СОДЕРЖАНИЕ

Том 62, номер 8, 2022 год

EDN: SBSSFU
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1235–1236

УДК 51(092)

10-я МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ “ЧИСЛЕННАЯ ГЕОМЕТРИЯ, ПОСТРОЕНИЕ РАСЧЕТНЫХ СЕТОК И ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ (NUMGRID 2020/Delaunay 130)”

DOI: 10.31857/S0044466922080154

В этом номере журнала публикуются расширенные версии статей, представленных на 10-й Международной конференции “Численная геометрия, построение расчетных сеток и высокопроизводительные вычисления (NUMGRID 2020/Delaunay 130)”, посвященной 130-летию со дня рождения Бориса Николаевича Делоне, которая прошла с 25 по 27 ноября 2020 г. в Москве.

Международная конференция NUMGRID проводится каждые два года (впервые она состоялась в 2002 г.) и является одной из небольших, но широко известных международных конференций в области построения расчетных сеток. В связи с ограничениями из-за COVID-19 в 2020 г. конференция проводилась в режиме онлайн. В ней приняли участие около сорока ученых из двенадцати стран.

Тематика конференции включает в себя теорию разбиений Делоне-Вороного, алгоритмы построения сеток и разбиений, методы деформации и оптимизации сеток, принцип равномерного распределения и оценки ошибок при адаптации, алгоритмы дискретной дифференциальной геометрии, двойственность в математическом программировании и численной геометрии, оптимизацию на основе сеток и методы оптимального управления, итерационные решатели для вариационных задач, а также разработка алгоритмов и программного обеспечения. Приложения обсуждаемых методов носят междисциплинарный характер и включают проблемы из математики, обработки и анализа данных (Big Data), вычислительной физики, математической кристаллографии и других областей.

Поскольку рабочим языком конференции был английский, научный перевод статей номера на русский язык был выполнен Оргкомитетом NUMGRID 2020 с помощью русскоговорящих авторов.

Эта конференция посвящена 130-летию со дня рождения Бориса Николаевича Делоне (1890, Санкт-Петербург-1980, Москва), выдающегося ученого, чье творчество является прекрасной иллюстрацией того, как важные идеи, зарожденные в фундаментальных областях математики, находят важные приложения в самых различных областях науки и техники. Концепции *множество Делоне и триангуляция Делоне* активно используются в физике и химии, кристаллографии и биологии и особенно в информационных технологиях (Computer Science).

Интересна эволюция творчества Бориса Николаевича Делоне от алгебры и теории чисел в сторону геометрии. Его студенческая работа, удостоенная Большой Золотой медали университета, была посвящена связи между теорией идеалов и теорией Галуа. После окончания университета он приступил к исследованиям по алгебраической теории чисел и через несколько лет, в конце 1910-х гг. получил выдающиеся результаты по диофантовым уравнениям третьей степени. Этот цикл работ, лучший в творчестве Б.Н. Делоне, по его личному мнению, обозначил настоящий прорыв в решении кубических диофантовых уравнений, первый после знаменитых работ великих классиков Эйлера, Лагранжа, Гаусса и др. по диофантовым уравнениям предыдущей, второй степени.

Важную роль и в мотивации, и в самих исследованиях сыграла замечательная работа Георгия Феодосьевича Вороного (1868—1908) о нахождении основных единиц в кольце алгебраических чисел третьей степени. Не случайно, по завершении теоретико-числового цикла Борис Николаевич геометрически переосмыслил алгоритм Вороного. Впрочем влияние Вороного, который кстати был близким другом отца Бориса Николаевича, на творчество Делоне, трудно переоценить. В начале 1920-х гг. последовала геометризация двух последних самых глубоких мемуаров Вороного, посвященных геометрии положительных квадратичных форм и теории параллелоэдров, в результате которой появилась концепция (r, R)-системы, L-тела и L-разбиения, а также метод пустого шара. Все это было элегантно и основательно изложено в мемуаре Делоне “Геометрия положительных квадратичных форм” в “Успехах математических наук” в 1937—1938 гг.

Термины *множество Делоне, симплексы Делоне и триангуляции Делоне* для этих понятий вошли в научный оборот к концу прошлого века. Но термин *разбиения Делоне* появился впервые в известной книге К.А. Роджерса “Укладки и покрытия”, еще при жизни Бориса Николаевича. По словам Делоне, этому предшествовало его письмо Г.С.М. Кокстеру, написанное в конце 1950-х гг. В нем Борис Николаевич сообщил выдающемуся геометру, что недавние результаты Кокстера по теории разбиений вторичны и что еще в 1924 г. на Международном математическом конгрессе в Торонто, где жил и работал Кокстер, была доложена работа Делоне об этих разбиениях. Кокстер нашел в Трудах Конгресса эту работу. По словам Делоне, в своем “очень вежливом” ответе, Кокстер просил понять его, ведь в 1924 г. он был еще столь юн, что, опять же по словам Делоне, “ходил под стол в коротких штанишках”. Один из авторов этих строк в 1995 г. после своего выступления на семинаре Кокстера в Торонто спросил профессора, насколько все это соответствует действительности. Кокстер в целом подтвердил, за исключением “хождения под стол в коротких штанишках”. В 1924 г. Кокстеру было 17 лет, жил он в Лондоне и готовился поступать в Кембридж. Одновременно с ответом в Москву Кокстер написал о работе Делоне в Кембридж К.А. Роджерсу, который в это время работал над своей книгой, ставшей впоследствии бестселлером. В результате впервые появилось упоминание *о разбиении Делоне*, которое наряду с термином *множество Делоне* к концу 1980-х гг. прочно вошло в математическую литературу.

Николай Долбилин, Владимир Гаранжа, Леннард Каменски
Москва и Буэнос-Айрес
Март 2022

EDN: JZKUYX
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1237–1250

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 519.63

ПОСТРОЕНИЕ НЕСИМПЛЕЦИАЛЬНЫХ СЕТОК ДЕЛОНЕ ПОСРЕДСТВОМ АППРОКСИМАЦИИ РАДИКАЛЬНЫМИ РАЗБИЕНИЯМИ[1)]

В. А. Гаранжа[1,2,*], Л. Каменски[2,*], Л. Н. Кудрявцева[1,2,**]**

[1] 119333 Москва, ул. Вавилова, 40, ВЦ им. А.А. Дородницына ФИЦ ИУ РАН, Россия
[2] 141701 Долгопрудный, М.о., Институтский пер., 9, МФТИ, Россия
**e-mail: garan@ccas.ru*
***e-mail: liukudr@yandex.ru*
****e-mail: l.kamenski@arcor.de*

Поступила в редакцию 01.12.2021 г.
Переработанный вариант 31.12.2021 г.
Принята к публикации 10.01.2022 г.

Рассматривается построение полиэдрального разбиения Делоне как предела последовательности степенных диаграмм (так называемых радикальных разбиений), а двойственная диаграмма Вороного получается как предел последовательности взвешенных разбиений Делоне. С использованием известной концепции подъема точек на параболоид задача сводится к построению пары двойственных выпуклых многогранников как предела последовательности пар общих двойственных выпуклых многогранников, вписанных и описанных вокруг кругового параболоида. При этом последовательность первичных многогранников должна сходиться к описанному многограннику, а последовательность двойственных многогранников сходится к вписанному многограннику. Для построения последовательностей пар взаимно двойственных многогранников нас интересует случай, когда вершины первичных многогранников могут перемещаться или сливаться. Это значит, что для двойственных многогранников не допускается появление новых граней. Данные правила по сути определяют преобразование множества заданных шаров, определяющих степенную диаграмму, во множество шаров Делоне, используя перемещение шара, изменение радиуса и удаление шара как допустимые операции. Хотя строгое обоснование (теоремы существования) для этой задачи пока недоступно, мы предлагаем функционал, измеряющий отклонение общего выпуклого многогранника от многогранника, вписанного в параболоид. Этот функционал является дискретным функционалом Дирихле для функции степени (так называемой степени точки относительно сферы), которая является линейным интерполянтом расстояния двойственных вершин от параболоида по вертикали. Абсолютный минимимум этого функционала достигается в случае, когда степень постоянна, т.е. вписанный многогранник может быть получен из минимизирующего многогранника с помощью параллельного переноса. Функционал Дирихле для двойственной поверхности не является квадратичной, поскольку неизвестными являются вершины первичного многогранника. Следовательно, преобразование множества шаров в шары Делоне в общем случае не является единственным. В данной работе мы сосредоточились на экспериментальном подтверждении работоспособности предложенного подхода и оставили в стороне проблемы качества получающейся сетки. Нулевое значение градиента предложенного функционала определяет многообразие, описывающее эволюцию сфер Делоне. Следовательно, сетки Делоне–Вороного могут быть оптимизированы с использованием этого многообразия в качестве ограничения. Численные примеры иллюстрируют построение многоугольных сеток Делоне в плоских областях. Библ. 19. Фиг. 15.

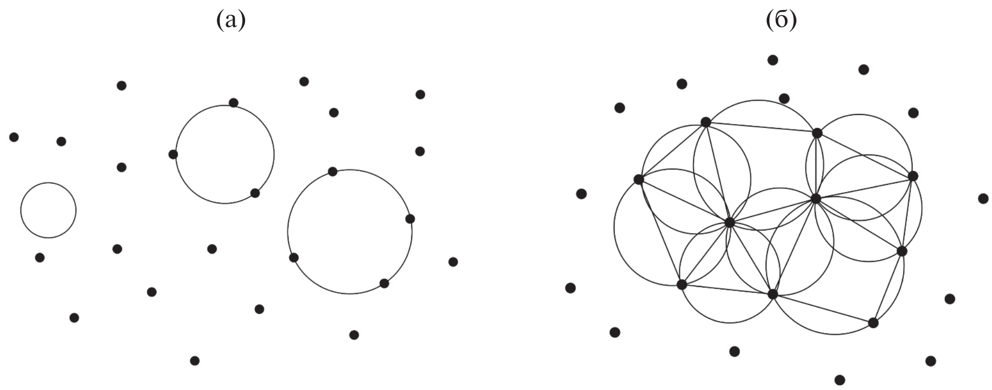
Ключевые слова: степенная диаграмма, радикальное разбиение, триангуляция Делоне, взвешенная триангуляция Делоне, разбиение Делоне, триангуляция Вороного.

DOI: 10.31857/S0044466922080051

1. ВВЕДЕНИЕ

В своем знаменитом докладе “Sur la sphere vide” на конгрессе по геометрии в Торонто в 1924 г., а затем в своих работах [1], [2], Борис Николаевич Делоне ввел понятие нормального разбиения

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект № 075-15-2020-799).



Фиг. 1. L-разбиение: (а) – пустой шар, движущийся через множество точек, (б) – пустые шары с d-мерными множествами точек на границе.

пространства, заданного дискретным множеством вершин, состоящего из d-мерных симплексов с пустыми описанными шарами, пустыми в том смысле, что они не содержат внутри себя никаких вершин. Знаменитая лемма Делоне гласит, что если условие пустого шара выполняется локально для любых двух соседних симплексов, имеющих общую $(d-1)$-мерную грань, то пустыми являются все описанные шары. Для доказательства этого результата Делоне использовал понятие степени τ точки $\mathbf{a}$ относительно шара B радиуса R с центром $\mathbf{c}$:

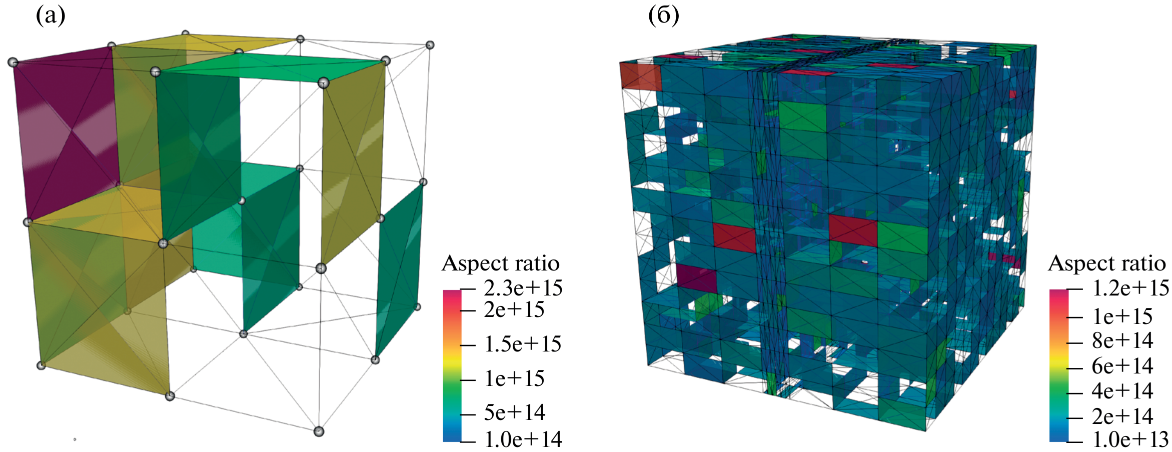
$$\tau_B(\mathbf{a}) = |\mathbf{c}-\mathbf{a}|^2 - R^2.$$

В 1937 г. Делоне представил *L-разбиение* (см. [3], [4]), которое получается путем перемещения, сжатия и раздувания пустого шара, расположенного среди вершин дискретного множества в $\mathbb{R}^d$ (фиг. 1а). Таким образом, определяются все возможные пустые шары с d-мерным набором вершин на их поверхности, так называемые *L-шары*.

Выпуклая оболочка множества вершин, лежащих на L-сфере, представляет собой выпуклый многогранник, названный Делоне *L-полиэдром* (фиг. 1б). Множество L-полиэдров определяет нормальное разбиение пространства, называемое L-разбиением. Лемма Делоне естественным образом обобщается на это многогранное разбиение. В наши дни L-разбиение называют *разбиением Делоне*, а L-шары, т.е. пустые шары с d-мерным набором вершин на их границе, называют *шарами Делоне*. Выпуклая оболочка центров сфер Делоне, проходящих через одну из точек дискретного множества, определяет многогранник Вороного для этой точки. Заметим, что как разбиения Делоне, так и разбиения Вороного для заданного набора вершин единственны. Отношения двойственности между разбиениями Делоне и Вороного просты и элегантны, чего нельзя сказать о триангуляциях Делоне. Например, для набора вершин, лежащих на одной сфере, один и тот же центр окружности (вершина Вороного) может быть порожден несколькими симплексами Делоне, тогда как соответствие между многогранником Делоне и соответствующей вершиной Вороного всегда взаимно однозначно.

Каждый многогранник Делоне может быть разбит на симплексы, тем самым задавая нормальное разбиение, которое обычно называется *триангуляцией Делоне*, при условии, что триангуляции отдельных многогранников Делоне согласованы между собой. Стоит обратить внимание на существенное различие: в разбиении Делоне имеется хотя бы один *замкнутый* пустой шар, в то время как ребро/грань в триангуляции Делоне имеет хотя бы один *открытый* пустой шар. Ребра/грани триангуляции, которые не имеют замкнутых пустых шаров – это ребра/грани, добавленные при триангуляции многогранников Делоне. Эти дополнительные ребра не имеют взаимно однозначного соответствия с двойственными гранями Вороного, а дополнительные грани соответственно не имеют взаимно однозначного соответствия с двойственными ребрами Вороного.

Заметим, что построение, основанное на правильной триангуляции разбиения Делоне, исключает плоские вырожденные симплексы, так называемые *конверты (slivers)*. Строго говоря, конверт – это вырожденный симплекс с $(d-m)$-мерным множеством вершин $(m > 0)$, для которого можно построить описанную сферу конечного радиуса. Очевидно, что такая сфера не является единственной. Каждый такой симплекс порождается неправильной триангуляцией



Фиг. 2. Конверты (slivers) в сетках Делоне генератора *TetGen*, вызванные округлением во входных данных для простой кубической сетки (а) и более сложного примера неравномерной декартовой сети вершин (б).

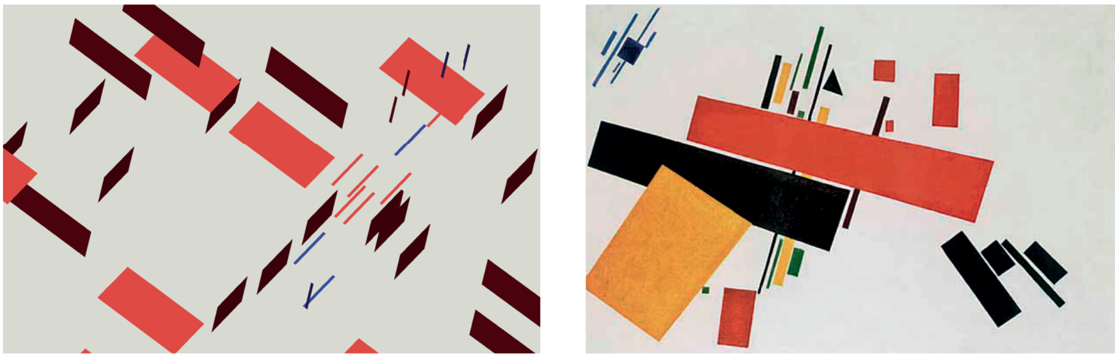
$(d-m)$-мерной грани разбиения Делоне. Проблема идентификации конвертов усугубляется, если речь идет о приближенных вычислениях, что, например, имеет место в стандартной арифметике с плавающей точкой.

При численном моделировании конверты недопустимы, поскольку они могут ухудшить точность аппроксимации конечных элементов и конечных объемов. Стандартное современное решение для устранения конвертов заключается в локальном нарушении условия пустой сферы Делоне. Если условие Делоне должно быть выполнено, что особенно актуально при использовании методов конечных объемов с использованием ячеек Вороного, выполняющих принцип максимума (см. [5], [6]), возникает печально известная и неприятная особенность современных алгоритмов построения триангуляций Делоне: порождение искусственных конвертов. Например, триангуляция вершин кубической решетки может привести к появлению значительного количества конвертов (фиг. 2), количество и расположение которых непредсказуемо зависит от ошибок округления входных данных, создавая хотя и весьма живописные, но крайне нежелательные узоры даже для самых простых входных данных (фиг. 3). Получение триангуляции Делоне с помощью радикального разбиения сложнее, но позволяет избавиться от искусственных конвертов, не нарушая условия Делоне.

Заметим, однако, что то же обозначение “конверт” иногда используется для симплекса плохой формы, который далек от плоского, но вычисление его центра и радиуса окружности устойчиво. Такие конверты являются законными симплексами Делоне плохой формы и не должны исключаться из триангуляции. Разница между корректным, но почти плоским симплексом, и неправильной триангуляцией грани многогранника Делоне должна быть четко определена. Естественную идентификацию дает степенная диаграмма (радикальное разбиение) для множества шаров, которая восходит к работам Рене Декарта. *Радикальное разбиение* определяется как множество выпуклых многогранников, построенных пересечениями полупространств, определяемых $(d-1)$-мерными плоскостями равной степени, ортогональными к отрезкам, соединяющим центры всех пар шаров (подробнее см. разд. 2). Для двух пересекающихся сфер радикальная плоскость всегда проходит через их общее множество. Следовательно, для множества шаров Делоне радикальное разбиение совпадает с разбиением Делоне.

Эквивалентность радикального разбиения и разбиения Делоне дает естественный способ ввести полиэдральную аппроксимацию разбиения Делоне для возмущенного множества точек. Давайте добавим небольшое возмущение к положению вершин и рассмотрим произвольное симплициальное разбиение Делоне для этого множества вершин, также допускающее конверты. Очевидно, что при этом изменится количество шаров Делоне, их центры и радиусы. Однако центры и радиусы шаров Делоне устойчивы по отношению к малым возмущениям, поскольку объем каждого многогранника Делоне изначально строго положителен. Следовательно, для каждого из шаров Делоне исходного разбиения мы получаем кластер шаров, аппроксимирующих его. Новый шар – это описанный шар некоторого нового симплекса Делоне. Мы можем найти наилучшее соответствие для центра каждого кластера, используя усреднение окружностей с объемами

(а) (б)



Фиг. 3. “Sliver Art № 3”: с правильно подобранной цветовой картой визуализация выборки конвертов (а) напоминает известную серию Казимира Малевича (б). (Казимир Малевич, “Динамический супрематизм № 38”, общественное достояние, Wikimedia Commons.)

соответствующих симплексов Делоне в качестве весов. В этом случае, очевидно, конверт даст околонулевой вклад в усредненные параметры шара. Самый простой способ вычислить средний радиус для кластера шаров – использовать метод наименьших квадратов для оценки расстояний между новым центром и возмущенными вершинами. Конверт может порождать изолированный шар, который далек от кластера шаров. Очевидно, что такой конверт следует игнорировать при построении радикального разбиения. Критерий исключения прост: если описанная сфера неустойчива, то почти плоский симплекс слишком плохо обусловлен, чтобы вносить вклад в набор шаров.

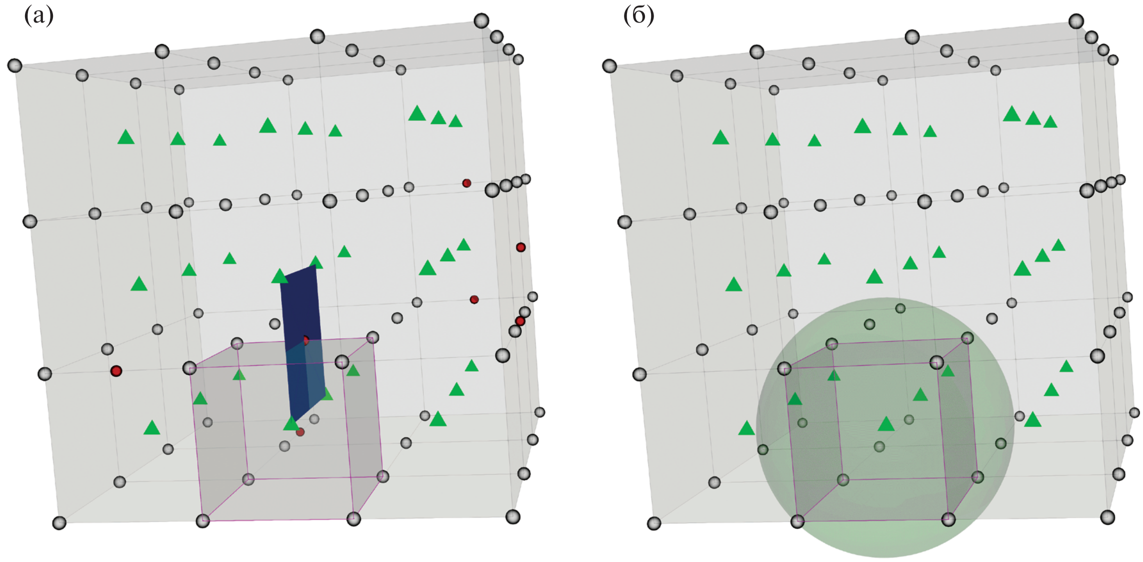
Для создания радикального разбиения можно эффективно использовать генератор *TetGen* (см. [7]), поскольку в нем есть возможность построения взвешенной тетраэдризации Делоне. В нашем случае вершины и веса определяются центрами и радиусами устойчивых шаров (см. подробности в разд. 2). Радикальная грань, двойственная взвешенному ребру Делоне, строится путем соединения ортоцентров взвешенных тетраэдров Делоне, примыкающих к этому ребру. Заметим, что и на этом этапе *TetGen* склонен создавать искусственные конверты, тем самым добавляя лишние вершины к радикальным граням (фиг. 4а). Такие вершины вместе с тетраэдрами, их порождающими, можно просто игнорировать, в результате чего получится корректное радикальное разбиение, совпадающее с разбиением Делоне исходного набора точек (фиг. 4б).

Как только радикальное разбиение вычислено, можно найти устойчивую согласованную триангуляцию полученного многогранного разбиения, которую можно использовать в качестве приближенной триангуляции Делоне. Заметим, что радикальное разбиение для возмущенного множества точек может привести к другому множеству точек в качестве набора вершин радикального разбиения. Вместо входной вершины может получиться кластер близких вершин, потенциально создавая симплексы типа “игла”. Эти кластеры также должны быть склеены.

Триангуляции Делоне имеют множество применений в самых разных областях (см. [8]). Одним из очень важных свойств для численного моделирования является выполнение принципа максимума для дискретного оператора Лапласа на сетках Делоне (см. [5], [6]). Наиболее значимой для построения расчетных сеток Вороного без их обрезания около границ расчетной области является возможность контролировать расположение шаров Делоне в ключевых областях вычислительной области, в частности, на границах и вблизи них (см. [9]–[11]). Мы предлагаем вычислительную схему, которая потенциально может служить инструментом управления размещения шаров Делоне и обеспечивать построение сеток Делоне–Вороного в обратную сторону, когда набор шаров генерирует набор вершин для построения сеток Делоне.

2. СТЕПЕННАЯ ДИАГРАММА И ПОДЪЕМ ТОЧЕК НА ПАРАБОЛОИД

Идея подъема точек на параболоид берет начало в работах Г.Ф. Вороного (см. [12]), который показал, что триангуляция Делоне в $\mathbb{R}^d$ является проекцией граней выпуклого многогранника



Фиг. 4. (а) – Конверт, возникший из-за ошибок округления арифметики с плавающей точкой, создает лишнюю вершину радикального разбиения. (б) – Корректная радикальная ячейка, совпадающая с ячейкой Делоне.

$P \in \mathbb{R}^{d+1}$, вписанного в круговой параболоид Π. Выпуклое тело P^*, построенное как пересечение верхних полупространств над касательными плоскостями к Π в вершинах P, называется *женератрисой Вороного*. Проекция его граней на $\mathbb{R}^d$ задает *диаграмму Вороного*. Более общая концепция подъема (см. [13], Edelsbrunner-2) основана на построении пары P, P^* выпуклых многогранников, удовлетворяющих отношению полярности (см. [14]) относительно параболоида Π.

Рассмотрим систему шаров $\mathcal{B} = B_1, \ldots, B_n$, определенных центрами $\mathbf{c}_i$ $\mathbb{R}^d$ и радиусами $R_i \geq 0$, поднятую систему точек $\mathcal{E}_l = \{\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_n\}$ в $\mathbb{R}^{d+1}$, где

$$\mathbf{p}_i^{\mathrm{T}} = \left(\mathbf{c}_i^{\mathrm{T}}, \frac{1}{2}\left(|\mathbf{c}_i|^2 - R_i^2\right)\right) = \left(\mathbf{c}_i^{\mathrm{T}}, h_i\right),$$

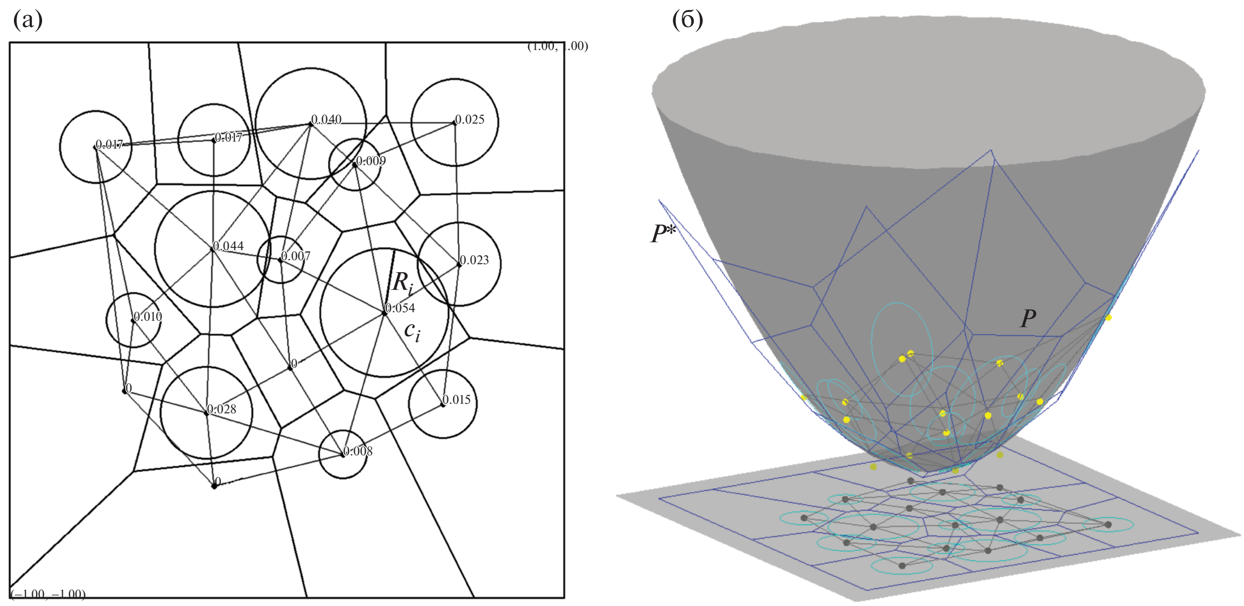
и нижнюю выпуклую оболочку $\mathcal{E}_l$, определяемую выпуклой функцией $x_{d+1} = v(x_1, \ldots, x_d)$. Функция, двойственная по Лежандру–Юнгу–Фенхелю (см. [15]) к функции v, обозначается через v^*. Если быть математически точным, то функцию $v(\mathbf{x})$ следует доопределять $+\infty$ вне выпуклой оболочки $\operatorname{conv}(\mathbf{c}_1, \ldots, \mathbf{c}_n)$ так, чтобы ее эпиграф (надграфик) представлял собой замкнутое множество. Двойственная функция $v^*(\mathbf{x})$ определена везде, и ее график содержит неограниченные грани. В дальнейшем мы будем рассматривать ограниченные задачи, в которых неограниченные грани по существу исключены из постановки задачи.

Проекция граней графика v определяет взвешенную триангуляцию Делоне $\mathcal{W}$ в $\mathbb{R}^d$ (см. [16]). Вершинами графика v являются пары $(\mathbf{c}_i, h_i)$, а вершинами взвешенной триангуляции Делоне – $\mathbf{c}_i$. T_k обозначает k-й взвешенный многогранник Делоне.

Проекция граней графика v^* определяет радикальное разбиение (степенную диаграмму) $\mathcal{R}$ для системы шаров в $\mathbb{R}^d$ (см. [16]) (фиг. 5). Проекция k-й вершины графа v^* на $x_{d+1} = 0$ обозначается через $\mathbf{v}_k$. Эта точка двойственна к $T_k\mathcal{W}$, а вершина $\mathbf{c}_i$ двойственна ячейке D_i из $\mathcal{R}$.

3. ДВИЖЕНИЕ ШАРОВ КАК ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ПАР ДВОЙСТВЕННЫХ МНОГОГРАННИКОВ

Рассмотрим следующую задачу: переместить и масштабировать шары $\mathcal{B}$ так, чтобы все вершины графика v^* сошлись к поверхности параболоида $x_{d+1} = \Pi(\mathbf{x}) = \left(x_1^2 + \cdots + x_d^2\right)/2$. Это озна-



Фиг. 5. (а) – Взвешенная триангуляция Делоне. (б) – Степенная диаграмма и двойственные многогранники при подъеме на параболоид. Рисунок построен с помощью detri2 Ханга Си.

чает, что проекция графика v^* в конечном итоге сходится к разбиению Делоне. Заметим, что количество вершин v_k может меняться во время движения шаров. Далее удобно использовать обозначение $\left(\mathbf{x}^{\text{т}}, x_{d+1}\right)$ для произвольной точки в $\mathbb{R}^{d+1}$, где $\mathbf{x}^{\text{т}} = \{x_1, \ldots, x_d\}$.

Для множества шаров $\mathcal{B}$ мы строим первичный и двойственный многогранники P и P, определяемые выпуклыми кусочно-линейными функциями $v(\mathbf{x})$ и $v^*(\mathbf{x})$ соответственно. Согласно соотношению полярности относительно кругового параболоида [14], вершина $(\mathbf{c}_i, h_i)$ определяет двойственную ей плоскость грани графика $v^*(\mathbf{x})$:

$$\mathbf{c}_i^{\text{т}} x = h_i + x_{d+1}.$$

Вершина $(\mathbf{v}_k, z_k)$ графика $v^*(\mathbf{x})$ является пересечением по крайней мере $d+1$ таких плоскостей:

$$\mathbf{v}_k^{\text{т}}(\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_p) = h_i - h_p, \tag{1}$$

где $i \neq p$ – индексы всех плоскостей, пересекающихся в $(\mathbf{v}_k, z_k)$. Следовательно,

$$z_k = \mathbf{v}_k^{\text{т}}\mathbf{c}_i - h_i = \mathbf{v}_k^{\text{т}}\mathbf{c}_i - \frac{1}{2}\mathbf{c}_i^2 + \frac{1}{2}R_i^2 = -\frac{1}{2}\left(\left|\mathbf{c}_i - \mathbf{v}_k\right|^2 - R_i^2\right) + \frac{1}{2}\mathbf{v}_k^2.$$

Другими словами,

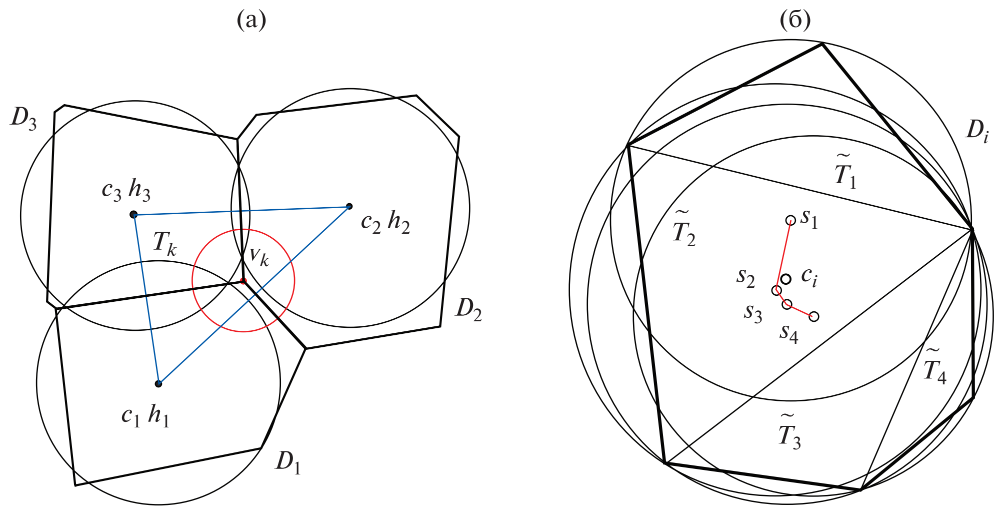
$$z_k - \Pi(\mathbf{v}_k) = -\frac{1}{2}\tau_i(\mathbf{v}_k), \tag{2}$$

где

$$\tau_i(\mathbf{y}) = \left|\mathbf{c}_i - \mathbf{y}\right|^2 - R_i^2$$

является степенью точки $\mathbf{y}$ относительно шара B_i. Следовательно, вертикальное расстояние вершины $(\mathbf{v}_k, z_k)$ от параболоида Π полностью определяется величиной степени. Другая интерпретация(1) состоит в том, что для вершины $\mathbf{v}_k$, дуальной к взвешенному многограннику Делоне T_k, равенство

$$\tau_i(\mathbf{v}_k) = \tau_p(\mathbf{v}_k)$$



Фиг. 6. (а) – Взвешенный треугольник Делоне T_k, двойственная вершина $\mathbf{v}_k$ и ортоокружность. (б) – Радикальная ячейка разбивается на четыре треугольника Делоне; центр $\mathbf{c}_i$ аппроксимируется облаком из центров четырех кругов Делоне.

выполняется для всех вершин T_k. Это означает, что в нашей ситуации можно опустить индексы и использовать обозначение $\tau(\mathbf{v}_k)$ для значения степени.

Соотношение (1) подразумевает, что градиент $v^*(\mathbf{x})$ на i-й грани своего графика равен $\mathbf{c}_i$. Верно и двойственное утверждение: градиент функции $v(\mathbf{x})$ на k-й грани графика равен $\mathbf{v}_k$. Для любого выпуклого многогранника T_k существует d линейных независимых векторов $\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_p$. В двух измерениях T_k в простейшем случае – треугольник, и это множество просто равно $\{\mathbf{c}_2 - \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_3 - \mathbf{c}_1\}$ (фиг. 6а). Когда $\tau(\mathbf{v}_k) > 0$, можно связать с $\mathbf{v}_k$ сферу с радиусом $\sqrt{\tau(\mathbf{v}_k)}$, которая называется *ортосферой*. В наших численных экспериментах в разд. 5 мы рисуем искусственные ортосферы с радиусами, определяемыми формулами $\sqrt{|\tau(\mathbf{v}_k)|}$. Как показано ниже, эти сферы визуализируют отклонение радикального разбиения от разбиения Делоне.

Пусть $\tilde{v}^*$ – спроецированный вариант функции v^*, построенный следующим образом: рассмотрим множество вершин $(\mathbf{v}_j, z_j)$ графа v^* и спроецируем их на параболоид Π, задавая

$$\tilde{z}_j = \frac{1}{2}|\mathbf{v}_j|^2 \quad \text{и} \quad \tilde{\mathbf{v}}_j = \mathbf{v}_j.$$

Как показано выше, эта проекция изменяет вертикальную составляющую z_j на $\tau(\mathbf{v}_j)/2$.

Вычисление нижней выпуклой оболочки системы точек $\{(\tilde{\mathbf{v}}_k, \tilde{z}_k)\}$, $k = 1, 2, \ldots, n_v$, приводит к графику функции $\tilde{v}^*$.

4. ФУНКЦИОНАЛ ДИРИХЛЕ ДЛЯ ФУНКЦИИ СТЕПЕНИ

Для оценки меры близости текущего радикального разбиения и разбиения Делоне мы рассматриваем функционал Дирихле для разности v^* и $\tilde{v}^*$:

$$F(X) = \frac{1}{2}\int_{\Omega} |\nabla v^* - \nabla \tilde{v}^*|^2 d\mathbf{x}. \tag{3}$$

Здесь X – вектор неизвестных, состоящий из $\mathbf{c}_i$ и R_i, а Ω – ограниченная область определения функции $\tilde{v}^*$. Из соотношения (2) следует

$$F(X) = \frac{1}{8}\int_{\Omega} |\nabla \tau(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}.$$

Пусть $\tau(\mathbf{x})$ обозначает кусочно-линейную функцию, которая совпадает с $\tau(\mathbf{v}_k)$ при $\mathbf{v}_k$ и является линейной на каждой ячейке $\tilde{T}_j$ вспомогательного разбиения Делоне. Предполагая, что каждая грань графа v^* проецируется на параболоид независимо от других граней, $F(X)$ можно переписать как

$$F_I(X) = \frac{1}{2}\sum_i \sum_{\tilde{T}_j \in D_i} \left|\mathbf{c}_i - \mathbf{s}_j\right|^2 \operatorname{vol}\tilde{T}_j, \tag{4}$$

где $\mathbf{s}_j$ – центр описанной сферы симплекса Делоне $\tilde{T}_j$. Приведенное выше равенство является очевидным следствием того, что

$$\nabla v^*\big|_{D_i} = \mathbf{c}_i, \quad \nabla \tilde{v}^*\big|_{\tilde{T}_j \in D_i} = \mathbf{s}_j.$$

Чтобы пояснить эту формулу, рассмотрим симплекс Делоне $\tilde{T}_j$ с вершинами $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_{d+1}$. Градиент $\mathbf{g}_j$ от $\tilde{v}^*$ определяется следующим образом:

$$(\mathbf{v}_m - \mathbf{v}_l)^{\mathrm{T}}\mathbf{g}_j = \frac{1}{2}\left(\mathbf{v}_m^2 - \mathbf{v}_l^2\right), \quad m, l \le d+1,$$

или

$$\left|\mathbf{g}_j - \mathbf{v}_m\right|^2 = \left|\mathbf{g}_j - \mathbf{v}_l\right|^2,$$

который как раз и является набором уравнений для центра сферы $\mathbf{s}_j$ из $\tilde{T}_j$. Заметим, что в общем случае функционал $F_I(X)$ не совпадает с $F(X)$, так как независимое проецирование граней на параболоид может приводить к вписанному многограннику, который может терять выпуклость на границах раздела проецируемых граней. Однако при сходимости F_I совпадает с F.

Равенство $F_I(X) = 0$ означает, что для каждого радикального многогранника D_i его двойственная вершина $^*\mathbf{c}_i$ совпадает со всеми центрами шаров Делоне триангуляции Делоне его множества вершин, а значит, D_i является многогранником Делоне.

Рассмотрим следующий алгоритм.

• Для $n = 0, 1, \ldots$

• По набору шаров $\mathcal{B}^n$ строятся первичные и двойственные функции v^n и v^{n*} с использованием подъема точек на параболоид. Эти функции определяют взвешенную триангуляцию Делоне $\mathcal{W}^n$ и радикальное разбиение $\mathcal{R}^n$ соответственно.

• Строится спроецированная функция $\tilde{v}^{n*}$. Эта функция определяет локальную триангуляцию Делоне $\tilde{\mathcal{T}}^n$ множества вершин каждой ячейки радикального разбиения $\mathcal{R}^n$.

• Выполняется шаг минимизации на основе приближенного градиентного спуска для функционала Дирихле $F_I(X)$, чтобы получить множество шаров $\mathcal{B}^{n+1}$.

• Процесс повторяется до сходимости.

