростом числа элементов  $N$  их обусловленность ухудшается, что может потребовать преобуслов-

ливания (умножения системы уравнений на приближенную обратную матрицу системы уравнений) для обеспечения устойчивости процесса решения.

Ключевой особенностью метода ГИУ является то обстоятельство, что для решения задачи надо аппроксимировать только граничную поверхность. То есть метод позволяет понизить на единицу размерность задачи. К сожалению, учет распределенных по области источников приводит к необходимости вводить сетку не только на границе, но и в области решения. Так что в задачах с ненулевыми свободными членами понижение размерности заключается только в том, что разрешающая система уравнений содержит только граничные искомые значения решения, но сетку придется построить и внутри области.

Далее, для уравнений с переменными коэффициентами и, тем более, для нелинейных уравнений определение исходных интегральных тождеств практически невозможно. Поэтому приходится прибегать к итерационным методам решения нелинейных уравнений, основанным на выделении линейного оператора классического типа (например, оператора Лапласа). Для такого линейного оператора исходные интегральные тождества известны. В итерациях нелинейные члены включаются в известную правую часть линеаризованных уравнений и определяются по значениям решения с предыдущей итерации. Сходимость таких итерационных процессов имеет место только для слабо нелинейных уравнений. С ростом влияния нелинейности сходимость резко замедляется и может вообще быть утрачена. Это ограничивает возможности применения МГЭ к нелинейным задачам.

### 21.3. Прямой МГЭ для теории упругости

Варианты МГЭ разделяются на прямые, полупрямые и непрямые методы. Под прямым методом граничных элементов подразумевают метод, использующий в качестве искомого переменные, фигурирующие в исходных уравнениях. Под полупрямым методом подразумевают метод, в котором граничные уравнения формулируются для вспомогательных переменных типа потенциала скоростей или функции напряжений. И, наконец, под непрямым методом граничных элементов понимают метод, использующий граничные уравнения для функций плотности основных переменных, которые сами по себе не представляют физические свойства, а служат вспомогательными переменными.

Для теории упругости рассмотрим прямой метод граничных элементов. Он основан на замене исходных уравнений в частных производных интегральным тождеством для упругих перемещений

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}^{(P)}) + \int_{\partial V} \mathbf{T}(\mathbf{x}^{(P)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)} = \int_{\partial V} \mathbf{U}(\mathbf{x}^{(P)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \cdot \mathbf{t}(\mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)} \quad (1)$$

здесь  $\mathbf{u}(\mathbf{x}^{(P)})$  - вектор перемещений в произвольной внутренней точке  $\mathbf{x}^{(P)}$ ;  $\mathbf{u}(\mathbf{x}^{(Q)})$  и  $\mathbf{t}(\mathbf{x}^{(Q)})$  - граничные значения векторов перемещений и напряжений. Ядра  $\mathbf{T}(\mathbf{x}^{(P)}, \mathbf{x}^{(Q)})$  и  $\mathbf{U}(\mathbf{x}^{(P)}, \mathbf{x}^{(Q)})$  определяют проекции векторов напряжений и перемещений во внутренней точке  $\mathbf{x}^{(P)}$ , вызванные приложением единичных возмущений (перемещений и напряжений, соответственно) в точке границы  $\mathbf{x}^{(Q)}$ . При стремлении  $\mathbf{x}^{(P)}$  к точке на границе  $\mathbf{x}^{(P)}$  интегральное тождество (1) переходит в интегральное граничное уравнение

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}^{(P)})/2 + \int_{\partial V} \mathbf{T}(\mathbf{x}^{(P)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \mathbf{u}(\mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)} = \int_{\partial V} \mathbf{U}(\mathbf{x}^{(P)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \mathbf{t}(\mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)} \quad (2)$$

здесь компоненты ядер  $\mathbf{T} = T_{ij}(\mathbf{x}^{(P)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$  и  $\mathbf{U} = U_{ij}(\mathbf{x}^{(P)}, \mathbf{x}^{(Q)}) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$ , отвечающие фундаментальному решению Кельвина-Соммиана для сосредоточенной силы

$$\frac{\partial \sigma_{i,j}}{\partial x_j} = \delta(|\mathbf{x}^{(P)} - \mathbf{x}^{(Q)}|)$$

имеют вид

$$U_{ij}(P, Q) = \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)} \left[ \frac{(3-4\nu)\delta_{ij}}{r} + \frac{(x_i^{(P)} - x_i^{(Q)})(x_j^{(P)} - x_j^{(Q)})}{r^3} \right] \quad (3)$$

$$\begin{aligned} T_{ij}(P, Q) = & \frac{1}{8\pi(1-\nu)} \left[ \frac{(1-2\nu)}{r^3} (-(x_i^{(P)} - x_i^{(Q)})\delta_{jk} + \right. \\ & + (x_j^{(P)} - x_j^{(Q)})\delta_{ik} + (x_k^{(P)} - x_k^{(Q)})\delta_{ij}) + \\ & \left. + \frac{1}{8\pi(1-\nu)} \frac{3(x_i^{(P)} - x_i^{(Q)})(x_j^{(P)} - x_j^{(Q)})(x_k^{(P)} - x_k^{(Q)})}{r^5} \right] n_k \quad (4) \end{aligned}$$

где  $n_k$  - проекции единичной внешней нормали к поверхности  $\partial V$ .

В двумерных задачах теории упругости ядра интегрального тождества имеют следующий вид:

$$U_{ij}(P, Q) = \frac{1}{8\pi\mu(1-\nu)} \left[ (3-4\nu)\delta_{ij} \ln\left(\frac{1}{r}\right) + \frac{\partial r}{\partial x_i} \frac{\partial r}{\partial x_j} \right]$$

$$T_{ij}(P, Q) = \frac{1}{4\pi(1-\nu)r} \left[ \frac{\partial r}{\partial n} \left( (1-2\nu)\delta_{ij} + 2 \frac{\partial r}{\partial x_i} \frac{\partial r}{\partial x_j} \right) + (1-2\nu) \left( \frac{\partial r}{\partial x_i} n_j - \frac{\partial r}{\partial x_j} n_i \right) \right] \quad (5)$$

Чтобы решить уравнение (2), вводится сетка граничных элементов с узлами в центрах тяжести элементов. В каждом граничном элементе граничные перемещения и напряжения принимают постоянные значения, равные значениям в узлах, расположенных в центрах элементов. Уравнение (2) записывается для каждого элемента, причем интегралы по границе вычисляются как суммы интегралов по граничным элементам с использованием введенной аппроксимации решения. При  $\mathbf{x}^{(P)} = \mathbf{x}^{(Q)}$  граничный интеграл имеет особенность, которая раскрывается предельным переходом, который во многих случаях исследуется аналитически, хотя существуют и разнообразные приближенные численные приемы вычисления интегралов, содержащих сингулярности.

Аналогично тому, как это было сделано в краевой задаче для уравнения Лапласа, применение граничных элементов приводит граничное интегральное уравнение к системе линейных алгебраических уравнений дискретизированной задачи следующего вида

$$(0.5\mathbf{E} + \mathbf{A}) \cdot \mathbf{d} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{s} \quad (6)$$

где  $\mathbf{E}$  - единичная матрица,  $\mathbf{d} = \{\mathbf{u}_\alpha\}_{\alpha=1}^N$  и  $\mathbf{s} = \{\mathbf{t}_\alpha\}_{\alpha=1}^N$  векторы дискретных переменных, содержащие граничные значения компонентов векторов перемещений (displacements) и напряжений (stresses) в характерных точках сетки граничных элементов,  $N$  - число граничных элементов, размерность этих векторов равна  $3N$ . Выражения для компонентов матриц  $3N \times 3N$   $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  представляются интегралами от ядер Сомилиана, которые удобно выписать рассматривая эти матрицы как блочные, содержащие  $N \times N$  блоков  $3 \times 3$  отвечающих векторным дискретным переменным  $\mathbf{u}_\alpha$  и  $\mathbf{t}_\alpha$ , каждая из которых имеет три компонента. Блочное представление матриц  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  имеет вид

$$A_{\alpha\beta} = \int_{\partial V_\beta} \mathbf{T}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)}$$

$$B_{\alpha\beta} = \int_{\partial V_\beta} \mathbf{U}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}^{(Q)}) ds^{(Q)}$$

Интегралы можно вычислять как аналитически, так и численно путем применения квадратурных формул. При  $\alpha = \beta$  подынтегральные выражения (ядра) имеют особенность, которая раскрывается путем предельного перехода. Матрицы **A** и **B** являются сплошь заполненными и несимметричными. Система  $N \times 3$  уравнений (6) содержит  $2N \times 3$  граничных параметров  $\mathbf{u}_\alpha$  и  $\mathbf{t}_\alpha$ , она замыкается с помощью  $N \times 3$  граничных условий, формулируемых для каждого граничного элемента в виде ограничений типа равенств, которым должны удовлетворять векторы перемещений и напряжений.