В этом алгоритме последовательность взвешенных триангуляций Делоне $\mathcal{W}^n$ сходится к диаграмме Вороного $\mathcal{V}$, а последовательность радикальных разбиений $\mathcal{R}^n$ сходится к разбиению Делоне $\mathcal{T}$. Заметим, что предельная триангуляция Делоне $\tilde{\mathcal{T}}$ состоит из симплексов Делоне, а $\mathcal{T}$ – из многогранных ячеек Делоне для того же набора точек. На каждом шаге алгоритма нет необходимости строить согласованную триангуляцию Делоне. При необходимости ее можно построить один раз по готовому разбиению Делоне.

Для упрощения алгоритма, во избежание трудоемкого вычисления точного градиента, величины c_i находятся с помощью локальной минимизации функционала (4), рассматривая его как квадратичную функцию от $\mathbf{c}_i$:

$$\mathbf{c}_i^{\text{new}} = \left(\sum_{\tilde{T}_j \in D_i} \mathbf{s}_j \operatorname{vol}\tilde{T}_j\right) \Bigg/ \sum_{\tilde{T}_j \in D_i} \operatorname{vol}\tilde{T}_j,$$

в то время как значение R_i пересчитывается с помощью простой аппроксимации методом наименьших квадратов

$$R_i^{\text{new}} = \frac{1}{\sqrt{M}} \left(\sum_{m=1}^{M} \left| \mathbf{c}_i^{\text{new}} - \mathbf{v}_m \right|^2 \right)^{1/2}, \tag{5}$$

где $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_M$ – вершины D_i. Заметим, что соотношение (5) эквивалентно равенству

$$\sum_{m=1}^{M} \tau(\mathbf{v}_m) = 0,$$

что, в свою очередь, является необходимым условием минимума относительно R_i для локального функционала

$$\sum_{m=1}^{M} \tau^2(\mathbf{v}_m)$$

при условии, что центры зафиксированы. Новые положения и радиусы вычисляются с использованием релаксационного параметра $0 < \theta < 1$:

$$\mathbf{c}_i^{n+1} = \mathbf{c}_i^n(1-\theta) + \mathbf{c}_i^{\text{new}}\theta,$$

$$R_i^{n+1} = R_i^n(1-\theta) + R_i^{\text{new}}\theta.$$

Этот эвристический алгоритм достаточно эффективен для начальных итераций и хорошо работает в двумерном случае, как показано экспериментально. Для трехмерного случая эксперименты пока не проводились, возможно, нужно будет использовать метод градиентного спуска.

Можно также рассмотреть задачу с ограничениями, в которой некоторые шары полностью или частично фиксированы: центрам шаров разрешено перемещаться по заданному многообразию, добавлены ограничения на радиусы и т.д.

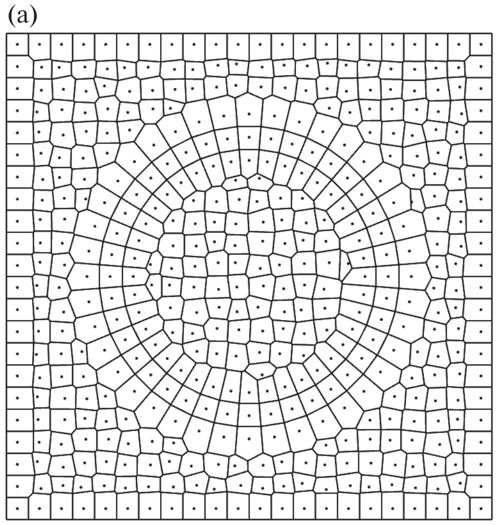
В настоящее время теорема существования для этой задачи отсутствует. К тому же легко можно сформулировать задачу с избыточными ограничениями так, что множество шаров Делоне не может быть построено посредством допустимых операций без разрешения введения новых шаров.

5. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

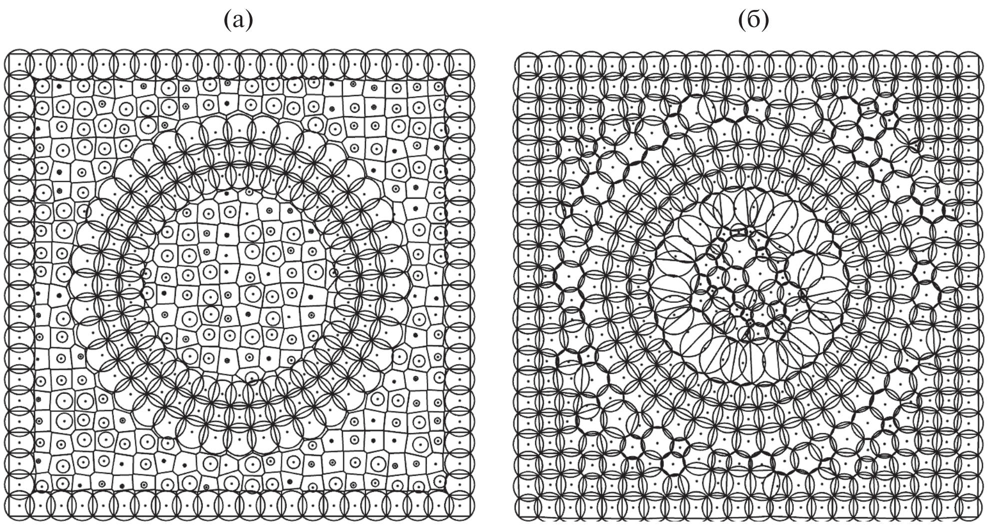
В качестве сравнительно простого теста рассмотрим квадрат с окружностью внутри и покроем все заданные внутренние и граничные кривые защитными кругами. Центры кругов для внешней границы фиксированы. Точки пересечения их окружностей, которые находятся снаружи области, по существу задают набор дополнительных вершин Делоне, таким образом определяя аппроксимацию внешней границы ребрами Вороного. Для внутренней границы, имеющей форму окружности, мы фиксируем как положение центров окружностей, так и их радиусы. Добавляются еще две линии окружностей, определяющие начальный слой четырехугольных ячеек Делоне вблизи внутренней границы. Центры этих дополнительных окружностей фиксированы, но радиусы могут меняться. Мы допускаем небольшое изменение радиусов и на внешней границе. Поскольку внешняя граница по сути уже покрыта ячейками Делоне, мы фактически задаем нулевые граничные условия для функции степени $\tau(x)$. Внутри области задается система кругов, изначально расположенная регулярно по квадратной решетке, затем к центрам и радиусам кругов добавляется случайное возмущение. Все круги, центры которых оказались вне области или попали внутрь защитных кругов, удаляются.

На фиг. 7 показаны начальное радикальное разбиение и конечное разбиение Делоне. Заметим, что ограничения удовлетворяются за счет появления больших ячеек вблизи фиксированных кругов, что, в свою очередь, сжимает некоторые свободные круги почти до нуля.

Обратим внимание, что регулярность слоев ячеек Делоне и Вороного вблизи внутренней границы нарушается из-за появления небольших ребер Делоне. В текущей версии алгоритма отсут-



Фиг. 7. Начальное радикальное разбиение $\mathcal{R}_0$ (а) и конечное разбиение Делоне $\mathcal{T}$ (б).



Фиг. 8. Начальное радикальное разбиение $\mathcal{R}_0$ с начальным набором кругов (а) и конечное разбиение Делоне $\mathcal{T}$ с кругами Делоне (б).

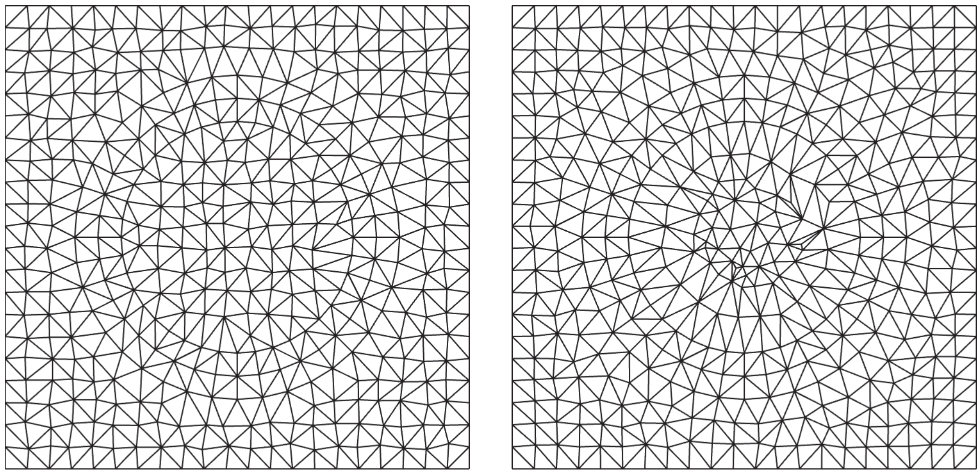
ствует механизм для их устранения. На фиг. 8 показано, как выглядят радикальные разбиения вместе с порождающими их кругами B_i.

Начальная взвешенная триангуляция Делоне $\mathcal{W}_0$ и конечная сетка Вороного показаны на фиг. 9. Вновь можно наблюдать проблемы с качеством ячеек в конечной триангуляции Вороного. Заметим, что два слоя ячеек Вороного около внутренней окружности на самом деле являются слоями четырехугольников, они разбиты на треугольники при отрисовке.

Увеличенные фрагменты сеток на фиг. 10 позволяют наглядно увидеть, как работает алгоритм.

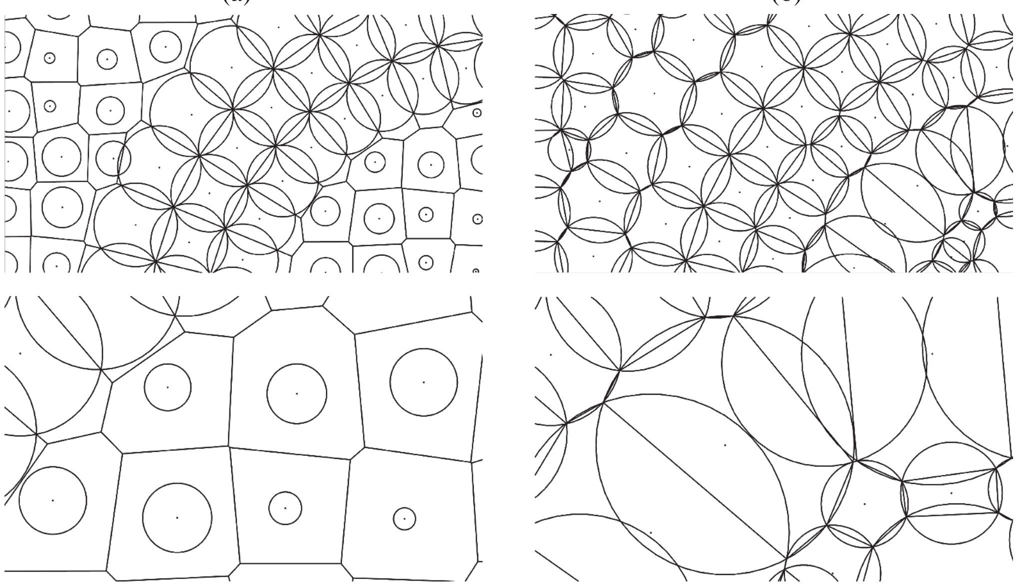
На фиг. 11 показана эволюция фрагмента сетки с добавленными ортокругами, т.е. с кругами, центрированными на двойственных вершинах $\mathbf{v}_k$ с $\sqrt{|\tau(\mathbf{v}_k)|}$ в качестве радиусов. В случае $\tau(\mathbf{v}_k) < 0$, красные окружности уже не являются настоящими ортоокружностями; они введены только для оценки отклонения радикальных ячеек от ячеек Делоне.

(а) (б)



Фиг. 9. Начальная взвешенная сетка Делоне $\mathcal{W}_0$ (а) и конечная триангуляция Вороного (б).

(а) (б)



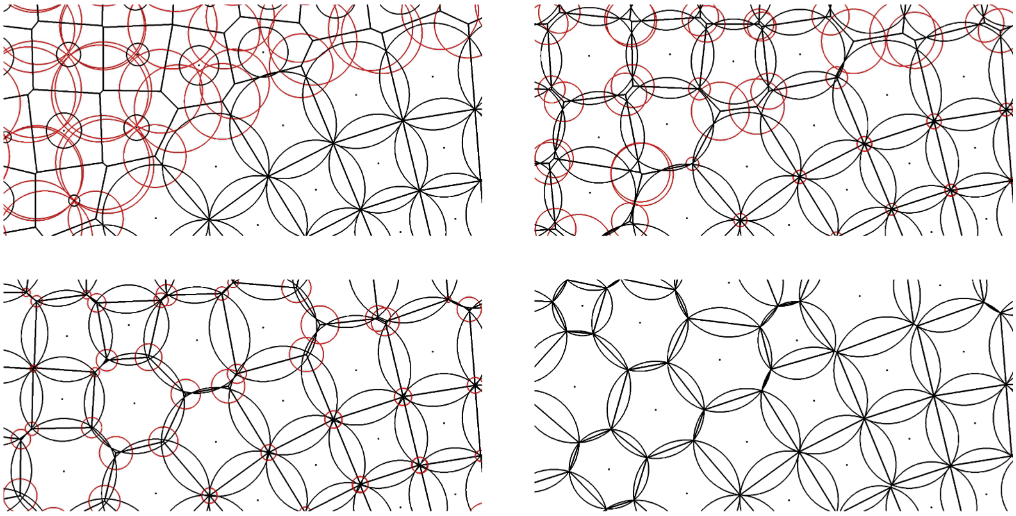
Фиг. 10. Фрагменты начального радикального разбиения (а) и соответствующие фрагменты полученного разбиения Делоне (б).

Далее мы используем тот же алгоритм для построения логотипа конференции NUMGRID-2020 (см. [17]). Аббревиатура NG создается с помощью набора фиксированных защитных кругов, включенных в квадратную решетку из кругов. Вокруг букв разбросан квазислучайный набор кругов. Начальное радикальное разбиение и сошедшееся решение (разбиение Делоне) показаны на фиг. 12.

На фиг. 13. показано, как выглядят радикальные разбиения вместе с порождающими их кругами B_i. Обратим внимание, что конечные круги на самом деле являются кругами Делоне.

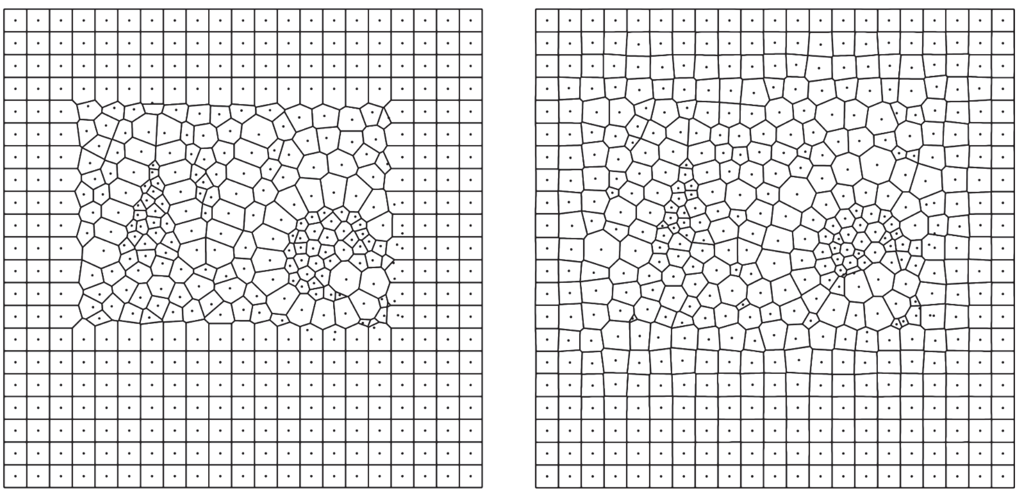
На фиг. 14 показаны начальная взвешенная триангуляция Делоне и конечная триангуляция Вороного.

Наконец, на фиг. 15 показаны увеличенные фрагменты начального радикального разбиения и сошедшегося радикального разбиения, которое является разбиением Делоне.



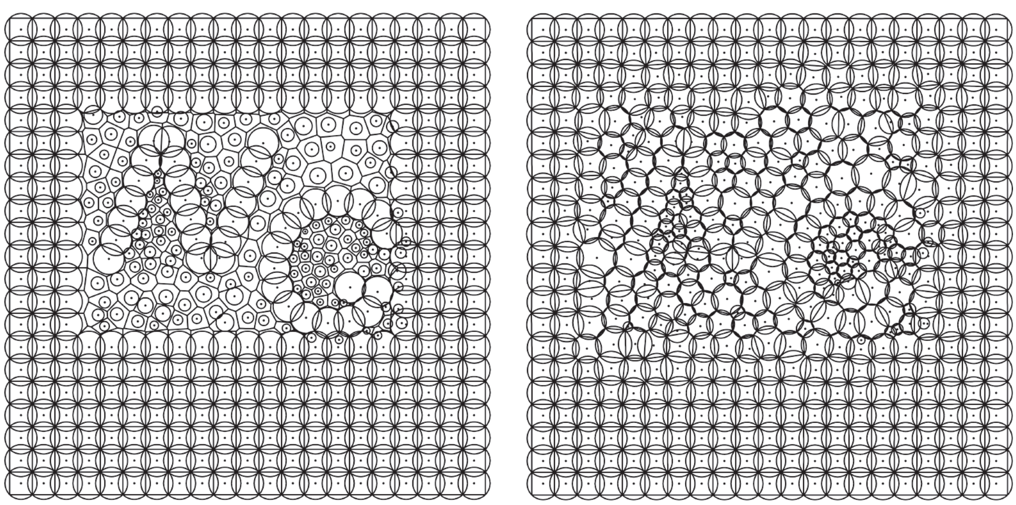
Фиг. 11. Последовательность радикальных разбиений. Красные окружности соответствуют абсолютным значениям степеней.

(а) (б)



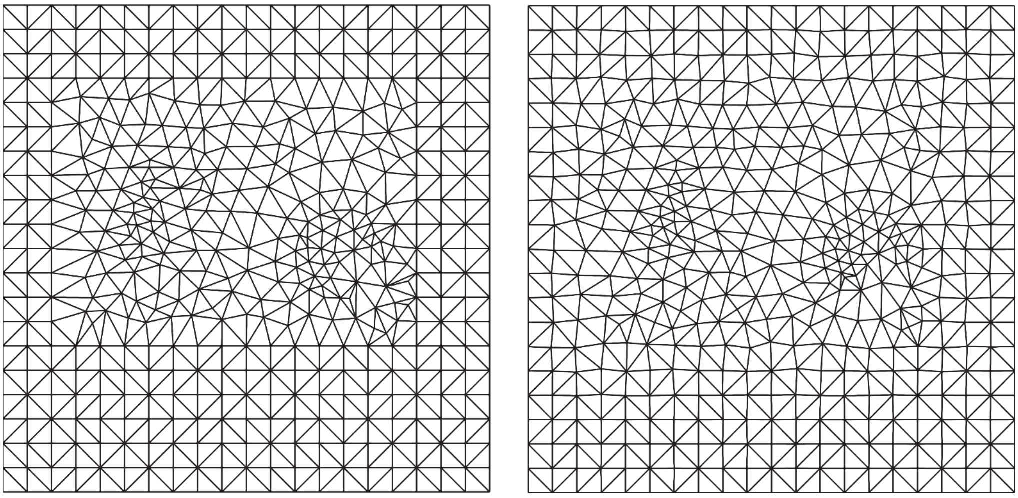
Фиг. 12. Логотип NG: начальное радикальное разбиение $\mathcal{R}_0$ (а) и конечное разбиение Делоне $\mathcal{T}$ (б).

(а) (б)



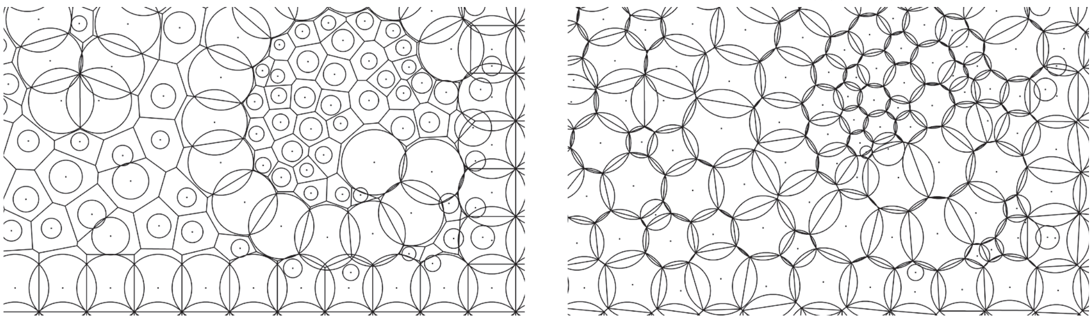
Фиг. 13. Логотип NG: начальное радикальное разбиение $\mathcal{R}_0$ с начальным набором кругов (а) и конечное разбиение Делоне $\mathcal{T}$ с кругами Делоне (б).

(а) (б)



Фиг. 14. Логотип NG: начальная взвешенная сетка Делоне $\mathcal{W}_0$ (а) и конечная триангуляция Вороного (б).

(а) (б)



Фиг. 15. Логотип NG: фрагменты начального радикального разбиения (а) и конечного разбиения Делоне (б).

6. ОБСУЖДЕНИЕ

В двумерном случае мы численно показали, что радикальное разбиение может превращаться в многоугольное разбиение Делоне через эволюцию набора окружностей. Постановка задачи многомерна, поэтому ожидается, что алгоритм применим и в трехмерном случае. Хотя для этой задачи пока нет результата о существовании решения, мы не считаем это критическим недостатком. Как только добавление новых шаров становится допустимой операцией, результат существования становится тривиальным, поскольку спроецированная функция $\tilde{v}^*$ на каждой итерации является решением задачи. Однако проблема минимального добавления шаров для построения решения остается открытой. Численные эксперименты показывают, что способность локально добавлять новые круги/шары может быть также важна для достижения заданного качества сетки при наличии ограничений.

Отметим, что концепция подъема точек на параболоид позволяет разрабатывать нетривиальные вычислительные алгоритмы. В [18] шары с заранее неизвестными радиусами приписываются к вершинам поверхностной триангуляции так, чтобы решить проблему восстановления взвешенной тетраэдризации Делоне для набора точек, соответствующих предписанным граничным треугольникам. В [18] проблема существования взвешенной тетраэдризации, которая соответствует заданной граничной сетке, не решена. Очевидно, что можно задать такую поверхностную триангуляцию, некоторые грани которой в принципе не могут быть взвешенными гранями Делоне. В этом случае сетка поверхности должна быть уточнена: добавляются новые вершины, что делает проблему существования решения не такой сложной.

Идея использования значения дискретного функционала Дирихле для произвольного подъема (для меры грубости поднятой поверхности) не нова. В [19] был установлен принцип минимальной грубости для двумерных триангуляций Делоне. На данный момент не ясно, как свойство минимальной грубости может быть связано с представленными результатами.

На практике функционалы качества сетки должны быть оптимизированы с использованием многообразия $\nabla F = 0$ в качестве ограничения. Очевидные требования к качеству связаны с устранением малых ребер и граней Делоне и Вороного, что является предметом текущего исследования. Чтобы построить хорошие сетки Делоне–Вороного, необходимо следовать заданной функции локального размера, а также использовать стратегию, в которой устраняются малые ребра/грани Делоне, удаляются малые шары Делоне и малые ребра/грани Вороного, а также отдается предпочтение многогранной, а не симплициальной сетке Вороного.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Delone (Delaunay) B.N.* Proc. Inter. Congr. Math. (Toronto 1924) V. 1. P. 695–700. Univ. Toronto Press, 1928.
2. *Delaunay B.N.* Sur la sphere vide // Bull. Acad. Sci. URSS. VII. Ser. 1934. V. 6. P. 793–800.
3. *Делоне Б.Н.* Геометрия положительных квадратичных форм // Успехи матем. наук. 1937. Т. 3. С. 16–62.
4. *Делоне Б.Н.* Геометрия положительных квадратичных форм // Успехи матем. наук. 1938. Т. 4. С. 102–164.
5. *Gärtner K., Kamenski L.* Why do we need Voronoi cells and Delaunay meshes? In Garanzha V.A., Kamenski L., and Si H. (eds), Numerical Geometry, Grid Generation and Scientific Computing, Lect. Notes Comput. Sci. Eng. V. 131. P. 45–60. Springer, Cham, 2019.
6. *Гертнер К., Каменски Л.* Зачем нужны сетки Вороного–Делоне? Основные свойства метода конечных объемов с использованием ячеек Вороного // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2019. V. 59. № 12. P. 2007–2023.
7. *Si H.* TetGen, a Delaunay-based tetrahedral mesh generator // ACM Transact. on Math. Software. 2015. V. 41. № 2. P. 1–36.
8. *Aurenhammer F., Klein R., Lee D.-T.* Voronoi diagrams and delaunay triangulations. World Sci. Publ. Co., Inc., USA, 2013.
9. *Garanzha V.A., Kudryavtseva L.N., Tsvetkova V.O.* Structured orthogonal near-boundary Voronoi mesh layers for planar domains. In Garanzha V.A., Kamenski L., Si H. (eds), Numerical Geometry, Grid Generation and Scientific Computing, Lect. Notes Comput. Sci. Eng. V. 131. P. 25–44. Springer, Cham, 2019.
10. *Гаранжа В.А., Кудрявцева Л.Н., Цветкова В.О.* Построение гибридных расчетных сеток Вороного. Алгоритмы и нерешенные проблемы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2019. V. 59. № 12. P. 2024–2044.
11. *Abdelkader A., Bajaj C., Ebeida M., Mahmoud A., Mitchell S., Owens J., Rushdi A.* VoroCrust: Voronoi meshing without clipping // ACM Trans. Graph. 2020. V. 39. № 3. P. 23.
12. *Voronoi G.F.* french Nouvelles applications des paramétres continus a la théorie de formes quadratiques // J. Reine Angew. Math. 1908. V. 134. P. 198–287.
13. *Edelsbrunner H., Seidel R.* Voronoi diagrams and arrangements // Discrete Comput. Geom. 1986. V. 1. P. 25–44.
14. *Александров А.Д.* Выпуклые многогранники. Москва–Ленинград: Гостехиздат, 1950.
15. *Fenchel W.* On conjugate convex functions // Canad. J. Math. 1949. V. 1. P. 73–77.
16. *Edelsbrunner H.* Geometry and topology for mesh generation. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge Univer. Press, 2001.
17. *Garanzha V.A., Kamenski L., Si H.* (eds) Numerical geometry, grid generation and scientific computing. V. 143 of Lect. Notes Comput. Sci. Eng., Springer, Cham, 2021.
18. *Alexa M.* Conforming weighted Delaunay triangulation // ACM Trans. Graph. 2020. V. 39. P. 6.
19. *Rippa S.* Minimal roughness property of the Delaunay triangulations // Comput. Aided Geom. Design. 1990. V. 7. P. 489–497.

EDN: LRKOSQ
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1251–1268

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 519.63

ФОРМУЛА ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ ЧЕРЕЗ ИЗОМЕТРИЧЕСКИЕ ИНВАРИАНТЫ ПАРЫ ОТРЕЗКОВ[1)]

О. Д. Аносова[1,*], М. Брайт[1,], В. А. Курлин[1,***]**
[1] *Департамент компьютерных наук и Фабрика инновационных материалов, Ливерпульский университет, Ливерпуль L69 3BX, Великобритания*
**e-mail: oanosova@liv.ac.uk*
***e-mail: sgmbrigh@liverpool.ac.uk*
****e-mail: vitaliy.kurlin@gmail.com*
Поступила в редакцию 11.10.2021 г.
Переработанный вариант 03.03.2022 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

Коэффициент зацепления обычно определяется как изотопический инвариант для двух непересекающихся замкнутых кривых в трехмерном пространстве. Однако изначальное определение через двойной интеграл, данное Гауссом в 1833 г., работает для любых непересекающихся кривых, рассматриваемых с точностью до движения трехмерного пространства. В частности, коэффициент зацепления является изометрическим инвариантом жестких структур, состоящих из отрезков прямых. В настоящей работе впервые дается полное доказательство точной аналитической формулы для коэффициента зацепления двух отрезков в терминах шести изометрических инвариантов, а именно, расстояния и угла между данными отрезками и четырех координат их концов в естественной системе координат, ассоциированной с этими отрезками. Практические приложения к сцепленным кристаллическим сетям побудили нас описать возможные расширения коэффициента зацепления на бесконечные периодические структуры и описать недавние результаты в изометрической классификации периодических множеств точек. Библ. 30. Фиг. 5.

Ключевые слова: интеграл Гаусса, коэффициент зацепления, изометрические инварианты.
DOI: 10.31857/S0044466922080026

1. ИНТЕГРАЛ ГАУССА ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ НЕПЕРЕСЕКАЮЩИХСЯ КРИВЫХ

Эта расширенная версия статьи конференции [1] включает все ранее пропущенные доказательства. Для любых векторов $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^3$, смешанное произведение определяется по формуле $(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = (\mathbf{u} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{w}$.

Определение 1 (интеграл Гаусса для коэффициента зацепления). Для кусочно-гладких кривых $\gamma_1, \gamma_2 : [0, 1] \to \mathbb{R}^3$, *коэффициент зацепления* может быть определен как интеграл Гаусса (см. [2])

$$\mathrm{lk}(\gamma_1, \gamma_2) = \frac{1}{4\pi}\int_0^1\int_0^1 \frac{(\dot\gamma_1(t), \dot\gamma_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3}\,dtds,$$

где $\dot\gamma_1(t)$, $\dot\gamma_2(s)$ – векторные производные функций $\gamma_1(t)$, $\gamma_2(s)$ от одной переменной.

Формула в определении 1 дает целое число для любых замкнутых непересекающихся кривых γ_1, γ_2, благодаря ее интерпретации как степени отображения Гаусса $\Gamma(t,s) = \frac{\gamma_1(t) - \gamma_2(s)}{|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|} : S^1 \times S^1 \to S^2$, т.е. $\deg\Gamma = \frac{\mathrm{area}(\Gamma(S^1 \times S^1))}{\mathrm{area}(S^2)}$, где площадь единичной сферы равна $\mathrm{area}(S^2) = 4\pi$. Эта целая степень является *коэффициентом зацепления* 2-компонентного зацепле-

[1)]Работа выполнена при поддержке Исследовательского совета по инженерным и физическим наукам Великобритании в рамках гранта “Топологический анализ данных в приложениях” (EP/R018472/1).

ния $\gamma_1 \sqcup \gamma_2 \subset \mathbb{R}^3$, образованного двумя замкнутыми кривыми. Инвариантность относительно непрерывной деформации $\mathbb{R}^3$ легко следует для замкнутых кривых: действительно, функция под интегралом Гаусса в (1), а значит и сам интеграл, непрерывно меняются при возмущении кривых γ_1, γ_2. Это означает, что любое целое значение должно оставаться постоянным.

Для незамкнутых кривых γ_1, γ_2 интеграл Гаусса дает действительное, но не обязательно целое значение, которое остается инвариантным при жестких движениях или изометриях, сохраняющих ориентацию (см. теорему 1). В $\mathbb{R}^3$ с евклидовой метрикой изометрии состоят из композиций вращений, параллельных переносов и отражений. Изометрическая инвариантность вещественного коэффициента зацепления для незамкнутых кривых нашла применение в изучении молекул (см. [3]).

Любая гладкая кривая может быть хорошо аппроксимирована ломаной, поэтому вычисление коэффициента зацепления сводится к сумме по парам прямых отрезков L_1, L_2. В 1976 г. Банчофф (см. [4]) выразил коэффициент зацепления $\mathrm{lk}(L_1, L_2)$, используя концы каждого отрезка (см. подробности этой и других предыдущих работ в разд. 3).

В 2000 г. Кленин и Ланговски (см. [5]) предложили формулу для коэффициента зацепления $\mathrm{lk}(L_1, L_2)$ для двух отрезков L_1, L_2 в терминах шести инвариантов, ссылаясь на предыдущую работу [6], в которой формула использовалась без детального доказательства. В [5] также пропущены все детали вывода формулы на основе инвариантов.

Полезность формулы на основе инварианта можно увидеть, рассмотрев аналогию с более простым понятием скалярного произведения векторов. Алгебраическая или *координатная* формула выражает скалярное произведение двух векторов $\mathbf{u} = (x_1, y_1, z_1)$ и $\mathbf{v} = (x_2, y_2, z_2)$ как $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2$, которые, в свою очередь, зависят от координат концевых точек данных векторов. Однако скалярное произведение для многомерных векторов $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$, $\mathbb{R}^n$ также может быть выражено в терминах только трех параметров $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = |\mathbf{u}| \cdot |\mathbf{v}| \cos\angle(|\mathbf{u}|, \mathbf{v})$. Две длины $|\mathbf{u}|$, $|\mathbf{v}|$ и угол $\angle(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ являются инвариантами изометрии векторов $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$. Эта вторая геометрическая или *инвариантная* формула позволяет понять, что $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ является инвариантом изометрии, в то время как намного труднее показать, что сумма $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2$ инвариантна при вращении. Это также дает другие геометрические идеи, которые трудно извлечь из формулы, основанной на координатах: например, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ колеблется как синус, когда длины $|\mathbf{u}|$, $|\mathbf{v}|$ фиксированы, но угол $\angle(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ меняется.

В настоящей работе мы приводим подробное доказательство инвариантной формулы для коэффициента зацепления в теореме 2 и новые следствия в разд. 6, формально исследующие асимптотическое поведение коэффициента зацепления, которое ранее не изучалось.

Наш собственный интерес к асимптотическому поведению мотивирован тем, что *периодический коэффициент зацепления* (см. [7]) является инвариантом кристаллических сетей (см. [8]), которые бесконечно периодичны в трех направлениях. Периодический коэффицент получается как бесконечная сумма коэффициентов зацепления между одним отрезком и всеми копиями другого отрезка, перенесенными по векторам решетки.

2. ОБЩАЯ СХЕМА ФОРМУЛЫ НА ОСНОВЕ ИНВАРИАНТОВ И ПОСЛЕДСТВИЯ

Общеизвестная теорема 1 перечисляет ключевые свойства $\mathrm{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$, которые будут использованы позже.

Теорема 1 (свойства коэффициента зацепления). *Коэффициент зацепления, заданный интегралом Гаусса в определении* 1 *для гладких кривых* γ_1, γ_2, *обладает следующими свойствами*:

а) *коэффициент зацепления симметричен*: $\mathrm{lk}(\gamma_1, \gamma_2) = \mathrm{lk}(\gamma_2, \gamma_1)$;

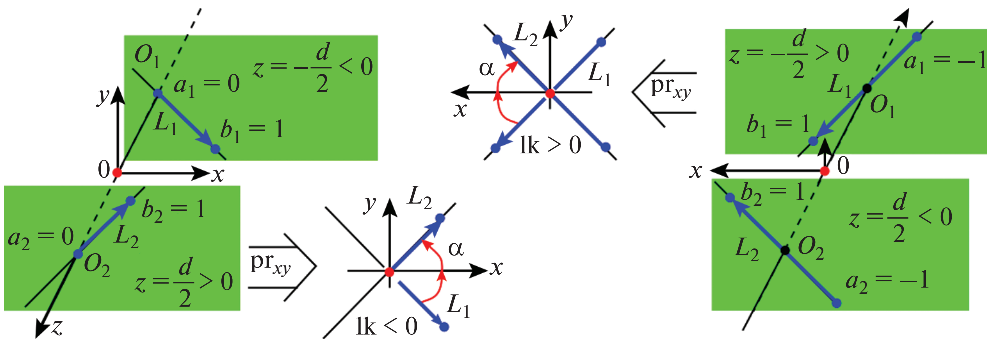
b) $\mathrm{lk}(\gamma_1, \gamma_2) = 0$ *для любых кривых* γ_1, γ_2, *принадлежащих одной плоскости*;

c) $\mathrm{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$ *не зависит от сохраняющих ориентацию параметризаций кривых* γ_1, γ_2 *с фиксированными конечными точками*;

d) $\mathrm{lk}(-\gamma_1, \gamma_2) = -\mathrm{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$, *где* $-\gamma_1$ *совпадает с* γ_1, *но имеет обратную ориентацию*;

e) *коэффициент зацепления* $\mathrm{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$ *инвариантен при любом масштабировании* $\mathbf{v} \to \lambda\mathbf{v}$ *для* $\lambda > 0$;

f) $\mathrm{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$ *умножается на* $\det M$ *при любом ортогональном отображении* $\mathbf{v} \mapsto M\mathbf{v}$.



Фиг. 1. Каждый отрезок прямой L_i лежит в плоскости $\{z = (-1)^i d/2\}$, $i = 1, 2$. Слева: расстояние $d > 0$, координаты конечных точек $a_1 = 0$, $b_1 = 1$ и $a_2 = 0$, $b_2 = 1$, длины $l_1 = l_2 = 1$. Справа: ориентированное расстояние $d < 0$, координаты конечной точки $a_1 = -1$, $b_1 = 1$ и $a_2 = -1$, $b_2 = 1$, поэтому $l_1 = l_2 = 2$. На обоих средних рисунках $\alpha = \pi/2$ – это угол от $\mathrm{pr}_{xy}(L_1)$ к $\mathrm{pr}_{xy}(L_2)$ с x-осью в качестве биссектрисы.

Доказательство. a) Заметим, что евклидово расстояние симметрично, а поскольку тройное произведение антисимметрично и $\gamma_2(s) - \gamma_1(t) = -(\gamma_1(t) - \gamma_2(s))$, то симметрия следует из следующих равенств:

$$(\dot\gamma_2(s), \dot\gamma_1(t), \gamma_2(s) - \gamma_1(t)) = -(\dot\gamma_1(t), \dot\gamma_2(s), \gamma_2(s) - \gamma_1(t)) =$$
$$= -(\dot\gamma_1(t), \dot\gamma_2(s), -(\gamma_1(t) - \gamma_2(s))) = (\dot\gamma_1(t), \dot\gamma_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s)).$$

b) Следует из того, что касательные вектора и вектор разности кривых лежат в одной плоскости и, следовательно, имеют нулевое смешанное произведение.

c) Является простым следствием независимости интегралов от параметризации.

d) Следует из $\dot\gamma_1(1 - t) = -\dot\gamma(t)$, так как кривая с обратной ориентацией $\gamma_1(t)$ совпадает с $\gamma_1(1 - t)$.

e) Любое масштабирование $\mathbf{v} \mapsto \lambda\mathbf{v}$ приводит к изменению параметризации $\gamma_i(t) \mapsto \lambda(\gamma_i(t)$. Поскольку $\dot{\lambda\gamma_i}(t) = \lambda\dot\gamma_i(t)$, результат получается из следующих равенств:

$$\mathrm{lk}(\lambda\gamma_1(t), \lambda\gamma_2(s)) = \frac{1}{4\pi}\int_0^1\int_0^1 \frac{(\lambda\dot\gamma_1(t), \lambda\dot\gamma_2(s), \lambda(\gamma_1(t) - \gamma_2(s)))}{|\lambda(\gamma_1(t) - \gamma_2(s))|^3} dtds =$$
$$= \frac{1}{4\pi}\int_0^1\int_0^1 \frac{\lambda^3(\dot\gamma_1(t), \dot\gamma_2(s), \gamma_1(t) - \gamma_2(s))}{\lambda^3|\gamma_1(t) - \gamma_2(s)|^3} dtds = \mathrm{lk}(\gamma_1(t), \gamma_2(s)).$$

f) Для ортогонального преобразования M имеем $M\mathbf{u} \times M\mathbf{v} = (\det M)M(\mathbf{u} \times \mathbf{v})$ и $M\mathbf{u} \cdot M\mathbf{v} = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$. Поэтому $|M\mathbf{v} - M\mathbf{u}| = |\mathbf{v} - \mathbf{u}|$, $(M\mathbf{u}, M\mathbf{v}, M\mathbf{w}) = \det M(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})$ и $\mathrm{lk}(M\gamma_1, M\gamma_2) = (\det M)(\mathrm{lk}(\gamma_1, \gamma_2))$, как и ожидалось. Теорема 1 доказана.

Основная теорема 2 докажет аналитическую формулу для коэффициента зацепления любых отрезков L_1, L_2 в терминах шести изометрических инвариантов L_1, L_2, которые введены в лемме 1. Более простое следствие 1 выражает $\mathrm{lk}(L_1, L_2)$ для любых *простых* ортогональных отрезков L_1, L_2, определенных их длинами $l_1, l_2 > 0$ и начальными конечными точками O_1, O_2 соответственно с евклидовым расстоянием $d(O_1, O_2) = d > 0$, так что векторы L_1, L_2, $\overrightarrow{O_1O_2}$ образуют положительно-ориентированный ортогональный базис, объем которого равен $\left|\left(L_1, L_2, \overrightarrow{O_1O_2}\right)\right| = |l_1l_2d|$ (см. фиг. 1).

Следствие 1 (коэффициент зацепления для простых ортогональных отрезков). Для любых простых ортогональных отрезков $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ с длинами l_1, l_2 и расстоянием d, как определено выше, коэффициент зацепления равен $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi}\mathrm{arctg}\left(\frac{l_1l_2}{d\sqrt{l_1^2 + l_2^2 + d^2}}\right)$.

Приведенное выше выражение является частным случаем общей формулы (3) для $a_1 = a_2 = 0$ и $\alpha = \pi/2$. Обе формулы инвариантны при равномерном масштабировании $\mathbb{R}^3$ на λ, что согласуется с теоремой 1. Если $l_1 = l_2 = l$, то коэффициент зацепления в следствии 1 становится $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi}\operatorname{arctg}\frac{l^2}{d\sqrt{2l^2 + d^2}}$. Если $l_1 = l_2 = d/2$, то $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = \frac{1}{2\pi}\left(\arcsin\frac{1}{\sqrt{2.5}} - \frac{\pi}{4}\right) \approx -0.016$. Если $l_1 = l_2 = d$, то $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi}\operatorname{arctg}\frac{1}{\sqrt{3}} = -\frac{1}{24} \approx -0.0417$.