Рассмотренные кусочно-постоянные аппроксимации решения на границах применялись в первых работах по методу граничных элементов, выполненных Риццо и Крузом (1977). В этом подходе граница представлялась отрезками прямых в двумерном случае и плоскими треугольниками в трехмерном случае. Для достижения достаточной точности требовалось большое количество граничных элементов, поэтому на низкопроизводительных компьютерах в 1970-е годы решались только очень простые задачи. В дальнейшем в работах Рикарделло и Круза эффективность МГЭ была улучшена путем применения линейных по граничному элементу аппроксимаций решения. В нашей стране методы граничных интегральных уравнений и граничных элементов активно развивались начиная с 1940-х годов в работах Д.И.Шермана, В.Д.Купрадзе, П.И.Перлина, Р.В. Гольдштейна, А.Я. Александрова, В.С.Рябенского и других.

Имеется большое разнообразие вариантов сведения исходных краевых задач к граничным интегральным уравнениям и, соответственно, большое разнообразие вариантов реализации метода граничных элементов. Подробное рассмотрение вариантов возможно лишь в рамках специального курса теории граничных интегральных уравнений и методов их численного решения. Подробности имеются в монографиях [Перлин, Партон, 1980]; [Бреббиа, Уокер, 1982]; [Бенерджи, Баттерфилд, 1984] и др.

## Послесловие

При написании данной книги и чтении соответствующего курса лекций наиболее важным представлялось не заполнение ее пространства бесконечными формулами, а изложение “на пальцах” идей и принципов предметной области. Иначе за лесом формул и подаваемых навалом деталей суть множества рассматриваемых вопросов осталось бы нераскрытой, замаскированной или недоступной для понимания.

При решении конкретных задач механики сплошных сред специалисту, не важно начинающий он или уже опытный, приходится иметь дело со свежей периодической (журнальной) литературой по теме, в которой можно найти подробности и недостающие детали. Чтобы со знанием дела подобрать необходимую литературу, нужно ориентироваться в предметной области. Если данная книга поможет читателю в этом, то цель книги будет считаться достигнутой.

## Список литературы

- Абрамов А.А. Вариант метода прогонки. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1, N2, 1961, с. 349-351.
- Агошков В.И. Методы оптимального управления и сопряженных уравнений в задачах математической физики. М.: ИВМ РАН, 2003. 256 с.
- Агошков В.И., Дубовский П.Б., Шутяев В.П. Методы решения задач математической физики. М.: Физматлит, 2002. 320 с.
- Алалькин Г.Б., Годунов С.К., Киреева И.Л., Плинер Л.А. Решение одномерных задач газовой динамики в подвижных сетках. М.: Наука, 1970. 112 с.
- Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и ее приложения. М.: Мир, 1972.
- Бабенко К.И. (Ред.) Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики. М.: Наука, 1979. 295 с.
- Бабенко К.И. Основы численного анализа. - М.: Наука, 1986. - 374 с.
- Баженов В. Г., Чекмарев Д. Т. Вариационно-разностные схемы в нестационарных волновых задачах пластин и оболочек Н-Новг.: Изд-во Нижегородского ун-та, 1992, 159с. Физматлит. 2002. 632 с.
- Баничук Н. В., Картвелишвили В. А., Черноусько Ф. Л. Вариационные задачи механики и управления. М.: Наука, 1973.
- Баничук Н.В. Оптимизация форм упругих тел. М.: Наука, 1980
- Бате К., Вильсон Е. Численные методы анализа и метод конечных элементов /Пер. с англ. А.С. Алексеева и др.; Под ред. А.Ф. Смирнова. М.: Стройиздат, 1982
- Бахвалов Н.С. Численные методы, Т. 1. М.: Наука, 1973, 631 с.
- Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М.: Наука, 1987.
- Бейкер Дж., Грейвс-Моррис П. Аппроксимации Паде. Мир. 1986.
- Белевич М. Ю. Связь уравнений неразрывности и диффузии плотности // Фундаментальная и прикладная гидрофизика. 2016.Т. 9. № 1. С. 73—82.
- Белоцерковский О.М., Чушкин П.И. Численный метод интегральных соотношений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1962. Т. 2. № 5. С. 731—759.
- Белоцерковский О.М. (ред.) Численные методы в механике жидкостей, М.: Мир, 1981. 407 с.
- Белоцерковский О. М., Давыдов Ю. М. Метод крупных частиц в газовой динамике. М.: Наука, 1982. 391 с.
- Белоцерковский О. М. Численное моделирование в механике сплошных сред. М.: Наука, 1984, 520 с.

- Белоцерковский О. М., Андрущенко В. А., Шевелев Ю. Д. Динамика пространственных вихревых течений в неоднородной атмосфере. М.: "Янус-К", 2000. 455 с.
- Белоцерковский С. М., Ништ М. И. Отрывное и безотрывное обтекание тонких крыльев идеальной жидкостью. М.: Наука, 1978. 351 с.
- Бенерджи П., Баттерфилд Р. Методы граничных элементов в прикладных науках. М.: Мир, 1984. 494 с.
- Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений, том 1 (2-е издание). М.: Наука, 1962
- Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений, том 2. М.: Наука, 1959
- Бреббиа К., Коннор Дж. Метод конечных элементов в механике жидкости. Л.: Судостроение, 1979. 204 с.
- Бреббиа К., Уокер С. Применение метода граничных элементов в технике. М.: Мир, 1982. 248 с.
- Бураго Н.Г. Формулировка основных уравнений механики сплошной среды в подвижных адаптивных координатах. Сб. Численные методы в механике твердого деформируемого тела, М.: ВЦ АН СССР, 1984. С. 32-49.
- Бураго Н. Г., Кукуджанов В. Н., Решение упругопластических задач методом конечных элементов. Пакет программ Астра. М.: ИПМ АН СССР. 1988. Препринт №326. 63 с.
- Бураго Н.Г., Глушко А.И., Ковшов А.Н."Термодинамический метод вывода определяющих соотношений для моделей сплошных сред" Известия РАН Механика твердого тела. 2000. No. 6. С. 4-15.
- Бураго Н.Г., Иваненко С.А. Применение уравнений теории упругости к построению адаптивных сеток // Труды Всеросс. Конф. по прикладной геометрии, построению сеток и высокопроизводительным вычислениям, М.: ВЦ РАН, 2004, 28 июня- 1 июля. С. 107-118.
- Бураго Н. Г., Кукуджанов В. Н. Обзор контактных алгоритмов // МТТ РАН, No.1, 2005, с.45-87.
- Бураго Н.Г. Моделирование разрушения упругопластических тел // Вычислительная механика сплошных сред, 2008. Т. 1, N. 4, С. 5-20. DOI:10.7242/1999-6691/2008.1.4.33
- Бураго Н.Г., Никитин И.С., Якушев В.Л. Гибридный численный метод решения нестационарных задач механики сплошной среды с применением адаптивных наложенных сеток. Журнал вычислительной математики и математической физики. 2016. Том 56. N.6. С. 1082-1092.
- Быкова Е.Г., Калпуш Т.В., Каропова Е.Д., Киреев И.В., Пятаев С.Ф., Рюде У., Шайдуров В.В. Уточнённые численные методы для задач конвекции-диффузии. (на англ. яз.). Том 1-2. Под ред. У.Рюде, В. В. Шайдурова. - Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 2001. - 252 с.
- Вайнберг М.М., Треногин В.А. Теория ветвлений решений нелинейных уравнений. М.: Наука, 1969. 527 с.

## Список литературы

---

- Валишвили Н.В. Методы расчета оболочек вращения на ЭЦВМ. М.: Машиностроение. 1976. - 278 с.
- Ванько В. И., Ермошина О. В., Кувыркин Г. Н. Вариационное исчисление и оптимальное управление. М.: МГТУ, 1999. Т. 15. 487 с.
- Власова Е. А., Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Приближенные методы математической физики. М.: МГТУ, 2001. Т. 13. 700 с.
- Воеводин В.В. Вычислительные основы линейной алгебры. М.: Наука, 1977.
- Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984.
- Волков Е.А. Численные методы. М.: Наука, 1987. - 248 с.
- Ворожцов Е.В. Разностные методы решения задач механики сплошных сред (учебное пособие). Новосибирск: НГТУ, 1998.
- Ворожцов Е.В., Яненко Н.Н. Методы локализации особенностей в вычислительной газодинамике. Новосибирск: Наука, 1985
- Вычислительные методы в гидродинамике, Б. Олдер, С. Фернбах, М. Ротенберг (Ред.), М., Мир, 1967. 383 с.
- Гавурин М. К. Лекции по методам вычислений. М.: Наука, 1971. 248 с.
- Галлагер Р. МКЭ: Основы /Пер. с англ. - М.: Мир, 1984. - 215с.
- Гильманов А. Н. Методы адаптивных сеток в задачах газовой динамики. М.: Физматлит, 2000. 247 с.
- Годунов С. К. Метод ортогональной прогонки. Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2, №6, 1962, с. 972-982.
- Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики, М.: Наука, 1976.
- Годунов С.К. О численном решении краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений. УМН. 1961. т. 16. № 3.
- Годунов С. К., Рябенский В. С. Разностные схемы. М.: Наука, 1973, 400 с.
- Григолюк Э.И., Толкачев В.М. Контактные задачи теории пластин и оболочек. - М.: Машиностроение. 1980. - 416 с.
- Григолюк Э. И., Шалашилин В. И. Проблемы нелинейного деформирования. Метод продолжения по параметру в нелинейных задачах механики твердого деформируемого тела. М.: Наука. Гл. ред. Физматлит, 1988. 232с
- Громадка Ц.Т. Лэй Ч. Комплексный метод граничных элементов в инженерных задачах: Пер. с англ. М.: Мир, 1990. 303 с.
- Демидович Б. П., Марон И. А., Шувалова Э. З. Численные методы анализа. М.: Наука, 1967. 368 с.
- Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений. М.: Мир, 1984, 333 с.
- Довгий С.А., Лифанов И.К. Методы решения интегральных уравнений. Теория и приложения. Киев: Наукова думка, 2002. 344с.

- Дородницын А.А. Об одном методе решения уравнений ламинарного пограничного слоя // Ж. прикл. механ. и техн. физ. 1960. N 3. С. 111-118.
- Дулан Э., Миллер Дж., Шилдерс У. Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем. М.: Мир, 1983, 199 с.
- Дьяченко В. Ф. Основные понятия вычислительной математики. М., Наука, 1972, 119 с.
- Дьяченко В.Ф. Об одном новом методе численного решения задач газовой динамики с двумя пространственными переменными. ЖВМиМФ. 1965. Т.5. No. 4. С. 680-688.
- Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций, Москва: Наука 1980.
- Зарубин В.С. Математическое моделирование в технике. Изд-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2001
- Зарубин В. С., Кувыркин Г. Н. Математические модели термомеханики. М.: Физматлит, 2002. 167 с.
- Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. М. Мир. 1975. 541 с. (О. С. Zienkiewicz. The Finite Element Method in Engineering Science. McGraw-Hill, London, 1971)
- Зенкевич О., Морган К. Конечные элементы и аппроксимация. М.: Мир, 1986. - 149 с.
- Иваненко С. А. Адаптивно-гармонические сетки. М.: Изд-во ВЦ РАН, 1997. 181 с.
- Иванов Г. В., Волчков Ю. М., Богульский И. О., Анисимов С. А., Кургузов В. А. Численное решение динамических задач упругопластического деформирования твердых тел. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2002. 350 с.
- Ильгамов М. А., Гильманов А. Н. Неотражающие условия на границах расчетной области. М.: Физматлит, 2003
- Ильин В. П. Численные методы решения задач строительной механики. СПбГАСУ, АСВ. 2005. 425с
- Калиткин Н. Н. Численные методы. -М.:Наука,1978. 512с.
- Калмыков С. Г., Кукуджанов В. Н. Метод потоков и корректирующих маркеров (ПИКМ-метод) для моделирования высокоскоростных соударений М.: ИПМ РАН 1993, Препринт №529. 39 с.
- Калнинс А. Исследование оболочек вращения при действии симметричной и несимметричной нагрузок // Тр. амер. общ. инж. мех. "Прикладная механика".1964. Т. 31. No. 3
- Каплун А.Б., Морозов Е.М., Олферьева М.А. ANSYS в руках инженера: Практическое руководство. М.: УРСС, 2004. 272с.
- Ковеня В. М., Яненко Н. Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики. Новосибирск: Наука, 1981. 304 с.
- Колмогоров А. Н., Фомин С. В. Элементы теории функций и функционального анализа. М., Наука, 1972, 496 с.
- Кондауров В. И., Фортов В. Е. Основы термомеханики конденсированной среды. М.: Изд-во МФТИ, 2002, 336с.

## Список литературы

---

- Коннор Дж., Бреббиа К. Метод конечных элементов в механике жидкости. Л.: Судостроение, 1979. 204 с.
- Копченова Н. В., Марон И. А. Вычислительная математика в примерах и задачах. М.: Наука, 1972. 367 с.
- Коробейников С. Н. Нелинейное деформирование твердых тел. Новосибирск: СО РАН, 2000. 261 с.
- Косарев В.И. 12 лекций по вычислительной математике. 2-е изд. - М.: Изд-во МФТИ, 2000. - 224 с.
- Крылов В.И., Бобков В.В., Монастырский П.И. Вычислительные методы, II тома, Москва: Наука 1977.
- Кукуджанов В. Н. Численное решение неодномерных задач распространения волн напряжений в твердых телах. М.: ВЦ АН СССР, 1976, 67 с.
- Кукуджанов В. Н. Численное моделирование динамических процессов деформирования и разрушения упругопластических сред. // Успехи механики. 1985. т.8. Вып.4. с.21-65.
- Кукуджанов В. Н. Разностные методы решения задач механики деформируемых тел. М.: Московский физико-технический институт, 1991, 123 с.
- Кукуджанов В.Н. Численные методы МСС. М.: Наука, 2005.
- Куликовский А. Г., Погорелов Н. В., Семенов А. Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: Физматлит, 2001. 608 с.
- Кунин В. Вычислительная физика. М., Мир, 1979.
- Курант Р., Фридрихс К. Сверхзвуковое течение и ударные волны. М.: Иностранная литература, 1950, 426с.
- Ладыженская О. А. Математические вопросы динамики вязкой несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1970. 288 с.
- Магомедов К. М., Холодов А. С. О построении разностных схем для уравнений гиперболического типа на основе характеристических соотношений. ЖВМиМФ, 1969, 9, N2, с. 373-386.
- Магомедов К. М., Холодов А. С. Сеточно-характеристические методы. М.: Наука. 1988. 287с.
- Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977. 456 с.; 1989. 608 с.
- Марчук Г. И., Шайдуров В. В. Повышение точности решений разностных схем. М.: Наука. 1979. 319 с.
- Марчук Ан. Г. Чубаров Л.Б. Шокин Ю.И. Численное моделирование волн цунами. Новосибирск: Наука, 1983. 175 с.
- Меткалф М. Оптимизация в Фортране. М.: Мир, 1985. 264 с.
- Митчелл Э., Уэйт Р. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными. М.:Мир. 1981. 216 с. (Mitchell A. R. and Wait R. The finite element method in partial differential equations. Wiley. N.-Y. 1977)
- Михлин С. Г. Прямые методы в математической физике, М.-Л.: ГИТТЛ, 1950, 452 с.