Следствие 1 подразумевает, что коэффициент зацепления находится в интервале $(-1/8, 0)$ для любых простых ортогональных отрезков с $d > 0$, что не было очевидно из определения 1. Если L_1, L_2 удаляются друг от друга, то $\lim\limits_{d\to+\infty} \mathrm{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi}\operatorname{arctg} 0 = 0$.

Если отрезки с $l_1 = l_2 = l$ становятся бесконечно короткими, то предел снова равен нулю: $\lim\limits_{l\to 0} \mathrm{lk}(L_1, L_2) = 0$ для любого фиксированного d. Из предела $\lim\limits_{x\to+\infty} \operatorname{arctg} x = \pi/2$ следует, что если отрезки с $l_1 = l_2 = l$ становятся бесконечно длинными для фиксированного расстояния d, то $\lim\limits_{l\to+\infty} \mathrm{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi}\operatorname{arctg}\frac{l^2}{d\sqrt{2l^2 + d^2}} = -\frac{1}{8}$. Если мы приблизим друг к другу отрезки L_1, L_2, которые имеют фиксированные (возможно, разные) длины l_1, l_2, то возникает тот же предел: $\lim\limits_{d\to 0} \mathrm{lk}(L_1, L_2) = -1/8$ (более общие следствия см. в разд. 6).

3. ПОСЛЕДНИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБ ИНТЕГРАЛЕ ГАУССА ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ

В обзоре [9] рассматривается история интеграла Гаусса, его использование в описании электромагнитных полей Максвеллом (см. [10]), и его интерпретация как степени отображения из тора в сферу. В классической теории узлов $\mathrm{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$ – это топологический инвариант зацепления, состоящего из замкнутых кривых $\gamma_1 \sqcup \gamma_2$ рассматриваемых с точностью до изотопии. Это отношение слишком гибко для незамкнутых кривых, которые могут быть изотопически развязаны, что превращает интеграл Гаусса в 0 для незамкнутых кривых γ_1, γ_2.

Вычислить значение интеграла Гаусса можно приближенно, но эта задача упрощается, когда мы рассматриваем прямые отрезки. Первая формула для коэффициента зацепления между двумя прямыми отрезками в терминах их геометрии была описана Банчоффом (см. [4]). Банчофф рассматривает проекцию отрезков на плоскость, ортогональную некоторому вектору $\xi \in S^2$. Интеграл Гаусса интерпретируется как доля единичной сферы, покрытая теми направлениями ξ, для которых проекции пересекаются.

Эта интерпретация легла в основу замкнутой формы, разработанной Араи (см. [11]), используя явную формулу ван Остерома и Страки для телесного угла. В [12] обсуждается другой подход к вычислению коэффициента зацепления с помощью телесного угла.

Альтернативный подсчет для этого телесного угла приведен в [13] в качестве отправной точки для вычисления дальнейших инвариантов открытых запутанных кривых. Эта формула не использует геометрические инварианты, но была использована в [5] для формулы (без доказательства), аналогичной теореме 2, которая доказывается в данной работе с дополнительными следствиями в разд. 6.

4. ШЕСТЬ ИЗОМЕТРИЧЕСКИХ ИНВАРИАНТОВ ПРЯМЫХ ОТРЕЗКОВ В ТРЕХМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

В этом разделе вводятся шесть изометричеких инвариантов, которые однозначно определяют положение любых отрезков $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ с точностью до изометрии $\mathbb{R}^3$ (см. лемму 1).

Достаточно рассмотреть только отрезки, которые не принадлежат одной двумерной плоскости. Если L_1, L_2 лежат в одной плоскости Π, например, параллельны, то $\dot{L}_1(t) \times \dot{L}_2(s)$ ортогонален любому вектору $L_1(t) - L_2(s)$ в плоскости Π, следовательно, $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = 0$. Обозначим через

$\bar{L}_1, \bar{L}_2 \subset \mathbb{R}^3$ бесконечные ориентированные прямые, проходящие через данные отрезки L_1, L_2 соответственно. В плоскости с фиксированными координатами x, y все углы измеряются против часовой стрелки от положительной оси x.

Определение 2 (инварианты отрезков). Пусть $\alpha \in [0, \pi]$ – угол между ориентированными отрезками $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$. Если предположить, что L_1, L_2 не параллельны, то существует единственная пара параллельных плоскостей Π_i, $i = 1, 2$, каждая из которых содержит бесконечную прямую $\bar{L}_i$, продолжающую отрезок L_i.

Выберем ортогональные координаты x, y, z в $\mathbb{R}^3$ так, что

a) горизонтальная плоскость $\{z = 0\}$ находится посередине между Π_1, Π_2 (см. фиг. 1);

b) $(0, 0, 0)$ – пересечение проекций $\mathrm{pr}_{xy}(\bar{L}_1)$, $\mathrm{pr}_{xy}(\bar{L}_2)$ на плоскость $\{z = 0\}$;

c) ось x разбивает пополам угол α между проекциями $\mathrm{pr}_{xy}(\bar{L}_1)$ и $\mathrm{pr}_{xy}(\bar{L}_2)$, ось y выбрана так, что угол α измеряется против часовой стрелки от оси x до оси y в плоскости $\{z = 0\}$;

d) ось z выбрана так, что оси x, y, z имеют правостороннюю ориентацию, тогда d – это ориентированное расстояние от Π_1 до Π_2; расстояние d отрицательно, если вектор $\overrightarrow{O_1O_2}$ противоположен положительно-ориентированной оси z на фиг. 1.

Пусть a_i, b_i – координаты начальной и конечной точек отрезков L_i бесконечной прямой $\bar{L}_i$, начало которой – это точка $O_i = \Pi_i \cap (z - \text{ось}) = (0, 0, (-1)^i d/2)$, $i = 1, 2$.

Случай, когда отрезки L_1, L_2 лежат в одной плоскости $\Pi \subset \mathbb{R}^3$ допускается определением 2, если мы решим, что расстояние d от Π_1 до Π_2 равно нулю.

Лемма 1 (параметризация). *Любые ориентированные отрезки $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ однозначно определяются с точностью до жесткого движения изометрическими инвариантами $\alpha \in [0, \pi]$ и d, a_1, b_1, a_2, $b_2 \in \mathbb{R}$ из определения 2. Для $l_i = b_i - a_i$, $i = 1, 2$, каждый отрезок прямой L_i имеет вид*

$$L_i(t) = \left((a_i + l_i t)\cos\frac{\alpha}{2}, (-1)^i (a_i + l_i t)\sin\frac{\alpha}{2}, (-1)^i \frac{d}{2}\right), \quad t \in [0, 1]. \tag{2}$$

Доказательство. Любые отрезки прямых $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$, не лежащие в одной плоскости, содержатся в разных параллельных плоскостях. Для $i = 1, 2$ плоскость Π_i определяется L_i и прямой, параллельной L_{3-i} и проходящей через конец отрезка L_i. Пусть L_i' – ортогональная проекция отрезка L_i на плоскость Π_{3-i}. Пусть O_i – точка пересечения непараллельных прямых, продолжающих отрезки L_i и L_{3-i}' в плоскости Π_i. Тогда отрезок O_1O_2 ортогонален обеим плоскостям Π_i, следовательно, обеим L_i для $i = 1, 2$.

По теореме 1, для вычисления $\mathrm{lk}(L_1, L_2)$ можно применить жесткое движение, чтобы переместить среднюю точку отрезка O_1O_2 в начало координат $O = (0, 0, 0) \in \mathbb{R}^2$ и сделать отрезок O_1O_2 вертикальным, т.е. лежащим внутри оси z. Ориентированное расстояние d можно определить как разность между координатами $O_2 = \Pi_2 \cap (z\text{-axis})$ и $O_1 = \Pi_1 \cap (z\text{-axis})$ вдоль оси z. Тогда L_i лежит в горизонтальной плоскости $\Pi_i = \{z = (-1)^i d/2\}$, $i = 1, 2$.

Дополнительное вращение вокруг оси z гарантирует, что ось x в горизонтальной плоскости $\Pi = \{z = 0\}$ является биссектрисой угла $\alpha \in [0, \pi]$ от $\mathrm{pr}_{xy}(\bar{L}_1)$ к $\mathrm{pr}_{xy}(\bar{L}_2)$, где $\mathrm{pr}_{xy} : \mathbb{R}^3 \to \Pi$ – ортогональная проекция. Тогда бесконечные прямые $\bar{L}_i$ через L_i имеют параметрическую форму $(x, y, z) = (t\cos(\alpha/2), (-1)^i t\sin(\alpha/2), (-1)^i d/2)$ с $s \in \mathbb{R}$.

Точку O_i можно рассматривать как начало ориентированной бесконечной прямой $\bar{L}_i$. Пусть отрезок L_i имеет длину $l_i > 0$ и его начальная точка имеет координату $a_i \in \mathbb{R}$ на ориентированной прямой $\bar{L}_i$. Тогда второй конец вектора L_i имеет координату $b_i = a_i + l_i$. Чтобы запараметризовать только отрезок L_i, параметр t можно заменить на $a_i + l_i t$, $t \in [0, 1]$. Лемма 1 доказана.

Если $t \in \mathbb{R}$ в лемме 1, то соответствующая точка $L_i(t)$ движется вдоль всей прямой $\bar{L}_i$.

Лемма 2 (формулы для инвариантов). *Пусть* $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ *– любые отрезки, не лежащие в одной плоскости и заданные начальной и конечной точками* $A_i, B_i \in \mathbb{R}^3$ *так, что* $\mathbf{L}_i = \overrightarrow{A_iB_i}$, $i = 1, 2$. *Тогда изометрические инварианты* L_1, L_2 *в лемме* 1 *вычисляются следующим образом*:

длины $l_i = \left|\overrightarrow{A_iB_i}\right|$, *расстояние* $d = \dfrac{\left[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \overrightarrow{A_1A_2}\right]}{|\mathbf{L}_1 \times \mathbf{L}_2|}$, *угол* $\alpha = \arccos\dfrac{\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2}{l_1 l_2}$, $a_1 = \left(\dfrac{\mathbf{L}_2}{l_2}\cos\alpha - \dfrac{\mathbf{L}_1}{l_1}\right) \cdot \dfrac{\overrightarrow{A_1A_2}}{\sin^2\alpha}$, $a_2 = \left(\dfrac{\mathbf{L}_2}{l_2} - \dfrac{\mathbf{L}_1}{l_1}\cos\alpha\right) \cdot \dfrac{\overrightarrow{A_1A_2}}{\sin^2\alpha}$, $b_i = a_i + l_i$, $i = 1, 2$.

Доказательство. Векторы $\mathbf{L}_i$ вдоль данных отрезков имеют длины $l_i = |\mathbf{L}_i| = \left|\overrightarrow{A_iB_i}\right|$, $i = 1, 2$. Угол $\alpha \in [0, \pi]$ между $\mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_2$ может быть найден из скалярного произведения $\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2 = |\mathbf{L}_1| \cdot |\mathbf{L}_2| \cos\alpha$ как $\alpha = \arccos\dfrac{\mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{L}_2}{l_1 l_2}$, так как функция $\arccos x : [-1, 1] \to [0, \pi]$ является биективной. Поскольку векторы $\mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_2$ непараллельны, то нормированное векторное произведение $e_3 = \dfrac{\mathbf{L}_1 \times \mathbf{L}_2}{|\mathbf{L}_1 \times \mathbf{L}_2|}$ определено и ортогонально обоим векторам $\mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_2$. Тогда $\mathbf{e}_1 = \dfrac{\mathbf{L}_1}{|\mathbf{L}_1|}$, $\mathbf{e}_2 = \dfrac{\mathbf{L}_2}{|\mathbf{L}_2|}$ и $\mathbf{e}_3$ имеют длины 1 и образуют линейный базис $\mathbb{R}^3$, где последний вектор ортогонален первым двум.

Пусть O – любая неподвижная точка $\mathbb{R}^3$, которую можно принять за начало координат $(0, 0, 0)$ в лемме 1, хотя ее положение относительно векторов $\overrightarrow{A_iB_i}$ еще не определено. Сначала выразим точки $O_i = (0, 0, (-1)^i d/2) \in \bar{L}_i$ с фиг. 1 в терминах данных векторов $\overrightarrow{A_iB_i}$. Если первый конец A_i имеет координату a_i на прямой $\bar{L}_i$, продолжающую отрезок L_i, то $\overrightarrow{O_iA_i} = a_i\mathbf{e}_i$ и

$$\overrightarrow{O_1O_2} = \overrightarrow{OO_2} - \overrightarrow{OO_1} = \left(\overrightarrow{OA_2} - \overrightarrow{O_2A_2}\right) - \left(\overrightarrow{OA_1} - \overrightarrow{O_1A_1}\right) = \overrightarrow{A_1A_2} + a_1\mathbf{e}_1 - a_2\mathbf{e}_2.$$

По определению 2 вектор $\overrightarrow{O_1O_2}$ ортогонален прямой $\bar{L}_i$, проходящей через вектор $\mathbf{e}_i = \dfrac{\mathbf{L}_i}{|\mathbf{L}_i|}$ для $i = 1, 2$. Тогда произведение $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \overrightarrow{O_1O_2}] = (\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2) \cdot \overrightarrow{O_1O_2}$ равно $|\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2| d$, где $\overrightarrow{O_1O_2}$ направлен по оси z, расстояние d – это z-координата O_2 минус z-координата O_1. Смешанное произведение $\left[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \overrightarrow{O_1O_2}\right] = (\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2) \cdot \left(\overrightarrow{A_1A_2} + a_1\mathbf{e}_1 - a_2\mathbf{e}_2\right) = (\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2) \cdot \overrightarrow{A_1A_2}$ не зависит от параметров a_1, a_2, потому что $\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2$ ортогональна к обоим $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$. Следовательно, расстояние равно $d = \dfrac{[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \overrightarrow{A_1A_2}]}{|\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2|} = \dfrac{[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \overrightarrow{A_1A_2}]}{|\mathbf{L}_1 \times \mathbf{L}_2|}$, которое может быть положительным или отрицательным (см. фиг. 1).

Осталось найти координату a_i первого конца отрезка L_i относительно начала координат O_i в оси $\bar{L}_i$, $i = 1, 2$. Вектор $\overrightarrow{O_1O_2} = \overrightarrow{A_1A_2} + a_1\mathbf{e}_1 - a_2\mathbf{e}_2$ ортогонален к обоим $\mathbf{e}_i$ тогда и только тогда, когда скалярные произведения равны нулю: $\overrightarrow{O_1O_2} \cdot \mathbf{e}_i = 0$. Так как $|\mathbf{e}_1| = 1 = |\mathbf{e}_2|$ и $\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2 = \cos\alpha$, получаем

$$\begin{gathered}
\mathbf{e}_1 \cdot \overrightarrow{A_1A_2} + a_1 - a_2(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) = 0,\\
\mathbf{e}_2 \cdot \overrightarrow{A_1A_2} + a_1(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2) - a_2 = 0,\\
\begin{pmatrix} 1 & -\cos\alpha \\ \cos\alpha & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \mathbf{e}_1 \cdot \overrightarrow{A_1A_2} \\ \mathbf{e}_2 \cdot \overrightarrow{A_1A_2} \end{pmatrix}.
\end{gathered}$$

Определитель матрицы 2×2 равен $\cos^2\alpha - 1 = -\sin^2\alpha \neq 0$, так как L_1, L_2 не параллельны. Тогда

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sin^2\alpha}\begin{pmatrix} -1 & \cos\alpha \\ -\cos\alpha & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{e}_1 \cdot \overrightarrow{A_1A_2} \\ \mathbf{e}_2 \cdot \overrightarrow{A_1A_2} \end{pmatrix}.$$

Получаем формулы

$$a_1 = \frac{-\mathbf{e}_1 \cdot \overrightarrow{A_1A_2} + \cos\alpha\left(\mathbf{e}_2 \cdot \overrightarrow{A_1A_2}\right)}{\sin^2\alpha} = \frac{(\mathbf{e}_2\cos\alpha - \mathbf{e}_1)\cdot\overrightarrow{A_1A_2}}{\sin^2\alpha} = \left(\frac{\mathbf{L}_2}{l_2}\cos\alpha - \frac{\mathbf{L}_1}{l_1}\right)\cdot\frac{\overrightarrow{A_1A_2}}{\sin^2\alpha},$$

$$a_2 = \frac{\cos\alpha\left(\mathbf{e}_1 \cdot \overrightarrow{A_1A_2}\right) - \mathbf{e}_1 \cdot \overrightarrow{A_1A_2}}{\sin^2\alpha} = \frac{(\mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_1\cos\alpha)\cdot\overrightarrow{A_1A_2}}{\sin^2\alpha} = \left(\frac{\mathbf{L}_2}{l_2} - \frac{\mathbf{L}_1}{l_1}\cos\alpha\right)\cdot\frac{\overrightarrow{A_1A_2}}{\sin^2\alpha}.$$

Координаты вторых концов получаются как $b_i = a_i + l_i$ для $i = 1, 2$. Лемма 2 доказана.

Следующая лемма гарантирует, что коэффициент зацепления ведет себя симметрично по d, значит, мы можем рассмотреть только один случай из двух $d > 0$ или $d < 0$.

Лемма 3 (симметрия). *Пусть отрезки* $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ *параметризованы, как в лемме* 1. *При центральной симметрии* $\mathrm{CS} : (x, y, z) \mapsto (-x, -y, -z)$ *относительно начала координат* $(0, 0, 0) \in \mathbb{R}^3$ *отрезки сохраняют свои инварианты* α, a_1, b_1, a_2, b_2. *Расстояние d и коэффициент зацепления меняют свои знаки*: $\mathrm{lk}(\mathrm{CS}(L_1), \mathrm{CS}(L_2)) = -\mathrm{lk}(L_1, L_2)$.

Доказательство. При центральной симметрии CS в обозначениях леммы 2 векторы $\mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_2$, $\overrightarrow{A_1A_2}$ меняют свои знаки. Тогда формула для $\alpha, a_1, b_1, a_2, b_2$ дает то же выражение, но смешанное произведение $\left[\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \overrightarrow{A_1A_2}\right]$ и d меняют свои знаки.

Поскольку центральная симметрия CS является ортогональным отображение M с $\det M = -1$, новый коэффициент зацепления меняет свой знак следующим образом: $\mathrm{lk}(\mathrm{CS}(L_1), \mathrm{CS}(L_2)) = \mathrm{lk}(\mathrm{CS}(L_2), \mathrm{CS}(L_1)) = -\mathrm{lk}(L_1, L_2)$, где мы также используем инвариантность коэффициента зацепления, когда отрезки меняются местами в теореме 1(f). Лемма доказана.

5. ИНВАРИАНТНАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ ОТРЕЗКОВ

В этом разделе доказывается основная теорема 2, которая выражает коэффициент зацепления двух отрезков в терминах их шести изометрических инвариантов из определения 2. В 2000 г. Кленин и Ланговски привели аналогичную, но чуть менее симметричную формулу (см. [5]), но не привели доказательства, что требует технических лемм ниже. Например, один из их шести инвариантов отличается от ориентированного расстояния d между ориентированными отрезками.

Теорема 2 (инвариантная формула). *Для любых отрезков* $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ *с инвариантами* $\alpha \in (0, \pi)$, $a_1, b_1, a_2, b_2, d \in \mathbb{R}$ *из определения* 2, *имеем*

$$\mathrm{lk}(L_1, L_2) = \frac{\mathrm{AT}(a_1, b_2; d, \alpha) + \mathrm{AT}(b_1, a_2; d, \alpha) - \mathrm{AT}(a_1, a_2; d, \alpha) - \mathrm{AT}(b_1, b_2; d, \alpha)}{4\pi}, \tag{3}$$

где

$$\mathrm{AT}(a, b; d, \alpha) = \mathrm{arctg}\left(\frac{ab\sin\alpha + d^2\,\mathrm{ctg}\,\alpha}{d\sqrt{a^2 + b^2 - 2ab\cos\alpha + d^2}}\right).$$

Для $\alpha = 0$ *или* $\alpha = \pi$, *мы задаем* $\mathrm{AT}(a, b; d, \alpha) = \mathrm{sign}(d)\pi/2$. *Мы также считаем, что* $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = 0$ *в случае* $d = 0$.

Выражение $a^2 + b^2 - 2ab\cos\alpha$ всегда неотрицательно как квадрат третьей стороны треугольника с первыми двумя сторонами a, b и углом α между ними. Также $a^2 + b^2 - 2ab\cos\alpha = 0$ только тогда, когда треугольник вырождается в случаях $a = \pm b$ и $\cos\alpha = \pm 1$. Для $\alpha = 0$ или $\alpha = \pi$, когда L_1, L_2 параллельны, $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = 0$ получается из $\mathrm{AT}(a, b; d, \alpha) = \mathrm{sign}(d)\pi/2 = 0$, когда $d = 0$ выполняется в дополнение к $\alpha = 0$ или $\alpha = \pi$.

Симметрия функции AT относительно a, b, т.е. $\mathrm{AT}(a, b; d, \alpha) = \mathrm{AT}(b, a; d, \alpha)$, подразумевает, что $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = \mathrm{lk}(L_2, L_1)$ по теореме 2. Поскольку функция AT нечетна относительно d, т.е. $\mathrm{AT}(a, b; -d, \alpha) = -\mathrm{AT}(b, a; d, \alpha)$, лемма 3 также выполняется.

Доказательство следствия 1. По определению любые простые ортогональные отрезки L_1, L_2 имеют угол $\alpha = \pi/2$ и координаты первых концов $a_1 = 0 = a_2$, следовательно, $b_1 = l_1$, $b_2 = l_2$. Тогда

(3) дает $\mathrm{AT}(0, l_2; d, \pi/2) = 0$, $\mathrm{AT}(l_1, 0; d, \pi/2) = 0$, $\mathrm{AT}(0, 0; d, \pi/2) = 0$. Окончательно, $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi}\mathrm{AT}(l_1, l_2; d, \alpha) = -\frac{1}{4\pi}\operatorname{arctg}\left(\frac{l_1 l_2}{d\sqrt{l_1^2 + l_2^2 + d^2}}\right)$. Следствие 1 доказано.

На фиг. 2 показано, как функция $\mathrm{AT}(a, b; d, \alpha)$ из теоремы 2 зависит от 2 из 4 инвариантов, когда остальные инварианты зафиксированы. Например, если угол $\alpha = \pi/2$ фиксирован, то $\mathrm{AT}(a, b; d, \pi/2) = \operatorname{arctg}\left(\frac{ab}{d\sqrt{a^2 + b^2 + d^2}}\right)$. Если также $a = b$, то поверхность $\mathrm{AT}(a, a; d, \pi/2) = \operatorname{arctg}\left(\frac{a^2}{d\sqrt{2a^2 + d^2}}\right)$ на фиг. 2а имеет горизонтальный хребет $\mathrm{AT}(0, 0; d, \pi/2) = 0$ и $\lim_{d\to 0}\mathrm{AT}(a, a; d, \pi/2) = \operatorname{sign}(d)\pi/2$ для $a \neq 0$. Если d, α свободны, но $a = 0$, то $\mathrm{AT}(0, 0; d, \alpha) = \operatorname{arctg}\left(\frac{d^2 \operatorname{ctg}\alpha}{d\sqrt{d^2}}\right) = \operatorname{sign}(d)\operatorname{arctg}(\operatorname{ctg}\alpha) = \operatorname{sign}(d)(\pi/2 - \alpha)$. Аналогично, $\lim_{d\to\infty}\mathrm{AT}(0, 0; d, \alpha) = \operatorname{sign}(d)(\pi/2 - \alpha)$ (см. линии $\mathrm{AT} = \pi/2 - \alpha$ на границах поверхностей AT на фиг. 2в, г).

Лемма 4. ($\mathrm{lk}(L_1, L_2)$ является интегралом по p, q). *В обозначениях определения* 2 *имеем*

$$\mathrm{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi}\int_{a_1/d}^{b_1/d}\int_{a_2/d}^{b_2/d}\frac{\sin\alpha\, dp\, dq}{(1 + p^2 + q^2 - 2pq\cos\alpha)^{3/2}}$$

для $d > 0$.

Доказательство. Мы предполагаем, что a_1, a_2, l_1, l_2, α заданы и $t, s \in [0, 1]$;

$$L_1(t) = \left((a_1 + l_1 t)\cos\frac{\alpha}{2}, -(a_1 + l_1 t)\sin\alpha, -\frac{d}{2}\right),$$

$$L_2(s) = \left((a_2 + l_2 s)\cos\frac{\alpha}{2}, (a_2 + l_2 s)\sin\alpha, \frac{d}{2}\right),$$

$$\dot{L}_1(t) = \left(l_1\cos\frac{\alpha}{2}, -l_1\sin\frac{\alpha}{2}, 0\right),$$

$$\dot{L}_2(s) = \left(l_2\cos\frac{\alpha}{2}, l_2\sin\frac{\alpha}{2}, 0\right),$$

$$\dot{L}_1(t)\times\dot{L}_2(s) = \left(0, 0, 2l_1 l_2\sin\frac{\alpha}{2}\cos\frac{\alpha}{2}\right) = \left(0, 0, l_1 l_2\sin\alpha\right),$$

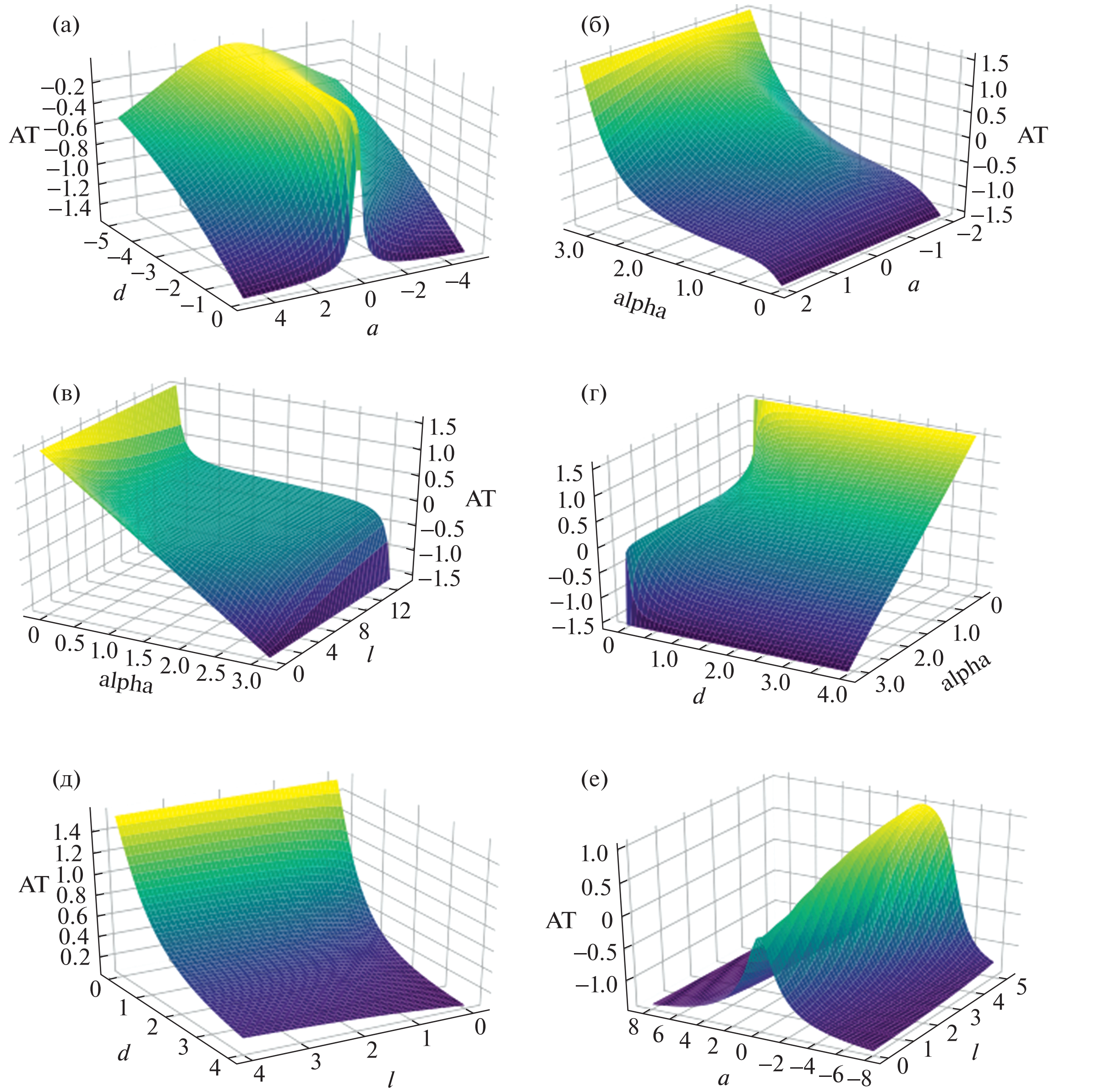
$$L_1(t) - L_2(s) = ((a_1 - a_2 + l_1 t - l_2 s)\cos\alpha, -(a_1 + a_2 + l_1 t + l_2 s)\sin\alpha, -d),$$

$$\left(\dot{L}_1(t), \dot{L}_2(s), L_1(t) - L_2(s)\right) = -d l_1 l_2\sin\alpha,$$

$$\mathrm{lk}(L_1, L_2) = \frac{1}{4\pi}\int_0^1\int_0^1\frac{(\dot{L}_1(t), \dot{L}_2(s), L_1(t) - L_2(s))}{\left|L_1(t) - L_2(s)\right|^3}dt\,ds =$$

$$= \frac{1}{4\pi}\int_0^1\int_0^1\frac{-d l_1 l_2\sin\alpha\, dt\, ds}{\left(d^2 + (a_1 - a_2 + l_1 t - l_2 s)^2\cos^2\frac{\alpha}{2} + (a_1 + a_2 + l_1 t + l_2 s)^2\sin^2\frac{\alpha}{2}\right)^{3/2}} =$$

$$= \frac{d l_1 l_2\sin\alpha}{4\pi}\int_0^1\int_0^1\frac{dt\, ds}{\left(d^2 + (a_1 - a_2 + l_1 t - l_2 s)^2\cos^2\frac{\alpha}{2} + (a_1 + a_2 + l_1 t + l_2 s)^2\sin^2\frac{\alpha}{2}\right)^{3/2}}.$$



Фиг. 2. Поверхность $\mathrm{AT}(a,b;d,\alpha) = \operatorname{arctg}\left(\dfrac{ab\sin\alpha + d^2\operatorname{ctg}\alpha}{d\sqrt{a^2+b^2-2ab\cos\alpha+d^2}}\right)$, где 2 из 4 инвариантов фиксированы: (а) – $l = b - a = 0$, $\alpha = \pi/2$; (б) – $l = d = -1$; (в) – $a = 0$, $d = 1$; (г) – $a = 0$, $l = 1$; (д) – $a = 1$, $\alpha = \pi/2$; (е) – $d = -1$, $\alpha = \pi/2$.

Для упрощения последнего интеграла введем переменные $p = (a_1 + l_1 t)/d$ и $q = (a_2 + l_2 s)/d$. При новых переменных p, q выражение под степенью 3/2 в знаменателе приобретает вид

$$d^2 + (pd - qd)^2\cos^2\frac{\alpha}{2} + (pd + qd)^2\sin^2\frac{\alpha}{2} =$$

$$= d^2\left(1 + (p^2 - 2pq + q^2)\cos^2\frac{\alpha}{2} + (p^2 + 2pq + q^2)\sin^2\frac{\alpha}{2}\right) =$$

$$= d^2\left(1 + p^2\left(\cos^2\frac{\alpha}{2} + \sin^2\frac{\alpha}{2}\right) + q^2 - 2pq\left(\cos^2\frac{\alpha}{2} - \sin^2\frac{\alpha}{2}\right)\right) =$$

$$= d^2(1 + p^2 + q^2 - 2pq\cos\alpha).$$

Старые переменные выражаются как $t = (pd - a_1)/l_1$, $s = (qd - a_2)/l_2$ и имеют дифференциалы $dt = \frac{d}{l_1}dp$, $ds = \frac{d}{l_2}dq$. Поскольку $t, s \in [0, 1]$, новые переменные p, q меняются в интервалах $[a_1/d, b_1/d]$ и $[a_2/d, b_2/d]$ соответственно. Тогда мы получаем требуемое выражение:

$$\mathrm{lk}(L_1, L_2) = -\frac{dl_1l_2\sin\alpha}{4\pi}\int_{a_1/d}^{b_1/d}\int_{a_2/d}^{b_2/d}\frac{d^2}{l_1l_2}\frac{dpdq}{d^3(1 + p^2 + q^2 - 2pq\cos\alpha)^{3/2}} =$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\int_{a_1/d}^{b_1/d}\int_{a_2/d}^{b_2/d}\frac{\sin\alpha dpdq}{(1 + p^2 + q^2 - 2pq\cos\alpha)^{3/2}}.$$

В силу леммы 3 вышеприведенные вычисления предполагают, что ориентированное расстояние $d > 0$. Лемма доказана.

Лемма 5 (коэффициент зацепления как одномерный интеграл). *В обозначениях определения* 2 *имеем*

$$\mathrm{lk}(L_1, L_2) = \frac{I(a_2/d) - I(b_2/d)}{4\pi},$$

где функция $I(r)$ *определяется как одномерный интеграл*

$$I(r) = \int_{a_1/d}^{b_1/d}\frac{\sin\alpha(r - p\cos\alpha)dp}{(1 + p^2\sin^2\alpha)\sqrt{1 + p^2 + r^2 - 2pr\cos\alpha}}$$

для $d > 0$.

Доказательство. Преобразуем выражение под степенью 3/2 в лемме 4:

$$1 + p^2 + q^2 - 2pq\cos\alpha = 1 + p^2\sin^2\alpha + (q - p\cos\alpha)^2.$$

Подстановка $(q - p\cos\alpha)^2 = (1 + p^2\sin^2\alpha)\,\mathrm{tg}^2\,\psi$ для новой переменной ψ упрощает сумму квадратов до $1 + \mathrm{tg}^2\,\psi = 1/\cos^2\psi$. Поскольку q изменяется в интервале $[a_2/d, b_2/d]$, для любого фиксированного $p \in [a_1/d, b_1/d]$, концы интервала $[\psi_0, \psi_1]$ из ψ удовлетворяют $\mathrm{tg}\,\psi_0 = \frac{a_2/d - p\cos\alpha}{\sqrt{1 + p^2\sin^2\alpha}}$ и $\mathrm{tg}\,\psi_1 = \frac{b_2/d - p\cos\alpha}{\sqrt{1 + p^2\sin^2\alpha}}$. Поскольку мы рассматриваем p, ψ как независимые переменные, то якобиан подстановки $(p, q) \mapsto (p, \psi)$ равен

$$\frac{\partial q}{\partial\psi} = \frac{\partial}{\partial\psi}\left(p\cos\alpha + \mathrm{tg}\,\psi\sqrt{1 + p^2\sin^2\alpha}\right) = \frac{\sqrt{1 + p^2\sin^2\alpha}}{\cos^2\psi}.$$

Для переменных p, ψ выражение под двойным интегралом в лемме 4 становится равным

$$\frac{\sin\alpha dpdq}{(1 + p^2 + q^2 - 2pq\cos\alpha)^{3/2}} = \frac{\sin\alpha dp}{((1 + p^2\sin^2\alpha) + (1 + p^2\sin^2\alpha)\,\mathrm{tg}^2\,\psi)^{3/2}}\frac{\partial q}{\partial\psi}d\psi =$$

$$= \frac{\sin\alpha dp}{(1 + p^2\sin^2\alpha)^{3/2}(1 + \mathrm{tg}^2\,\psi)^{3/2}}\frac{d\psi\sqrt{1 + p^2\sin^2\alpha}}{\cos^2\psi} = \frac{\sin\alpha dp\cos\psi d\psi}{1 + p^2\sin^2\alpha},$$

$$\mathrm{lk} = -\frac{1}{4\pi}\int_{a_1/d}^{b_1/d}\frac{\sin\alpha dp}{1 + p^2\sin^2\alpha}\int_{\psi_0}^{\psi_1}\cos\psi d\psi = \frac{1}{4\pi}\int_{a_1/d}^{b_1/d}\frac{\sin\alpha dp}{1 + p^2\sin^2\alpha}(\sin\psi_0 - \sin\psi_1).$$

Мы можем выразить синусы углов ψ_0, ψ_1 в терминах тангенса как $\sin\psi_0 = \operatorname{tg}\psi_0/\sqrt{1+\operatorname{tg}^2\psi_0}$. Используя $\operatorname{tg}\psi_0 = (a_2/d - p\cos\alpha)/\sqrt{1+p^2\sin^2\alpha}$, получаем

$$\sqrt{1+\operatorname{tg}^2\psi_0} = \sqrt{\frac{(1+p^2\sin^2\alpha)+(a_2/d-p\cos\alpha)^2}{1+p^2\sin^2\alpha}} = \sqrt{\frac{1+p^2+(a_2/d)^2-2(a_2/d)p\cos\alpha}{1+p^2\sin^2\alpha}},$$

$$\sin\psi_0 = \frac{a_2/d-p\cos\alpha}{\sqrt{1+p^2\sin^2\alpha}}\sqrt{\frac{1+p^2\sin^2\alpha}{1+p^2+(a_2/d)^2-2\dfrac{a_2}{d}p\cos\alpha}} = \frac{a_2/d-p\cos\alpha}{\sqrt{1+p^2+(a_2/d)^2-2(a_2/d)p\cos\alpha}}.$$

Тогда $\sin\psi_1$ имеет такое же выражение с a_2, замененным на b_2. Подставив эти выражения в предыдущую формулу для коэффициента зацепления, получаем

$$\operatorname{lk}(L_1,L_2) = \frac{1}{4\pi}\int\limits_{a_1/d}^{b_1/d}\frac{\sin\alpha dp}{1+p^2\sin^2\alpha}\left(\frac{a_2/d-p\cos\alpha}{\sqrt{1+p^2+(a_2/d)^2-2(a_2/d)p\cos\alpha}}-\right.$$

$$\left.-\frac{b_2/d-p\cos\alpha}{\sqrt{1+p^2+(b_2/d)^2-2(b_2/d)p\cos\alpha}}\right) = \frac{I(a_2/d)-I(b_2/d)}{4\pi}$$

для

$$I(r) = \int\limits_{a_1/d}^{b_1/d}\frac{\sin\alpha(r-p\cos\alpha)dp}{(1+p^2\sin^2\alpha)\sqrt{1+p^2+r^2-2pr\cos\alpha}}.$$

Лемма 6 ($I(r)$ через arctg). *Интеграл $I(r)$ в лемме 5 можно найти как*

$$\int\frac{\sin\alpha(r-p\cos\alpha)dp}{(1+p^2\sin^2\alpha)\sqrt{1+p^2+r^2-2pr\cos\alpha}} = \operatorname{arctg}\frac{pr\sin\alpha+\operatorname{ctg}\alpha}{\sqrt{1+p^2+r^2-2pr\cos\alpha}}+C.$$

Доказательство. Самый простой способ – дифференцировать $\operatorname{arctg}\omega$ с дополнительной функцией $\omega = (pr\sin^2\alpha+\cos\alpha)/\sin\alpha\sqrt{1+p^2+r^2-2pr\cos\alpha}$ относительно переменной p, помня, что r, α – фиксированные параметры. Для упрощения обозначений мы используем вспомогательный символ для выражения под квадратным корнем: $R = 1+p^2+r^2-2pr\cos\alpha$. Тогда $\omega = (pr\sin^2\alpha+\cos\alpha)/\sin\alpha\sqrt{R}$ и

$$\frac{d\omega}{dp} = \frac{1}{R\sin\alpha}\left(r\sin^2\alpha\sqrt{R}-(rp\sin^2\alpha+\cos\alpha)\frac{2p-2r\cos\alpha}{2\sqrt{R}}\right) =$$

$$= \frac{1}{R\sqrt{R}\sin\alpha}\Big(r\sin^2\alpha(1+p^2+r^2-2pr\cos\alpha)-(rp\sin^2\alpha+\cos\alpha)(p-r\cos\alpha)\Big) =$$

$$= \frac{rp^2\sin^2\alpha+r^3\sin^2\alpha-2pr^2\cos\alpha\sin^2\alpha-rp^2\sin^2\alpha+pr^2\cos\alpha\sin^2\alpha-p\cos\alpha+r}{R\sqrt{R}\sin\alpha} =$$

$$= \frac{r^3\sin^2\alpha-pr^2\cos\alpha\sin^2\alpha-p\cos\alpha+r}{R\sqrt{R}\sin\alpha} = \frac{(r-p\cos\alpha)(1+r^2\sin^2\alpha)}{R\sqrt{R}\sin\alpha},$$

$$\frac{d}{dp}\operatorname{arctg}\omega = \frac{1}{1+\omega^2}\frac{d\omega}{dp} = \frac{(\sin\alpha\sqrt{R})^2}{(\sin\alpha\sqrt{R})^2+(pr\sin^2\alpha+\cos\alpha)^2}\frac{d\omega}{dp} =$$

$$= \frac{R\sin^2\alpha}{R\sin^2\alpha+(p^2r^2\sin^4\alpha+2pr\sin^2\alpha\cos\alpha+\cos^2\alpha)}\frac{(r-p\cos\alpha)(1+r^2\sin^2\alpha)}{R\sqrt{R}\sin\alpha} =$$

$$= \frac{\sin\alpha}{\sqrt{R}}\frac{(r-p\cos\alpha)(1+r^2\sin^2\alpha)}{\sin^2\alpha(1+p^2+r^2-2pr\cos\alpha)+(p^2r^2\sin^4\alpha+2pr\sin^2\alpha\cos\alpha+\cos^2\alpha)} =$$

$$= \frac{\sin\alpha(r - p\cos\alpha)(1 + r^2\sin^2\alpha)}{(1 + p^2\sin^2\alpha + r^2\sin^2\alpha + p^2r^2\sin^4\alpha)\sqrt{R}} = \frac{\sin\alpha(r - p\cos\alpha)(1 + r^2\sin^2\alpha)}{(1 + p^2\sin^2\alpha)(1 + r^2\sin^2\alpha)\sqrt{R}} =$$

$$= \frac{\sin\alpha(r - p\cos\alpha)}{(1 + p^2\sin^2\alpha)\sqrt{R}} = \frac{\sin\alpha(r - p\cos\alpha)}{(1 + p^2\sin^2\alpha)\sqrt{1 + p^2 + q^2 - 2pq\cos\alpha}}.$$

Поскольку мы получили требуемое выражение под интегралом $I(r)$, лемма 6 доказана.