## Список литературы

---

- Новацкий В.К. Волновые задачи теории пластичности. М.: Мир, 1978. 307 с.
- Норри Д., де Фриз Ж. Введение в метод конечных элементов. М.: "Мир", 1981. 304 с.
- Оден Дж. Конечные элементы в нелинейной механике сплошных сред. М.: Мир, 1976. - 358 с.
- Ортега Дж., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975, 558 с.
- Пасконов В. М., Полежаев В. И., Чудов Л. А. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена. М.: Наука, 1984, 285 с.
- Петров И.Б., Лобанов А.И. Лекции по вычислительной математике. М: Интернет-Университет Информационных Технологий; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. 523 с.
- Победря Б.Е. Численные методы в теории упругости и пластичности: Учеб. пособие.-2-е изд.- М.: Изд-во МГУ, 1995.- 366 с.
- Полак Э. Численные методы оптимизации. М.: Мир, 1974, 376 с.
- Полежаев В.И., Бунэ А.В., Везуб Н.А. и др. Математическое моделирование конвективного теплообмена на основе уравнений Навье - Стокса. М.: Наука, 1987
- Поттер Д. Вычислительные методы в физике. М.:Мир, 1975, 392с.
- Приклонский В.И. Численные методы. МГУ.: Физфак, 1999. 146с.
- Проблемы турбулентности. / Ред. М. А. Великанов, Н. Т. Швейковский // М.-Л.: ОНТИ, 1936. 332 с.
- Пшеничный Б.Н., Данилин Ю.М. Численные методы в экстремальных задачах. М.: Наука, 1979, 319 с.
- Пэжина П. Основные вопросы упруго-вязко-пластичности. М.: Мир, 1968, 176 с.
- Рекач В. Г. Руководство к решению задач по теории упругости. М.: "Высшая школа", 1966. 227 с.
- Рихтмайер Р.Д. Разностные методы решения краевых задач, М., ИЛ, 1960.
- Рихтмайер Р.Д., Мортон К.В. Разностные методы решения краевых задач, М., Мир, 1972. .
- Рихтмайер Р. Принципы современной математической физики. Ч.1.- М.: Мир, 1982. - 312 с.
- Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н. Системы квазилинейных уравнений. М.: Наука, 1978. 687 с.
- Росляков Г. С., Чудов Л. А. Численные методы в механике сплошных сред. Ч. 1-3, М.: ВЦ МГУ, 1968.
- Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир, 1980, 616с.
- Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971.
- Самарский А.А. Введение в численные методы.- М.: Наука, 1987. - 459с.

## Список литературы

---

- Самарский А.А. Теория разностных схем, Наука, 1989
- Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Вычислительная теплопередача М.: КомКнига. 2003. 784 с
- Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989. 432с.
- Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование. М.: Физматлит, 1997.
- Самарский А.А., Моисеенко Б.Д. Экономичная схема сквозного счета для многомерной задачи Стефана // ЖВМиМФ, 1965. Т. 5. No. 5. С. 816-827.
- Сборник задач для упражнений по курсу: Основы вычислительной математики. / Под ред. Рябенского В.С. - М.: МФТИ, 1988.
- Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. М.: Мир, 1979, 392 с
- Седов Л. И. Методы подобия и размерности в механике. М.: Наука, 1965. 386 с.
- Современное состояние аэродинамики больших скоростей / Ред. Л. Хоуарт, Г.Г.Черный // Москва, ИЛ, 1956. т. 1-2.
- Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Ред. Дж. Холл, Дж. Уатт // М.: Мир, 1979, 312 с.
- Стренг Г. Фикс Г. Теория метода конечных элементов. М.: Мир, 1980.
- Теория ветвления и нелинейные задачи на собственные значения. / Редакторы Дж. Б. Келлер, С. Антман. М.: Мир, 1974. 254 с.
- Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач, Наука 1979.
- Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г., Численные методы решения некорректных задач, Наука, 1990
- Тихонов А.Н., Леонов А.С., Ягола А.Г., Нелинейные некорректные задачи, Наука, 1995
- Тихонов А. Н., Самарский А. А. Однородные разностные схемы на неравномерных сетках. ЖВМиМФ. 1962. N.2. С. 812-832.
- Турбулентность. Принципы и применения. / Ред. У. Фрост и Т. Моулден // М.: Мир, 1980. 535 с.
- Турчак Л.И. Основы численных методов. М.: Наука, 1987. 250с.
- Уилкинс М. Л. Расчет упругопластических течений. В кн. Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир: 1967. с.212-263
- Уилкинсон, Райнш, Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра, М. Машиностроение, 1976
- Федоренко Р. П. Введение в вычислительную физику. Учебное пособие для ВУЗов. М.: Изд-во МФТИ, 1994. 528с
- Флетчер К. Численные методы на основе метода Галеркина. М.: Мир, 1988. 352 с.
- Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей, Мир, 1991 (т.1, 2)

## Список литературы

---

- Фокс А., Пратт М. Вычислительная геометрия. М.: Мир, 1982. 304 с.
- Фомин В. М., Гулидов А. И., Сапожников Г. А. и др. Высокоскоростное взаимодействие тел. Новосибирск: Изд-во СО РАН. 1999. 600с.
- Форсайт Дж., Молер К. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений, М.: Мир, 1969, 167 с.
- Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980. 280 с.
- Хокни Р., Иствуд Дж., Численное моделирование методом частиц, Мир, 1987
- Численное решение задач гидромеханики. / Ред. Р. Рихтмайер // М.: Мир, 1977. 207 с.
- Численные методы в динамике жидкостей. / Ред. Г. Вирц и Ж. Смолдерен // М.: Мир, 1981. 407 с
- Численные методы в механике жидкостей. / Ред. О. М. Белоцерковский. // М.: Мир, 1973. (Proc. of the second Intern. Conf. On Numer. Meth. In Fluid Dynamics. / Eds. J. Ehlers, K. Hepp and H. A. Weldenmuller. Springer-Verlag, N.Y. 1973)
- Численные методы условной оптимизации / Ред. Ф. Гилл, У. Мюррей // М.: Мир, 1977. 290 с.
- Шокин Ю. И. Метод дифференциального приближения. Новосибирск: Наука, 1979.
- Шокин Ю. И., Яненко Н. Н., Метод дифференциального приближения. Приложения к газовой динамике. Новосибирск: Наука СибОт. 1985. 357с.
- Якушев В. Л. Нелинейные деформации и устойчивость тонких оболочек. М: Наука, 2004. 275 с.
- Яненко Н.Н. Методы дробных шагов решения многомерных задач математической физики. - М.: Наука, 1967. - 156 с.
- Яненко Н.Н., Анучина Н.Н., Петренко В.Е., Шокин Ю.И. // Численные методы механики сплошной среды. 1970. Т. 1, No 1, С. 40.
- Ясницкий Л.Н. Метод фиктивных канонических областей в механике сплошных сред. М.: Наука, 1992. 126 с.
- Azarenok B.N. Adaptive Moving Grids in Supersonic Flow Simulation, Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations, B. K. Soni, J. Haeuser, J. F. Thompson, P. Eiseman, (Eds.), Proceedings of the 7th International Conference, Whistler, British Columbia, Canada, Sept. 2000, pp. 629-638.
- Beale JT, Majda A. Vortex methods I, II. Math Comput 1982;39:1-27, and 29-52.
- Beale JT, Majda A. Higher order accurate vortex methods with explicit velocity kernels. J Comput Phys 1985;58:188-208.
- Boris J. P., Book D. L. Flux corrected transport. I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works. // J. Comput. Phys. 1973. V. 11. No. 1. P. 38-69.