Доказательство теоремы 2. Рассмотрим правую часть уравнения в лемме 6 как функцию трех переменных $F(p,r;\alpha) = \operatorname{arctg}\left(\frac{pr\sin\alpha + \operatorname{ctg}\alpha}{\sqrt{1 + p^2 + r^2 - 2pr\cos\alpha}}\right)$. Функция в лемме 5 имеет вид $I(r) = F(b_1/d, r;\alpha) - F(a_1/d, r;\alpha)$. По лемме 5

$$\mathrm{lk} = \mathrm{integral}_p\, \mathrm{lk}(L_1, L_2) =$$
$$= \frac{(F(b_1/d, a_2/d;\alpha) - F(a_1/d, a_2/d;\alpha)) - (F(b_1/d, b_2/d;\alpha) - F(a_1/d, b_2/d;\alpha))}{4\pi}.$$

Перепишем функцию из числителя выше следующим образом:

$$F\left(a/d, b/d;\alpha\right) = \operatorname{arctg}\frac{(ab/d^2)\sin\alpha + \operatorname{ctg}\alpha}{\sqrt{1 + (a/d)^2 + (b/d)^2 - 2(ab/d^2)\cos\alpha}} = \operatorname{arctg}\frac{ab\sin\alpha + d^2\operatorname{ctg}\alpha}{d\sqrt{a^2 + b^2 - 2ab\cos\alpha + d^2}}.$$

Если обозначить последнее выражение как $\mathrm{AT}(a,b;d,\alpha)$, то из формулы (3) следует требуемый результат.

В леммах 4 и 5 и выше мы использовали, что ориентированное расстояние d положительно. По лемме 3 ориентированное расстояние d и $\mathrm{lk}(L_1, L_2)$ одновременно меняют свои знаки при центральной симметрии, в то время как все остальные инварианты остаются неизменными. Поскольку $\mathrm{AT}(a,b;-d,\alpha) = -\mathrm{AT}(a,b;d,\alpha)$ из-за нечетности функции arctan, то формула (3) справедлива для $d < 0$. Формула остается верной даже для $d = 0$, когда L_1, L_2 лежат в одной плоскости. В этом случае $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = 0$ требует дополнительного обсуждения из-за разрывности коэффициента зацепления около значения $d = 0$ (см. ниже в следствии 4).

6. АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ ОТРЕЗКОВ

В этом разделе рассматривается поведение коэффициента зацепления $\mathrm{lk}(L_1, L_2)$ в теореме 2 относительно шести инвариантов отрезков L_1, L_2. На фиг. 3 показано, как коэффициент зацепления между двумя равными отрезками прямых изменяется для различных пар инвариантов.

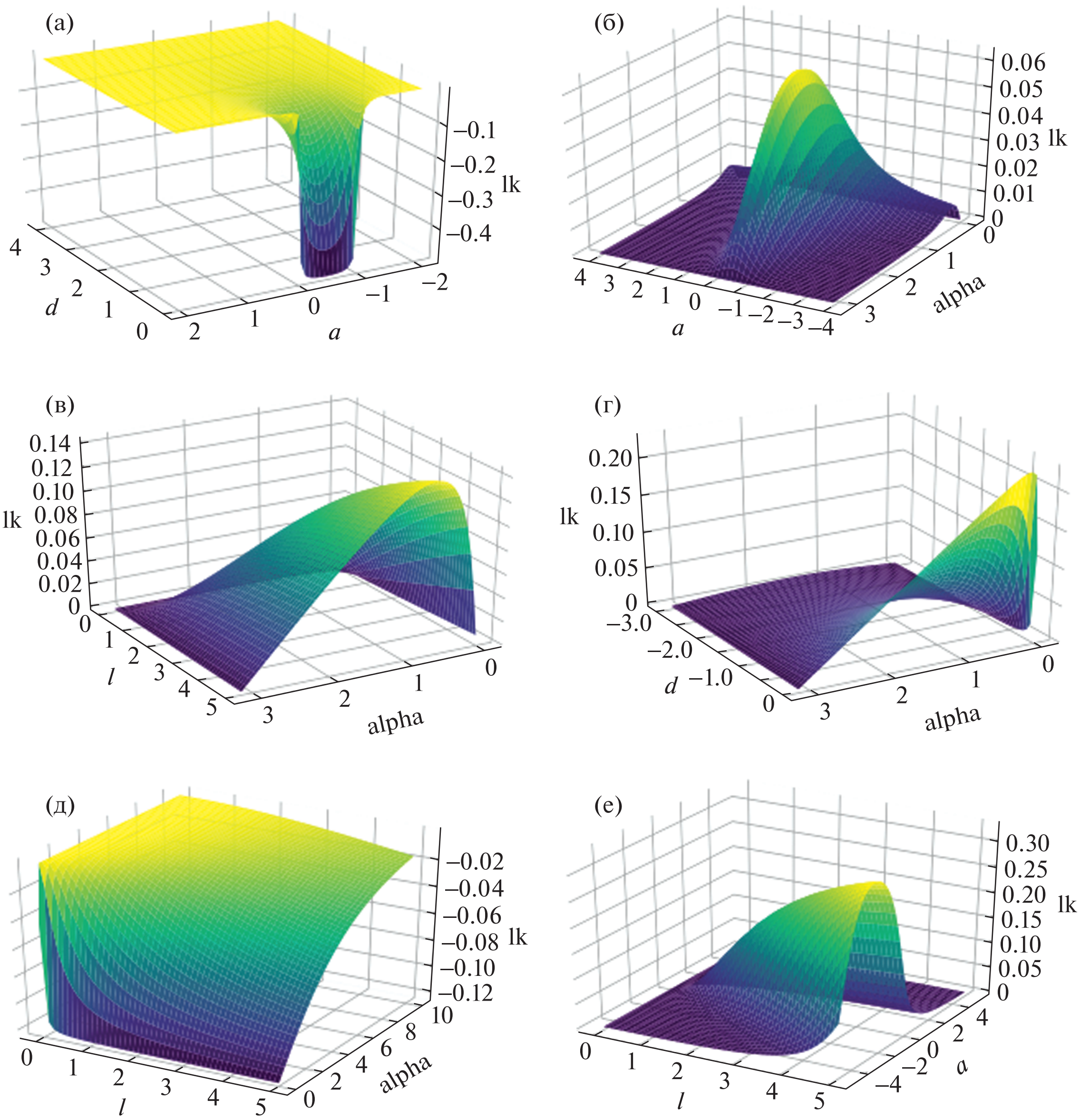
Следствие 2 (границы коэффициента зацепления). Для любых отрезков $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ коэффициент зацепления $\mathrm{lk}(L_1, L_2)$ находится между $\pm 1/2$.

Доказательство. По теореме 2 $\mathrm{lk}(L_1, L_2)$ – это сумма 4 функций AT, деленная на 4π. Так как каждая функция AT принимает значения строго между $\pm\pi/2$, то коэффициент зацепления находится между $\pm 1/2$. Следствие доказано.

Следствие 3 (знак коэффициента зацепления). В обозначениях определения 2 имеем $\lim\limits_{\alpha\to 0}\mathrm{lk}(L_1, L_2) = 0 = \lim\limits_{\alpha\to\pi}\mathrm{lk}(L_1, L_2)$. Для любых непараллельных отрезков L_1, L_2 имеем $\mathrm{sign}(\mathrm{lk}(L_1, L_2)) = -\mathrm{sign}(d)$. Поэтому $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = 0$ тогда и только тогда, когда $d = 0$ или $\alpha = 0$, или $\alpha = \pi$.

Доказательство. Если $\alpha = 0$ или $\alpha = \pi$, то $\mathrm{ctg}\alpha$ не определено, поэтому теорема 2 дополнительно задает $\mathrm{AT}(a,b;d,\alpha) = \mathrm{sign}(d)\pi/2$. Тогда $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = \mathrm{sign}(d)(\pi/2)(1 + 1 - 1 - 1) = 0$.

Теорема 2 также требует $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = 0$ для $d = 0$. Если $d \neq 0$ и $\alpha \to 0$ в интервале $[0, \pi]$, а все остальные параметры остаются фиксированными, то $d^2\mathrm{ctg}\alpha \to +\infty$. Следовательно, каждая из 4 функций AT в теореме 2 приближается к $d\pi/2$, поэтому $\mathrm{lk}(L_1, L_2) \to 0$. Аналогичный вывод следует и в случае $\alpha \to \pi$, когда $d^2\mathrm{ctg}\alpha \to -\infty$.



Фиг. 3. Коэффициент зацепления $\mathrm{lk}(a, a+l; a, a+l; d, \alpha)$ из формулы (3), где 2 из 4 инвариантов фиксированы: (а) – $l = 1$, $\alpha = \pi/2$; (б) – $l = 1$, $d = -1$; (в) – $a = 0$, $d = 1$; (г) – $a = 0$, $l = 1$; (д) – $a = 0$, $\alpha = \pi/2$; (е) – $d = -1$, $\alpha = \pi/2$.

Если L_1, L_2 не параллельны, то угол α между ними принадлежит интервалу $(0, \pi)$. Если $d > 0$, лемма 4 утверждает, что

$$\mathrm{lk}(L_1, L_2) = -\frac{1}{4\pi}\int\limits_{a_1/d}^{b_1/d}\int\limits_{a_2/d}^{b_2/d}\frac{\sin\alpha\, dp\,dq}{(1 + p^2 + q^2 - 2pq\cos\alpha)^{3/2}}.$$

Так как функция под интегралом строго положительна, то $\mathrm{lk}(L_1, L_2) < 0$. По лемме 3 оба $\mathrm{lk}(L_1, L_2)$ одновременно меняют свои знаки под действием центральной симметрии. Следовательно, формула $\mathrm{sign}(\mathrm{lk}(L_1, L_2)) = -\mathrm{sign}(d)$ имеет место для всех d, включая $d = 0$. Следствие доказано.

Следствие 4 (lk для $d \to 0$). Если расстояние $d \to 0$ и кривые L_1, L_2 остаются непересекающимися, то выражение в формуле (3) ведет себя непрерывно, поэтому $\lim\limits_{d\to 0}\mathrm{lk}(L_1, L_2) = 0$. Если

$d \to 0$ и внутренности отрезков L_1, L_2 пересекаются в предельном случае $d = 0$, то $\lim\limits_{d\to 0} \mathrm{lk}(L_1, L_2) = -\mathrm{sign}(d)/2$, где $d \to 0$ сохраняет свой знак.

Доказательство. Напомним, что $\lim\limits_{x\to\pm\infty} \mathrm{arctg}\, x = \pm\pi/2$. По следствию 3 предположим, что $\alpha \neq 0$, $\alpha \neq \pi$, так что $\alpha \in (0, \pi)$. Тогда $\sin\alpha > 0$, $a^2 + b^2 - 2ab\cos\alpha > (a-b)^2 \geq 0$ и

$$\lim_{d\to 0} \mathrm{AT}(a,b;d,\alpha) = \lim_{d\to 0} \mathrm{arctg}\left(\frac{ab\sin\alpha + d^2\,\mathrm{ctg}\,\alpha}{d\sqrt{a^2+b^2-2ab\cos\alpha+d^2}}\right) = \mathrm{sign}(a)\mathrm{sign}(b)\mathrm{sign}(d)\frac{\pi}{2},$$

и теорема 2 дает

$$\lim_{d\to 0} \mathrm{lk}(L_1, L_2) = \frac{\mathrm{sign}(d)}{8}(\mathrm{sign}(a_1) - \mathrm{sign}(b_1))(\mathrm{sign}(b_2) - \mathrm{sign}(a_2)).$$

В предельном случае $d = 0$ отрезки прямых $L_1, L_2 \subset \{z = 0\}$ остаются непересекающимися в одной плоскости тогда и только тогда, когда обе координаты конечных точек a_i, b_i имеют одинаковый знак хотя бы для одного из $i = 1, 2$, что эквивалентно $\mathrm{sign}(a_i) - \mathrm{sign}(b_i) = 0$, т.е. $\lim\limits_{d\to 0} \mathrm{lk}(L_1, L_2) = 0$ из произведения выше. Следовательно, формула (3) непрерывна при $d \to 0$ для любых непересекающихся отрезков. Любые отрезки, пересекающиеся в плоскости $\{z = 0\}$ при $d = 0$, имеют координаты конечных точек $a_i < 0 < b_i$ для обоих $i = 1, 2$ и имеют предел $\lim\limits_{d\to 0} \mathrm{lk}(L_1, L_2) = \dfrac{\mathrm{sign}(d)}{8}(-1-1)(1-(-1)) = -\dfrac{\mathrm{sign}(d)}{2}$ в соответствии с требованиями.

Следствие 5 (lk для $d \to \pm\infty$). Если расстояние $d \to \pm\infty$, то $\mathrm{lk}(L_1, L_2) \to 0$.

Доказательство. Если $d \to \pm\infty$, а остальные инварианты отрезков L_1, L_2 остаются фиксированными, то функция

$$\mathrm{AT}(a,b;d,\alpha) = \mathrm{arctg}\left(\frac{ab\sin\alpha + d^2\,\mathrm{ctg}\,\alpha}{d\sqrt{a^2+b^2-2ab\cos\alpha+d^2}}\right)$$

из теоремы 2 имеет предел $\mathrm{arctg}(\mathrm{sign}(d)\,\mathrm{ctg}\,\alpha) = \mathrm{sign}(d)(\pi/2 - \alpha)$. Поскольку четыре функции AT в теореме 2 включают одни и те же значения d, α, их пределы аннулируют друг друга, поэтому $\mathrm{lk}(L_1, L_2) \to 0$. Следствие доказано.

Следствие 6 (lk для $a_i, b_i \to \infty$). Если инварианты d, α отрезков прямых $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ остаются фиксированными, но $a_i \to +\infty$ или $b_i \to -\infty$ для каждого $i = 1, 2$, то $\mathrm{lk}(L_1, L_2) \to 0$.

Доказательство. Если $a_i \to +\infty$, то $a_i \leq b_i \to +\infty$, $i = 1, 2$. Если $b_i \to -\infty$, то $b_i \geq a_i \to -\infty$, $i = 1, 2$. Рассмотрим первый случай $a_i \to +\infty$, второй аналогичен. Так как d, α фиксированы, то $a^2 + b^2 - 2ab\cos\alpha + d^2 \leq (a+b)^2 + d^2 \leq 5b^2$ для достаточно больших b. Поскольку $\mathrm{arctg}(x)$ увеличивается,

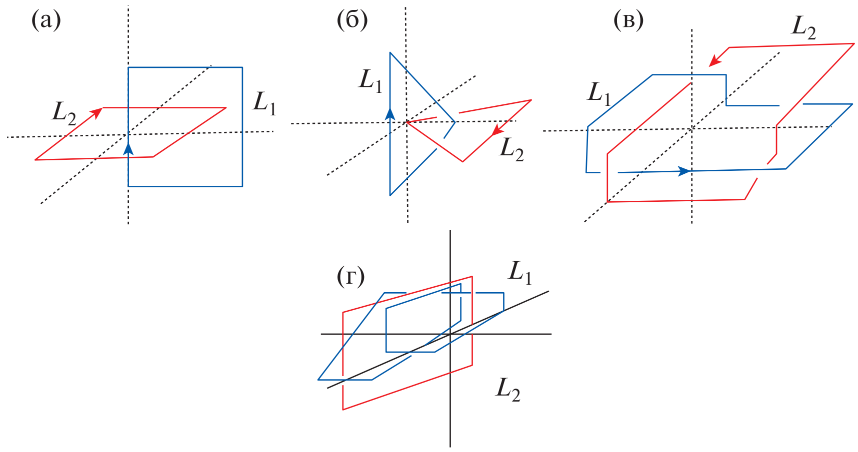
$$\mathrm{AT}(a,b;d,\alpha) \geq \mathrm{arctg}\left(\frac{ab\sin\alpha + d^2\,\mathrm{ctg}\,\alpha}{db\sqrt{5}}\right) \to \mathrm{sign}(d)\frac{\pi}{2},$$

как $b \geq a \to +\infty$. Поскольку четыре функции AT в теореме 2 имеют один и тот же предел, когда их первые два аргумента стремятся к $+\infty$, эти 4 предела аннулируют друг друга, поэтому $\mathrm{lk}(L_1, L_2) \to 0$.

Следствие 7 (lk для $a_i \to b_i$). Если один из отрезков $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^3$ становится бесконечно коротким так, что его второй конец стремится к фиксированному первому концу (или наоборот), а все остальные инварианты L_1, L_2 из определения 2 остаются фиксированными, то $\mathrm{lk}(L_1, L_2) \to 0$.

Доказательство. Покажем, что $\mathrm{lk}(L_1, L_2) = 0$ для $d = 0$. Достаточно рассмотреть случай $d \neq 0$. Тогда функция

$$\mathrm{AT}(a,b;d,\alpha) = \mathrm{arctg}\left(\frac{ab\sin\alpha + d^2\,\mathrm{ctg}\,\alpha}{d\sqrt{a^2+b^2-2ab\cos\alpha+d^2}}\right)$$



Фиг. 4. (а) – Зацепление Хопфа в виде двух квадратных циклов имеет $\mathrm{lk} = -1$ и вершины с координатами $L_1 = (-2,0,-2)$, $(2,0,-2)$, $(2,0,2)$, $(-2,0,2)$, $L_2 = (-1,-2,0)$, $(-1,2,0)$, $(1,2,0)$, $(1,-2,0)$. (б) – Зацепление Хопфа из треугольных циклов $L_1 = (-1,0,-1)$, $(-1,0,1)$, $(1,0,0)$ и $L_2 = (0,0,0)$, $(2,1,0)$, $(2,-1,0)$ имеет $\mathrm{lk} = +1$. (в) – Зацепление Соломона из ломаных $L_1 = (-1,1,1)$, $(-1,-1,1)$, $(3,-1,1)$, $(3,1,-1)$, $(1,1,-1)$, $(1,1,1)$ и $L_2 = (0,-2,-2)$, $(0,-2,0)$, $(2,2,0)$, $(2,0,0)$, $(0,2,0)$, $(2,0,0)$, $(2,0,-2)$, $(2,-2,-2)$, $(0,-2,-2)$ имеет $\mathrm{lk} = +2$. (г) – Зацепление Уайтхеда с вершинами $L_1 = (-1,0,1)$, $(1,0,1)$, $(0,0,-2)$, $(0,1,-2)$, $(-1,1,-2)$, $(-2,-1,3)$, $(1,-1,3)$, $(-1,0,-3)$, $(-1,2,-3)$, $(-1,2,1)$ и $L_2 = (0,-2,-1)$, $(0,2,-1)$, $(0,2,2)$, $(0,-2,2)$ имеет $\mathrm{lk} = 0$.

является непрерывной. Допустим, что (например, для $i = 1$) $a_1 \to b_1$, случай $b_1 \to a_1$ аналогичен. Из непрерывности AT следует, что $\mathrm{AT}(a_1, b_2; d, \alpha) \to \mathrm{AT}(b_1, b_2; d, \alpha)$ и $\mathrm{AT}(a_1, a_2; d, \alpha) \to \mathrm{AT}(b_1, a_2; d, \alpha)$. В пределе все члены в теореме 2 исчезают, следовательно, $\mathrm{lk}(L_1, L_2) \to 0$.

7. ВЫЧИСЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ЗАЦЕПЛЕНИЯ ДЛЯ ЛОМАНЫХ

Если кривые $\gamma_1, \gamma_2 \subset \mathbb{R}^3$ состоят из прямых отрезков, то $\mathrm{lk}(\gamma_1, \gamma_2)$ можно вычислить как сумму $\mathrm{lk}(L_1, L_2)$ по всем парам отрезков $L_1 \subset \gamma_1$ и $L_2 \subset \gamma_2$. В [7] приведено сложное доказательство того, что эта сумма сходится для кубической решетки. Вопрос о сходимости периодических коэффициентов зацепления для произвольных решеток остается открытым.

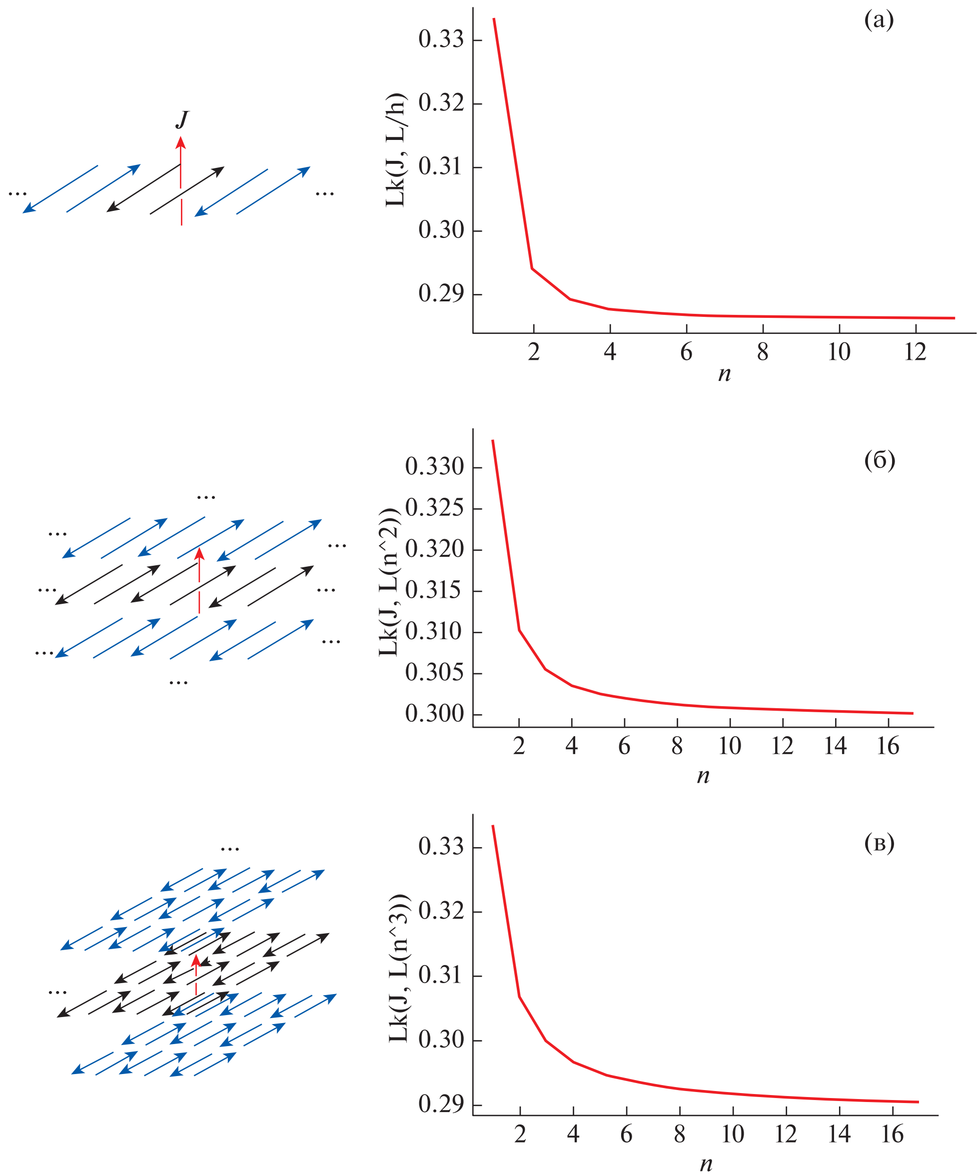
На фиг. 4 показаны ломаные, коэффициенты зацеплений которых были вычислены нашим кодом в Питоне по формуле (3) (см. сайт https://github.com/MattB-242/Closed_Lk_Form).

Для всех зацеплений на фиг. 4 формула (3) вычисляет коэффициент зацепления между двумя компонентами как равный -1 и $+1$ соответственно в ориентациях, указанных на фиг. 4, с ошибкой вычисления менее 10^{-12}.

Асимптотический коэффициент зацепления, введенный Арнольдом, сходится для бесконечно длинных кривых (см. [14]), в то время как нашей мотивацией было вычисление геометрических и топологических инвариантов для классификации периодических структур, таких как текстильные (см. [15]) и кристаллические структуры (см. [8]).

Теорема 2 позволяет нам вычислить *периодический* коэффициент зацепления между отрезком J и растущей конечной решеткой L_n, элементарная ячейка которой состоит из n копий двух противоположно ориентированных отрезков, ортогональных J. Этот периодический коэффициент зацепления вычисляется для возрастающего параметра n в решетке, периодически расширяющейся в одном, двух и трех направлениях (см. фиг. 5). С увеличением n функция lk асимптотически приближается к приближенному значению 0.30 для 1- и 3-периодической решетки и 0.29 для 2-периодической решетки.

Формула, основанная на шести инвариантах, позволила нам доказать новые асимптотические результаты для коэффициента зацепления, приведенные в следствиях 2–7 разд. 6. Поскольку периодический коэффициент зацепления является вещественным инвариантом изометрии, его можно использовать для непрерывной количественной оценки сходства между периодиче-



Фиг. 5. Слева: отрезок прямой $J = (0,0,-1) + t(0,0,2)$ красного цвета и периодическая решетка $L(n^k)$, полученная из n копий "элементарной ячейки" $L = \{(-1,-1,0) + t(0,2,0),\ (-1,1,0) + s(0,-2,0)\}$, $t, s \in [0,1]$, перенесенных в k линейно независимых направлениях для $n \in \mathbb{Z}$. Справа: периодический коэффициент зацепления $\mathrm{lk}(J, L(n^k))$ быстро сходится для $n \to +\infty$ при $k = 1$ (а), $k = 2$ (б), $k = 3$ (в).

скими кристаллическими сетями (см. [8]). Следующий возможный шаг – использовать формулу (3) для доказательства асимптотической сходимости периодического коэффициента зацепления для произвольных решеток, чтобы показать, что предел бесконечной суммы является изометрическим инвариантом, который может быть использован для сравнения кристаллических структур.

Инварианты Милнора обобщают коэффициент зацепления на инварианты связей с более чем двумя компонентами. Интеграл для трехкомпонентного инварианта Милнора (см. [16]) может быть вычислен в замкнутой форме аналогично теореме 2. Интересной открытой проблемой является распространение подхода, основанного на изометрии, на более тонкие инварианты узлов.

Однако есть и приложения в самой теории узлов. Интеграл Гаусса в (1) был расширен до бесконечного интеграла Концевича, содержащего все конечные инварианты Васильева узлов (см. [17]). Коэффициенты этого бесконечного ряда были явно описаны (см. [18]) как решения экспоненциальных уравнений с некоммутативными переменными x, y в сжатой форме с точностью до коммутаторов от коммутаторов в x, y. Главная метабелева формула для $\ln(e^x e^y)$ нашла более простое доказательство (см. [19]) в виде порождающего ряда по переменным x, y.

8. ВЫВОДЫ И ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ОБОБЩЕНИЯ НА ПЕРИОДИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ

В данной работе было представлено подробное доказательство аналитической формулы для коэффициента зацепления, основанной на шести инвариантах изометрии, которые однозначно определяют относительное положение двух отрезков в $\mathbb{R}^3$. Хотя подобная формула была заявлена в [5], доказательство не было приведено. Поэтому данная статья заполняет важный пробел в литературе, дополняя ранее отсутствующее доказательство с помощью сложных лемм 4–6 в разд. 5.

Мотивацией для нас послужило обнаружение взаимопроникающих кристаллических сетей (см. [8]). Твердые кристаллические материалы (кристаллы) – это периодические структуры, которые определяются в жесткой форме и могут быть естественно классифицированы с точностью до изометрии, сохраняющей все межатомные расстояния. Изометрические инварианты из Топологического Анализа Данных оказались значительно слабее, чем предполагалось ранее (см. [20]). Первый полный инвариант изометрии кристаллов был найден в [21]. Более сложной проблемой является разработка непрерывной метрики между кристаллами. Приближенные метрики между решетками любой размерности были определены в [22], которая инициировала новую область периодической геометрии (см. [23]). И классификационные, и метрические проблемы могут быть объединены в более важную с практической точки зрения задачу непрерывной параметризации всех кристаллов. Такие параметризации были недавно описаны для решеток размерности два (см. [24], [25]) и три (см. [26], [27]). Для кристаллов общего вида наиболее простыми полными инвариантами являются точечные распределения расстояний (см. [28]), чьи более простые средние значения (см. [29]) достаточны для предсказания энергии кристаллов в пределах 5 кДж/моль (см. [30]).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bright M., Anosova O., Kurlin V.* A proof of the invariant-based formula for the linking number and its asymptotic behaviour. In Proceed. of Numerical Geometry, Grid Generation and Scientific Computing, 2020. URL: https: //arxiv.org/abs/2011.04631.
2. *Gauss C.F.* Integral formula for linking number. Zur mathematischen theorie der electrodynamische wirkungen, Collected Works, 1833. P. 605.
3. *Ahmad R., Paul S., Basu S.* Characterization of entanglements in glassy polymeric ensembles using the gaussian linking number // Phys. Rev. E. 2020. V. 101. № 2. P. 022503.
4. *Banchoff T.* Self-linking numbers of space polygons // Indiana U. Math. J. 1976. V. 25. P. 1171–1188.
5. *Klenin K., Langowski J.* Computation of writhe in modeling of supercoiled dna // Biopolymers: Original Res. on Biomolecules. 2000. V. 54. № 5. P. 307–317.
6. *Vologodskii A.V., Anshelevich V.V., Lukashin A.V., Frank-Kamenetskii M.D.* Statistical mechanics of supercoils and the torsional stiffness of the dna double helix // Nature. 1974. V. 280. № 5720. P. 294–298.
7. *Panagiotou E.* The linking number in systems with periodic boundary conditions // J. Comput. Phys. 2015. V. 300. P. 533–573.
8. *Cui P., McMahon D., Spackman P., Alston B., Little M., Day G., Cooper A.* Mining predicted crystal structure landscapes with high throughput crystallisation: old molecules, new insights // Chemic. Sci. 2019. V. 10. P. 9988–9997.
9. *Ricca R.L., Nipoti B.* Gauss' linking number revisited // J. of Knot Theory and Its Ramifications. 2011. V. 20. № 10. P. 1325–1343.
10. *Maxwell J.C.* A treatise on electricity and magnetism // Nature. 1873. V. 7. № 182. P. 478–480.
11. *Arai Z.* A rigorous numerical algorithm for computing the linking number of links // Nonlin. Theory and Its Appl. 2013. V. 4. № 1. P. 104–110.
12. *Bertolazzi E., Ghiloni R., Specogna R.* Efficient computation of linking number with certification, 2019. URL: https://arxiv.org/abs/1912.13121.
13. *Panagiotou E., Kauffman L.H.* Knot polynomials of open and closed curves // Proc. A. 2020. V. 476. № 2240. P. 20200124. URL: https://arxiv.org/abs/2001.01303.
14. *Vogel T.* On the asymptotic linking number // Proc. Am. Math. Soc. 2003. V. 131. P. 2289–2297.

15. *Bright M., Kurlin V.* Encoding and topological computation on textile structures // Comput. and Graphic. 2020. V. 90. P. 51–61.
16. *DeTurck D., Gluck H., Komendarczyk R., Melvin P., Shonkwiler C., Vela-Vick D.* Pontryagin invariants and integral formulas for milnor's triple linking number. URL: https://arxiv.org/abs/1101.3374.
17. *Kontsevich M.* Vassiliev's knot invariants // Adv. Sov. Math. 1993. V. 16. P. 137–150.
18. *Kurlin V.* Compressed Drinfeld associators // J. of Algebra. 2005. V. 292. P. 184–242.
19. *Kurlin V.* The Baker-Campbell-Hausdorff formula in the free metabelian lie algebra // J. of Lie Theory. 2007. V. 17. № 3. P. 525–538.
20. *Smith P., Kurlin V.* Families of point sets with identical 1D persistence. 2022. URL: https://arxiv.org/abs/arxiv:2202.00577.
21. *Anosova O., Kurlin V.* An isometry classification of periodic point sets. In Proceed. of Discrete Geometry and Mathematical Morphology, 2021.
22. *Mosca M., Kurlin V.* Voronoi-based similarity distances between arbitrary crystal lattices // Crystal Res. and Tech. 2020. V. 55. № 5. P. 1900197.
23. *Anosova O., Kurlin V.* Introduction to periodic geometry and topology, 2021. URL: https://arxiv.org/abs/2103.02749.
24. *Kurlin V.* Mathematics of 2-dimensional lattices. 2022. URL: https://arxiv.org/abs/2201.05150.
25. *Bright M., Cooper A.I., Kurlin V.* Easily computable continuous metrics on the space of isometry classes of 2-dimensional lattices, 2021. URL: https: //arxiv.org/abs/2109.10885.
26. *Kurlin V.* A complete isometry classification of 3-dimensional lattices. 2022. URL: https://arxiv.org/abs/2201.10543.
27. *Bright M., Cooper A., Kurlin V.* A complete and continuous map of the lattice isometry space for all 3-dimensional lattices, 2021. URL: https: //arxiv.org/abs/2109.11538.
28. *Widdowson D., Kurlin V.* Pointwise distance distributions of periodic sets, 2021. URL: https://arxiv.org/abs/2108.04798.
29. *Widdowson D., Mosca M., Pulido A., Kurlin V., Cooper A.* Average minimum distances of periodic point sets // MATCH Communicat. in Math. and in Comput. Chem. 2022. V. 87. P. 529–559. URL: https://arxiv.org/abs/2009.02488.
30. *Ropers J., Mosca M.M., Anosova O., Kurlin V., Cooper A.* Fast predictions of lattice energies by continuous isometry invariants of crystal structures. In Proceed. of DACOMSIN, 2021. URL: https://arxiv.org/abs/2108.07233.

EDN: URYONZ
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1269–1287

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 519.63

ТРАНСФИНИТНАЯ БАРИЦЕНТРИЧЕСКАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ ЧЕРЕЗ МИНИМИЗАЦИЮ ЭНЕРГИИ ДИРИХЛЕ ДЛЯ КОНИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

© 2022 г. А. Г. Беляев[1,*], П.-А. Файоль[2,]**

[1] *Институт Сенсоров, Сигналов и Систем, Школа Инженерных и Физических наук, Университет Хериота-Уатта, Эдинбург, Великобритания*

[2] *Лаборатория компьютерной графики, Университет Айдзу, Айдзу-Вакамацу, Фукушима кен, Япония*

**e-mail: a.belyaev@hw.ac.uk*

***e-mail: fayolle@u-aizu.ac.jp*

Поступила в редакцию 15.04.2021 г.
Переработанный вариант 15.04.2021 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

Мы анализируем общую конструкцию для трансфинитных барицентрических координат (также известных как непрерывные или интегральные барицентрические координаты) и рассматриваем простой вариационный принцип для получения трансфинитной версии барицентрических координат Лапласа. Показываем, что наш подход приводит к общему описанию трансфинитных барицентрических координат и устанавливаем связь с задачами минимизации энергии Дирихле для конических поверхностей. Рассматриваем как двумерные, так и трехмерные случаи и обсуждаем связи трансфинитной барицентрической интерполяции с классическими обратными задачами Минковского и Кристоффеля в дифференциальной геометрии. Библ. 32. Фиг. 8.

Ключевые слова: интегральные (трансфинитные, непрерывные) барицентрические координаты, обобщенные барицентрические координаты, интегральные координаты Лапласа, минимизация энергии Дирихле.

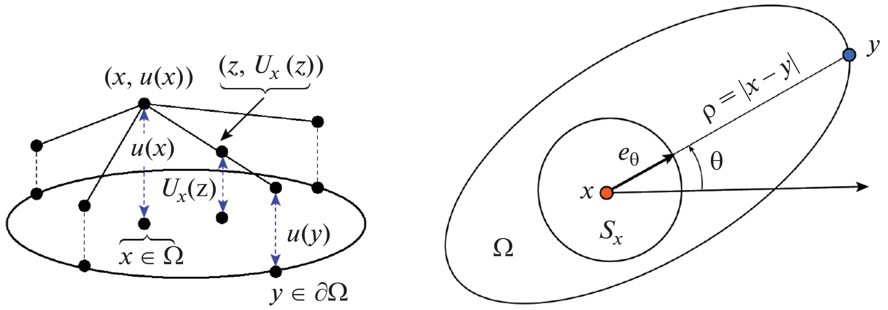
DOI: 10.31857/S0044466922080038

1. ВВЕДЕНИЕ

Начало современным активным исследованиям обобщенных барицентрических координат и их приложений было положено работами Вокспресса (см. [1]), Воррена (см. [2]) и Флотера (см. [3]) и в настоящее время подпитывается многочисленными приложениями обобщенных схем барицентрической интерполяции в вычислительной механике, компьютерной графике и геометрическом моделировании (см. [4]–[7]). В настоящей работе основное внимание уделяется анализу трансфинитных координат Лапласа, являющихся непрерывной версией популярной схемы обобщенной барицентрической интерполяции, которая известна под названиями координат Лапласа (см. [8]), несибсоновских координат (см. [9]), котангенсных весов (см. [10]), дискретных гармонических координат (см. [11]), а также координат Вороного (см. [12], а также более ранние работы [13]–[16]). Высокая популярность координат Лапласа обусловлена тем, что они аппроксимируют оператор Лапласа (отсюда и название) на полигональных сетках (см. [10], [17]).

Трансфинитные (использующие интегрирование, непрерывные) барицентрические координаты были первоначально разработаны Ворреном и соавт. (см. [18]). Хотя в настоящее время трансфинитная барицентрическая интерполяция представляет собой активную область исследований (см. [19]–[27]), очень мало известно о трансфинитных версиях координат Лапласа. В данной работе мы рассматриваем простой вариационный принцип для трансфинитных барицентрических координат Лапласа и показываем, как он приводит к общему описанию трансфинитных барицентрических координат.

Один из наших основных результатов может быть сформулирован следующим образом. Пусть Ω – строго выпуклая ограниченная область в $\mathbb{R}^N$ с $N = 2$ или $N = 3$. Рассмотрим функцию $u(\mathbf{y})$, определенную для каждого $\mathbf{y} \in \partial\Omega$. Зафиксируем $\mathbf{x} \in \Omega$ и предположим, что $u(\mathbf{x})$ известно. Рас-



Фиг. 1. (а) – Точка $\mathbf{x} \in \Omega$ параметризует семейство конических поверхностей $\{(\mathbf{z}, U_\mathbf{x}(\mathbf{z})) \in \mathbb{R}^{N+1}, \mathbf{z} \in \Omega \subset \mathbb{R}^N\}$, каждая из которых состоит из отрезков, соединяющих $(\mathbf{y}, u(\mathbf{y}))$, $\mathbf{y} \in \partial\Omega$, с вершиной $(\mathbf{x}, u(\mathbf{x}))$. (б) – Обозначения, которые мы используем для определения трансфинитных барицентрических координат.

смотрим коническую поверхность $U_\mathbf{x}(\mathbf{z})$, порожденную прямыми отрезками, соединяющими внутреннюю точку $(\mathbf{x}, u(\mathbf{x}))$ с граничными точками $(\mathbf{y}, u(\mathbf{y}))$, $\mathbf{y} \in \partial\Omega$. На фиг. 1а видно, как строится коническая поверхность $\{(\mathbf{z}, U_\mathbf{x}(\mathbf{z})) \in \mathbb{R}^{N+1}, \mathbf{z} \in \Omega\}$.

Пусть величина $u(\mathbf{x})$ определяется минимизацией энергии Дирихле

$$\iint_\Omega |\nabla U_\mathbf{x}|^2 d\mathbf{z} \to \min. \tag{1}$$

Тогда, как будет показано ниже, значение $u(\mathbf{x})$ получается трансфинитной интерполяцией Лапласа

$$u(\mathbf{x}) = \int_{S_\mathbf{x}} \frac{u(\mathbf{y}) w(\mathbf{x}, \mathbf{e}_\theta)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\boldsymbol{\theta} \Bigg/ \int_{S_\mathbf{x}} \frac{w(\mathbf{x}, \mathbf{e}_\theta)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\boldsymbol{\theta} \tag{2}$$

с весовой функцией, заданной

$$w(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = \Delta_S f + (N - 1) f, \quad f = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{N-1}, \tag{3}$$

и определенной с точностью до мультипликативной константы. Здесь $S_\mathbf{x}$ – это единичная сфера с центром в точке $\mathbf{x}$, интегрирование проводится относительно сферических координат $\boldsymbol{\theta}$ (точка $\boldsymbol{\theta}$ $S_\mathbf{x}$ соответствует единичному вектору θ и получается как радиальная проекция $\mathbf{y} \in \partial\Omega$ на $S_\mathbf{x}$), а Δ_S обозначает сферический оператор Лапласа.

Для двумерного случая мы демонстрируем, как предложенная конструкция, основанная на минимизации энергии Дирихле для конических поверхностей, может быть использована для вывода ставших классическими координат среднего значения (“mean value coordinates”) (см. [3]), которые не аппроксимируют Лапласиан (см. [28]), но обладают замечательными интерполяционными свойствами.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 представлена общая конструкция трансфинитных барицентрических координат для выпуклой области. В разд. 3 показано, как двумерные трансфинитные барицентрические координаты могут быть получены как предельный случай метода конструкции Флотера–Хорманна–Коса (см. [11]), которая дает общее описание двумерных барицентрических координат для выпуклых многоугольников. В разд. 4 демонстрируется, как (2), (3) для $N = 2$ получены из (1) и как это приводит к общему построению трансфинитных барицентрических координат в двумерном пространстве. Аналогичные результаты для $N = 3$ представлены в разд. 6. В разд. 5 мы связываем классические “mean value coordinates” (см. [3]) с задачами минимизации энергии Дирихле для конических поверхностей. В разд. 7 показано, как наша коструктиция трансфинитных барицентрических координат связана с классическими обратными задачами Минковского и Кристоффеля в дифференциальной геометрии. В разд. 8 приведены итоги нашего исследования.

Настоящая статья является расширенной версией нашей работы, доложенной на NUMGRID 2020 (см. [29]).

2. ВВЕДЕНИЕ В ТРАНСФИНИТНЫЕ БАРИЦЕНТРИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ

Пусть Ω – ограниченная выпуклая область в $\mathbb{R}^N$, и $\mathbf{x}$ – точка внутри Ω. Предположим, что нам известны значения функции $u(\cdot)$ на $\partial\Omega$. Трансфинитная барицентрическая интерполяция T интерполирует $u(\cdot)$ с $\partial\Omega$ на Ω:

$$T : u\big|_{\partial\Omega} \to u(\mathbf{x}),$$

с сохранением линейных функций.

Рассмотрим единичную сферу $S_\mathbf{x}$ с центром в $\mathbf{x}$. Предполагаем, что $S_\mathbf{x}$ параметризована внешней единичной нормалью $\mathbf{e}_\theta$, где $\boldsymbol{\theta}$ обозначает сферические координаты (см. фиг. 1а для наглядного объяснения используемых обозначений). Общая форма интерполяции T дается в виде

$$u(\mathbf{x}) = \int\limits_{S_\mathbf{x}} \frac{u(\mathbf{y})w(\mathbf{x},\mathbf{e}_\theta)}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}d\theta \Bigg/ \int\limits_{S_\mathbf{x}} \frac{w(\mathbf{x},\mathbf{e}_\theta)}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}d\theta, \quad \mathbf{x}\in\Omega, \quad \mathbf{y}\in\partial\Omega, \tag{4}$$

где $w(\mathbf{x},\mathbf{e}_\theta)$ – весовая функция, удовлетворяющая условия ортогональности

$$0 = \int\limits_{S_\mathbf{x}} \mathbf{e}_\theta w(\mathbf{x},\mathbf{e}_\theta)d\boldsymbol{\theta} \quad \forall\ \mathbf{x}\in\Omega. \tag{5}$$

Отметим, что (5) необходимо и достаточно для линейной точности. Действительно, полагая $u(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{x}$, получаем

$$u(\mathbf{y}) \equiv \mathbf{y} = \mathbf{x} + \rho\mathbf{e}_\theta, \quad \rho = |\mathbf{x}-\mathbf{y}|,$$

что после подстановки в (4) дает (5).

Если $w(\mathbf{x},\mathbf{e}_\theta) \equiv 1$, то мы приходим к трансфинитной версии “mean value coordinates”

$$u(\mathbf{x}) = \int\limits_{S_\mathbf{x}} \frac{u(\mathbf{y})d\theta}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \Bigg/ \int\limits_{S_\mathbf{x}} \frac{d\theta}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}, \tag{6}$$

которая была первоначально предложена в [3] для двумерных многоугольников, а затем в [30], [19] для простых многогранников и непрерывного случая.

Двумерный случай

В двумерном случае $\mathbf{e}_\theta = (\cos\theta, \sin\theta)$ и, следовательно, для каждого $\mathbf{x}\in\Omega$ (5) упрощается до системы двух уравнений

$$\int\limits_0^{2\pi} w(\mathbf{x},\theta)\cos\theta d\theta = 0 = \int\limits_0^{2\pi} w(\mathbf{x},\theta)\sin\theta d\theta. \tag{7}$$

Разложим $w(\mathbf{x},\theta)$ в ряд Фурье

$$w(\mathbf{x},\theta) = \sum c_n(\mathbf{x})e^{jn\theta}, \quad j = \sqrt{-1}.$$

Заметим, что (7) эквивалентно $c_{-1} = 0 = c_1$, и поэтому $w(\mathbf{x},\theta)$ можно представить как

$$h''_{\theta\theta}(\mathbf{x},\theta) + h(\mathbf{x},\theta) = w(\mathbf{x},\theta) \tag{8}$$

для некоторой периодической по θ функции $h(\mathbf{x},\theta)$. Действительно, разлагая $h(\mathbf{x},\theta)$ в ряд Фурье

$$h(\mathbf{x},\theta) = \sum h_n(\mathbf{x})e^{jn\theta}$$

и подставляя это разложение в (8), получаем

$$-n^2h_n(\mathbf{x}) + h_n(\mathbf{x}) = c_n(\mathbf{x}), \quad h_n(\mathbf{x}) = c_n(\mathbf{x})/(1-n^2), \quad \text{где} \quad n \ne \pm 1,$$

что определяет $h(\mathbf{x},\theta)$ однозначно, если дополнительно положить $h_{-1}(\mathbf{x}) = 0 = h_1(\mathbf{x})$.

Мы можем интерпретировать (8) геометрически. Для каждой точки $\mathbf{x} \in \Omega$ рассмотрим замкнутую кривую $\Sigma_{\mathbf{x}}$, чья опорная функция $h(\mathbf{x}, \theta)$ задается (8). Радиус кривизны $\Sigma_{\mathbf{x}}$ задается левой частью (8), и условия ортогональности (7) можно записать как

$$\int_0^{2\pi} \mathbf{n} \frac{d\theta}{k} \equiv \int_{\Sigma_{\mathbf{x}}} \mathbf{n} dl = 0, \tag{9}$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{e}_\theta = (\cos\theta, \sin\theta)$ – внешняя единичная нормаль к $\Sigma_{\mathbf{x}}$, k – кривизна $\Sigma_{\mathbf{x}}$, и l – натуральная параметризация кривой $\Sigma_{\mathbf{x}}$. Например, если для каждого $\mathbf{x}$ кривая $\Sigma_{\mathbf{x}}$ является единичной окружностью с центром в $\mathbf{x}$, то $w(\mathbf{x}, \theta) \equiv 1$, и мы получаем двумерный вариант трансфинитных “mean value coordinates” (6).

N-мерный случай

Известно, что N компонентов единичной нормали $\mathbf{e}_\theta$ являются собственными функциями, соответствующими минимальному ненулевому собственному значению $\lambda_{\min} = N - 1$ сферического лапласиана $-\Delta_S$. Таким образом, если весовая функция $w(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ в (4) задается

$$w(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = \Delta_S h + (N-1)h \tag{10}$$

для некоторой функции $h(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$, то условия ортогональности (5) выполняются. Действительно, простое интегрирование по частям на единичной сфере $S_{\mathbf{x}}$ дает

$$\int_{S_{\mathbf{x}}} \mathbf{e}_\theta w(\mathbf{x}, \mathbf{e}_\theta) d\theta = \int_{S_{\mathbf{x}}} \mathbf{e}_\theta \left[\Delta_S h + (N-1)h\right] d\boldsymbol{\theta} =$$
$$= \int_{S_{\mathbf{x}}} \left[\Delta_S \mathbf{e}_\theta + (N-1)\mathbf{e}_\theta\right] h(\mathbf{x}, \theta) d\boldsymbol{\theta} = 0.$$

3. ДВУМЕРНЫЕ ТРАНСФИНИТНЫЕ БАРИЦЕНТРИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ КАК ПРЕДЕЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ ИХ ДИСКРЕТНЫХ АНАЛОГОВ

Начнем с общей конструкции обобщенных барицентрических координат, введенной в [11]. Пусть $A(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ обозначает ориентированную площадь треугольника, образованного точками $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ и $\mathbf{z}$. Рассмотрим выпуклый многоугольник с вершинами $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$, точку $\mathbf{x}$ внутри многоугольника и ориентированные площади треугольников $A_i(\mathbf{x}) = A(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_{i+1})$ и $B_i(\mathbf{x}) = A(\mathbf{x}, \mathbf{v}_{i-1}, \mathbf{v}_{i+1})$. Тогда, как показано в [11], веса

$$w_i = \frac{c_{i+1}A_{i-1} - c_i B_i + c_{i-1}A_i}{A_{i-1}A_i}, \tag{11}$$

где $c_i(\mathbf{x})$ – некоторые вещественные функции, определяют систему обобщенных барицентрических координат. Более того, любая система обобщенных барицентрических координат может быть представлена в виде ((11)) для некоторых функций $c_i(\mathbf{x})$, $i = 1, 2, \ldots, n$.

Следуя [11], можно переписать (11) в виде

$$w_i = \frac{2}{\rho_i}\left(\frac{h_{i+1} - h_i \cos\theta_i}{\sin\theta_i} + \frac{h_{i-1} - h_i \cos\theta_{i-1}}{\sin\theta_{i-1}}\right), \tag{12}$$

где $h_i(\mathbf{x}) = c_i(\mathbf{x})/\rho_i(\mathbf{x})$, $\rho_i(\mathbf{x}) = |\mathbf{x} - \mathbf{v}_i|$, и θ_i – угол между лучами $[\mathbf{x}\mathbf{v}_i)$ и $[\mathbf{x}\mathbf{v}_{i+1})$.

Предположим теперь, что функции $h_i(\mathbf{x})$, $i = 1, 2, \ldots, n$, являются достаточно гладкими, число вершин многоугольника стремится к бесконечности, а все углы θ_i равномерно стремятся к нулю: $\theta_i \approx d\theta \to 0$. Переходя к пределу, мы получаем гладкую функцию $h(\mathbf{x}, \theta)$, удовлетворяющую следующим условиям:

$$\frac{h_{i+1} - h_i\cos\theta_i}{\sin\theta_i} \approx \frac{h_{i+1} - h_i + h_i\theta_i^2/2}{\theta_i} \approx \left[h(\mathbf{x}, \theta)'_\theta + h(\mathbf{x}, \theta)\frac{\theta_i}{2}\right]_{\theta = \sum_{k=1}^{i+1}\theta_k},$$

$$\frac{h_{i-1} - h_i \cos\theta_{i-1}}{\sin\theta_{i-1}} \approx \frac{h_{i-1} - h_i + h_i\theta_{i-1}^2/2}{\theta_{i-1}} \approx \left[-h(\mathbf{x},\theta)'_\theta + h(\mathbf{x},\theta)\frac{\theta_{i-1}}{2}\right]_{\theta=\sum_{k=1}^{i}\theta_k}.$$

Сложение правых сторон этих формул дает

$$\left[\frac{h(\mathbf{x},\theta+d\theta)'_\theta - h(\mathbf{x},\theta)'_\theta}{d\theta} + h(\mathbf{x},\theta)\right]_{\theta=\sum_{k=1}^{i}\theta_k} d\theta + \text{члены высшего порядка.}$$

Поэтому (12) приблизительно равно

$$\frac{2}{\rho_i}\left[h(\mathbf{x},\theta)''_{\theta\theta} + h(\mathbf{x},\theta)\right]\Big|_{\theta=\sum_{k=1}^{i}\theta_k} d\theta,$$

и мы получаем (8). Теперь можно сформулировать наш результат как утверждение, которое обобщает результат из [5, section 3.2.2].

Утверждение 1. *В двумерном случае трансфинитные барицентрические координаты* (4), (8) *получаются как предельный случай для конструкции Флотера–Хормана–Коса* (11).

По сравнению с работой Косинки и Бартона [25], где квадратичная скорость сходимости обобщенных барицентрических координат к их непрерывным аналогам, барицентрическим ядрам была доказана и численно проверена, новизна и важность Утверждения 1 состоит в выявлении связи между функциями $c_i(\mathbf{x})$ в (11) и опорной функцией $h(\mathbf{x})$, заданной (8).

4. ДВУМЕРНЫЕ ТРАНСФИНИТНЫЕ БАРИЦЕНТРИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ И МИНИМИЗАЦИЯ ЭНЕРГИИ ДИРИХЛЕ

Трансфинитные координаты Лапласа в двумерном пространстве

Под двумерными трансфинитными координатами Лапласа мы понимаем непрерывную версию дискретных гармонических координат. Как показано в [11], задание $c_i = \rho_i^2$ в (11) дает дискретные гармонические координаты. Таким образом, в соответствии с утверждением 1, трансфинитные координаты Лапласа описываются уравнением

$$w(\mathbf{x},\theta) = \rho''_{\theta\theta} + \rho. \tag{13}$$

Если вес $w(\mathbf{x},\theta)$ в (4) положителен, то интерполяция посредством (4) следует из [24, теорема 1]. Однако (13) не обязательно положительно и интерполяционные свойства (4), (13) требуют обоснования. Начнем с самого простого случая, когда Ω – это единичный круг с центром в начале координат, а точка $\mathbf{x}$ имеет координаты $(-a, 0)$, где $0 < a < 1$. Простые аналитические вычисления показывают, что ядро

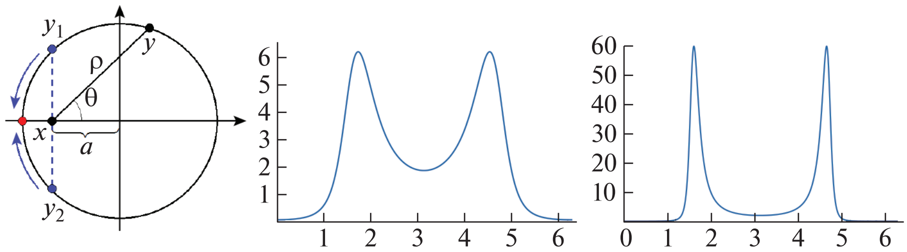
$$k(x,\theta) = (\rho''_{\theta\theta} + \rho)\big/\rho \tag{14}$$

имеет два одинаковых максимума, достигаемых при θ_1 и θ_2, которые приближаются к $\pi/2$ и $3\pi/2$ соответственно, когда $a \to 1$ (см. фиг. 2а). Эти максимумы равны $32\big/[27(1-a^2)]$ и становятся все более резкими и острее, по мере того, как $\mathbf{x}$ приближается к границе, когда $a \to 1$, как демонстрируют фиг. 2б, в. Граничные точки $\mathbf{y}_1$ и $\mathbf{y}_2$, соответствующие θ_1 и θ_2, становятся все ближе и ближе друг к другу, когда $a \to 1$, и в пределе сливаются с $\mathbf{x}$ на границе. Таким образом, подобно классической интерполяции Шепарда (см. [31]),

$$u(\mathbf{x}) = \int_{S_\mathbf{x}} k(\mathbf{x},\theta)u(\mathbf{y})d\theta \Big/ \int_{S_\mathbf{x}} k(\mathbf{x},\theta)d\theta \tag{15}$$

обеспечивает граничную интерполяцию. Общий случай строго выпуклых Ω легко сводится к вышеприведенному случаю круга, если для данной точки $\mathbf{y} \in \partial\Omega$ мы рассмотрим окружность, соприкасающуюся с $\partial\Omega$ в точке $\mathbf{y}$.

Оказывается, что (13) также может быть выведено путем имитации свойства минимизации энергии Дирихле гармоническими функциями (см. [20], [21]). Пусть $u(\mathbf{y})$ задана для каждого



Фиг. 2. (а) – Иллюстрация обозначений, используемых для демонстрации интерполяционных свойств (14), (15) для окружности. Графики ядра $k(\mathbf{x},\theta)$, определенного (14) для $\mathbf{x} = (-0.9, 0)$ (б) и $\mathbf{x} = (-0.99, 0)$ (в).

$\mathbf{y} \in \partial\Omega$. Возьмем $\mathbf{x} \in \Omega$ и предположим, что $u(\mathbf{x})$ известно. Рассмотрим конический участок поверхности, образованный прямыми отрезками, соединяющими внутреннюю точку $(\mathbf{x}, u(\mathbf{x}))$ с граничными точками $(\mathbf{y}, u(\mathbf{y}))$. В полярных координатах (r,θ) с центром в точке $\mathbf{x}$ граница $\partial\Omega$ задается $r = \rho(\theta)$, $\rho = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$, а коническая поверхность, связанная с точкой $\mathbf{x}$, определяется уравнением

$$U_{\mathbf{x}}(\mathbf{z}) = \frac{(\rho - r)u(\mathbf{x}) + ru(\mathbf{y})}{\rho}, \tag{16}$$

где $r = |\mathbf{x} - \mathbf{z}|$ и $\mathbf{y} \in \partial\Omega$ обозначает точку пересечения $\partial\Omega$ с лучом, выходящим из $\mathbf{x}$ и проходящим через $\mathbf{z}$. На фиг. 1 продемонстрировано построение конической поверхности $(\mathbf{z}, U_{\mathbf{x}}(\mathbf{z}))$, $\mathbf{z} \in \Omega$, и используемые обозначения.

Теперь значение $u(\mathbf{x})$ выбирается так, что энергия Дирихле построенной конической поверхности достигает своего минимального значения:

$$\iint_{\Omega} |\nabla U_{\mathbf{x}}|^2 d\mathbf{z} \to \min.$$

Утверждение 2. *В двумерном случае, минимум энергии Дирихле для конической поверхности, состоящей из прямых отрезков, соединяющих внутреннюю точку* $(\mathbf{x}, u(\mathbf{x}))$, $\mathbf{x} \in \Omega$, *с граничными точками* $(\mathbf{y}, u(\mathbf{y}))$, $\mathbf{y} \in \partial\Omega$, *достигается на поверхности, определяемой 2D трансфинитной барицентрической интерполяцией* (4), (13).

Краткий вывод этого утверждения приведен в [20] (см. также [29]). Для полноты изложения мы приводим здесь подробный вывод результата для интеграла Дирихле с весом

$$\iint_{\Omega} |\nabla U_{\mathbf{x}}|^2 a(\mathbf{x},\theta) d\mathbf{z},$$

где $a(x,\theta)$ – положительная весовая функция.

Доказательство. Для функции $f(r,\theta)$ ее градиент и магнитуда градиента в полярных координатах задаются формулами

$$\nabla f(r,\theta) = \frac{\partial f}{\partial r}\mathbf{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}\mathbf{e}_\theta, \quad |\nabla f|^2 = \left|\frac{\partial f}{\partial r}\right|^2 + \frac{1}{r^2}\left|\frac{\partial f}{\partial \theta}\right|^2.$$

Поэтому

$$\frac{\partial U_{\mathbf{x}}}{\partial r} = \frac{u(\mathbf{y}) - u(\mathbf{x})}{\rho} \quad \text{и} \quad \frac{\partial U_{\mathbf{x}}}{\partial \theta} = r\left[(u(\mathbf{y}) - u(\mathbf{x}))\left(\frac{1}{\rho}\right)'_\theta + \frac{1}{\rho}u'_\theta(\mathbf{y})\right].$$

Таким образом, мы приходим к следующей задаче минимизации:

$$\min \leftarrow \iint_{\Omega} |\nabla U_{\mathbf{x}}|^2 a(\mathbf{x},\theta) d\mathbf{z} = \int_0^{2\pi} a(\mathbf{x},\theta) d\theta \int_0^{\rho} r dr \left\{ \left[\frac{u(\mathbf{x}) - u(\mathbf{y})}{\rho} \right]^2 + \left[(u(\mathbf{y}) - u(\mathbf{x})) \left(\frac{1}{\rho} \right)_{\theta}' + \frac{1}{\rho} u_{\theta}'(\mathbf{y}) \right]^2 \right\} =$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} a(\mathbf{x},\theta) d\theta \left\{ [u(\mathbf{x}) - u(\mathbf{y})]^2 + \left[u_{\theta}'(\mathbf{y}) + (u(\mathbf{x}) - u(\mathbf{y})) \frac{\rho_{\theta}'}{\rho} \right]^2 \right\},$$

где последний интеграл является квадратичной функцией от $u(\mathbf{x})$. Отсюда для оптимального значения $u(\mathbf{x})$ получаем

$$\int_0^{2\pi} u(\mathbf{x}) \left\{ 1 + \left(\frac{\rho_{\theta}'}{\rho} \right)^2 \right\} a(\mathbf{x},\theta) d\theta = \int_0^{2\pi} \left\{ u(\mathbf{y}) - u_{\theta}'(y) \frac{\rho_{\theta}'}{\rho} + u(\mathbf{y}) \left(\frac{\rho_{\theta}'}{\rho} \right)^2 \right\} a(\mathbf{x},\theta) d\theta$$

и, следовательно, $u(\mathbf{x})$ получается в виде дроби

$$u(\mathbf{x}) = \frac{\int_0^{2\pi} \left\{ u(\mathbf{y}) - u_{\theta}'(\mathbf{y}) \frac{\rho_{\theta}'}{\rho} + u(\mathbf{y}) \left(\frac{\rho_{\theta}'}{\rho} \right)^2 \right\} a(\mathbf{x},\theta) d\theta}{\int_0^{2\pi} \left\{ 1 + \left(\frac{\rho_{\theta}'}{\rho} \right)^2 \right\} a(\mathbf{x},\theta) d\theta}. \tag{17}$$

Рассмотрим знаменатель парвой части в (17). Интегрирование по частям дает

$$\int_0^{2\pi} \left(\frac{\rho_{\theta}'}{\rho} \right)^2 a(\mathbf{x},\theta) d\theta = \int_0^{2\pi} \left\{ \frac{(a\rho_{\theta}')_{\theta}'}{\rho} - \left(\frac{a\rho_{\theta}'}{\rho} \right)_{\theta}' \right\} d\theta = \int_0^{2\pi} \frac{(a\rho_{\theta}')_{\theta}'}{\rho} d\theta,$$

а знаменатель в (17) определяется как

$$\int_0^{2\pi} \frac{(a\rho_{\theta}')_{\theta}' + a\rho}{\rho} d\theta.$$

Теперь рассмотрим числитель (17). Мы имеем

$$-\int_0^{2\pi} u_{\theta}'(\mathbf{y}) \frac{a\rho_{\theta}'}{\rho} d\theta = \int_0^{2\pi} u(\mathbf{y}) \left(\frac{a\rho_{\theta}'}{\rho} \right)_{\theta}' d\theta = \int_0^{2\pi} u(\mathbf{y}) \left(\frac{(a\rho_{\theta}')_{\theta}'}{\rho} - \frac{a(\rho_{\theta}')^2}{\rho^2} \right) d\theta.$$

Таким образом, (17) может быть записано как

$$u(\mathbf{x}) = \int_0^{2\pi} u(\mathbf{y}) \frac{w(\mathbf{x},\theta)}{\rho} d\theta \Bigg/ \int_0^{2\pi} \frac{w(\mathbf{x},\theta)}{\rho} d\theta, \quad w(\mathbf{x},\theta) = (a\rho_{\theta}')_{\theta}' + a\rho. \tag{18}$$

Теперь видно, что (18) с $a(\mathbf{x},\theta) \equiv 1$ соответствует (4) с (13). Утверждение 2 доказано.

Общая конструкция в 2D

Здесь мы покажем, что, подобно трансфинитным координатам Лапласа, общая конструкция двумерных трансфинитных барицентрических координат (4), (8) также может быть получена как решение задачи минимизации энергии Дирихле.

Опять же, рассматриваем точку $\mathbf{x}$ внутри выпуклой области Ω и предполагаем, что $\partial\Omega$ задается $r = \rho(\theta)$ в полярных координатах с центром в $\mathbf{x}$. Таким образом, Ω может быть описана $\{(r\cos\theta, r\sin\theta)\}$ с $0 \le r < \rho(\theta)$. Рассмотрим теперь другую область G, определяемую неравенством $0 \le r < g(\mathbf{x},\theta)$, где $g(\mathbf{x},\theta)$ – некоторая функция. Тогда ∂G задается $r = g(\mathbf{x},\theta)$.

Предположим, что мы знаем $u(\mathbf{x})$ и, как и раньше, используем линейную интерполяцию между $u(\mathbf{x})$ и $u(\mathbf{y})$, где $\mathbf{y} \in \partial\Omega$ для определения $u(\cdot)$. Тогда значения $u(\cdot)$ на ∂G даются в виде

$$v = \frac{u(\mathbf{y})g(\mathbf{x},\theta) + u(\mathbf{x})(\rho - g(\mathbf{x},\theta))}{\rho}. \tag{19}$$

Теперь применим трансфинитную интерполяцию Лапласа к области G. Имеем

$$\int_0^{2\pi} \frac{g''_{\theta\theta} + g}{g} v d\theta = u(\mathbf{x}) \int_0^{2\pi} \frac{g''_{\theta\theta} + g}{g} d\theta$$

и, подставляя функцию $v(\cdot)$, определенную в (19), получаем

$$\int_0^{2\pi} \frac{g''_{\theta\theta} + g}{\rho} u(\mathbf{y}) d\theta + u(\mathbf{x}) \int_0^{2\pi} \left(1 - \frac{g}{\rho}\right) \frac{g''_{\theta\theta} + g}{g} d\theta = u(\mathbf{x}) \int_0^{2\pi} \frac{g''_{\theta\theta} + g}{g} d\theta,$$

что сразу же приводит к следующему общему представлению двумерных трансфинитных координат

$$u(\mathbf{x}) = \int_0^{2\pi} \frac{g''_{\theta\theta} + g}{\rho} u(\mathbf{y}) d\theta \Bigg/ \int_0^{2\pi} \frac{g''_{\theta\theta} + g}{\rho} d\theta \tag{20}$$

и дает общую двумерную трансфинитную барицентрическую интерполяцию (4), (8).

5. ТРАНСФИНИТНЫЕ КООРДИНАТЫ ДЛЯ МНОГОУГОЛЬНЫХ ОБЛАСТЕЙ

Теперь рассмотрим случай, когда область Ω является многоугольником с границей $\partial\Omega$, определяемой вершинами $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$, и вычислим барицентрические координаты, соответствующие (20), для конкретных примеров вспомогательных областей G.

Вспомогательная область G является единичным диском

Сначала рассмотрим случай, когда G является единичным диском с центром в точке $\mathbf{x}$. В этом случае $g(\mathbf{x},\theta) = \mathrm{cst} = 1$, $g''_{\theta\theta}(\mathbf{x},\theta) = 0$ и (20) становится

$$u(\mathbf{x}) = \int_0^{2\pi} \frac{u(\mathbf{y})d\theta}{\rho} \Bigg/ \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\rho},$$

где $\mathbf{y} \in \partial\Omega$. Мы получили (6). Так как $\partial\Omega$ — это граница многоугольника с вершинами $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$, то приходим к хорошо известным весам, соответствующим “mean value coordinates”. А именно, вес w_i, соответствующий вершине $\mathbf{v}_i$, задается уравнением

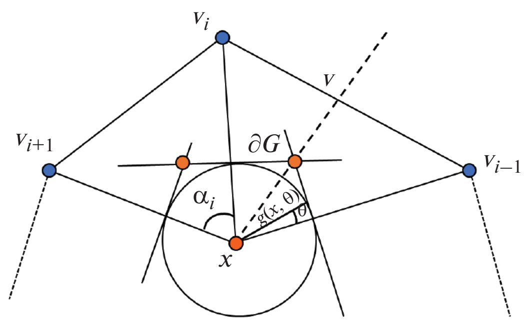
$$w_i(\mathbf{x}) = \frac{\operatorname{tg}\alpha_{i-1}/2 + \operatorname{tg}\alpha_i/2}{\rho_i}, \tag{21}$$

где $\rho_i = |\mathbf{x} - \mathbf{v}_i|$, а α_i — угол между лучами $[\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)$ и $[\mathbf{x}, \mathbf{v}_{i+1})$.

Вспомогательная область G ограничена дискретным набором касательных к единичной окружности

В этом примере рассмотрим касательные к единичной окружности с центром в точке $\mathbf{x}$, которые перпендикулярны лучам $[\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)$, как показано на фиг. 3.

Утверждение 3. *Пусть Ω является многоугольником с вершинами $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$, а G — многоугольник, образованный касательными к единичной окружности с центром в $\mathbf{x}$, которые перпендикулярны лучам $[\mathbf{x}, \mathbf{v}_i]$. Тогда* (20) *дает дискретную интерполяцию с весами, заданными* (21).



Фиг. 3. Вспомогательная область ∂G задается касательными к единичной окружности, которые перпендикулярны лучам $[\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)$ (дискретная огибающая).

Доказательство. Пусть $g(\mathbf{x}, \theta)$ обозначает расстояние от $\mathbf{x}$ до ∂G в направлении $\mathbf{e}_\theta$. Мы хотим оценить

$$\int_0^{2\pi} \frac{g''_{\theta\theta} + g}{\rho} u(\mathbf{y}) d\theta,$$

где $\mathbf{y} \in \partial\Omega$. Видно, что

$$g(\mathbf{x}, \theta) = \begin{cases} 1/\cos\theta, & 0 < \theta < \alpha_{i-1}/2, \\ 1/\cos(\alpha_{i-1} - \theta), & \alpha_{i-1}/2 < \theta < \alpha_{i-1}, \end{cases}$$

$$g'_\theta(\mathbf{x}, \theta) = \begin{cases} \dfrac{\sin\theta}{\cos^2\theta}, & 0 < \theta < \alpha_{i-1}/2, \\ -\dfrac{\sin(\alpha_{i-1} - \theta)}{\cos^2(\alpha_{i-1} - \theta)}, & \alpha_{i-1}/2 < \theta < \alpha_{i-1}, \end{cases}$$

и

$$g''_{\theta\theta}(\mathbf{x}, \theta) = \begin{cases} \dfrac{2\sin^2\theta}{\cos^3\theta} + \dfrac{1}{\cos\theta}, & 0 < \theta < \alpha_{i-1}/2, \\ \dfrac{2\sin^2(\alpha_{i-1} - \theta)}{\cos^3(\alpha_{i-1} - \theta)} + \dfrac{1}{\cos(\alpha_{i-1} - \theta)}, & \alpha_{i-1}/2 < \theta < \alpha_{i-1}. \end{cases}$$

Поскольку $g'_\theta(\mathbf{x}, \theta)$ имеет разрыв, нам нужно сначала оценить вклад этого разрыва.

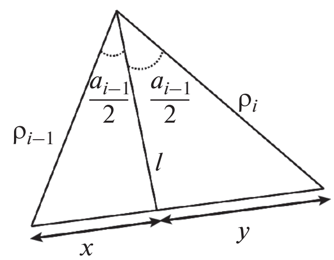
Вклад разрыва. Мы используем здесь обозначения, показанные на фиг. 3. Пусть $\mathbf{v}$ обозначает пересечением луча, соответствующего углу $\alpha_{i-1}/2$, с отрезком $[\mathbf{v}_{i-1}, \mathbf{v}_i]$. Так как $g'_\theta(\mathbf{x}, \theta)$ имеет разрыв (скачок) при $\theta = \alpha_{i-1}/2$, вычисление $g''_{\theta\theta}(x, \theta)$ создает масштабированную дельта-функцию при $\theta = \alpha_{i-1}/2$. Скачок $g'_\theta(x, \theta)$ при $\theta = \alpha_{i-1}/2$ это

$$g'_\theta\left(\mathbf{x}, \frac{\alpha_{i-1}}{2} +\right) - g'_\theta\left(\mathbf{x}, \frac{\alpha_{i-1}}{2} -\right) = -2\sin\frac{\alpha_{i-1}}{2} \Big/ \cos^2\frac{\alpha_{i-1}}{2}. \tag{22}$$

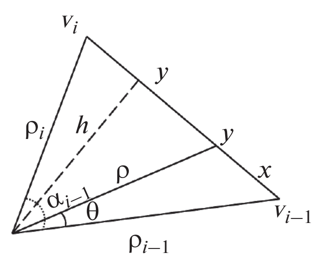
Теперь давайте вычислим $u(\mathbf{v})$. Нам даны $u(\mathbf{v}_{i-1})$, и $u(\mathbf{v}_i)$ и известно, что $u(\cdot)$ линейно на отрезке $[\mathbf{v}_{i-1}, \mathbf{v}_i]$. Используем обозначения, показанные на фиг. 4. Пусть ρ_{i-1} обозначает длину $[\mathbf{x}, \mathbf{v}_{i-1}]$, а ρ_i – длину $[\mathbf{x}, \mathbf{v}_i]$. Обозначим также длины $[\mathbf{v}_{i-1}, \mathbf{v}]$ и $[\mathbf{v}_i, \mathbf{v}]$ через x и y соответственно. Получаем

$$\frac{x}{y} = \frac{\rho_{i-1}}{\rho_i}, \quad u(\mathbf{v}) = \frac{u(\mathbf{v}_i)x + u(\mathbf{v}_{i-1})y}{x + y} = \frac{u(\mathbf{v}_i)\rho_{i-1} + u(\mathbf{v}_{i-1})\rho_i}{\rho_{i-1} + \rho_i},$$

$$\rho_{i-1}\rho_i \sin\alpha_{i-1} = \rho_{i-1} l \sin\frac{\alpha_{i-1}}{2} + \rho_i l \sin\frac{\alpha_{i-1}}{2},$$



Фиг. 4. Влияние разрыва при $\theta = \alpha_{i-1}/2$. Используемые обозначения.



Фиг. 5. Вклад регулярной точки отрезка $[\mathbf{v}_{i-1}, \mathbf{v}_i]$. Используемые обозначения.

$$\frac{1}{\rho} = \frac{1}{l} = \frac{\rho_{i-1}\sin\frac{\alpha_{i-1}}{2} + \rho_i \sin\frac{\alpha_{i-1}}{2}}{\rho_{i-1}\rho_i \sin\alpha_{i-1}} = \frac{1}{2\cos\frac{\alpha_{i-1}}{2}}\left(\frac{1}{\rho_{i-1}} + \frac{1}{\rho_i}\right),$$

$$\frac{u(\mathbf{v})}{\rho} = \frac{1}{l}\frac{u(\mathbf{v}_i)x + u(\mathbf{v}_{i-1})y}{x+y}\frac{1}{2\cos\frac{\alpha_{i-1}}{2}}\left[\frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i} + \frac{u(\mathbf{v}_{i-1})}{\rho_{i-1}}\right].$$

Комбинируя это с (22), получаем

$$\frac{\sin\frac{\alpha_{i-1}}{2}}{\cos^3\frac{\alpha_{i-1}}{2}}\left[\frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i} + \frac{u(\mathbf{v}_{i-1})}{\rho_{i-1}}\right]$$

и после перегруппировки слагаемых получаем

$$-\frac{u(\mathbf{v}_i)}{|\mathbf{v}_i - x|}\left[\sin\frac{\alpha_{i-1}}{2}\Big/\cos^3\frac{\alpha_{i-1}}{2} + \sin\frac{\alpha_i}{2}\Big/\cos^3\frac{\alpha_i}{2}\right]. \tag{23}$$

Вклад регулярной точки. Теперь рассмотрим вклад регулярной точки на $[\mathbf{v}_{i-1}, \mathbf{v}_i]$. Используемые обозначения показаны на фиг. 5. Обозначим через h высоту от неотмеченной вершины до отрезка $[\mathbf{v}_{i-1}, \mathbf{v}_i]$.

Имеем

$$u(\mathbf{y}) = \frac{u(\mathbf{v}_{i-1})y + u(\mathbf{v}_i)x}{x+y},$$

$$\rho_{i-1}\rho_i \sin\alpha_{i-1} = h(x+y), \quad xh = \rho_{i-1}\rho\sin\theta, \quad yh = \rho_i\rho\sin(\alpha_{i-1} - \theta),$$

$$\frac{x}{x+y} = \frac{\rho_{i-1}\rho\sin\theta}{\rho_{i-1}\rho_i\sin\alpha_{i-1}}, \quad \frac{y}{x+y} = \frac{\rho_i\rho\sin(\alpha_{i-1} - \theta)}{\rho_{i-1}\rho_i\sin\alpha_{i-1}},$$

$$\frac{u(\mathbf{y})}{\rho} = \frac{u(\mathbf{v}_{i-1})}{\rho_{i-1}}\frac{\sin(\alpha_{i-1}-\theta)}{\sin\alpha_{i-1}} + \frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i}\frac{\sin\theta}{\sin\alpha_{i-1}}.$$

Теперь нам нужно оценить сумму двух интегралов:

$$I_1 = \int\limits_0^{\alpha_{i-1}/2}\left(\frac{2\sin^2\theta}{\cos^3\theta} + \frac{2}{\cos\theta}\right)\left[\frac{u(\mathbf{v}_{i-1})}{\rho_{i-1}}\frac{\sin(\alpha_{i-1}-\theta)}{\sin\alpha_{i-1}} + \frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i}\frac{\sin\theta}{\sin\alpha_{i-1}}\right]d\theta,$$

$$I_2 = \int\limits_{\alpha_{i-1}/2}^{\alpha_{i-1}}\left(\frac{2\sin^2(\alpha_{i-1}-\theta)}{\cos^3(\alpha_{i-1}-\theta)} + \frac{2}{\cos(\alpha_{i-1}-\theta)}\right)\left[\frac{u(\mathbf{v}_{i-1})}{\rho_{i-1}}\frac{\sin(\alpha_{i-1}-\theta)}{\sin\alpha_{i-1}} + \frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i}\frac{\sin\theta}{\sin\alpha_{i-1}}\right]d\theta,$$

которые становятся

$$I_1 = \int\limits_0^{\alpha_{i-1}/2}\frac{2}{\cos^3\theta}\left[\frac{u(\mathbf{v}_{i-1})}{\rho_{i-1}}\frac{\sin(\alpha_{i-1}-\theta)}{\sin\alpha_{i-1}} + \frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i}\frac{\sin\theta}{\sin\alpha_{i-1}}\right]d\theta,$$

$$I_2 = \int\limits_{\alpha_{i-1}/2}^{\alpha_{i-1}}\frac{2}{\cos^3(\alpha_{i-1}-\theta)}\left[\frac{u(\mathbf{v}_{i-1})}{\rho_{i-1}}\frac{\sin(\alpha_{i-1}-\theta)}{\sin\alpha_{i-1}} + \frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i}\frac{\sin\theta}{\sin\alpha_{i-1}}\right]d\theta$$

после упрощений.

Интегралы I_1 и I_2 вычисляются в явном виде

$$I_1 = \frac{\operatorname{tg}\alpha_{i-1}/2}{1+\cos\alpha_{i-1}}\left[\frac{u(\mathbf{v}_{i-1})}{\rho_{i-1}}(2+\cos\alpha_{i-1}) + \frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i}\right],$$

$$I_2 = \frac{\operatorname{tg}\alpha_{i-1}/2}{1+\cos\alpha_{i-1}}\left[\frac{u(\mathbf{v}_{i-1})}{\rho_{i-1}} + \frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i}(2+\cos\alpha_{i-1})\right].$$

После суммирования членов, соответствующих вершине $\mathbf{v}_i$, и с учетом скачка (23), мы получаем

$$\frac{u(\mathbf{v}_i)}{|\mathbf{v}_i-\mathbf{x}|}\left\{\frac{\operatorname{tg}\alpha_{i-1}/2}{1+\cos\alpha_{i-1}}(3+\cos\alpha_{i-1}) + \frac{\operatorname{tg}\alpha_i/2}{1+\cos\alpha_i}(3+\cos\alpha_i) - \right.$$
$$\left. - \left[\sin\frac{\alpha_{i-1}}{2}\Big/\cos^3\frac{\alpha_{i-1}}{2} + \sin\frac{\alpha_i}{2}\Big/\cos^3\frac{\alpha_i}{2}\right]\right\}.$$

Дальнейшие упрощения этого выражения приводят к

$$\frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i}\left(\operatorname{tg}\alpha_{i-1}/2 + \operatorname{tg}\alpha_i/2\right).$$

Таким образом, вес $w_i(\mathbf{x})$, соответствующий вершине $\mathbf{v}_i$, дается обычным выражением для “mean value coordinates”. Утверждение 3 доказано.

Вспомогательная область G получается проекцией вершин $\partial\Omega$ на единичную окружность

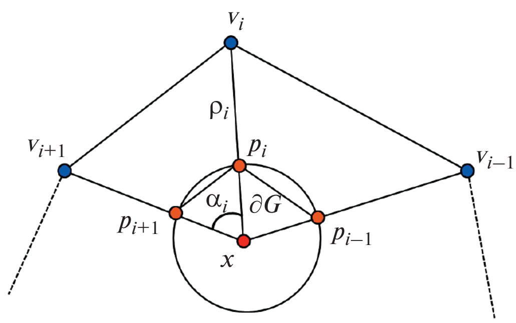
В качестве последнего примера рассмотрим случай, когда G – многоугольник, чьи вершины $\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_n$ являются проекциями вершин $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$ $\partial\Omega$ на единичную окружность с центром в $\mathbf{x}$. На фиг. 6 демонстрируется построение многоугольника G.