- Caish R, Lowemgrub J. Convergence of the vortex method for vortex sheets. *SIAM J Numer Anal* 1989;26:1060–80.
- Chorin AJ. Numerical study of slightly viscous flow. *J Fluid Mech* 1973;57:785–96.
- Chorin A.J., Bernard P. Discretization of a vortex street? with an example of roll-up. *J. Comput. Phys.* 1973. v. 13. pp. 423-429.
- Choquin JP, Huberson S. Particle simulation of viscous flows. *Comput Fluids* 1988;2:397–410.
- Cottet G.H. Convergence of a vortex in cell method for the two-dimensional Euler equations. *Math Comp* 1987;49:407.
- Cottet GH, Mas-Gallic S. A particle method to solve the Navier–Stokes system. *Numer Math* 1990;57:805–27.
- Courant R., Friedrichs K. Lewy H. Uber die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik, *Math. Annalen.* 1928. 100. H. 1/2. 32-74. [Рус. пер.: Курант Р., Фридрихс К., Леви Г. (1940) О разностных уравнениях математической физики, *Успехи матем. наук*, 8, 125-160.]
- Courant R., Isaacson E., Rees M. On the solution of nonlinear hyperbolic equations by finite differences // *Comm. Pure Appl. Math.* 1952. V. 5. No. 3. P. 243-255.
- DuFort E. C., Frankel S. P. Stability conditions in the numerical treatment of parabolic differential equations. // *Math. Tables and Other Aids to Computation.* 1953. V. 7. P. 135-152.
- Gingold R. A. and Monaghan J. J. Smoothed particle hydrodynamics—Theory and application to nonspherical stars, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 181, 375 (1977)
- Glimm J., Graham M.J., Grove J., Li X.L., Smith T.M., Tan D., Tangerman, and Zhang Q., Fronttracking In two and three dimensions, *Comput. Math. Appl.* 35, 1 (1998).
- Glimm J., Grove J. W., Li X. L., Shyue K.-M., Zeng Y., and Zhang Q. Three-dimensional front tracking, *SIAMJ.Sci.Comput.* 19,703(1998).
- Hald O, Mauceri del Prete V. Convergence of vortex methods for Euler’s equations. *Maths Comp* 1979;32:791–809.
- Hess J.L. Calculation of potential flow about arbitrary three-dimensional lifting bodies. *McDonnell Douglas Rep.*, MDC J5679-01 1972.
- Jameson, A. Baker, T. Solution of the Euler equations for complex configurations. In *AIAA*, pages Paper 83-1929. *AIAA*, 1983.
- Jamet D., Lebaigue O., Coutris N. and Delhayе J. M. The second gradient theory for the direct numerical simulations of liquid–vapor flows with phase-change, *J. Comput. Phys.* 169, 624 (2001)
- Koumoutsakos P, Leonard A. High resolution simulations of the flow around an impulsively started cylinder using vortex methods. *J Fluid Mech* 1985;296:1–38.
- Lax P. D. Weak solution of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation. // *Comm. Pure Appl. Math.* 1954. V. 7, No. 1. P. 159-193.

- Lax P.D., Wendroff B. Systems of conservation laws. *Commun. Pure Appl Math.* 1960. V.13. N.2.: 217–237.
- Lax P. D., Wendroff B. Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy. // *Comm. Pure Appl. Math.* 1964. V. 17. No. 3. P. 381-398.
- Leonard A. Computing three-dimensional incompressible flows with vortex laminents. *Annu Rev Fluid Mech* 1985;17:523–59.
- MacCormack R. W. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering // *AIAA Paper*. No. 69-354.
- Monaghan J.J., Shock Simulation by the Particle Method SPH, *Journal of Computational Physics* 52 (1983), S. 374-389
- Monaghan J.J. Smoothed particle hydrodynamics, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **30**, 543 (1992)
- v. Neumann J., Richtmeyer R.D., A Method for the Numerical Calculation of Hydrodynamic Shocks, *J. Appl. Phys.* 21, 232-237, 1957
- Osher S., Fedkiw, R. P. Level set methods: An overview and some recent results, *J. Comput. Phys.* 169,463(2001)
- Peskin C.S. Numerical analysis of blood flow in the heart, *J. Comput. Phys.* 25, 220 (1977)
- Peyrot R. and Taylor T.D. *Computational Methods for Fluid Flow*. Springer-Verlag, N.-Y. 1983.
- Scardovelli R., Zaleski, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 31, 567 (1999).
- Sethian J.A. *Level Set Methods. Evolving Interfaces in Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*, Cambridge University Press, 1996.
- Shuichiro Inutsuka, Reformulation of Smoothed Particle Hydrodynamics with Riemann Solver // *Journal of Computational Physics* **179**, 238–267 (2002)
- Tryggvason G., Bunner B., Esmarelli A., Juric D., Al-Rawahi N., Tauber W., Han J., Nas S., and Jan Y. J. A front tracking method for the computations of multiphase flow, *J. Comput. Phys.* 169, 708 (2001)
- Unverdi S. and Tryggvason G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multifluid flows, *J. Comput. Phys.* 100, 25 (1992).
- Wilkins M. L., *Computer Simulation of Dynamic Phenomena*, Springer, 1999
- Yanenko N. N. *The Method of Fractional Steps*. Springer, N.Y., 1971 (in French, *Methodes a Pas Fractionnaires*, Armand Colin, Paris, 1968)
- Yee H. C. A class of high-resolution explicit and implicit shock-capturing methods. Technical Report Lecture Series 1989-04, von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1989.

## Приложение 1. Из функционального анализа

Ниже *напоминаются* некоторые основные понятия функционального анализа, использованные в изложении. Для более подробного чтения рекомендуются книги Колмогорова и Фомина (1972) и Михлина (1950).

### П1.1. Линейное множество

Линейное множество или линеал образуется элементами, сложение которых и умножение на число дает элемент того же множества.

Примеры: 1) пространство векторов. 2) пространство функций имеющих общую область определения и непрерывные производные до какого-то определенного порядка  $n$  (обозначается  $C^{(n)}$ , по первой букве слова непрерывный - continuous).

Более строгое и подробное (педантичное) определение линейного пространства  $M$  основано на аксиомах линейного пространства:

- 1)  $x + y = y + x$ , сложение коммутативно ( $\forall x, y \in M$ );
- 2)  $(x + y) + z = x + (y + z)$ , сложение ассоциативно ( $\forall x, y, z \in M$ );
- 3) существует единственный нулевой элемент  $0 \in M$  такой, что  $x + 0 = x$ ,  $\forall x \in M$ ;
- 4) для любого элемента ( $\forall x \in M$ ) существует единственный противоположный элемент  $-x \in M$  такой, что  $x + (-x) = 0$ ;
- 5)  $\alpha(\beta x) = (\alpha\beta)x$ , умножение на число ассоциативно ( $\forall x \in M$ ;  $\alpha, \beta$  - вещественные числа);
- 6)  $1x = x$ , ( $\forall x \in M$ ) - умножение на единицу не меняет элемента;
- 7)  $\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y$ , ( $\forall x, y \in M$ ) умножение на число дистрибутивно относительно сложения элементов;
- 8)  $(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x$ , умножение вектора на число дистрибутивно относительно сложения чисел.

### П1.2. Норма

Норма в линейном пространстве является аналогом длины вектора и вводится для оценки величины элементов линейного множества и расстояний между элементами - точками этого про-

пространства и превращает линейное пространство в нормированное пространство. Свойства нормы имеют вид:

$$\begin{aligned} \|f\| &\geq 0, \\ \|\lambda f\| &= |\lambda| \|f\| \\ \|f + g\| &\leq \|f\| + \|g\| \end{aligned}$$

где последнее неравенство называется неравенством треугольника. Из  $\|f\| = 0$  следует  $f = 0$ , в противном случае  $\|f\|$  называется полунормой.

Например, в функциональном пространстве непрерывных функций  $C$  для любого ( $\forall$ ) элемента  $f(x)$  ( $x \in V$ ) норма ( $\|f\|$ ) определяется так

---

$$\forall f \in C, : \|f\| = \max_{x \in V} |f(x)|$$

в функциональном пространстве "интегрируемых с квадратом" функций  $L_2$  норма вводится так:

$$f \in L_2 : \|f\| = \left( \int_V f^2(x) dV \right)^{1/2}$$

в трехмерном пространстве векторов  $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3) \in A$  норма вводится так:

$$\forall \mathbf{a} \in A : \|\mathbf{a}\| = \left( \sum_{i=1}^3 a_i^2 \right)^{1/2}$$

Полунорма: в трехмерном пространстве векторов  $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z) \in A$  модуль отдельной компоненты дает пример полунормы:

$$\mathbf{a} \in A : \|\mathbf{a}\| = |a_x|$$

В отличие от нормы полунорма может равняться нулю для ненулевых элементов.

### П1.3. Гильбертовы пространства

Гильбертовы пространства это линейные пространства, в которых определено *скалярное произведение* любых двух элементов, а нормой элемента является корень квадратный от скалярного

произведения элемента на себя. Если, например, скалярное произведение определить так

$$(f_1, f_2) = \int_V f_1(x)f_2(x)dV, \quad \|f\| = [(f, f)]^{1/2}$$

то имеем гильбертово функциональное пространство интегрируемых с квадратом функций  $H_2$ . Другим примером может служить  $N$ -мерное пространство векторов со скалярным произведением

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^N a_i b_i, \quad \|\mathbf{a}\| = [(\mathbf{a}, \mathbf{a})]^{1/2}$$

называемое гильбертовым пространством  $N$ -мерных векторов.