Утверждение 4. *Пусть Ω является многоугольником с вершинами $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$, а G – многоугольник, чьи вершины получены радиальной проекцией вершин Ω на единичную окружность с центром в $\mathbf{x}$. Тогда* (20) *снова дает веса, соответствующие* “*mean value coordinates*” (21).

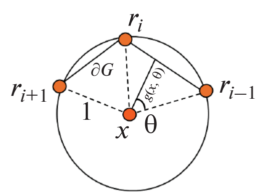
Доказательство. Вычислим

$$\int\limits_0^{2\pi}\frac{g''_{\theta\theta}+g}{\rho}u(\mathbf{y})d\theta,$$

где $\mathbf{y}\in\partial\Omega$, а $g(\mathbf{x},\theta)$ обозначает расстояние от $\mathbf{x}$ до ∂G в направлении $\mathbf{e}_\theta$.



Фиг. 6. Случай, когда вершины ∂G определяются из проекции $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$ на единичную окружность с центром в $\mathbf{x}$.



Фиг. 7. Вычисление $g(\mathbf{x}, \theta)$ для отрезка $[\mathbf{p}_{i-1}, \mathbf{p}_i]$.

Для треугольника $(\mathbf{x}, \mathbf{v}_{i-1}, \mathbf{v}_i)$ имеем

$$\rho_{i-1}\rho_i \sin\alpha_{i-1} = \rho_{i-1}\rho\sin\theta + \rho_{i+1}\rho\sin(\alpha_{i-1} - \theta),$$

что приводит к

$$\rho(\theta) = \frac{\rho_{i-1}\rho_i \sin\alpha_{i-1}}{\rho_{i-1}\sin\theta + \rho_i \sin(\alpha_{i-1} - \theta)}.$$

Аналогично,

$$\frac{u(\mathbf{y})}{\rho} = \frac{u(\mathbf{v}_{i-1})}{\rho_{i-1}}\frac{\sin(\alpha_{i-1} - \theta)}{\sin\alpha_{i-1}} + \frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i}\frac{\sin\theta}{\sin\alpha_{i-1}}.$$

Теперь рассмотрим треугольник $(\mathbf{x}, \mathbf{p}_{i-1}, \mathbf{p}_i)$ (фиг. 7), имеем

$$\sin\alpha_{i-1} = g(\mathbf{x}, \theta)\sin\theta + g(\mathbf{x}, \theta)\sin(\alpha_{i-1} - \theta),$$

что приводит к

$$g(\mathbf{x}, \theta) = \frac{\sin\alpha_{i-1}}{\sin\theta + \sin(\alpha_{i-1} - \theta)}.$$

Нам надо вычислить

$$\int\limits_{\theta=0}^{2\pi} \frac{g''_{\theta\theta}(\mathbf{x}, \theta) + g(\mathbf{x}, \theta)}{\rho(\theta)} u(\mathbf{y}) d\theta.$$

Рассмотрим вклад одного отрезка $[\mathbf{p}_{i-1}, \mathbf{p}_i]$

$$I = \int\limits_{\theta=0}^{\alpha_{i-1}} \frac{g''_{\theta\theta}(\mathbf{x}, \theta) + g(\mathbf{x}, \theta)}{\rho(\theta)} u(y) d\theta.$$

Этот интеграл вычисляется аналитически:

$$I = 2\,\mathrm{tg}\frac{\alpha_{i-1}}{2}\left\{\frac{u(\mathbf{v}_{i-1})}{\rho_{i-1}} + \frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i}\right\}.$$

Суммируя вклады для данной вершины $\mathbf{v}_i$, приходим к

$$w_i(\mathbf{x}) = 2\frac{u(\mathbf{v}_i)}{\rho_i}\left(\mathrm{tg}\frac{\alpha_{i-1}}{2} + \mathrm{tg}\frac{\alpha_i}{2}\right).$$

Таким образом, с точностью до коэффициента 2, который исчезает при нормализации весов, мы снова получили веса, соответствующие “mean value coordinates”. Утверждение 4 доказано.

6. ТРЕХМЕРНЫЕ ТРАНСФИНИТНЫЕ КООРДИНАТЫ И МИНИМИЗАЦИЯ ЭНЕРГИИ ДИРИХЛЕ

Трансфинитные координаты Лапласа в 3D

Определим трехмерные трансфинитные координаты Лапласа как барицентрическую интерполяцию (4), которая для каждого $\mathbf{x} \in \Omega$ минимизирует энергию Дирихле:

$$\iiint_{\Omega} |\nabla U_x|^2 d\mathbf{z} \to \min,$$

для конической поверхности (16), связанной с $\mathbf{x}$.

Утверждение 5. *В трехмерном случае минимум энергии Дирихле для конической поверхности, состоящей из прямых отрезков, соединяющих внутреннюю точку* $(\mathbf{x}, u(\mathbf{x}))$, $\mathbf{x} \in \Omega$, *с граничными точками* $(\mathbf{y}, u(\mathbf{y}))$, $\mathbf{y} \in \partial\Omega$, *достигается на трансфинитной барицентрической интерполяции* (4) *с весовой функцией, заданной*

$$w(\mathbf{x}, \mathbf{e}_\omega) = \Delta_S(\rho^2/2) + 2(\rho^2/2), \tag{24}$$

где Δ_S *обозначает сферический лапласиан, а* $\rho(\omega)$ *описывает* $\partial\Omega$ *в сферических координатах с центром в* $\mathbf{x}$ (*т.е. для каждого* $\mathbf{y} \in \partial\Omega$ $\rho = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ *и* $\mathbf{e}_\omega = (\mathbf{y} - \mathbf{x})/\rho$).

Ниже мы выведем более общий результат, полученный для энергии Дирихле с весом

$$\iiint_{\Omega} |\nabla U_{\mathbf{x}}|^2 a(\mathbf{x}, \omega) d\mathbf{z}, \tag{25}$$

где $a(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ – положительная весовая функция и $\boldsymbol{\omega} = (\theta, \varphi)$ обозначает сферические координаты. Мы покажем, что минимизация взвешенной энергии Дирихле с весом (плотностью) $a(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ приводит к (4) с весовой функцией

$$w(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = \Delta_S^a f + 2af,$$

где $f = \rho^2/2$ и

$$\Delta_S^a = \mathrm{div}_S\,(a\nabla_S).$$

Здесь div_S и ∇_S обозначают дивергенцию и градиент сферы соответственно.

Доказательство. Пусть задана точка $\mathbf{x} \in \Omega$, мы рассматриваем стандартные сферические координаты с центром в точке $\mathbf{x}$: радиальное расстояние r и сферические координаты $\boldsymbol{\omega} = (\theta, \varphi)$ с полярным углом θ и азимутальным углом φ. Для функции $f(r, \theta, \varphi)$ ее градиент и магнитуда градиента в сферических координатах задаются формулами

$$\nabla f(r, \theta, \varphi) = \frac{\partial f}{\partial r}\mathbf{e}_r + \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta}\mathbf{e}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial \varphi}\mathbf{e}_\varphi,$$

$$|\nabla f|^2 = \left|\frac{\partial f}{\partial r}\right|^2 + \frac{1}{r^2}\left|\frac{\partial f}{\partial \theta}\right|^2 + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left|\frac{\partial f}{\partial \varphi}\right|^2.$$

Аналогично плоскому случаю, мы имеем

$$U_{\mathbf{x}}(\mathbf{z}) = \frac{(\rho - r)u(\mathbf{x}) + ru(\mathbf{y})}{\rho}$$

и, следовательно,

$$\frac{\partial U_{\mathbf{x}}}{\partial r} = \frac{u(\mathbf{y}) - u(\mathbf{x})}{\rho},$$

$$\frac{\partial U_{\mathbf{x}}}{\partial \theta} = r\left[(u(\mathbf{y}) - u(\mathbf{x}))\left(\frac{1}{\rho}\right)'_{\theta} + \frac{1}{\rho}u'_{\theta}(\mathbf{y})\right],$$

$$\frac{\partial U_{\mathbf{x}}}{\partial \varphi} = r\left[(u(\mathbf{y}) - u(\mathbf{x}))\left(\frac{1}{\rho}\right)'_{\varphi} + \frac{1}{\rho}u'_{\varphi}(\mathbf{y})\right].$$

Как и в двумерном случае определим $u(\mathbf{x})$ таким образом, чтобы для построенной конической поверхности $U_{\mathbf{x}}(\mathbf{z})$ энергия Дирихле с плотностью $a(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ достигла своего минимального значения. Рассмотрим следующую задачу минимизации:

$$\min \leftarrow \iiint\limits_{\Omega} |\nabla U_{\mathbf{x}}|^2 a(\mathbf{x}, \theta, \varphi) d\mathbf{z} = \int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{2\pi}\int\limits_0^{\rho} a(\mathbf{x}, \theta, \varphi) r^2 \sin\theta dr d\varphi d\theta \left\{\left[\frac{u(\mathbf{x}) - u(\mathbf{y})}{\rho}\right]^2 + \right.$$

$$\left. + \left[(u(\mathbf{y}) - u(\mathbf{x}))\left(\frac{1}{\rho}\right)'_{\theta} + \frac{1}{\rho}u'_{\theta}(\mathbf{y})\right]^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}\left[(u(\mathbf{y}) - u(\mathbf{x}))\left(\frac{1}{\rho}\right)'_{\varphi} + \frac{1}{\rho}u'_{\varphi}(\mathbf{y})\right]^2\right\} =$$

$$= \frac{1}{3}\int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{2\pi} a(\mathbf{x}, \theta, \varphi)\rho(\theta, \varphi)\sin\theta d\varphi d\theta \left\{[u(\mathbf{x}) - u(\mathbf{y})]^2 + \right.$$

$$\left. + \left[u'_{\theta}(\mathbf{y}) + (u(\mathbf{x}) - u(\mathbf{y}))\frac{\rho'_{\theta}}{\rho}\right]^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}\left[u'_{\varphi}(\mathbf{y}) + (u(\mathbf{x}) - u(\mathbf{y}))\frac{\rho'_{\varphi}}{\rho}\right]^2\right\}.$$

Таким образом, для оптимального значения $u(\mathbf{x})$ получаем

$$\begin{gathered}\int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{2\pi} u(\mathbf{x})\left\{1 + \left(\frac{\rho'_{\theta}}{\rho}\right)^2 + \left(\frac{\rho'_{\varphi}}{\rho\sin\theta}\right)^2\right\} a\rho\sin\theta d\theta d\varphi = \int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{2\pi}\left\{u(\mathbf{y}) - u'_{\theta}(\mathbf{y})\frac{\rho'_{\theta}}{\rho} - u'_{\varphi}(\mathbf{y})\frac{\rho'_{\varphi}}{\rho\sin^2\theta} + \right. \\ \left. + u(\mathbf{y})\left(\frac{\rho'_{\theta}}{\rho}\right)^2 + u(\mathbf{y})\left(\frac{\rho'_{\varphi}}{\rho\sin\theta}\right)^2\right\} a\rho\sin\theta d\theta d\varphi.\end{gathered} \tag{26}$$

Сначала рассмотрим

$$\int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{2\pi}\left\{1 + \left(\frac{\rho'_{\theta}}{\rho}\right)^2 + \left(\frac{\rho'_{\varphi}}{\rho\sin\theta}\right)^2\right\} a\rho\sin\theta d\theta d\varphi \tag{27}$$

и покажем, что этот интеграл равен

$$\int\limits_0^{\pi}\int\limits_0^{2\pi}\frac{\Delta_S^a f + 2af}{\rho}\sin\theta d\theta d\varphi, \quad f = \rho^2/2. \tag{28}$$

Имеем

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\frac{\Delta_S^a f+2af}{\rho}\sin\theta d\theta d\varphi=\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left\{\rho'_\theta\sin\theta a'_\theta+a\frac{(\rho'_\theta)^2}{\rho}\sin\theta+a\sin\theta\rho''_{\theta\theta}+a\rho'_\theta\cos\theta\right\}+ \\ +\frac{1}{\sin\theta}\left\{\rho'_\varphi a'_\varphi+a\frac{(\rho'_\varphi)^2}{\rho}+a\rho''_{\varphi\varphi}\right\}d\theta d\varphi. \tag{29}$$

Рассмотрим

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left\{\rho'_\theta\sin\theta a'_\theta+a\frac{(\rho'_\theta)^2}{\rho}\sin\theta+a\sin\theta\rho''_{\theta\theta}+a\rho'_\theta\cos\theta\right\}d\theta d\varphi. \tag{30}$$

Интегрируя по частям

$$\int_0^{\pi}a\sin\theta\rho''_{\theta\theta}d\theta,$$

покажем, что

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left\{\rho'_\theta\sin\theta a'_\theta+a\sin\theta\rho''_{\theta\theta}+a\rho'_\theta\cos\theta\right\}d\theta d\varphi=0,$$

и поэтому (30) равно

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}a\frac{(\rho'_\theta)^2}{\rho}\sin\theta d\theta d\varphi=\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left(\frac{\rho'_\theta}{\rho}\right)^2 a\rho\sin\theta d\theta d\varphi. \tag{31}$$

Далее рассмотрим

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\frac{1}{\sin\theta}\left\{\rho'_\varphi a'_\varphi+a\frac{(\rho'_\varphi)^2}{\rho}+a\rho''_{\varphi\varphi}\right\}d\theta d\varphi. \tag{32}$$

Интегрирование по частям

$$\int_0^{2\pi}\rho'_\varphi a'_\varphi d\varphi$$

дает

$$\int_0^{2\pi}\left\{\rho'_\varphi a'_\varphi+a\rho''_{\varphi\varphi}\right\}d\varphi=0.$$

Таким образом, (32) становится

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\frac{1}{\sin\theta}\left\{a\frac{(\rho'_\varphi)^2}{\rho}\right\}d\theta d\varphi. \tag{33}$$

Теперь, используя (30)–(33), мы видим, что (27) и (28) совпадают.

Далее рассмотрим

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left\{u(\mathbf{y})-u'_\theta(\mathbf{y})\frac{\rho'_\theta}{\rho}-u'_\varphi(\mathbf{y})\frac{\rho'_\varphi}{\rho\sin^2\theta}+u(\mathbf{y})\left(\frac{\rho'_\theta}{\rho}\right)^2+u(\mathbf{y})\left(\frac{\rho'_\varphi}{\rho\sin\theta}\right)^2\right\}a\rho\sin\theta d\theta d\varphi. \tag{34}$$

Интегрирование по частям дает

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left\{-u'_\theta(\mathbf{y})\frac{\rho'_\theta}{\rho}\right\}a\rho\sin\theta d\theta d\varphi=\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left\{u(\mathbf{y})\frac{(a\rho'_\theta\sin\theta)'_\theta}{\sin\theta}\right\}\sin\theta d\theta d\varphi$$

и аналогично

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left\{-u'_{\varphi}(\mathbf{y})\frac{\rho'_{\varphi}}{\rho\sin^2\theta}\right\}a\rho\sin\theta d\theta d\varphi = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left\{u(\mathbf{y})\frac{(a\rho'_{\varphi})'_{\varphi}}{\sin^2\theta}\right\}\sin\theta d\theta d\varphi.$$

Таким образом, (34) становится

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}u(\mathbf{y})\left\{a\rho + \frac{(a\rho'_{\theta}\sin\theta)'_{\theta}}{\sin\theta} + a\rho\left(\frac{\rho'_{\theta}}{\rho}\right)^2 + \frac{(a\rho'_{\varphi})'_{\varphi}}{\sin^2\theta} + a\rho\left(\frac{\rho'_{\varphi}}{\rho\sin\theta}\right)^2\right\}\sin\theta d\theta d\varphi.$$

Используя (29), мы видим, что это выражение равняется

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}u(\mathbf{y})\left\{\frac{\Delta_S^a f + 2af}{\rho}\right\}\sin\theta d\theta d\varphi.$$

Таким образом, мы показали, что (26) соответствует

$$u(\mathbf{x}) = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\frac{u(\mathbf{y})w(\mathbf{x},\theta,\varphi)}{\rho}\sin\theta d\theta d\varphi \Bigg/ \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\frac{w(\mathbf{x},\theta,\varphi)}{\rho}\sin\theta d\theta d\varphi,$$

где

$$w(\mathbf{x},\theta,\varphi) = \Delta_S^a f + 2af, \quad f = \rho^2/2.$$

Теперь утверждение (5) получается, если положить $a(\mathbf{x},\theta,\varphi) \equiv 1$.

Общее построение в 3D

Аналогично двумерному случаю, введем в рассмотрение область G, определяемую радиальной функцией $g(\mathbf{x},\boldsymbol{\omega})$, $\boldsymbol{\omega} = (\theta,\varphi)$, и применим трансфинитную интерполяцию Лапласа к G, где значения $u(\cdot)$ на ∂G находятся путем линейной интерполяции

$$v = \frac{u(\mathbf{y})g + u(\mathbf{x})(\rho - g)}{\rho}.$$

Тогда имеем

$$\int_{S_{\mathbf{x}}}\frac{\Delta_S(g^2/2) + 2(g^2/2)}{g}v d\boldsymbol{\omega} = u(\mathbf{x})\int_{S_{\mathbf{x}}}\frac{\Delta_S(g^2/2) + 2(g^2/2)}{g}d\boldsymbol{\omega},$$

где $d\boldsymbol{\omega} = \sin\theta d\theta d\varphi$ – элемент площади $S_{\mathbf{x}}$ единичной сферы с центром в $\mathbf{x}$. Аналогично двумерному случаю, это приводит к

$$\int_{S_{\mathbf{x}}}\frac{\Delta_S(g^2/2) + 2(g^2/2)}{\rho}u(\mathbf{y})d\boldsymbol{\omega} + u(\mathbf{x})\int_{S_{\mathbf{x}}}\left(1 - \frac{g}{\rho}\right)\frac{\Delta_S(g^2/2) + 2(g^2/2)}{g}d\boldsymbol{\omega} =$$
$$= u(x)\int_{S_{\mathbf{x}}}\frac{\Delta_S(g^2/2) + 2(g^2/2)}{g}d\boldsymbol{\omega},$$

и мы получаем

$$u(\mathbf{x}) = \int_{S_{\mathbf{x}}}\frac{\Delta_S(g^2/2) + 2(g^2/2)}{\rho}u(\mathbf{y})d\omega \Bigg/ \int_{S_x}\frac{\Delta_S(g^2/2) + 2(g^2/2)}{\rho}d\boldsymbol{\omega}.$$

Таким образом, мы пришли к общей трехмерной трансфинитной барицентрической интерполяции (4), (8) с $h(\mathbf{x},\boldsymbol{\omega}) = g(\mathbf{x},\boldsymbol{\omega})^2/2$.

7. ОБОБЩЕННЫЕ БАРИЦЕНТРИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ И ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ МИНКОВСКОГО И КРИСТОФФЕЛЯ

Рассмотрим трансфинитную барицентрическую интерполяционную схему (4), которая удовлетворяет свойству линейной точности, т.е. точна на линейных функциях. Тогда, как мы знаем, весовая функция $w(\mathbf{x}, \mathbf{e}_\theta)$, определенная на $S_\mathbf{x}$, удовлетворяет условиям ортогональности (5). Оказывается, что условие (5) связано с классическими проблемами Минковского и Кристоффеля в дифференциальной геометрии.

В разд. 2 мы уже исследовали геометрическую интерпретацию весовой функции $w(\mathbf{x}, \theta)$ в двумерном случае: ее можно рассматривать как радиус кривизны вспомогательной замкнутой кривой $\Sigma_\mathbf{x}$, связанной с точкой $\mathbf{x} \in \Omega$. Теперь мы попытаемся распространить это геометрическое наблюдение на трехмерный случай.

Проблема Минковского – это обратная задача, посвященная восстановлению замкнутой выпуклой поверхности из ее гауссовой кривизны, заданной как функция внешней нормали поверхности $\mathbf{e}_\theta$ (см. [32]). Если задана положительная функция $K(\boldsymbol{\theta})$, определенная на единичной сфере S, то необходимым и достаточным условием существования решения проблемы Минковского с гауссовой кривизной $K(\boldsymbol{\theta})$ является условие

$$\int_\Sigma \mathbf{e}_\omega dA \equiv \int_S \frac{\mathbf{e}_\omega d\boldsymbol{\omega}}{K(\boldsymbol{\omega})} = 0, \tag{35}$$

где Σ – реконструированная поверхность, а dA – ее элемент площади ($dA = d\boldsymbol{\omega}/K$ по определению гауссовой кривизны). Необходимость (35) следует сразу же из теоремы Гаусса–Остроградского о дивергенции. Проблема Минковского может быть сведена к решению нелинейного уравнения Монжа–Ампера

$$\det\left[\nabla_S^2 h(\boldsymbol{\omega}) + h(\boldsymbol{\omega}) I\right] = K(\boldsymbol{\omega}),$$

где $h(\boldsymbol{\omega})$ – опорная функция Σ, а $\nabla_S^2 h(\boldsymbol{\omega})$ обозначает матрицу вторых частных производных (гессиан) опорной функции $h(\boldsymbol{\omega})$.

Проблема Кристоффеля – это еще одна классическая обратная задача в дифференциальной геометрии. Она состоит в нахождении выпуклой поверхности Σ с заданной суммой главных радиусов кривизны. Проблема Кристоффеля проще проблемы Минковского и может быть решена через решение эллиптического дифференциального уравнения второго порядка

$$\operatorname{trace}\left[\nabla_S^2 h(\boldsymbol{\omega}) + h(\boldsymbol{\omega}) I\right] \equiv \Delta_S h(\boldsymbol{\omega}) + (N-1) h(\boldsymbol{\omega}) = R(\boldsymbol{\omega}), \tag{36}$$

где Δ_S – лапласиан сферы, а

$$R(\omega) = \sum_{i=1}^{N-1} R_i(\omega)$$

есть сумма главных радиусов кривизны. Так как $\lambda = (N-1)$ является первым ненулевым собственным значением функции $-\Delta_S$ и компоненты вектора $\mathbf{e}_\omega$ являются соответствующими $N-1$ собственными функциями, то необходимым и достаточным условием разрешимости (36) является

$$\int_\Sigma \mathbf{e}_\omega R(\boldsymbol{\omega}) ds = 0. \tag{37}$$

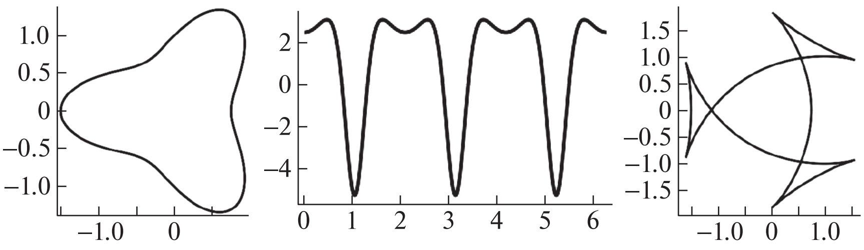
Теперь для каждого $\mathbf{x} \in \Omega$ мы можем положить

$$R(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega}) = w(\mathbf{x}, \mathbf{e}_\omega)$$

и решить (36). После чего поверхность $\Sigma_\mathbf{x}$ восстанавливается из опорной функции $h(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$. Один из способов решения (36) состоит в разложении $w(\mathbf{x}, \mathbf{e}_\omega)$ по сферическим гармоникам и построения опорной функции $h(\mathbf{x}, \boldsymbol{\omega})$ в виде ряда по сферическим гармоникам.

Если $N = 2$, то $\boldsymbol{\omega} = \theta$, и задачи Минковского и Кристоффеля совпадают, так как $R(\theta) = 1/k(\theta)$. Опорная функция $h(\theta)$ для $\Sigma_\mathbf{x}$ удовлетворяет уравнению

$$h''_{\theta\theta}(\theta) + h(\theta) = w(\mathbf{x}, \theta) \tag{38}$$



Фиг. 8. (а) – График в полярных координатах заданной опорной функции $h(\theta)$. (б) – График радиуса кривизны $R(\theta) = h''(\theta) + h(\theta)$. (в) – Кривая, восстановленная по опорной функции $h(\theta)$. Кривая имеет шесть вершин, соответствующих нулям ее радиуса кривизны $R(\theta)$.

с периодическими граничными условиями. Например, трансфинитные координаты Лапласа и координаты Вокспресса–Воррена получаются из

$$w(\mathbf{x},\theta) = \rho''_{\theta\theta} + \rho \quad \text{и} \quad w(\mathbf{x},\theta) = (1/\rho)''_{\theta\theta} + 1/\rho$$

соответственно.

На фиг. 8 показан пример плоской кривой, восстановленной по заданной опорной функции.

В трехмерном пространстве ситуация сложнее. Пусть сферические координаты задаются $\boldsymbol{\omega} = (\theta,\varphi)$. Мы уже видели, что трансфинитные координаты Лапласа задаются с помощью весовой функции

$$w(\mathbf{x},\theta,\varphi) = \Delta_S(\rho^2/2) + 2(\rho^2/2)$$

и, следовательно, согласно обратной задаче Кристоффеля, определяют поверхность $\Sigma_{\mathbf{x}}$, чья опорная функция задается уравнением $h(\mathbf{x},\boldsymbol{\omega}) = \rho^2/2$. Далее для каждого $\mathbf{x} \in \Omega$, если функция $w(\mathbf{x},\theta,\varphi)$ удовлетворяет условию ортогональности (5), то решение уравнения

$$\Delta_S h + 2h = w(\mathbf{x},\theta,\varphi)$$

определяет опорную функцию $h(\mathbf{x},\boldsymbol{\omega})$ поверхности $\Sigma_{\mathbf{x}}$, соответствующей точке $\mathbf{x}$. Более того, как мы видели во второй части разд. 6, обратная задача Кристоффеля естественным образом связана с любой системой трансфинитных барицентрических координатами, если мы положим $h = g^2/2$ и для каждого $x \in \Omega$ будем рассматривать область G, определяемую радиальной функцией $g(\mathbf{x},\boldsymbol{\omega})$.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы использовали простой вариационный принцип (минимизация энергии Дирихле конической поверхности) для получения трансфинитной версии барицентрических координат Лапласа и расширили этот подход для получения общего описания трансфинитных барицентрических координат в двумерном и трехмерном случаях. Мы привели выражения этих координат для многоугольных областей на плоскости для некоторых конкретных случаев. Наконец, обсудили связи между трансфинитными барицентрическими координатами и классическими обратными задачами Минковского и Кристоффеля в дифференциальной геометрии.

Авторы благодарны организаторам конференции NUMGRID 2020, где была представлена предварительная версия этой работы. Авторы также хотели бы поблагодарить рецензентов за полезные и конструктивные замечания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Wachspress E.L.* A rational finite element basis. Acad. Press, New York, 1975.
2. *Warren J.* Barycentric coordinates for convex polytopes // Adv. in Comput. Math. 1996. V. 6. № 2. P. 97–108.
3. *Floater M.S.* Mean value coordinates // Comput. Aided Geometric Design. 2003. V. 20. № 1. P. 19–27.
4. *Floater M.S.* Generalized barycentric coordinates and applications // Acta Numer. 2015. V. 24. P. 161–214.

5. *Hormann K., Sukumar N.* ed. Generalized barycentric coordinates in computer graphics and computational mechanics. CRC Press, 2017.
6. *Budninskiy M., Liu B., Tong Y., Desbrun M.* Power coordinates: A geometric construction of barycentric coordinates on convex polytopes // ACM Transact. on Graph. 2016. V. 35. № 6. P. 241.
7. *Yan Z., Schaefer S.* A family of barycentric coordinates for co-dimension 1 manifolds with simplicial facets // Comput. Graph. Forum. 2019. V. 38. № 5. P. 75–83. SGP 2019 Special Issue.
8. *Bobach T., Bertram M., Umlauf G.* Issues and implementation of C^1 and C^2 natural neighbor interpolation. Inter. Symp. on Visual Comput. 2006. P. 186–195.
9. *Belikov V.V., Ivanov V.D., Kontorovich V.K., Korytnik S.A., Semenov A.Y.* The non-Sibsonian interpolation: a new method of interpolation of the values of a function on an arbitrary set of points // Comput. Math. Math. Phys. 1997. V. 37. № 1. P. 9–15.
10. *Pinkall U., Polthier K.* Computing discrete minimal surfaces and their conjugates // Experiment. Math. 1993. V. 2. № 1. P. 15–36.
11. *Floater M.S., Hormann K., K'os G.* A general construction of barycentric coordinates over convex polygons // Adv. in Comput. Math. 2006. V. 24. № 1–4. P. 311–331.
12. *Ju T., Liepa P., Warren J.* A general geometric construction of coordinates in a convex simplicial polytope // Comput. Aided Geometr. Design. 2007. V. 24. № 3. P. 161–178.
13. *MacNeal R.H.* An asymmetrical finite difference network // Quart. of Appl. Math. 1953. V. 11. № 3. P. 295–310.
14. *Christ N.H., Friedberg R., Lee T.D.* Weights of links and plaquettes in a random Lattice // Nucl. Phys. B 1982. V. 210. № 3. P. 337–346.
15. *Eck M., DeRose T., Duchamp T., Hoppe H., Lounsbery M., Stuetzle W.* Multiresolution analysis of arbitrary meshes // In Siggraph. 1995. V. 95. P. 173–182.
16. *Sugihara K.* Surface interpolation based on new local coordinates // Computer-Aided Design. 1999. V. 31. № 1. P. 51–58.
17. *Meyer M., Lee H., Barr A., Desbrun M.* Generalized barycentric coordinates on irregular polygons // J. of Graph. Tools. 2002. V. 7. № 1. P. 13–22.
18. *Warren J., Schaefer S., Hirani A., Desbrun M.* Barycentric coordinates for convex sets // Adv. in Comput. Math. 2007. V. 27. № 3. P. 319–338.
19. *Ju T., Schaefer S., Warren J.* Mean value coordinates for closed triangular meshes // ACM Transact. on Graph. 2005. V. 24. № 3. P. 561–566. Proceed. of SIGGRAPH. 2005.
20. *Belyaev A.* On transfinite barycentric coordinates. Proceed. of the Fourth Eurographics Symp. on Geometry Processing (SGP 2006). P. 89–99. 2006.
21. *Schaefer S., Ju T., Warren J.* A unified, integral construction for coordinates over closed curves // Comput. Aided Geometr. Design. 2007. V. 24. № 8–9. P. 481–493.
22. *Dyken C., Floater M.S.* Transfinite mean value interpolation // Comput. Aided Geometr. Design. 2009. V. 26. P. 117–134.
23. *Bruvoll S., Floater M.S.* Transfinite mean value interpolation in general dimension // J. Comp. Appl. Math. 2010. V. 233. P. 1631–1639.
24. *Floater M.S., Kosinka J.* Barycentric interpolation and mappings on smooth convex domains. Proceed. of the 14th ACM Symp. on Solid and Phys. Model. 2010. P. 111–116.
25. *Kosinka J., Barton M.* Convergence of barycentric coordinates to barycentric Kernels // Comput. Aided Geometr. Design. 2016. V. 43. P. 200–210.
26. *Chen R., Gotsman C.* Complex transfinite barycentric mappings with similarity Kernels // Comput. Graph. Forum. 2016. V. 35. № 5. P. 41–53. SGP 2016 Special Issue.
27. *Floater M.S., Patrizi F.* Transfinite mean value interpolation over polygons, 2019. arXiv:1906.08358 [math.NA].
28. *Zayer R.* Numerical and variational aspects of mesh parameterization and editing. PhD thesis, Saarland Univer., 2007.
29. *Belyaev A., Fayolle P.-A.* On integral-based (transfinite) laplace coordinates. Numeric. Geometry, Grid Generat. and Sci. Comput. NUMGRID 2020. Springer, 2020.
30. *Floater M.S., K'os G., Reimers M.* Mean value coordinates in 3D // Comput. Aided Geometr. Design. 2005. V. 22. № 7. P. 623–631.
31. *Shepard D.* A two-dimensional interpolation function for irregularly-spaced data. Proceed. of the 1968 23rd ACM Nation. Conf. P. 517–524. ACM Press, 1968.
32. *Minkowski H.* Volumen und Oberfläsche // Math. Ann. 1903. V. 57. P. 447–495.

EDN: NGVPXS
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1288

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 519.63

A PARALLEL RBF-VerBSS HYBRID METHOD FOR MESH DEFORMATION[1)]

Chang Jihai[1,*], Yu Fei[1,], Cao Jie[1,***], Guan Zhenqun[1,****]**

[1] *Dalian University of Technology, Dalian 116024 Liaoning Province, China*

**e-mail: qiling_chang@126.com*

***e-mail: fei.yu@mail.dlut.edu.cn*

****e-mail: caojie@mail.dlut.edu.cn*

*****e-mail: guanzhq@dlut.edu.cn*

Поступила в редакцию 10.10.2021 г.
Переработанный вариант 10.10.2021 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

Параллельный гибридный алгоритм RBF-VerBSS для деформации расчетных сеток. Метод деформации сетки широко используется в численном моделировании нестационарных задач. В данной работе мы предлагаем гибридный метод деформации сетки, основанный на радиальных базисных функциях (RBF) и методе сглаживания шаров и вершин (VerBSS). На первом этапе строится фоновая сетка, согласованная с границей расчетной сетки, затем она деформируется при помощи RBF. Смещения внутренних вершин переносятся на соответствующие вершины расчетной сетки. Граница сетки и сдвинутые вершины затем используются совместно для расчета окончательной деформации расчетной сетки с помощью алгоритма VerBSS. Таким образом, достигается лучшая сходимость сетки. Результаты численных примеров показывают, что предложенный метод имеет более высокую эффективность и лучшую устойчивость, чем традиционные алгоритмы RBF и методы фоновых сеток для сеток большой размерности.

Ключевые слова: гибридный метод деформации сетки.

DOI: 10.31857/S0044466922080117

[1)] Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

EDN: JDLRXZ
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1289–1299

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 514.17+514.87

О КРИСТАЛЛОГРАФИЧНОСТИ ЛОКАЛЬНЫХ ГРУПП МНОЖЕСТВА ДЕЛОНЕ В ЕВКЛИДОВОЙ ПЛОСКОСТИ

© 2022 г. Н. П. Долбилин[1,*], М. И. Штогрин[1,]**

[1] 119991 Москва, ул. Губкина, 8, Математический институт им. В.А. Стеклова РАН, Россия

**e-mail: dolbilin@mi-ras.ru*

***e-mail: stogrin@mi-ras.ru*

Поступила в редакцию 11.10.2021 г.
Переработанный вариант 02.03.2022 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

Доказывается, что в любом множестве Делоне на евклидовой плоскости подмножество точек с кристаллографической локальной группой, т.е. с локальными поворотами порядка $n = 1, 2, 3, 4$ или 6, является также множеством Делоне. Из этого результата вытекает ряд важных следствий для правильных систем и кристаллических структур. Под локальной группой в точке множества X понимается группа кластера радиуса $2R$ с центром в этой точке, где R – радиус покрытия плоскости равными кругами с центрами в X. Библ. 10. Фиг. 7.

Ключевые слова: множество Делоне, кластер, группа кластера, локальная группа.

DOI: 10.31857/S004446692208004X

1. ВВЕДЕНИЕ

В работах Б.Н. Делоне [1]–[3] было введено и изучено понятие (r, R)-системы, которое сейчас называют множеством Делоне. С помощью множеств Делоне описывают микроструктуру любого твердого вещества, как аморфного, так и кристаллического. Строение кристалла, в отличие от микроструктуры аморфного вещества, обладает высокой симметрией в целом, которая является кристаллографической группой. В дальнейшем была построена локальная теория правильных систем, заложенная в [4]. Был доказан ряд теорем, в которых "глобальный порядок" в кристалле (т.е. наличие в нем кристаллографической группы симметрий) выводится из попарной идентичности его кластеров некоторого радиуса. В локальной теории важную роль играет наличие у кластеров симметрий или их отсутствие. Подчеркнем, что речь идет лишь о симметриях, действующих на множестве в пределах кластера и не обязанных входить в группу симметрий множества Делоне в целом.

В случае трехмерного пространства М.И. Штогрин (см. [5]) показал, что в $2R$-изометричном множестве Делоне, где R – радиус покрытия, кластеры (или "паучки") радиуса $2R$ не могут содержать вращений выше 6-го порядка. Этот результат, полученный в конце 1970-х гг. и опубликованный лишь в 2010 г., оказался важным для получения верхней оценки $\hat{\rho}_3 \le 10R$ для радиуса регулярности $\hat{\rho}_3$ в трехмерном пространстве (см. [6], [7]).

Недавно Н.П. Долбилин (см. [8], [9]) доказал утверждения, верные для совершенно произвольных множеств Делоне без каких-либо дополнительных условий, из которого следует утверждение Штогрина для множеств с одинаковыми $2R$-кластерами. В частности, в [9] из произвольного множества Делоне $X \subset \mathbb{R}^3$ было выделено подмножество $\tilde{X}$ всех тех точек из X, в которых порядок локальной оси не превосходит 6. Было доказано, что подмножество $\tilde{X}$ является также множеством Делоне, для которого значение радиуса покрытия $\tilde{R}$, вообще говоря, превосходит радиус покрытия R для X. Отсюда следует, что в множестве X с одинаковыми $2R$-кластерами у всех точек локальные группы не содержат вращений выше 6-го порядка, т.е. $X = \tilde{X}$.

Этот результат подсказал направление исследований локальных групп в произвольных множествах Делоне на плоскости и в 3D-пространстве.

Так, в [9] были высказаны две гипотезы. Одна, общая, гипотеза утверждает, что в произвольном множестве Делоне $X(\subset \mathbb{R}^3)$ подмножество X_{cr} всех точек x из X, в которых локальные вращения имеют только кристаллографический порядок n, т.е. $n = 1, 2, 3, 4, 6$, является множеством Делоне.

Согласно другой, ослабленной, гипотезе (см. [9]), для $2R$-изометрического множества $X \subset \mathbb{R}^3$ локальные группы (которые в этом случае все попарно сопряжены) не содержат осей некристаллографического порядка n, т.е. нет осей порядков $n = 5$ и $n > 6$. Очевидно, что справедливость ослабленной гипотезы следует из справедливости общей гипотезы относительно произвольных множеств Делоне. С другой стороны, ослабленная гипотеза является очень сильным обобщением классической теоремы об отсутствии глобальной оси 5-го порядка в двумерной и трехмерной решетках.

Обратим внимание на то, что обобщение происходит сразу по двум направлениям. Во-первых, речь идет о невозможности не только глобальных осей 5-го порядка, но и локальных. Во-вторых, семейство $2R$-изометричных множеств, о которых говорится в ослабленной гипотезе, гораздо шире не только семейства решеток, но и, как следует из [10], семейства правильных систем (определение см. ниже).

Основная цель настоящей работы – доказать упомянутую выше общую гипотезу для случая плоскости (теорема 2.1).

2. ОПРЕДЕЛЕНИЯ. ОСНОВНОЙ РЕЗУЛЬТАТ

Приведем несколько необходимых определений (подробнее см., например, [6]).

Определение 2.1 (множество Делоне). Множество $X \subset \mathbb{R}^2$ называется *множеством Делоне* типа (r, R), где $r, R > 0$, если выполнены следующие два условия:

(1) в открытом круге $B_y^o(r)$ радиуса r с центром в произвольной точке $y \in \mathbb{R}^2$ содержится не более одной точки из X:

$$\left|X \cap B_y^o(r)\right| \le 1;$$

(2) в замкнутом круге $B_y(R)$ содержится не менее одной точки из X:

$$\left|X \cap B_y(R)\right| \ge 1.$$

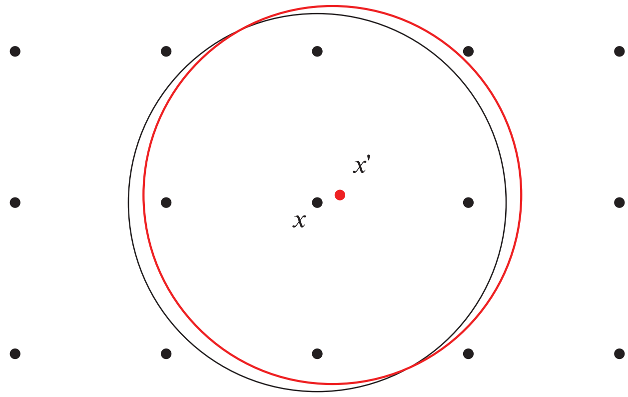
Ясно, что $r < R$. Более того, из определения 2.1 следует, что для данного множества Делоне X оба неравенства (1) и (2) выполняются и для r', и для R', если $r' < r$ и $R' > R$. Поэтому будем считать, что в качестве r и R выбраны соответственно наибольшее и наименьшее возможные для данного множества X значения. Другими словами, если X – фиксированное множество центров кругов, то под r понимается наибольший радиус упаковки плоскости $\mathbb{R}^2$ равными кругами с центрами в X, а под R – наименьший радиус покрытия плоскости $\mathbb{R}^2$ равными кругами с центрами в X.

Определение 2.2 (правильная система). Множество Делоне $X \subset \mathbb{R}^2$ называется *правильной системой*, если для любой пары точек x, x' из X существует движение g плоскости $\mathbb{R}^2$, для которого $g(x) = x'$ и $g(X) = X$.

Из определения следует, что группа симметрий правильной системы действует транзитивно на ее точках. Решетка, построенная на некотором базисе, является частным случаем правильной системы. На решетке существует транзитивная группа, состоящая из параллельных переносов исключительно.

Определение 2.3 (кластер). Для $x \in X$ и произвольного $\rho > 0$ множество $X \cap B_x(\rho)$ назовем *ρ-кластером* точки x в множестве Делоне X и обозначим через $C_x(\rho)$. При этом два ρ-кластера $C_x(\rho)$ и $C_{x'}(\rho)$ считаются *эквивалентными*, если существует движение g такое, что $g(x) = x'$ и $g(C_x(\rho)) = C_{x'}(\rho)$.

Отметим, что кластеры $C_x(\rho)$ и $C_{x'}(\rho)$ двух разных точек $x \ne x' \in X$ могут совпадать как множества, но при этом могут не быть эквивалентными, потому что может не оказаться изометрии,



Фиг. 1. Пример кластеров $C_x(\rho)$ и $C_{x'}(\rho)$, которые совпадают теоретико-множественно, но не являются эквивалентными.

переводящей одновременно x в x' и множество в себя (фиг. 1). Мы видим, что в этом случае одно и то же множество $X \cap B_x(\rho)$ $(= X \cap B_{x'}(\rho))$ окружает две свои точки x и x' по-разному.

Определение 2.4 (группа кластера). Для данной точки $x \in X$ *группой кластера* $C_x(\rho)$ называется группа $S_x(\rho)$ всех изометрий s плоскости таких, что $s(x) = x$ и $s(C_x(\rho)) = C_x(\rho)$.

При $\rho < 2r$ для каждой точки $x \in X$ ρ-кластер $C_x(\rho)$ состоит из единственной точки – точки x и группа $S_x(\rho) = O_x(2)$ – ортогональная группа $O(2)$ с неподвижной точкой x. Далее, для каждой точки x группа $S_x(\rho)$ не возрастает и может только уменьшаться с ростом радиуса ρ. Так как при $\rho = 2R$ кластер $C_x(2R)$ вокруг любой точки множества Делоне (это верно в пространстве любой размерности) является полномерным, то его группа $S_x(2R)$ является конечной. Для случая плоскости конечность группы $S_x(\rho)$ для любой точки $x \in X$ достигается уже при $\rho = 2r$.

Определение 2.5 (локальная группа). Группу $2R$-кластера $C_x(2R)$ назовем *локальной группой в точке* x и обозначим $S_x(2R) := G_x$. Вращение из локальной группы (если не сказано иное) будем называть *локальным вращением*, имея в виду, что это вращение, ограниченное на шар $B_x(2R)$, оставляет кластер $C_x(2R)$ инвариантным.

Множество всех собственных вращений (плоскости вокруг точки x) группы G_x составляет циклическую подгруппу, порядок которой обозначим через n_x. Напомним, что эти вращения, вообще говоря, не являются симметрией множества Делоне X в целом.

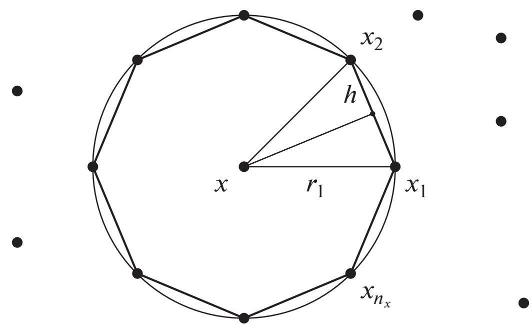
Конечные подгруппы ортогональной группы $O(2)$, содержащие вращения порядков $n = 1, 2, 3, 4$ или 6, являются кристаллографическими точечными группами, т.е. конечными подгруппами симметрий той или иной двумерной решетки.

Основной результат работы – следующая теорема.

Теорема 2.1. *Пусть $X \subset \mathbb{R}^2$ – произвольное множество Делоне с радиусом покрытия R и X_{cr} – подмножество всех точек $x \in X$, локальная группа которых кристаллографическая. Тогда подмножество X_{cr} является множеством Делоне с радиусом покрытия R_{cr} меньше $2R$. Более того, оценка $R_{\mathrm{cr}} < 2R$ неулучшаема.*

3. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ОСНОВНОГО РЕЗУЛЬТАТА

Пусть для $x \in X$, $n_x \geq 3$ и x_1 – ближайшая к x точка из X. Ясно, что $|xx_1| < 2R$. Так как $G_x \supseteq C_{n_x}$, то точка x_1 размножается поворотами из группы C_{n_x} в вершины правильного n_x-угольника $P = x_1 x_2 \ldots x_{n_x}$, вписанного в окружность радиуса $r_1 = |xx_1|$ (фиг. 2). Если h – середина сто-



Фиг. 2. Орбита $C_{n_x} \cdot x_1$ ближайшей к x точки x_1; $n_x = 8$.

роны x_1x_2, то в прямоугольном треугольнике Δxhx_1 угол $\angle hxx_1 = \pi/n_x$. Так как $|hx_1| \geq r$ и $|xx_1| < 2R$, то

$$\sin\frac{\pi}{n_x} = \frac{|hx_1|}{|xx_1|} > \frac{r}{2R},$$

откуда получаем

$$n_x < \frac{\pi}{\arcsin\dfrac{r}{2R}}. \tag{1}$$

Вообще говоря, на расстоянии r_1 от x может находиться k орбит (относительно группы C_{n_x}) точек из X, ближайших к x, где $k \geq 1$. Эти точки являются вершинами выпуклого kn_x-угольника, вписанного в окружность радиуса r_1. Его наименьшая сторона не превышает стороны правильного выпуклого kn_x-угольника, вписанного в ту же окружность. В силу (1) в общем случае имеем $kn_x < \pi/\arcsin r/(2R)$.

Лемма 3.1. *Пусть точка $x_1 \in X$ является ближайшей к точке $x \in X$. Если $n_x \geq 7$, то $n_{x_1} \leq 2$.*

Доказательство. Если x_1 – ближайшая к x точка из X, то $|xx_1| < 2R$. Поэтому $x_1 \in C_x(2R)$. Все точки из X, эквивалентные точке x_1 относительно группы $C_{n_x} \subseteq G_x$, являются вершинами правильного выпуклого n_x-угольника $P = x_1x_2 \ldots x_{n_x}$, вписанного в окружность радиуса $|xx_1|$.

Угол $\angle x_2x_1x_{n_x}$ в n_x-угольнике P равен $(n_x - 2)\pi/n_x$. Длина стороны $|x_1x_2| = 2|xx_1|\sin(\pi/n_x)$. Так как $n_x \geq 7 > 6$, то $|x_1x_2| < |xx_1| < 2R$. Таким образом, $x_2 \in C_{x_1}(2R)$.

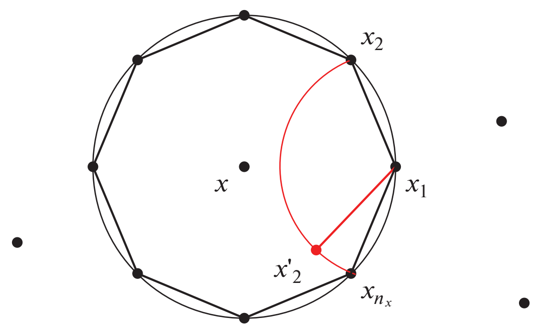
Предположим противное: $n_{x_1} \geq 3$. Повернем точку x_2 вокруг x_1 на угол $2\pi/n_{x_1}$ (такой поворот принадлежит группе G_{x_1}) в сторону точки x. Так как $n_x \geq 7$ и $n_{x_1} \geq 3$, то

$$\angle x_2x_1x_2' = \frac{2\pi}{n_{x_1}} < \frac{(n_x - 2)\pi}{n_x} = \angle x_2x_1x_{n_x}.$$

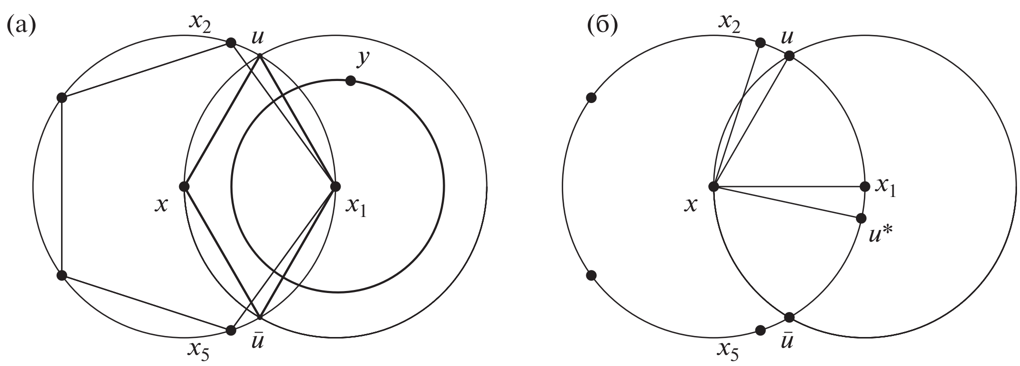
Поэтому поворот точки x_2 на угол, не превосходящий $2\pi/3$, оставляет ее образ x_2' на дуге $x_2x_2'x_{n_x}$ (фиг. 3), находящейся внутри $\angle x_2x_1x_{n_x}$ многоугольника P. Отсюда получаем $|xx_2'| < |xx_1|$. С другой стороны, так как $|x_1x_2'| = |x_1x_2| < |x_1x|$, то $x_2' \neq x$. Получаем противоречие с тем, что $x_1 \in X$, по нашему выбору, точка ближайшая к x. Это доказывает, что в локальной группе G_{x_1} порядок вращения не превышает 2: $n_{x_1} \leq 2$.

Лемма 3.2. *Для данной точки $x \in X$ пусть $x_1 \in X$ – ближайшая к ней точка. Если $n_x = 5$, то $n_{x_1} \leq 3$.*

Доказательство. Точки множества X, эквивалентные точке x_1 относительно группы $C_{n_x} \subseteq G_x$, образуют вершины правильного выпуклого 5-угольника $x_1x_2x_3x_4x_5$, вписанного в окружность с центром x и радиуса $|xx_1| < 2R$. Окружности радиуса $|xx_1|$ с центрами x и x_1 соответственно пере-



Фиг. 3. Иллюстрация к лемме 3.1 при $n_x \geq 7$, $n_{x_1} \geq 3$.



Фиг. 4. Иллюстрация к лемме 3.2 при $n_x = 5$: (а) – случай 1, (б) – случай 2, $n_{x_1} = 6$.

секаются в точках u и $\bar{u}$, симметричных относительно прямой xx_1. Будем считать, что точка u ближе к x_2, чем к x_5, а $\bar{u}$, наоборот, ближе к x_5.

Несмотря на то что точка x_1 – ближайшая к x, точка x не обязана быть ближайшей к x_1. Поэтому исследование значения n_{x_1} разделим на два случая.

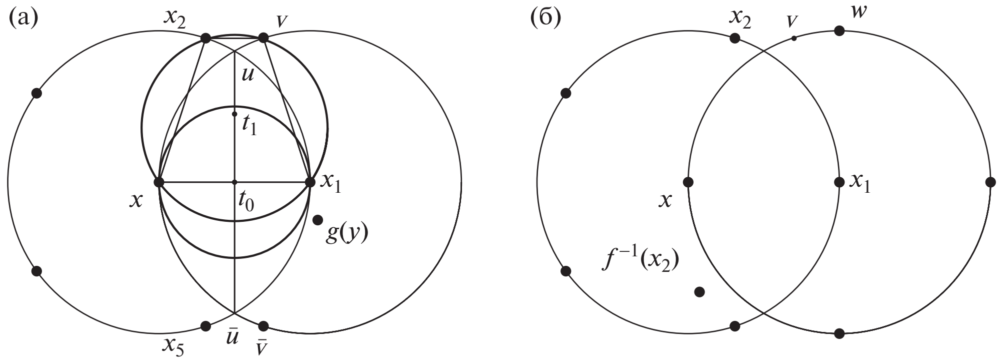
Случай 1: точка x не является ближайшей к x_1 в множестве X.

Случай 2: точка x является ближайшей к x_1 в множестве X.

Доказательство случая 1. Пусть внутри круга с центром x_1 и радиуса $|x_1x|$ помимо x_1 имеется хотя бы еще одна точка из X. Обозначим ее через y (фиг. 4а). Так как $|x_1y| < |x_1x| = |xu|$, то дуга окружности с центром x_1 и радиусом $|x_1y|$, расположенная внутри круга с центром x и радиуса $|xx_1|$, не содержит ни одной точки из множества X. С другой стороны, эта дуга больше $2\pi/3$, так как пересекается со сторонами угла $ux_1\bar{u} = 2\pi/3$ ромба $xux_1\bar{u}$ с вершиной x_1. Таким образом, угол локального поворота вокруг x_1 больше $2\pi/3$. Следовательно, $n_{x_1} \leq 2$.

Доказательство случая 2. Если точка x является ближайшей к точке x_1, тогда внутри окружности радиуса $|x_1x|$ с центром x_1 нет других точек из множества X кроме центра x_1. Внутри дуги $ux\bar{u}$, расположенной внутри окружности радиуса $|xx_1|$ с центром x, содержится лишь одна точка из X, и эта точка – точка x. Следовательно, $n_{x_1} \leq 6$. Докажем методом от противного, что $n_{x_1} \neq 4, 5, 6$.

Пусть $n_{x_1} = 6$, т.е. в группе G_{x_1} имеются повороты вокруг точки x_1 на угол $\pm\pi/3$, при которых точка x переходит в точки u и $\bar{u}$ (фиг. 4б). Таким образом, если $n_{x_1} = 6$, то точки пересечения окружностей u, $\bar{u}$ принадлежат кластеру $C_x(2R)(\subset X)$. Так как $n_x = 5$, в G_x имеются повороты во-



Фиг. 5. Иллюстрация к лемме 3.2 при $n_x = 5$: (а) – случай 2, $n_{x_1} = 5$; (б) – случай 2, $n_{x_1} = 4$.

круг точки x на углы $\pm 2\pi/5$. При одном из них точка x_2 переходит в x_1, а точка u переходит в точку $u^* \in C_x(2R)$. Так как

$$\angle x_1xu^* = \angle x_2xu = 2\pi(1/5 - 1/6) = \pi/15,$$

точка u^* расположена внутри дуги $x_1\bar{u}$ с центральным углом $\angle x_1x\bar{u} = \pi/3$. Следовательно, для точки $u^* \in X$ имеем $|x_1u^*| < |x_1x|$, что противоречит основному условию случая 2: внутри круга радиуса $|x_1x|$ с центром x_1 других точек из X кроме x_1 нет. Итак, доказано, что $n_{x_1} \neq 6$.

Пусть $n_{x_1} = 5$. Тогда при повороте вокруг точки x_1 на угол $2\pi/5$ точка x перейдет в точку v, зеркально симметричную точке x_2 относительно прямой $u\bar{u}$ (фиг. 5а).

Рассмотрим круг $B(x, x_2, v, x_1)$, описанный около равнобочной трапеции xx_2vx_1. Если круг $B(x, x_2, v, x_1)$ внутри пуст от точек из X, то его радиус не превышает R. Отсюда следует, что для точки v расстояние $|xv| \leq 2R$. Более того, $|x_2v| < |xx_1|$.

Если же круг $B(x, x_2, v, x_1)$ содержит внутри точки из X, то нельзя утверждать, что его радиус не превышает R. Следовательно, мы не можем утверждать, что $|xv| \leq 2R$. Тем не менее мы покажем, что в любом случае среди точек, лежащих внутри этого круга, найдется точка $y \in X$ такая, что $|xy| \leq 2R$ и $|x_2y| < |xx_1|$.

Обозначим через $B(x, x_1)$ круг, построенный на отрезке $[xx_1]$ как на диаметре. Очевидно, что в силу свойств кругов $B_x(|xx_1|)$ и $B_{x_1}(|xx_1|)$, внутри круга $B(x, x_1)$ нет точек из X. Более того, на границе этого круга имеются лишь две (диаметрально противоположные) точки x и x_1 из X.

Пусть t_0 – центр круга $B(x, x_1)$ и t_1 – центр круга $B(x, x_2, v, x_1)$. Рассмотрим семейство кругов $\{B_t(|tx|), t \in [t_0, t_1]\}$, где $B_t(|tx|)$ – круг с центром в точке t и радиусом $|tx|$. Следовательно, отрезок $[xx_1]$ является хордой круга $B_t(|tx|)$. Радиус $|tx|$ круга $B_t(|tx|)$ растет вместе с удалением центра t от t_0.

Пусть t^* – ближайшая к t_0 точка отрезка $[t_0, t_1]$, для которой круг $B_{t^*}(|t^*x|)$ содержит хотя бы еще одну точку из X. Такая точка t^* найдется на отрезке $[t_0, t_1]$, так как для точки t_1 окружность $\partial B_{t_1}(|t_1x|)$ помимо x и x_1 содержит, по крайней мере, две другие точки x_2 и v из X.

Внутри круга $B_{t^*}(|t^*x|)$ нет точек из X, поэтому его радиус не превосходит R. На окружности $\partial B_{t^*}(|t^*x|)$ находятся концы x и $x_1 \in X$ хорды и хотя бы одна “новая” точка $y \in X$. Поэтому $|xy| \leq 2R$.

Отметим, что мы можем считать точку y не совпадающей с x_2. Действительно, если $t^* \neq t_1$, то $y \neq x_2$, так как $x_2 \in \partial B_{t_1}(|t_1x|)$. Если $t^* = t_1$, то на окружности $\partial B_{t_1}(|t_1x|)$ находятся две точки x_2 и v из X. В этом случае мы можем взять $y := v$.

Далее, так как внутри окружностей $\partial B_x(|xx_1|)$ и $\partial B_{x_1}(|xx_1|)$ кроме их центров нет других точек из X, то новая точка $y \in \partial B_{t^*}(|t^*x|)$ принадлежит криволинейному треугольнику x_2vu, образованному дугами трех окружностей: $\partial B(x, x_2, v, x_1)$, $\partial B_x(|xx_1|)$ и $\partial B_{x_1}(|xx_1|)$, $y \neq x_2$ (фиг. 5а). Легко проверить, что

$$|x_2 v| = \max_{z \in \Delta x_2 v u} |x_2 z| = (1 - 2\cos 72°)|xx_1| < 0.382|xx_1|. \tag{2}$$

Так как $|xy| \leq 2R$, то поворот $g \in G_x$ вокруг точки x на 72°, при котором x_2 переходит в x_1, перемещает точку y в $g(y)$ (фиг. 5а). Из того, что $x_1 = g(x_2)$ и $y \in \Delta x_2 v u$, следует

$$|x_1 g(y)| = |x_2 y| \leq |x_2 v| < 0.382|xx_1|. \tag{3}$$

Таким образом, точка $g(y) \neq x_1$ и $g(y)$ лежит внутри круга $B_{x_1}(|xx_1|)$. Получили противоречие предположению о том, что внутри этого круга нет других точек из X кроме центра x_1. Доказано, что $n_{x_1} \neq 5$.

Пусть, наконец, $n_{x_1} = 4$. Тогда при повороте f вокруг точки x_1 на угол $\pi/2$ (по часовой стрелке) точка x перейдет в точку w, близкую к v и расположенную на продолжении дуги xv (фиг. 5б). Легко проверить, что $|x_2 w| < |x_1 w| = |x_1 x|$.

Заметим, что хотя точка v в случае $n_{x_1} = 4$ не обязана принадлежать множеству X, но, как и в предыдущем пункте ($n_{x_1} = 5$), круги $B_x(|xx_1|)$ и $B_{x_1}(|x_1 x|)$ кроме своих центров не содержат внутри себя других точек из X. Поэтому с помощью тех же аргументов, что и в предыдущем пункте, доказывается, что круг $B(x, x_2, v, x_1)$ пуст внутри от точек из X. Значит, $|x_1 x_2| \leq 2R$.

Тогда под действием $f^{-1} \in G_{x_1}$ точка w возвращается в x. А в силу $|x_2 w| < |xx_1|$, точка x_2 перейдет в точку $f^{-1}(x_2) \in X$, расположенную внутри круга $B_x(|xx_1|)$. Получено противоречие с тем, что точка x_1 является ближайшей к точке x. Следовательно, $n_{x_1} \neq 4$. Лемма 3.2 доказана.

Следствие. Пусть для множества Делоне $X \subset \mathbb{R}^2$ и всех точек $x \in X$ их $2R$-кластеры $C_x(2R)$ попарно эквивалентны и циклическая группа C_n — подгруппа всех вращений группы G_x. Тогда порядок группы C_n равен $n = 1, 2, 3, 4$ или 6.

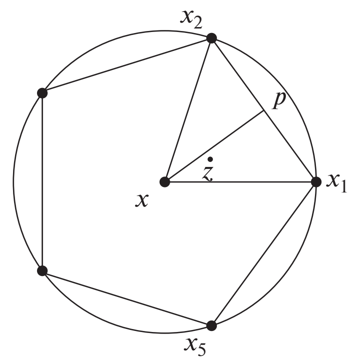
В частности, в любой правильной системе точек X на плоскости для любой точки $x \in X$ подгруппа C_n вращений локальной группы G_x имеет один и тот же для данного множества X порядок n, равный $1, 2, 3, 4$ или 6.

Лемма 3.3. *Для произвольной точки $z \in \mathbb{R}^2$, пусть $x \in X$ — ближайшая к z точка множества Делоне (с радиусом покрытия R), n_x — порядок подгруппы вращений из локальной группы G_x, и x_1 — ближайшая к x точка из X. Тогда, если $n_x \geq 5$, то среди эквивалентных относительно группы C_{n_x} вершин правильного выпуклого n_x-угольника $x_1 x_2 \ldots x_{n_x}$ ближайшая к z вершина находится от z ближе $2R$.*

Доказательство. Так как точка x является ближайшей к z, $|xz| \leq R$, то точка z расположена в области Вороного точки x в множестве X. Эта область содержится в правильном n_x-угольнике, образованном срединными перпендикулярами к отрезкам $[xx_1]$, $[xx_2]$, … , $[xx_{n_x}]$. В свою очередь, при $n_x \geq 5$ этот n_x-угольник принадлежит правильному n_x-угольнику $x_1 x_2 \ldots x_{n_x}$. Поэтому z также принадлежит этому n_x-угольнику $x_1 x_2 \ldots x_{n_x}$. Значит, z принадлежит некоторому равнобедренному треугольнику с вершиной x, основанием которого является некоторая сторона n_x-угольника. Для определенности будем считать, что это равнобедренный $\Delta xx_1 x_2$ (фиг. 6). Более того, если ближайшей к z вершиной n_x-угольника является x_1, то $z \in \Delta xpx_1$, где xp — срединный перпендикуляр к отрезку $[x_1 x_2]$.

Фундаментальный треугольник Δxpx_1 вместе с точкой z принадлежит кругу $B_{x_1}(|x_1 x|)$. Значит, $|zx_1| \leq |xx_1|$. С другой стороны, так как x_1 является ближайшей к x, то $|xx_1| < 2R$. Следовательно, $|zx_1| < 2R$. Лемма 3.3 доказана.

Доказательство (теоремы 2.1). Покажем, что расстояние от произвольной точки плоскости $z \in \mathbb{R}^2$ до ближайшей к z точки $\hat{x} \in X_{\mathrm{cr}} \subseteq X$ меньше $2R$, где R — радиус покрытия для X. Пусть



Фиг. 6. Иллюстрация к лемме 3.3.

$x \in X$ – ближайшая к z точка из X, тогда $|xz| \leq R$. Если $x \in X_{\mathrm{cr}}$, т.е. $n_x \leq 4$ или $n_x = 6$, то полагаем $\hat{x} = x$, и неравенство $|\hat{x}z| < 2R$ установлено.

Если $x \notin X_{\mathrm{cr}}$, то $n_x = 5$ или $n_x \geq 7$. Пусть $C_{n_x} (\subseteq G_x)$ – подгруппа локальных вращений вокруг x, пусть также $x_1 \in X$ – ближайшая к x точка из X. Орбита $C_{n_x} \cdot x_1$ точки $x_1 \in X$ образует правильный n_x-угольник. Так как $n_x = 5$ или $n_x \geq 7$, то в силу лемм 3.1 и 3.2 для каждой точки x' из орбиты $C_{n_x} \cdot x_1$ получаем $n_{x'} \leq 3$, и потому каждая точка этой орбиты принадлежит X_{cr}.

С другой стороны, по лемме 3.3, если x' – ближайшая к z точка этой же орбиты, то $|zx'| < 2R$. Так как при этом $x' \in X_{\mathrm{cr}}$, то расстояние от z до ближайшей точки $\hat{x} \in X_{\mathrm{cr}}$ меньше $2R$. Следовательно, радиус покрытия R_{cr} для X_{cr} меньше $2R$.

Итак, показано, что для любого множества Делоне X на евклидовой плоскости подмножество X_{cr} всех точек из X, локальные группы которых кристаллографические, является множеством Делоне с радиусом покрытия $R_{\mathrm{cr}} < 2R$. Неулучшаемость этой оценки будет установлена в следующем разделе.

4. О НЕУЛУЧШАЕМОСТИ ОЦЕНКИ $R_{\mathrm{cr}} < 2R$

Покажем, что оценка $R_{\mathrm{cr}} < 2R$ неулучшаема в том смысле, что для любого достаточно малого числа $\varepsilon > 0$ найдется множество Делоне $X \subset \mathbb{R}^2$ с радиусом покрытия R, для которого подмножество Делоне X_{cr} всех кристаллографических точек имеет радиус покрытия R_{cr}, где $2R - \varepsilon < R_{\mathrm{cr}} < 2R$.

Построение множества X с радиусом покрытия R и $R_{\mathrm{cr}} > 2R - \varepsilon$. Возьмем квадратную решетку Λ, построенную на ортонормированном репере с началом $O(0, 0)$. Радиус R покрытия для Λ равен $R = \sqrt{2}/2$. Модифицируем решетку Λ следующим образом. Предварительно проведем две концентрические окружности с центром O радиусов $\sqrt{2}$ и $\sqrt{2}\cos(\pi/n)$ (штриховое обозначение на фиг. 7), где $n = 8k$, $k = 1, 2, \ldots$:

a) 8 соседних с O узлов решетки Λ (на фиг. 7 эти 8 узлов отмечены маленькими кружочками)

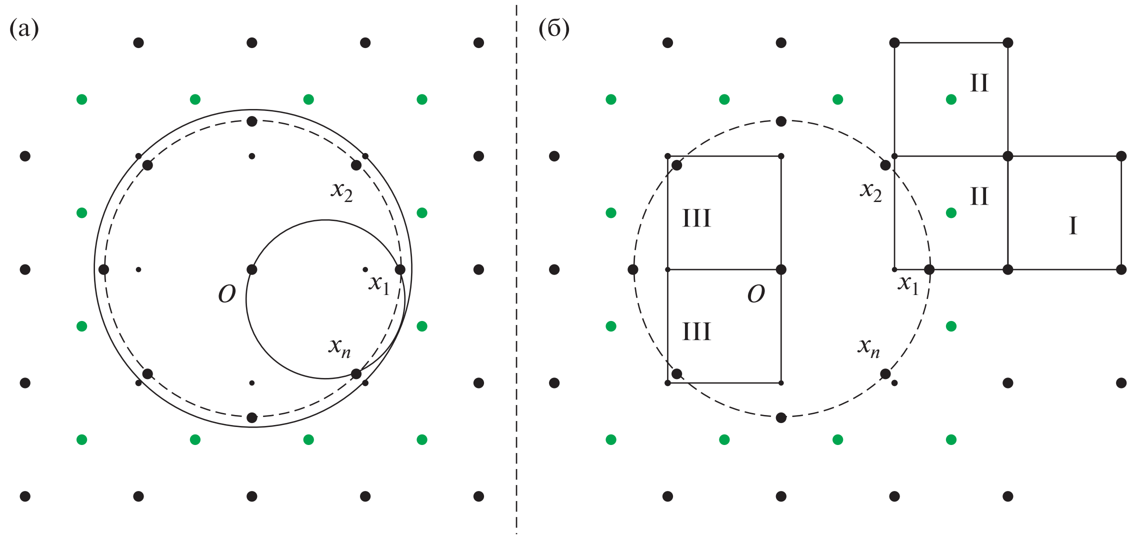
$$K = \{(\pm 1, 0), (0, \pm 1), (\pm 1, \pm 1)\} \tag{4}$$

переместим на штриховую окружность в следующие точки

$$\left(\pm\sqrt{2}\cos\frac{\pi}{n}, 0\right), \left(0, \pm\sqrt{2}\cos\frac{\pi}{n}\right), \left(\pm\cos\frac{\pi}{n}, \ \pm\cos\frac{\pi}{n}\right); \tag{5}$$

b) добавим вершины правильного выпуклого n-угольника, вписанного в (штриховую) окружность $\partial B_O\left(\sqrt{2}\cos(\pi/n)\right)$ (фиг. 7 соответствует случаю $n = 8$, $k = 1$)

$$V_n = \left\{\left(\sqrt{2}\cos\frac{\pi}{n}\cos 2\pi\frac{m}{n}, \sqrt{2}\cos\frac{\pi}{n}\sin 2\pi\frac{m}{n}\right), \quad m = 1, 2, \ldots, n\right\}, \tag{6}$$



Фиг. 7. Точность оценки $R_{cr} < 2R$: (а) – конструкция множества $X_{n_{cr}}$ с $R_{n_{cr}} > 2R - \varepsilon$; (б) – квадратные ячейки трех типов, проверка равенства $R_n = R$.

где $n = 8k$. Заметим, что среди n вершин V_n из (6) содержатся все 8 точек из (5): они соответствуют значениям индекса m, равным k, $2k$, $3k$, …, $8k$.

c) добавим к этому множеству множество M, состоящее из центров всех тех 12 квадратов решетки Λ, которые смежны с центральными 4 квадратами (на фиг. 7 эти точки отмечены зеленым цветом).

В результате получаем точечное множество X_n:

$$X_n := (\Lambda \backslash K) \cup V_n \cup M. \tag{7}$$

Для множества Делоне X_n выполняются следующие свойства:

1) радиус R_n покрытия для X_n равен $R = \sqrt{2}/2$ (такой же, как для решетки Λ);

2) в X_n имеется лишь одна точка с некристаллографической локальной группой, это – точка $O(0, 0)$; другими словами, подмножество $X_{n_{cr}}$ всех точек из X_n с локальными кристаллографическими группами есть

$$X_{n_{cr}} := X_n \backslash \{O\};$$

3) радиус покрытия $R_{n_{cr}}$ для $X_{n_{cr}}$ равен $R_{n_{cr}} = \sqrt{2}\cos(\pi/n)$; ясно, что $R_{n_{cr}} > \sqrt{2}/2$ при $n \geq 3$; следовательно, для любого $\varepsilon > 0$ при всех достаточно больших целых $n > N(\varepsilon)$ радиус $R_{n_{cr}}$ удовлетворяет неравенствам $\sqrt{2} - \varepsilon < R_{n_{cr}} < \sqrt{2}$, т.е. $2R - \varepsilon < R_{n_{cr}} < 2R$.

Проверим выполнение свойства 1): $R_n = R = \sqrt{2}/2$. Для этого достаточно установить, что расстояние $|zx|$ от произвольной точки z плоскости до ближайшего узла $x \in X_n$ не превышает $R = \sqrt{2}/2$, более того, $\sup_{z\in\mathbb{R}^2}\min_{x\in X_n}|zx| = \sqrt{2}/2$.

Внутри круга $B_O\left(\sqrt{2}\cos(\pi/n)\right)$ содержится только одна точка $O(0, 0)$ из X_n. Далее, n-угольник $x_1x_2 \ldots x_n$ состоит из n конгруэнтных равнобедренных треугольников ΔOx_ix_{i+1} с общей вершиной O (фиг. 7а). Благодаря выбранному значению $\sqrt{2}\cos(\pi/n)$ радиуса штриховой окружности, окружность, описанная около ΔOx_ix_{i+1} имеет, радиус $\sqrt{2}/2$. Таким образом, эта окружность лежит внутри круга $B_O\left(\sqrt{2}\right)$, проходит через его центр O и касается его граничной окружности $\partial B_O\left(\sqrt{2}\right)$ (фиг. 7а). Поэтому окружность, описанная около ΔOx_ix_{i+1}, не содержит внутри точек из X_n. Следовательно, ΔOx_ix_{i+1} есть ячейка Делоне, и для любой точки z, лежащей в n-угольнике, расстояние до ближайшего узла из X_n не превышает $\sqrt{2}/2$.

Если точка z лежит вне n-угольника, то имеются три возможности (области I, II и III на фиг. 7б).

Для любой точки z из квадратной ячейки типа I решетки Λ со стороной 1 неравенство $\min_{x\in X_n}|zx| \le \sqrt{2}/2$ очевидно (фиг. 7б). Причем расстояние от центра квадратной ячейки типа I до вершины в точности равно $\sqrt{2}/2$. Поэтому для z из квадратной ячейки типа I имеем

$$\sup_{z\in I}\min_{x\in X_n}|zx| = \sqrt{2}/2.$$

Пусть теперь точка z принадлежит одной из 12 квадратных ячеек типа II решетки Λ, центры которых добавлены к X_n (зеленые точки на фиг. 7б). В этом случае расстояние от точки z до центра ячейки, который также принадлежит множеству X_n, не превосходит $\sqrt{2}/2$.

Пусть z принадлежит одной из 4 квадратных ячеек типа III (фиг. 7б). Если при этом z принадлежит многоугольнику $x_1x_2 \dots x_n$, то неравенство $\min_{x\in X_n}|zx| \le 2R$ доказано выше. Если же z лежит в уголке квадратной ячейки типа III, не входящем в многоугольник, то расстояние $|zx|$ до ближайшей точки $x \in X_n$, очевидно, меньше $\sqrt{2}/2$.

Итак, доказано, что радиус покрытия R_n для X_n равен $R_n \equiv R = \sqrt{2}/2$.

Теперь проверим свойство 2): для любой точки из X_n, за исключением точки O, ее локальная группа кристаллографическая. Локальная группа точки O содержит подгруппу C_n, где $n \ge 8$, и поэтому не является кристаллографической.

Следовательно, в множестве $X_{n_{\text{cr}}} = X_n \backslash \{O\}$ локальные группы для всех его точек кристаллографические. Наибольший пустой круг от точек из множества $X_{n_{\text{cr}}}$ – это круг $B_O\left(\sqrt{2}\cos(\pi/n)\right)$, описанный около правильного n-угольника. Поэтому для множества $(X_n)_{\text{cr}}$ радиус покрытия $R_{n_{\text{cr}}} = \sqrt{2}\cos(\pi/n)$, где $n = 8k$.

Таким образом, доказано свойство 3): для $\forall\varepsilon > 0$ найдется $N(\varepsilon)$, такое что для каждого $n > N(\varepsilon)$ существует множество Делоне X_n с радиусом покрытия R, в котором подмножество $X_{n_{\text{cr}}}$ всех точек x с кристаллографическими локальными группами G_x является множеством Делоне с радиусом покрытия $R_{n_{\text{cr}}}$, где

$$2R - \varepsilon < R_{n_{\text{cr}}} < 2R.$$

Неулучшаемость оценки $R_{n_{\text{cr}}} < 2R$ установлена.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подчеркнем, что теорема 2.1 есть двумерный аналог общей гипотезы (см. п. 1, а также [9]) о кристаллическом ядре X_{cr} множества Делоне в трехмерном пространстве.

Авторы благодарны И. Бабурину за проявленный интерес к полученным результатам. В частности, он обратил внимание на то, что для множества Делоне X, состоящего из вершин узора Пенроуза, в его кристаллическом ядре X_{cr} содержатся правильные декагоны, которые являются ячейками Делоне в этом ядре. Следовательно, группа декагона, содержащая поворот 10-го порядка, хотя и является локальной группой в множестве X, в то же время не является локальной группой в кристаллическом ядре потому, что не является группой никакого кластера в этом ядре. Действительно, неподвижная точка этой группы, центр ячейки Делоне, принадлежит X, но не принадлежит X_{cr}.

Отметим, что этот факт не случаен. Из лемм 3.1 и 3.2 следует, что если в точке $x \in X$ локальная группа не кристаллографическая, то все ближайшие к x точки принадлежат кристаллическому ядру X_{cr} и поэтому являются вершинами ячейки Делоне в ядре, которая обладает этой же некристаллографической группой.

В связи с замечанием рецензента еще раз напомним, что локальная группа в точке x из X – это группа $2R$-кластера с центром в точке x.

Таким образом, возникает следующий вопрос. Пусть $X_{\rm cr}$ – кристаллическое ядро множества Делоне $X \subset \mathbb{R}^2$. Рассмотрим последовательность вложенных, возможно не строго, множеств Делоне:

$$X \supseteq X_{\rm cr} \supseteq (X_{\rm cr})_{\rm cr} \supseteq ((X_{\rm cr})_{\rm cr})_{\rm cr} \supseteq \dots \quad (8)$$

Понятно, что если в этой последовательности на каком-то шаге встретится знак равенства двух множеств, то дальше последовательность множеств стабилизируется. Пока не известно, есть ли множество Делоне X, для которого последовательность строгих вложений бесконечна. Также неизвестен пример множества Делоне X, для которого последовательность (8) содержала бы более одного строгого вложения: $X \supset X_{\rm cr} \supset (X_{\rm cr})_{\rm cr}$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Delaunay B.* Sur la sphere vide // Изв. АН СССР, ОМЕН. 1934. V. 6. P. 793–800.
2. *Делоне Б.Н.* Геометрия положительных квадратичных форм // Успехи матем. наук. 1937. Вып. 3. С. 16–62.
3. *Делоне Б.Н.* Геометрия положительных квадратичных форм // Успехи матем. наук. 1938. Вып. 4. С. 102–164.
4. *Делоне Б.Н., Долбилин Н.П., Штогрин М.И., Галиулин Р.В.* Локальный критерий правильности системы точек // ДАН СССР. 1976. Т. 227. № 1. С. 19–21.
5. *Штогрин М.И.* Об ограничении порядка оси паучка в локально правильной системе Делоне. Тез. докл. "Geometry, Topology, Algebra and Number Theory, Applications", Inter. Conf. dedicated to the 120-th Anniversary of Boris Nikolaevich Delone (1890–1980) (Moscow, August 16–20, 2010), Abstracts, Steklov Math. Inst., Moscow, 2010. P. 168–169.
6. *Долбилин Н.П.* Множества Делоне в $\mathbb{R}^3$ с $2R$-условиями регулярности, Топология и физика, Сб. статей. К 80-летию со дня рождения ак. Сергея Петровича Новикова, Тр. МИАН, 302, М.: МАИК Наука/Интерпериодика, 2018. С. 176–201.
7. *Dolbilin N., Garber A., Leopold U., Schulte E., Senechal M.* On the Regularity Radius of Delone Sets in $\mathbb{R}^3$ // Discrete Comput. Geom. 2021. V. 66. P. 996–1024 (published online). https://doi.org/10.1007/s00454-021-00292-6
8. *Dolbilin N.P.* From local identity to global order. Materials for Lupanov Inter. Seminar XIII, Moscow State Univer., June 17–22, 2019. P. 13–22.
9. *Dolbilin N.P.* Local groups in Delone sets // Lect. Not. in Comput. Sci. and Engineer. by Springer Inter. Publ. 2021. V. 143. P. 3–11 (published online). https://doi.org/10.1007/978-3-030-76798-3
10. *Baburin I.A., Bouniaev M., Dolbilin N., Erokhovets N.Yu., Garber A., Krivovichev S.V., Schulte E.* On the origin of crystallinity: on a lower of Delone sets // Acta Crystallogr. Sect. A. 2010. № 6. P. 616–629.

EDN: MVYOSV
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1300–1322

ОБЩИЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 519.63

ДВИЖЕНИЕ И ДЕФОРМАЦИЯ КВАЗИИЗОМЕТРИЧЕСКОЙ СЕТКИ С ГЕОМЕТРИЧЕСКИ АДАПТИРОВАННОЙ МЕТРИКОЙ[1)]

© 2022 г. В. А. Гаранжа[1,2,*], Л. Н. Кудрявцева[1,2,]**

[1] 119333 Москва, ул. Вавилова, 40, ВЦ им. А.А. Дородницына ФИЦ ИУ РАН, Россия

[2] 141701 Долгопрудный, М.о., Институтский пер., 9, МФТИ, Россия

**e-mail: garan@ccas.ru*

***e-mail: liukudr@yandex.ru*

Поступила в редакцию 11.10.2021 г.
Переработанный вариант 03.03.2022 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

Предложен алгоритм, который позволяет строить движущуюся адаптивную сетку с фиксированной связностью на основе квазиизометрического сеточного функционала в соответствии с нестационарной геометрически адаптивной управляющей метрикой в расчетной области. На каждом шаге по времени используется предобусловленный метод градиентного спуска для сеточного функционала, чтобы построить большие смещения вершин сетки. Промежуточные сетки, использующие простую линейную интерполяцию между начальным и смещенным состояниями с использованием времени в качестве параметра, гарантированно являются невырожденными деформациями начальной сетки. Следовательно, для численного моделирования с малыми временными шагами можно использовать один сравнительно дорогостоящий шаг вариационного алгоритма деформации сетки на 5–10 временных шагов, что значительно повышает эффективность алгоритма перестроения сетки применительно к алгоритмам вычислительной физики на подвижных сетках. Управляющая метрика обеспечивает анизотропное сгущение сетки вблизи границы движущегося тела по нормали и специальный выбор сгущения сетки в переходных зонах. Алгоритм вычисления целевых касательных растяжений сетки имеет решающее значение для реализуемости управляющей метрики. Он учитывает кривизну границы тела, а мелкие геометрические детали разрешаются с помощью медиальных осей. Дополнительные данные кодируются на фоновой движущейся сетке. Библ. 25. Фиг. 30.