Скалярное произведение удовлетворяет неравенству Коши-Буняковского:

$$|(f \cdot g)| \leq \|f\| \|g\|$$

и имеет следующие свойства:

$$(f \cdot g) = (g \cdot f)$$

$$\alpha(f \cdot g) = (\alpha g \cdot f)$$

$$(f \cdot (g_1 + g_2)) = (f \cdot g_1) + (f \cdot g_2)$$

$$(f \cdot f) > 0 \text{ если } f \neq 0$$

$$(f \cdot f) = 0 \text{ если } f = 0$$

Элементы гильбертова пространства ортогональны, если их скалярное произведение равно нулю.

## П1.4. Линейная зависимость и базис

Говорят, что элемент  $f$  *линейно зависит* от элементов  $f_i$ , если найдутся отличные от нуля вещественные числа  $\alpha_i$  такие, что

$$f = \sum_{i=1}^N \alpha_i f_i$$

Последовательность линейно-независимых элементов  $\{u_i\}_{i=1}^{\infty}$  считается полной, если можно найти такое целое положительное число  $N$  и набор чисел  $\{\alpha_i\}_{i=1}^N$ , при которых для произвольного элемента линейного пространства справедливо неравенство

$$\|u - \sum_{i=1}^N \alpha_i u_i\| < \varepsilon$$

для любого наперед заданного малого числа  $\varepsilon > 0$ . При этом элементы  $\{u_i\}_{i=1}^{\infty}$  называются базисом, а числа  $\{\alpha_i\}_{i=1}^N$  называются коэффициентами Фурье.

Важными представляются следующие определения и утверждения:

*Базис* это совокупность всех линейно-независимых элементов пространства.

Число базисных элементов определяет *размерность пространства*.

Любой элемент пространства есть линейная комбинация (суперпозиция) базисных элементов. Коэффициенты такой линейной комбинации называются коэффициентами разложения этого элемента по базисным элементам.

*В нормированном базисе* норма каждого из базисных элементов равна единице.

*В ортогональном базисе* скалярные произведения базисных векторов между собой равны нулю.

## П1.5. Оператор и функционал

*Оператор* преобразует один элемент линейного пространства в другой элемент (возможно, в элемент другого пространства). Примеры: дифференцирование, умножение на число.

*Положительно определенный* оператор  $A$  для любого элемента  $x$  удовлетворяет неравенству

$$(Ax, x) > 0$$

*Самосопряженный* оператор удовлетворяет равенству

$$(Ax, y) = (x, Ay)$$

для любых элементов  $x$  и  $y$ .

*Функционалом называют* оператор, который преобразует элемент пространства в число. Примеры: норма, скалярное произведение.

Последовательность элементов  $f_i (i=1,2,\dots)$  имеет предел  $f$  тогда и только тогда, когда для любого  $\varepsilon > 0$  найдется такой номер  $i_* > 0$ , что для всех больших номеров  $i > i_*$  будет выполнено неравенство  $\|f_i - f\| < \varepsilon$ .

## П1.6. Полнота

Последовательность элементов  $f_i (i=1,2,\dots)$  имеет предел  $f$  тогда и только тогда, когда для любого  $\varepsilon > 0$  найдется такой номер  $i_* > 0$ , что для всех больших номеров  $i > i_*$  будет выполнено неравенство  $\|f_i - f\| < \varepsilon$ .

*Полнота пространства означает, что* пределы любых последовательностей элементов этого пространства принадлежат этому же пространству. *Полнота базиса* означает, что любой элемент пространства представим в виде предела последовательности линейных комбинаций базисных функций.

## П1.7. Подпространство

*Подпространство  $H'$  пространства  $H$  определяется* отношениями:  $H' \subset H$ , или  $f \in H' \Rightarrow f \in H$ . *Оболочка* это конечномерное подпространство  $H^{(N)}$ , образованное линейными комбинациями  $N$  линейно независимых векторов  $\varphi_i(x)$

$$H^{(N)} = \left\{ f(x) : f = \sum_{i=1}^N a_i \varphi_i(x), \forall a_i \in R^{(1)} \right\}$$

где  $R^{(1)}$  - одномерное арифметическое пространство (множество вещественных чисел).

## Приложение 2. Абстрактная тензорная нотация

При записи формул приняты следующие обозначения:  $f, g$  – скаляры,  $a, b, \dots$  – векторы,  $T$  – тензор второго ранга,  $I$  – единичный тензор,  $e_i (i=1,2,3)$  – ортонормальный базис декартовой системы координат, по повторяющимся индексам подразумевается суммирование, заключенный в скобки индекс не суммируется,  $\mathbf{r} = x_i e_i$  – радиус-вектор,  $V$  – область трехмерного пространства, ограниченная поверхностью  $S$ ,  $\mathbf{n}$  – вектор единичной внешней нормали. В ряде формул рассмотрена поверхность  $S$ , ограниченная контуром  $C$  с элементом  $dl$ . Подчеркнем, что, вопреки распространенному заблуждению, приводимая ниже запись выражений в абстрактной тензорной нотации, кроме выражений, явно использующих индексно-компонентную нотацию, справедливы для любой системы координат, а не только для декартовой.

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} \times \mathbf{a} = \mathbf{b} \times \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{c} \cdot \mathbf{a} \times \mathbf{b} = \mathbf{c} \times \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$$

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{c} \times \mathbf{b}) \times \mathbf{a} = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{c}$$

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) + \mathbf{b} \times (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) + (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) \times \mathbf{b} = 0$$

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{d}) - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{d})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{c})$$

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \times (\mathbf{c} \times \mathbf{d}) = (\mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{d})\mathbf{c} - (\mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c})\mathbf{d}$$

$$\nabla = e_i \partial / \partial x_i$$

$$\nabla(fg) = \nabla(gf) = f\nabla g + g\nabla f$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{f}\mathbf{a}) = f\nabla \cdot \mathbf{a} + \mathbf{a} \cdot \nabla f$$

$$\nabla \times (\mathbf{f}\mathbf{a}) = f\nabla \times \mathbf{a} + \nabla f \times \mathbf{a}$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{a} - \mathbf{a} \cdot \nabla \times \mathbf{b}$$

$$\nabla \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{a}(\nabla \cdot \mathbf{b}) - \mathbf{b}(\nabla \cdot \mathbf{a}) + (\mathbf{b} \cdot \nabla)\mathbf{a} - (\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b}$$

$$\mathbf{a} \times (\nabla \times \mathbf{b}) = (\nabla \mathbf{b}) \cdot \mathbf{a} - (\mathbf{a} \cdot \nabla)\mathbf{b}$$

$$\mathbf{a} \times (\nabla \times \mathbf{b}) = (\nabla \mathbf{b}) \cdot \mathbf{a} + \mathbf{b} \times (\nabla \times \mathbf{a}) + (\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b} + (\mathbf{b} \times \nabla) \mathbf{a}$$

$$\nabla^2 f = \nabla \cdot \nabla f$$

$$\nabla^2 \mathbf{a} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{a}) - \nabla \times \nabla \times \mathbf{a}$$

$$\nabla \times \nabla f = 0$$

$$\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{a} = 0$$

$$\mathbf{T} = T_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$$

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = \partial T_{ij} / \partial x_j$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{a} \mathbf{b}) = (\nabla \cdot \mathbf{a}) \mathbf{b} + (\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b}$$

$$\nabla \cdot (f \mathbf{T}) = (\nabla \cdot f) \mathbf{T} + f \nabla \cdot \mathbf{T}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{r} = 3$$

$$\nabla \times \mathbf{r} = 0$$

$$\nabla |\mathbf{r}| = \mathbf{r} / |\mathbf{r}|$$

$$\nabla (1/|\mathbf{r}|) = -\mathbf{r} / |\mathbf{r}|^3$$

$$\nabla \otimes \mathbf{r} = \mathbf{I}$$

$$\int_V \nabla f dV = \int_S f \mathbf{n} dS$$

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \int_S \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} dS$$

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{T} dV = \int_S \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} dS$$

$$\int_V \nabla \times \mathbf{a} dV = \int_S \mathbf{a} \times \mathbf{n} dS$$

$$\int_V (f\nabla^2 g - g\nabla^2 f) dV = \int_S (f\nabla g - g\nabla f) \cdot \mathbf{n} dS$$

$$\int_V (\mathbf{a} \cdot \nabla \times \nabla \times \mathbf{b} - \mathbf{b} \cdot \nabla \times \nabla \times \mathbf{a}) dV = \int_S (\mathbf{b} \times \nabla \times \mathbf{a} - \mathbf{a} \times \nabla \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{n} dS$$

$$\int_S \nabla f \times \mathbf{n} dS = \int_C \mathbf{f} \mathbf{n} dl$$

$$\int_S (\nabla \times \mathbf{a}) \cdot \mathbf{n} dS = \int_C \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} dl$$

$$\int_S (\nabla f \times \nabla g) \cdot \mathbf{n} dS = \int_C f dg = - \int_C g df$$

## Приложение 3. Криволинейные координаты

### П3.1. Цилиндрические координаты

Дивергенция

$$\nabla \cdot \mathbf{a} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r a_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial a_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial a_z}{\partial z}$$

Градиент

$$(\nabla f)_r = \frac{\partial f}{\partial r}; \quad (\nabla f)_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta}; \quad (\nabla f)_z = \frac{\partial f}{\partial z}$$

Вихрь (Ротор)

$$\begin{aligned} (\nabla \times \mathbf{a})_r &= \frac{1}{r} \frac{\partial a_z}{\partial \theta} - \frac{\partial a_\theta}{\partial z}; \\ (\nabla \times \mathbf{a})_\theta &= \frac{\partial a_r}{\partial z} - \frac{\partial a_z}{\partial r}; \\ (\nabla \times \mathbf{a})_z &= \frac{1}{r} \frac{\partial (r a_\theta)}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial a_r}{\partial \theta} \end{aligned}$$

Лапласиан

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$

Лапласиан вектора

$$\begin{aligned} (\nabla^2 \mathbf{a})_r &= \nabla^2 a_r - \frac{2}{r^2} \frac{\partial a_\theta}{\partial \theta} - \frac{a_r}{r^2}; \\ (\nabla^2 \mathbf{a})_\theta &= \nabla^2 a_\theta + \frac{2}{r^2} \frac{\partial a_r}{\partial \theta} - \frac{a_\theta}{r^2}; \\ (\nabla^2 \mathbf{a})_z &= \nabla^2 a_z \end{aligned}$$

Компоненты конвективного члена  $(\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b}$

$$\begin{aligned}
 ((\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b})_r &= a_r \frac{\partial b_r}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_r}{\partial \theta} + a_z \frac{\partial b_r}{\partial z} - \frac{a_\theta b_\theta}{r} \\
 ((\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b})_\theta &= a_r \frac{\partial b_\theta}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_\theta}{\partial \theta} + a_z \frac{\partial b_\theta}{\partial z} + \frac{a_\theta b_r}{r} \\
 ((\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b})_z &= a_r \frac{\partial b_z}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_z}{\partial \theta} + a_z \frac{\partial b_z}{\partial z}
 \end{aligned}$$

Дивергенция тензора

$$\begin{aligned}
 (\nabla \cdot \mathbf{T})_r &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r T_{rr}) + \frac{1}{r} \frac{\partial T_{\theta r}}{\partial \theta} + \frac{\partial T_{zr}}{\partial z} - \frac{T_{\theta\theta}}{r} \\
 (\nabla \cdot \mathbf{T})_\theta &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r T_{r\theta}) + \frac{1}{r} \frac{\partial T_{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial T_{z\theta}}{\partial z} + \frac{T_{\theta r}}{r} \\
 (\nabla \cdot \mathbf{T})_z &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r T_{rz}) + \frac{1}{r} \frac{\partial T_{\theta z}}{\partial \theta} + \frac{\partial T_{zz}}{\partial z}
 \end{aligned}$$

## П3.2. Сферические координаты

Дивергенция

$$(\nabla \cdot \mathbf{a}) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 a_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta a_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial a_\phi}{\partial \phi}$$

Градиент

$$(\nabla \cdot f)_r = \frac{\partial f}{\partial r}, \quad (\nabla \cdot f)_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta}, \quad (\nabla \cdot f)_\phi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi}$$

Вихрь

$$\begin{aligned}
 (\nabla \times \mathbf{a})_r &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta a_\phi) - \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial a_\theta}{\partial \phi} \\
 (\nabla \times \mathbf{a})_\theta &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial a_r}{\partial \phi} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r a_\phi) \\
 (\nabla \times \mathbf{a})_\phi &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r a_\theta) - \frac{1}{r} \frac{\partial a_r}{\partial \theta}
 \end{aligned}$$

Лапласиан

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial f}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2}$$

Лапласиан вектора

$$(\nabla^2 \mathbf{a})_r = \nabla^2 a_r - \frac{2a_r}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial a_\theta}{\partial \theta} - \frac{2 \cot \theta a_\theta}{r^2} - \frac{2}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial a_\varphi}{\partial \varphi}$$

$$(\nabla^2 \mathbf{a})_\theta = \nabla^2 a_\theta + \frac{2}{r^2} \frac{\partial a_r}{\partial \theta} - \frac{a_\theta}{r^2 \sin^2 \theta} - \frac{2 \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial a_\varphi}{\partial \varphi}$$

$$(\nabla^2 \mathbf{a})_\varphi = \nabla^2 a_\varphi - \frac{a_\varphi}{r^2 \sin^2 \theta} + \frac{2}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial a_r}{\partial \varphi} + \frac{2 \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial a_\theta}{\partial \varphi}$$

Компоненты конвективного члена  $(\mathbf{a} \cdot \nabla) \mathbf{b}$

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b})_r = a_r \frac{\partial b_r}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_r}{\partial \theta} + \frac{a_\varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial b_r}{\partial \varphi} - \frac{a_\theta b_\theta + a_\varphi b_\varphi}{r}$$

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b})_\theta = a_r \frac{\partial b_\theta}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_\theta}{\partial \theta} + \frac{a_\varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial b_\theta}{\partial \varphi} + \frac{a_\theta b_r}{r} - \frac{\cot \theta a_\varphi b_\varphi}{r}$$

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla \mathbf{b})_\varphi = a_r \frac{\partial b_\varphi}{\partial r} + \frac{a_\theta}{r} \frac{\partial b_\varphi}{\partial \theta} + \frac{a_\varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial b_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{a_\varphi b_r}{r} + \frac{\cot \theta a_\theta b_\theta}{r}$$

Дивергенция тензора

$$(\nabla \cdot \mathbf{T})_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 T_{rr}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta T_{\theta r})$$

$$+ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial T_{\varphi r}}{\partial \varphi} - \frac{T_{\theta\theta} + T_{\varphi\varphi}}{r}$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{T})_\theta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 T_{r\theta}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta T_{\theta\theta})$$

$$+ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial T_{\varphi\theta}}{\partial \varphi} + \frac{T_{\theta r}}{r} - \frac{\cot \theta T_{\varphi\varphi}}{r}$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{T})_\varphi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 T_{r\varphi}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta T_{\theta\varphi})$$

$$+ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial T_{\varphi\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{T_{\varphi r}}{r} - \frac{\cot \theta T_{\varphi\theta}}{r}$$

## Приложение 4. Свойства разностных схем

*Аппроксимация* это приближенное представление функций и соотношений между ними.

*Ошибка аппроксимации* это разность между точным и приближенным выражениями уравнения или его части.

*Порядок аппроксимации* это показатель степенной функции, характеризующей скорость убывания ошибки аппроксимации в зависимости от числа базисных элементов или от величины шага сетки.

*Устойчивость* это существование и ограниченность оператора, обратного исходному оператору задачи, что необходимо для непрерывной зависимости решения от входных данных.

*Сходимость* это стремление нормы ошибки (разности между точным и приближенным решениями) к нулю при наращивании числа используемых базисных элементов аппроксимирующего пространства.

*Конвекция* это процесс переноса субстанции вместе с потоком массы.

*Транспортность* это правильное описание распространения возмущений благодаря конвекции.

*Диффузия* это вязкое сглаживание (обмен субстанцией без перетока массы, в реальности обеспечивается благодаря хаотичному движению и взаимодействию молекул) диффузионный поток пропорционален антиградиенту диффундирующей величины с коэффициентом пропорциональности, называемым коэффициентом диффузии.

*Основные типы вязкости:* физическая вязкость, аппроксимационная (схемная) вязкость, явная искусственная вязкость, вязкость сглаживания, эффективная (суммарная) вязкость.

*Диссипация (рассеяние энергии)* это наличие диффузии в схеме.

*Дисперсия* это зависимость скорости распространения возмущений от длины волны.(или от частоты)

*Консервативность* это выполнение законов сохранения.

*Дивергентная форма записи* определяет скорость изменения сохраняемой величины через дивергенцию ее потока.

*Локальная консервативность* означает консервативный обмен субстанцией за счет конвективных и диффузионных потоков между соседними контрольными или приузловыми объемами.

*Глобальная консервативность* означает выполнение законов сохранения для области решения в целом. Глобально консервативная схема является и локально консервативной. Обратное неверно.

#### Приложение 4. Свойства разностных схем

---

*Монотонность* это свойство схем не производить новые минимумы и максимумы для рассчитываемой функции (при отсутствии источников и стоков)

*Однородность* это одинаковость алгоритма расчета всех ячеек (узлов, шаблонов) сетки.

*Схема сквозного счета* это однородная схема для расчета разрывных решений.

*Робастность* это способность алгоритма найти решение при произвольных входных данных

*Эффективность* это способность схемы выдать решение в разумный срок.

*Экономичность* это уменьшенный объем вычислений, требуемых для достижения определенной точности. Для суждения об экономичности нужна оценка асимптотической скорости возрастания объема вычислений при увеличении числа базисных элементов.

*Точность* характеризует величину ошибки приближенного решения в зависимости от числа базисных элементов (членов ряда, числа конечных элементов, объемов, узлов, частиц и т.д.).

Предметный указатель

---

## **Предметный указатель**

## Предметный указатель

---

- Аппроксимация 269  
Безразмерные переменные 115  
Вязкость 269  
Граничные условия  
    для закона сохранения ..... 112  
    типа Дирихле ..... 112  
    типа Неймана ..... 112  
Грань 30  
Дивергенция 266, 267, 268  
Дисперсия 269  
диссипация 269  
Диссипация 135  
диффузия 135, 269  
Достоверность численных решений  
    113  
Жесткие системы ОДУ 80  
Интерполяция 26  
    глобальная ..... 26  
    локальная ..... 26  
    полиномами Лагранжа ..... 26  
    степенными функциями ..... 27  
Консервативность 269  
    способы обеспечения ..... 104  
Координаты  
    объемные ..... 32  
    площадные ..... 32  
Масштабирование неизвестных  
    48  
Матрица Гильберта 29  
Машинное эpsilon 115  
Метод  
    R-функций ..... 125  
    Адамса ..... 79  
    Адамса-Башфорта ..... 79  
    барьерных функций ..... 75  
    бессеточный ..... 125  
    Бубнова-Галеркина ..... 19  
    Галеркина ..... 19  
    Галеркина бессеточный ..... 125  
    гармонических возмущений ..... 130  
    Гири ..... 81  
    Годунова 45, 155, 156, 158, 159,  
        160  
    градиентный ..... 61  
    граничных интегральных  
        уравнений ..... 124  
    граничных элементов ..... 124  
    дискретных возмущений ..... 129  
    дифференциальных приближений  
        ..... 132  
    искусственных аналитических  
        решений ..... 114  
    итерационный безматричный ..... 63  
    Калнинса ..... 87  
    квадратного корня ..... 54  
    квазилинеаризации ..... 85  
    конечных разностей ..... 120  
    Лакса-Вендроффа ..... 161  
    Либмана или Гаусса-Зейделя ..... 59  
    локальных вариаций ..... 75  
    матричный ..... 131  
    минимальных невязок ..... 61  
    множителей Лагранжа ..... 74  
    моментов ..... 20  
    наименьших квадратов ..... 22  
    наискорейшего спуска ..... 61  
    Ньютона ..... 65  
    Ньютона модифицированный ..... 65  
    Ньютона-Канторовича ..... 66  
    ортогональной прогонки ..... 89  
    погружения ..... 67  
    последовательной релаксации ..... 60  
    последовательных смещений ..... 59  
    предиктор-корректор ..... 78  
    прогонки Абрамова ..... 89  
    продолжения по параметру ..... 67  
    простой итерации ..... 59  
    прямых ..... 119  
    разделения переменных ..... 117  
    распада разрыва ..... 45  
    расщепления ..... 120, 123  
    Рунге-Кутты ..... 78  
    Рэля-Ритца ..... 21  
    сопряженных градиентов ..... 62  
    спектральный ..... 125, 131  
    сплайнов ..... 90  
    стрельбы или пристрелки ..... 83  
    суперэлементов ..... 57  
    упругих решений ..... 65  
    установления ..... 169  
    фронтальный ..... 56  
    Хойна ..... 78  
    штрафных функций ..... 74  
    Эйлера с пересчетом ..... 78  
    Эйлера явный ..... 77  
Монотонность 270  
Неподвижная точка отображения  
    59  
Однородность 270  
Оптимизация структуры матриц  
    СЛАУ 52  
Ошибка аппроксимации 269  
Параметры подобия 116  
Покоординатная редукция уравнений  
    118  
Порядок аппроксимации 269  
Правило Крамера 49  
Предобусловливание 48  
Принцип  
    замороженных коэффициентов 135  
    сжимающих отображений ..... 59, 60

## Предметный указатель

---

Принцип расщепления по процессам 136	нестационарной диффузии.....112
Прогонка	обезразмеривание.....114
матричная ..... 51	переноса .....111
Программирование	погранслойное.....112
линейное ..... 71	Устойчивость 136, 269
математическое..... 71	Функционал
нелинейное ..... 73	энергии .....61
Ребро 30	Хранение матриц СЛАУ 52
Робастность 270	Численное дифференцирование
Сверхсходимость 36	использование интерполянтов ...42
Сетка 30	метод естественной
неоднородная ..... 30	аппроксимации.....44
неравномерная ..... 30	метод неопределенных
нерегулярная ..... 30	коэффициентов.....42
неструктурированная ..... 30	метод отображений .....45
однородная ..... 30	Численное интегрирование 35
равномерная..... 30	формула прямоугольников.....35
регулярная ..... 30, 31	формула Симпсона .....36
структурированная ..... 30	формулы Гаусса .....36
Симметризация СЛАУ 53	Число обусловленности 28
Сингулярные числа матрицы 28	Экономичность 270
Сплайны 30	Экстраполяция 26
Схема	Эффективность 270
аппроксимирующая ..... 126	
ВВЦП.....129	
квазиньютоновская неявная ..... 81	
Кранка-Николсона ..... 81	
Лакса ..... 140, 147	
Лакса-Вендроффа ..... 147	
Мак-Кормака ..... 148	
многослойная ..... 77	
многошаговая ..... 77	
неявная..... 77, 80	
явная ..... 77	
Сходимость 269	
Теорема	
Куна-Таккера ..... 74	
Лакса ..... 127	
о неявной функции ..... 69	
о параметрах подобия ..... 115	
о соотношениях на скачке ..... 109	
о сходимости каркасов ..... 17	
о сходимости приближенных решений ..... 18	
Точка	
ветвления ..... 70	
особая..... 70	
предельная ..... 70	
умирания решения..... 70	
Точность 270	
Транспортивность 269	
Турбулентность 11	
Уравнение	
гиперболическое второго порядка ..... 112	

## Именной указатель

- Абрамов А.А. 89  
Алберг Дж. 31, 90  
Бахвалов Н.С. 89  
Бубнов И.Г. 19  
Гавурин М.К. 18, 19  
Галеркин Б.Г. 23, 41  
Гаусс К. 36, 37, 38, 40  
Гильберт Д. 28  
Годунов С.К. 45, 89, 122  
Калнинс Е. 87, 89  
Колмогоров А.Н. 258  
Крамер Г. 46  
Лагранж Ж.Л. 27  
Михлин С.Г. 12, 252, 258  
Молер К. 48  
Нильсен Э. 31, 90  
Остроградский М.В. 44  
Райнш У. 24, 25  
Ритц В. 21  
Рэлей Д.У. 21  
Рябенский В.С. 45  
Сегерлинд Л. 34  
Тейлор Б. 44  
Уилкинсон 24, 25  
Уолш Дж. 31, 90  
Фомин С.В. 258  
Форсайт Дж. 48