Ключевые слова: 65N50, адаптивные сетки, подвижные сетки, квазиизометрический функционал, принцип равномерного распределения.

DOI: 10.31857/S0044466922080063

1. ВВЕДЕНИЕ

Принцип равномерного распределения (см. [1]) является одной из основ алгоритмов подвижных адаптирующихся сеток (см. [2], [3]). Его идея состоит в том, чтобы вычислить распределение шага сетки, используя информацию из уравнений в частных производных или из оценки ошибки интерполяции. В одномерном случае принцип равномерного распределения приводит к решению линейного эллиптического уравнения второго порядка со скалярной управляющей функцией. Заметим, что для задач, зависящих от времени, обычно приходится использовать различные адаптивные фильтры для подавления неустойчивости подвижной сетки, которые были описаны в 1986 г. в известной работе [4].

Способ обобщения на несколько измерений до сих пор вызывает споры. Широко используемое обобщение основано на решении уравнений типа Лапласа для координат вершин сетки с помощью скалярной функции управления (см. [5], [6]).

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке второго автора РНФ (проект 18-41-09018_ANR (сокращенно НОРМА)).

В начале 1990-х гг. С.К. Годунов сформулировал следующие основные принципы вариационного метода построения расчетных сеток:

– сетка сама по себе должна быть квазиизометрической деформацией и должна сходиться к определенному квазиизометрическому отображению при измельчении;

– квазиизометрическое отображение должно быть единственным и устойчивым решением вариационной задачи;

– вариационная задача должна использовать меры искажения, основанные на главных инвариантах метрического тензора деформации;

– дискретизированная вариационная задача также должна иметь единственное и устойчивое решение.

К сожалению, методов построения сеток, удовлетворяющих одновременно всем этим принципам, не существует.

Напомним, что по определению квазиизометрического отображения отношение длины любой простой выпрямляемой кривой к длине ее образа ограничено сверху некоторой константой $K > 1$, а снизу – $1/K$.

Первая реализация этих идей была представлена в [7] с использованием метода конформных отображений в двумерных областях простой формы. Эти идеи получили развитие в ряде работ, включая [8], [9], где был предложен и обоснован теоретически и численно вариационный принцип для построения многомерных квазиизометрических отображений.

В настоящей работе, которая является расширенной версией статьи в трудах конференции NUMGRID2020 (см. [10]), предлагается новый алгоритм, позволяющий строить подвижную адаптивную сетку с фиксированной связностью с помощью нестационарной управляющей метрики в вычислительной области. Рассматриваются методы построения управляющей метрики и расчетных сеток, позволяющих повысить точность численного моделирования вязких течений с использованием погруженных граничных условий (IBC – Immersed Boundary Conditions) (см. [11]) для системы движущихся тел, задаваемых функцией расстояния со знаком.

Используется следующий принцип оптимальности: каждая ячейка идеальной сетки в данный момент времени преобразуется к локальным координатам, в которых локальный метрический тензор является единичным. В результате этого преобразования ячейка должна быть конгруэнтна ячейке с тем же номером в начальной сетке. Квазиизометрический функционал из [8] используется для измерения и управления соответствием между реальной и идеальной сетками. Мы обнаружили, что когда глобальные большие деформации начальной сетки необходимы для удовлетворения критерия сжатия сетки внутри тонких движущихся слоев вблизи границ областей, простые явные методы оптимизации не позволяют сетке точно следовать за метрикой. К сожалению, алгоритм предобусловленного градиентного спуска для квазиизометрического функционала является довольно дорогим, и поэтому его использование на каждом временном шаге расчета вязкого течения неэффективно. Другая проблема заключается в том, что из-за нелинейности уравнений Эйлера–Лагранжа мы не можем предполагать, что норма невязки равна нулю на каждом временном шаге. Таким образом, непрерывность по времени движущейся сетки не гарантируется, поскольку итерационная минимизация функционала с обновленной метрикой может привести к значительным смещениям даже для бесконечно малых временных шагов за счет остаточной невязки, а пространственно-временные траектории ячеек сетки могут стать сильно скошенными. Для решения этой проблемы мы предлагаем простой и эффективный алгоритм, основанный на прямой интерполяции сетки. Используя алгоритм минимизации из [12], мы вычисляем предиктор, который определяет направление минимизации (поле смещения) для каждой вершины сетки для большого приращения времени. Каждая промежуточная сетка, вычисленная с помощью этого смещения посредством линейной интерполяции, гарантированно корректна. Мы обнаружили, что длина вычисленного поля смещений сильно превосходит смещения, допускаемые численным алгоритмом для течений вязкой жидкости (см. [11]), поэтому количество дорогостоящих неявных минимизаций может быть значительно сокращено. Предполагая, что временная зависимость метрики определяется гладкой функцией, получаем алгоритм деформации/адаптации сетки, который требует только 1–2 применений линейного решателя за, скажем, 5–10 временных шагов, что делает его довольно эффективным компонентом решателя потока движущейся сетки. Мы обнаружили, что линейный решатель, основанный на так называемой неполной факторизации Холецкого второго порядка (IC2) (см. [13], [14]), является очень эффективным компонентом алгоритма минимизации, особенно, для параллельной версии алгоритма. Наш опыт с более простыми алгоритмами, такими как метод сопряженных градиентов со стандартной неполной факторизацией Холецкого IC(k) в качестве предобуславливателя, не оправдал ожиданий.

2. КВАЗИИЗОМЕТРИЧЕСКИЙ ФУНКЦИОНАЛ

Квазиизометрический функционал был предложен в [8], [9]. Здесь мы используем упрощенную версию этого функционала для контролируемой деформации сетки.

Пусть $\xi_1,\ldots,\xi_d$ обозначают лагранжевы координаты, связанные с упругим материалом, а $x_1,\ldots,x_d$ — эйлеровы координаты материальной точки. Пространственное отображение $x(\xi,t):\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}^d$ задает зависящую от времени упругую деформацию, где параметр t — время, а ξ_i — координаты в области с начальной сеткой. Таким образом, ξ_i вморожены в ячейки исходной сетки, а эйлеровы координаты — это координаты точек сетки в расчетной области.

Матрица Якоби отображения $x(\xi,\cdot)$ обозначается через C, где $c_{ij}=\partial x_i/\partial\xi_j$.

Пусть $G_\xi(\xi,t)$ и $G_x(x,t)$ — метрические тензоры, определяющие линейные элементы и длины кривых в лагранжевых и эйлеровых координатах в областях Ω_ξ и Ω_x соответственно. Тогда $x(\xi,t)$ — это отображение между метрическими многообразиями M_ξ и M_x.

Определим следующий поливыпуклый упругий потенциал (внутреннюю энергию), который служит мерой искажения и записывается как взвешенная сумма мер искажения формы и объема (см. [8]):

$$W(C)=(1-\theta)\frac{\frac{1}{d}\operatorname{tr}(C^{\mathrm T}C)}{\det C^{2/d}}+\frac{1}{2}\theta\left(\frac{1}{\det C}+\det C\right). \qquad (1)$$

Очевидно,

$$W(U)=1,\quad U^{\mathrm T}U=I\quad \text{и}\quad \det U=1 \qquad (2)$$

для произвольной сохраняющей ориентацию ортогональной матрицы U. Как было предложено в [8], мы установили $\theta=4/5$. Это значение обеспечивает разумный баланс между искажениями формы и объема.

Ищем деформацию сетки $x(\xi,t)$, которая является решением вариационной задачи

$$F(x(\xi,t))=\int\limits_{\Omega_\xi}W(Q(x,t)\nabla_\xi x(\xi,t)H(\xi)^{-1})\det H\,d\xi. \qquad (3)$$

В текущей версии алгоритма деформации сетки мы не рассматриваем вариацию функционала (3) в зависимости от времени t.

Матрицы $H(\xi)$ и $Q(x,t)$ задают факторизации метрических тензоров G_ξ и G_x соответственно, определяемые как

$$H^{\mathrm T}H=G_\xi,\quad \det H>0,\quad Q^{\mathrm T}Q=G_x,\quad \det Q>0.$$

Предполагаем, что сингулярные значения матриц Q и H равномерно ограничены снизу и сверху.

Нестационарная деформация сетки вводится через зависящий от времени метрический тензор $G_x(x,t)=Q^{\mathrm T}(x,t)Q(x,t)$. Из (2) следует, что абсолютный минимум функционала (3) равен

$$\operatorname{vol}\Omega_\xi=\int\limits_{\Omega_\xi}\det H\,d\xi$$

и достигается при $Q(x,t)\nabla_\xi x(\xi,t)H(\xi)^{-1}=U$, где U — ортогональная матрица. Это означает, что в "изотропной" системе координат $y=Qx$, в которой метрический тензор $G_x(x,t)$ является единичным, отображение $x(x,t)$ локально изометрично отображению $x(\xi,0)$, когда $H(\xi)=\nabla_\xi x(\xi,0)$.

Предположим, что область Ω_ξ может быть разбита на выпуклые многогранники D_k. Строим непрерывную кусочно-гладкую деформацию $x_h(\xi,\cdot)$, которая регулярна на каждом многограннике. На практике мы используем линейные и полилинейные конечные элементы для того, чтобы собрать глобальную деформацию. Интеграл $F(x_h(\xi),t)$ по этой деформации мы называем *полудискретным функционалом*.

Для аппроксимации интеграла по выпуклой ячейке D_k требуются определенные квадратурные правила. В результате полудискретный функционал заменяется дискретным:

$$F(x_h(\xi,t),t) \approx \sum_k \mathrm{vol}(D_k) \sum_{q=1}^{N_k} \beta_q W(C_q) = F^h(x_h(\xi,t),t),$$

где N_k – число квадратурных узлов на ячейку D_k, C_q обозначает матрицу Якобиана в q-м квадратурном узле D_k, а β_q – веса квадратуры (подробнее см. [9]). Мы прячем в квадратурные веса значения $\det H$ для упрощения обозначений. Используем только такие квадратурные правила, которые гарантируют свойство мажорирования

$$F(x_h(\xi,t),t) \le CF^h(x_h(\xi,t),t), \tag{4}$$

где $C \ge 1$ – константа. Данное свойство можно использовать для доказательства того, что все промежуточные деформации $x_h(\xi,t)$, обеспечивающие конечные значения дискретного функционала, являются гомеоморфизмами (см. [9]).

3. ПРЕДОБУСЛОВЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ МИНИМИЗАЦИИ И СТРАТЕГИЯ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ПО ВРЕМЕНИ ДВИЖУЩЕЙСЯ СЕТКИ

Удобно записать дискретный функционал в виде функции $F(Z,Y,t)$ с пространственным аргументом $Z^{\mathrm{T}} = (z_1^{\mathrm{T}} z_2^{\mathrm{T}} \dots z_{n_v}^{\mathrm{T}})$, где $z_k \in \mathbb{R}^d$, $k = 1,2,\dots,n_v$, являются положениями вершин сетки. Зависимость от времени t вводится через зависящую от времени метрику $G_x(y,t)$. Вектор Y соответствует аргументу y метрики G_x.

Матрица Гессе $\tilde{H}$ функции F относительно Z строится из $d \times d$ блоков $\tilde{H}_{ij} = \partial^2 F/(\partial z_i \partial z_j^T)$. Здесь матрица $\tilde{H}_{ij}$ находится на пересечении i-й блочной строки блока и j-го блочного столбца. Мы фильтруем матрицу Гессе во время процедуры сборки конечных элементов, чтобы сделать ее положительно определенной и уменьшить количество ненулевых элементов в 2 раза (см. [12]). Ниже мы используем те же обозначения $\tilde{H}$ для фильтрованной матрицы Гессиана. Градиент F по Z обозначается через R. Этот вектор состоит из подвекторов r_i размера d. Он является приближенным градиентом функционала, так как мы не дифференцируем метрику G_x, следовательно, зависимость от Y не учитывается.

Поскольку точное решение вариационной задачи на временном слое $t^{n+1} = t^n + \Delta t^n$ слишком дорого, мы используем специальные 1- или 2-шаговые эвристические схемы интегрирования по времени.

Один шаг метода Ньютона для нахождения стационарной точки функции может быть записан как

$$\sum_{j=1}^{n_v} \tilde{H}_{ij}(Z^n, Z^n, t^{n+1}) \delta z_j + r_i(Z^n, Z^n, t^{n+1}) = 0. \tag{5}$$

Этот набор равенств можно кратко записать в виде

$$\tilde{H}(Z^n, Z^n, t^{n+1}) \delta Z + R(Z^n, Z^n, t^{n+1}) = 0 \tag{6}$$

и

$$\tilde{Z} = Z^n + \tau_n \delta Z. \tag{7}$$

Здесь параметр τ_n находится как приближенное решение одномерной задачи

$$\tau_n = \arg\min_{\tau} F(Z^n + \tau\delta Z, Z^n, t^{n+1}). \tag{8}$$

Для поиска приближенного минимума используется стандартный алгоритм золотого сечения.

Для приближенного решения линейной системы (6) используется метод сопряженных градиентов с предобусловливанием на основе приближенной факторизации Холецкого второго порядка (см. [13]). Для параллельной версии решателя мы используем аддитивную версию приближенной факторизации Холецкого второго порядка, основанную на разбиении на подобласти с перекрытиями (см. [14]). Полученная нелинейная схема оказалась очень устойчивой и достаточно эффективной.

Можно попытаться упростить структуру матрицы Гессе, задав $\tilde{H}_{ij} = 0$, когда $i \neq j$ (см. [15]) или даже рассматривая только диагональную часть матрицы Гессиана в качестве предусловия. Мы обнаружили, что если для удовлетворения критерия сжатия сетки внутри тонких движущихся слоев необходимы глобальные большие деформации исходной сетки, то простые “явные” (т.е. не требующие решения линейных систем с глобальными матрицами) методы оптимизации сетки не могут точно следовать метрике. Наш линейный решатель основан на извлечении d независимых линейных систем с симметричными положительно-определенными $n_v \times n_v$ матрицами (см. [12]) из линейной системы (6), которые по существу эквивалентны конечно-элементным аппроксимациям скалярных уравнений Пуассона с тензорными коэффициентами.

Простейший одношаговый алгоритм интегрирования по времени формулируется так:

$$Z^{n+1} = Z^n + \min\left(\frac{1}{2}, \tau_n\right)\delta Z. \tag{9}$$

Наблюдаемый парадокс вариационного метода заключается в том, что мы можем приписать любую разумную константу K в диапазоне $(0,1/2]$ шагу τ_n и после короткого переходного периода алгоритм в конечном итоге отмасштабирует приращение δZ таким образом, что значение $\tau_n|\delta Z|$ будет почти неизменным, поскольку в противном случае слой сетки будет отставать от заданного положения. Задание $K = 1/2$ оказалось хорошим экспериментальным компромиссом между точностью и устойчивостью. Для улучшения точности был опробован следующий двухшаговый алгоритм:

– вычислить

$$Z^{n+1/2} = Z^n + \frac{1}{2}\tau_n\delta Z, \tag{10}$$

– найти новое приращение $\delta\tilde{Z}$ такое, что

$$\tilde{H}(Z^{n+1/2}, Z^{n+1/2}, t^{n+1})\delta Z + R(Z^{n+1/2}, Z^{n+1/2}, t^{n+1}) = 0, \tag{11}$$

– присвоить

$$Z^{n+1} = Z^n + \tau_n\delta\tilde{Z}. \tag{12}$$

Для обеспечения устойчивости алгоритма в случае, когда полученное Z^{n+1} не является допустимым решением, необходимо найти новое τ_n через

$$\tau_n = \arg\min_{\tau} F(Z^n + \tau\delta\tilde{Z}, Z^{n+1/2}, t^{n+1}), \tag{13}$$

и повторяем шаги (10)–(12) с новым τ_n, которое по построению должно быть меньше предыдущего. Полученный алгоритм напоминает стандартную двухступенчатую схему Рунге–Кутты, связанную с одним временным шагом вдоль пространственно-временной траектории. Более точно, этап предиктора Рунге–Кутты похож на этап минимизации алгоритма типа Ньютона, а этап корректора Рунге–Кутты может служить дополнительным итерационным шагом. Мы обнаружили, что эта двухэтапная схема резко повышает точность локализации слоев сетки. Более того, она создает гладкие пространственно-временные траектории ячеек и позволяет запускать решатель деформации сетки с гораздо большими временными шагами. Из стратегии минимизации следует, что функция F имеет конечные значения для любого вектора Z_α, определяемого как

$$Z_\alpha = \alpha Z^n + (1-\alpha)Z^{n+1}, \quad 0 \neq \alpha \neq 1,$$

что, в свою очередь, означает, что все промежуточные деформации сетки являются невырожденными.

4. РАСТЯЖЕНИЕ СЕТКИ И УПРАВЛЕНИЕ ГРАДАЦИЕЙ РАЗМЕРОВ В НОРМАЛЬНОМ И КАСАТЕЛЬНОМ НАПРАВЛЕНИЯХ

Система из одного или нескольких движущихся и деформирующихся тел обозначается как область $B \in \mathbb{R}^d$, определяемая неявной функцией $d_s(x,t)$ таким образом, что функция d_s отрицательна внутри тела, положительна вне его, а изоповерхность $d_s(x,t) = 0$ определяет границу ∂B в момент времени t. Мы предполагаем, что $d_s(x,t)$ напоминает функцию расстояния со знаком для мгновенной границы области. Теоретически можно предположить существование квазиизометрического отображения $x(y) : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ такого, что функция $d_s(x(y),t)$ является именно функцией расстояния. На практике мы предполагаем, что вектор $\nabla_x d_s$ в окрестности границы определен, и его норма ограничена снизу и сверху некоторыми глобальными константами.

Метрический тензор $G(x,t)$ определяется как функция $d_s(x,t)$ таким образом, что он достигает наибольшего значения на границе области и уменьшается внутри и снаружи тела (по разным законам). Сетка внутри тела в общем случае довольно грубая, так как решение расчетного модуля с погруженной границей внутри тела не имеет физического смысла. Важно иметь высокоразрешенную сетку, покрывающую внутреннюю и внешнюю части пограничного слоя таким образом, чтобы внешняя (физически осмысленная) часть слоя и внутренняя (искусственная) часть слоя описывались близкими законами, а сгущенная сетка была бы гладкой по всему слою, что значительно повышает точность и устойчивасть реализации условий погруженной границы (IBC) (см. [16]).

Для достижения плавной градации размера сетки мы используем вспомогательное логарифмическое отображение, которое позволяет достичь почти постоянного коэффициента роста размера сетки в нормальном направлении от тела. Рассмотрим одномерное вспомогательное отображение $y(\xi) : [0,1] \to [0,1]$. Определим равномерную сетку в координатах ξ с размером ячейки $h = 1/N$, где N — число ячеек. Вершины y_i распределены в предположении постоянной скорости роста

$$y_{i+1} - y_i = (y_i - y_{i-1})(1+\varepsilon).$$

Это равенство можно рассматривать как конечно-разностную аппроксимацию уравнения

$$h\ddot{y} = \varepsilon\dot{y}.$$

Меняя местами зависимые и независимые переменные, получаем

$$-\ddot{\xi}h = \varepsilon\dot{\xi}^2.$$

Решение этого уравнения выглядит следующим образом:

$$\xi = \phi(y) = \frac{h}{\varepsilon}\ln\left[1 + \frac{A\varepsilon}{h}(y-\delta)\right] + \delta A. \tag{14}$$

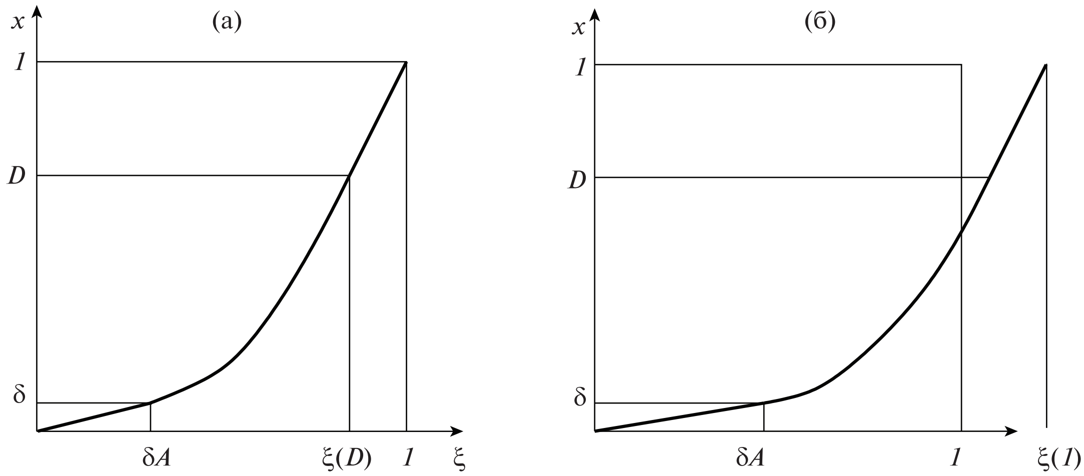
Мы разделили одномерную “вычислительную область” на три субрегиона: “граничный слой” $0 <= y <= \delta$, переходная зона $\delta \le y \le D < 1$ и внешняя зона $D \le y \le 1$. Поскольку мы применяем адаптацию сетки для лучшей реализации метода погруженных границ для движущихся тел, внутри пограничного слоя просто назначаем постоянный максимальный коэффициент сжатия сетки A. Для внешней зоны также предполагаем линейное распределение с постоянным коэффициентом сжатия $\kappa = (1-D)/(1-\phi(D)) \le 2$. Функция ϕ управляет переходом между наименьшими и наибольшими масштабами. На фиг. 1а показан общий результат (отметим, что показан транспонированный график).

Производные этого отображения определяются следующим образом:

$$\gamma(y,\delta,A) = \dot{\phi} = \frac{1}{\dfrac{1}{A} + \dfrac{\varepsilon}{h}(y-\delta)}, \quad \ddot{\phi} = -\frac{\varepsilon}{h}\frac{1}{\left[\dfrac{1}{A} + \dfrac{\varepsilon}{h}(y-\delta)\right]^2}. \tag{15}$$

Коэффициент сжатия сетки определяется функцией $\dot{\phi}$. Ее график представляет собой гиперболу.

Набор управляющих параметров δ, A, κ, h может быть противоречивым, так как при слишком больших значениях коэффициента сжатия A можно получить $\phi^{-1}(1) > 1$ или даже $\phi^{-1}(D) > 1$.



Фиг. 1. (а) – Вспомогательное одномерное отображение, определяющее растяжение. (б) – Целевой коэффициент сжатия сетки A слишком велик и должен быть уменьшен.

В этом случае мы итерационно уменьшаем значение A с $\kappa = 2$, пока не будет выполнено равенство $\phi^{-1(1)} = 1$.

Для вычисления безразмерных управляющих параметров функции ϕ мы используем радиус $R_{\max}$ зоны влияния тела, истинную толщину слоя сетки δ_R, и средний размер сетки l_R в направлении нормали к телу.

Тогда

$$h = \frac{3}{2}\frac{l_R}{R_{\max}}, \quad \delta = \max\left(\frac{\delta_R}{R_{\max}}, \frac{h}{A}\right).$$

Предположим, что тело является нулевой изоповерхностью функции расстояния со знаком $d_s(x,t)$. Вычислим функцию сжатия по нормали следующим образом:

$$\sigma_1(x,t) = \gamma(|d_s(x,t)|/R_{\max}, \delta, A_n), \tag{16}$$

где A_n – коэффициент сжатия по нормали к границе.

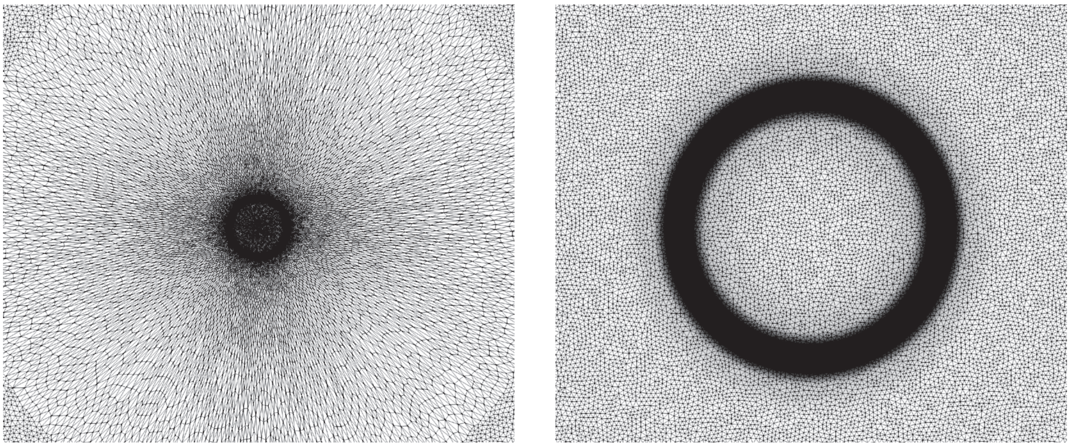
Обозначим через $u_1 = \nabla d_s/|\nabla d_s|$ единичный вектор нормали к изоповерхности функции расстояния. Мы можем получить полный ортонормированный базис $U = (u_1,\ldots,u_d)$, используя векторы $u_2,\ldots,u_d$, определяющие локальный касательный базис на изоповерхности d_s. Метрический тензор $G_x(x,t)$ определяется следующим образом:

$$G_x = U\Sigma U^T, \quad \Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_i). \tag{17}$$

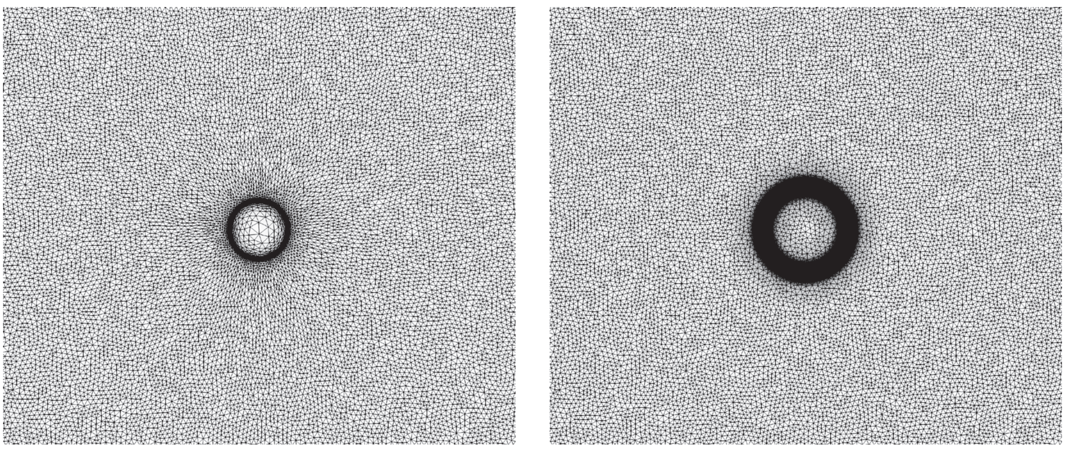
Выбор тангенциальных растяжений, а именно, растяжений в направлениях, ортогональных градиенту неявной функции, не является тривиальным. Он очень важен для того, чтобы получить деформацию сетки без скачков размера и разрывов. Здесь “разрыв” означает появление длинных и перекошенных ячеек сетки, что напоминает приближение разрыва упругого материала.

Изотропный выбор $\sigma_i = \sigma_1$ или $G_x = \sigma_1^2 I$ кажется самым простым. К сожалению, его применимость очень ограничена, поскольку прообраз пограничного слоя в начальных координатах ξ масштабируется в A_n раз, как показано на фиг. 2 для $A_n = 6$. Увеличенный прообраз может покрыть всю начальную область или даже выйти за пределы границы, значит, большинство ячеек сетки попадут в пограничный слой, делая результирующую сетку непригодной для использования. Сетка в фиг. 2 содержит 22 531 вершину и 44 610 треугольников, однако геометрическое увеличение слоя практически не зависит от сетки.

Если задать максимальное тангенциальное сжатие A_t, то линейный размер прообраза увеличится в A_t раз, а толщина слоя прообраза увеличится в A_n раз, как показано на фиг. 3 для $A_n = 6$, $A_t = 2$ и той же начальной сетки.



Фиг. 2. Изотропная метрика: внутренний слой в вычислительной области и его прообраз в параметрической области.



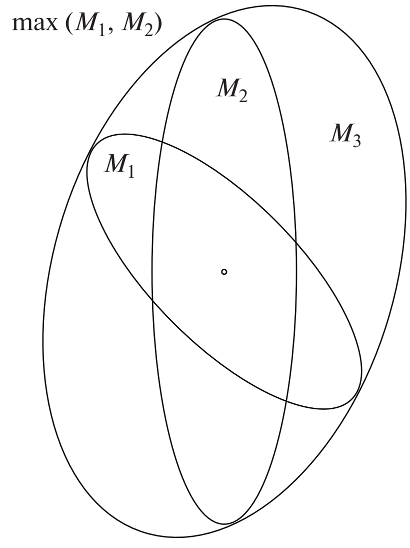
Фиг. 3. Анизотропная метрика: внутренний слой в вычислительной области и его прообраз в параметрической области.

Максимальный коэффициент анизотропии A_n/A_t задается в пограничном слое и σ_i выбираются для постепенного уменьшения анизотропии вдали от слоя. В некоторых случаях постоянный коэффициент A_t не позволяет разрешить граничные особенности, в частности, при наличии острых или сильно изогнутых фрагментов границы. Общая идея состоит в том, что когда тангенциальное разрешение недостаточно, следует использовать разумные значения тангенциальных растяжений A^*_{ti}, $i = 2,\ldots,d$, в различных направлениях в диапазоне $A_t \leq A^*_{ti} \geq A_n$.

Обозначим метрику с постоянными растяжениями в пограничном слое через G_1, а метрику около особенностей поверхности через G_2. Используем то же представление (16) и (17) для G_2, главное отличие – радиус влияния R_2, который должен быть меньше по сравнению с глобальным радиусом влияния $R_{\max}$ для G_1. Тогда окончательная метрика определяется следующим образом:

$$G_x = G_3 = \max(G_1, G_2).$$

Операция максимума основана на построении общего описанного эллипсоида и близка к предложенной в [17] (см. фиг. 4). Рассмотрим два концентрических эллипсоида M_1 и M_2, заданных квадратичными формами $x^{\mathrm{T}}G_1^{-1}x = 1$ и $x^{\mathrm{T}}G_2^{-1}x = 1$ соответственно. Общий описанный эллипсоид M_3 определяет матрицу G_3. Построить эллипсоид M_3 просто: достаточно найти аффинное отображение, которое преобразует один из эллипсоидов в сферу. В преобразованных координатах



Фиг. 4. Иллюстрация операции максимума для двух метрик.

тривиально строится описанный эллипсоид и отображается обратно в исходные координаты. Поскольку каждая из метрик определяется своим спектральным разложением, это построение сводится к ряду произведений ортогональных и диагональных матриц.

Основной недостаток этого подхода заключается в том, что он по сути является ручным: необходимо отметить определенные зоны на поверхности как особенности. Это может быть сделано относительно легко на плоскости, но очевидно невозможно в трехмерном случае. Для построения полностью автоматического алгоритма мы предлагаем новую процедуру вычисления целевых касательных растяжений. Она основана на оценке радиусов приближенных главных кривизн граничной поверхности и расстояния до медиальной оси. Напомним, что медиальная ось определяется множеством центров шаров, которые принадлежат области или ее дополнению и касаются границы области хотя бы в двух точках.

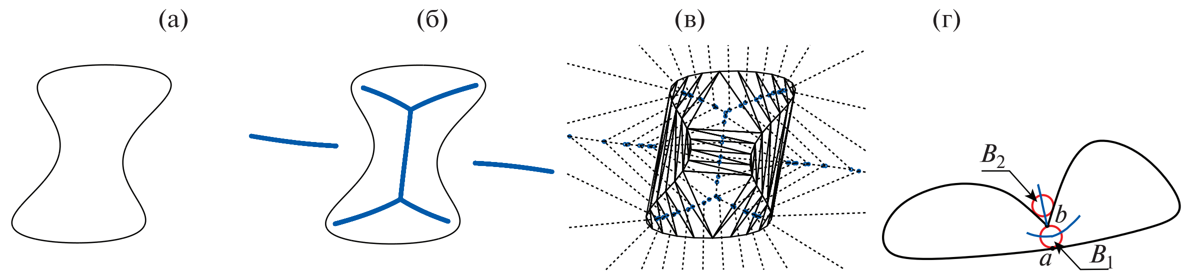
На фиг. 5 показана медиальная ось для простого гладкого контура 2г; фиг. 5в иллюстрирует идею аппроксимации медиальной оси ребрами Вороного (ребрами и гранями в 3г). Эта идея была предложена в известном алгоритме Powercrust, разработанном Н. Амента и соавт. в 2001 г. (см. [18]). Поясним, как медиальные оси сочетаются с данными о кривизне для определения анизотропной локальной функции размера на поверхности тела. Предположим, что в каждой граничной точке p нашего тела мы знаем главные кривизны и главные направления, а также расстояние до медиальной оси. Обозначим через κ_1, κ_2 главные кривизны и через u_1, u_2 ортогональные главные направления на касательной плоскости. Мы всегда предполагаем, что u_1, u_2, n — правый ортонормированный базис, где n — внешняя единичная нормаль в точке p. Обозначим через $R_1(p) = 1/|\kappa_1|$, $R_2(p) = 1/|\kappa_2|$ радиусы главных кривых в точке p, предполагая, что $R_1 \le R_2$, а $R_{ma}(p)$ обозначает минимальное расстояние от точки p до медиальной оси. Обозначим через s отношение масштабов медиальной оси и кривизны:

$$s = \min\left(1, \frac{R_{ma}}{R_1}\right).$$

Тогда локальные радиусы $r_1(p)$, $r_2(p)$ определяются следующим образом:

$$r_1 = \min(R_1, R_{ma}), \quad r_2 = \min\left(R_2, \frac{R_{ma}R_2}{R_1}\right).$$

Эта формула означает, что локальный соприкасающийся параболоид касания масштабируется на коэффициент s, чтобы учесть локальный размер объекта, сохраняя при этом локальную анизотропию кривизны поверхности. В случае, когда тело задается поверхностной триангуляцией, фиг. 5г дает простую иллюстрацию к этому анализу: очевидно, что в точке a радиус касающейся медиальной окружности B_1 меньше радиуса кривизны, а в точке b кривизна бесконечна и ради-



Фиг. 5. Концепция медиальной оси на плоскости: (а) — контур тела, (б) — медиальная ось, (в) — аппроксимация медиальной оси ребрами Вороного, (г) — выбор локального касательного размера на границе тела.

усы последовательности внешних окружностей сходятся к нулю, поэтому оба радиуса равны нулю и отношение s неопределенно. Однако, рассматривая левый и правый предел вблизи острых вершин, можно получить непрерывные функции $r_1(p)$, $r_2(p)$, которые могут достигать нулевых значений на острых линиях и конических вершинах и унаследовать достаточно плавное поведение распределения радиусов медиальной оси вблизи особенностей. Или еще проще, можно ограничить R_1, R_2 снизу небольшой константой, тогда при $R_{ma} \to 0$ выражения для r_1, r_2 хорошо определены.

Покажем, как локальные радиусы $r_{1,2}$ переходят в касательные растяжения $\sigma_{2,3}$ в произвольной точке x расчетной области. Для вычисления целевых касательных растяжений на поверхности тела используется простая идея: каждый радиус задает умозрительную окружность в плоскости, заданной нормалью поверхности и одним из векторов касательного базиса. Эта окружность должна быть образом окружности в параметрической области, на окружности которой мы помещаем $m \geq 12$ шагов параметрической сетки. Отношение радиуса параметрической окружности и вычисленного локального радиуса определяет локальное тангенциальное растяжение вдоль базисного вектора. Это растяжение усекается сверху заданным значением нормального растяжения. Таким образом, делается умозрительная попытка отобразить, по крайней мере локально, границу тела сложной формы на шар в параметрической области.

Переведем приведенные выше аргументы в алгоритм. Предположим, что масштабированная функция расстояния со знаком

$$y = |d_s(x,t)|/R_{\max}$$

и координата $b(x)$ ближайшей точки на границе известны. Присваиваем касательные базисные векторы $u_1(b)$, $u_2(b)$ точке x. Нормальное растяжение $\sigma_1(x)$ вычисляется с помощью (16). Для вычисления $\sigma_{2,3}(x)$ для дополнения тела мы предлагаем следующую эвристику. Определим вспомогательную функцию

$$\psi(r, y) = \frac{r_r/R_{\max} + \phi(y)}{r/R_{\max} + y}.$$

Здесь r — эффективный радиус в вычислительной области, а $r_r \geq mh$ — целевой радиус в параметрических координатах.

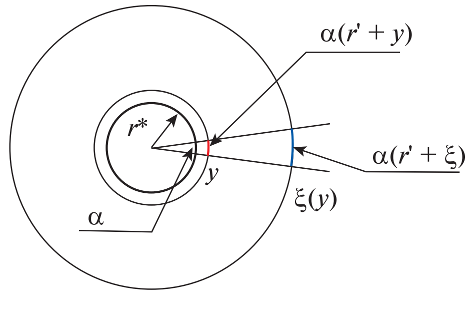
Окончательные формулы выглядят следующим образом:

$$\sigma_2(x) = \min(\sigma_1(b), \tilde{\sigma}_2(x)), \quad \tilde{\sigma}_2(x) = \psi(r_1, y), \tag{18}$$

$$\sigma_3(x) = \min(\sigma_1(b), \tilde{\sigma}_3(x)), \quad \tilde{\sigma}_3(x) = \psi(r_2, y), \tag{19}$$

где одномерный закон растяжения $\phi(y)$ определен в (14). Геометрический смысл этого закона объясняется на фиг. 6.

Рассмотрим одномерное растяжение (14) вдоль радиальных направлений для полярных координат вокруг окружности радиусом $r^* = r/R_{\max}$. Предполагаем, что $y = 0$ на границе окружности. Тогда длина внешней границы сектора с углом α равна $\alpha(r^* + y)$, а после растяжения длина его изображения равна $\alpha(r' + \xi)$, $\xi = \phi(y)$, $r' = r_r/R_{\max}$. Отношение длин определяет целевое ка-



Фиг. 6. Геометрический смысл распределения касательных растяжений.

сательное растяжение. Для упрощения постановки задачи используем независимое построение касательных для ортогональных направлений, подставляя вместо r^* значения $r_{1,2}/R_{\max}$.

Как следует из (18) и (19), касательные растяжения во всей области не могут превышать нормальное растяжение на границе, значит, генерируемая анизотропная метрика ограничена сверху изотропной адаптивной метрикой. В переходной зоне мы добавляем дополнительное ограничение

$$\sigma_1(x) = \max(\sigma_1(x), \sigma_2(x), \sigma_3(x)).$$

Это равенство означает, что нас не интересуют ячейки сетки, которые анизотропны в тангенциальном направлении.

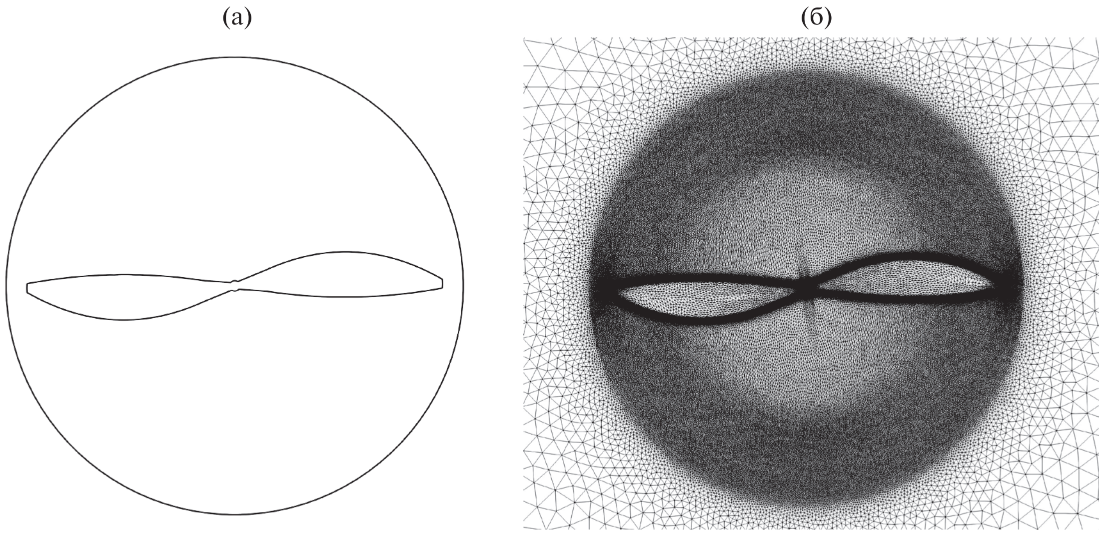
Формально те же законы (18) и (19) используются внутри тела. Мы обнаружили, что потенциально это может привести к появлению довольно крупных ячеек внутри тела, что не является критическим недостатком алгоритма деформации сетки, так как IBC-решатель (см. [16]) предположительно слабо чувствителен к размеру искусственных ячеек внутри тела. Важно гарантировать симметрию и плавный переход размеров внутри пограничного слоя сетки.

5. ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ НА ОСНОВЕ MPI

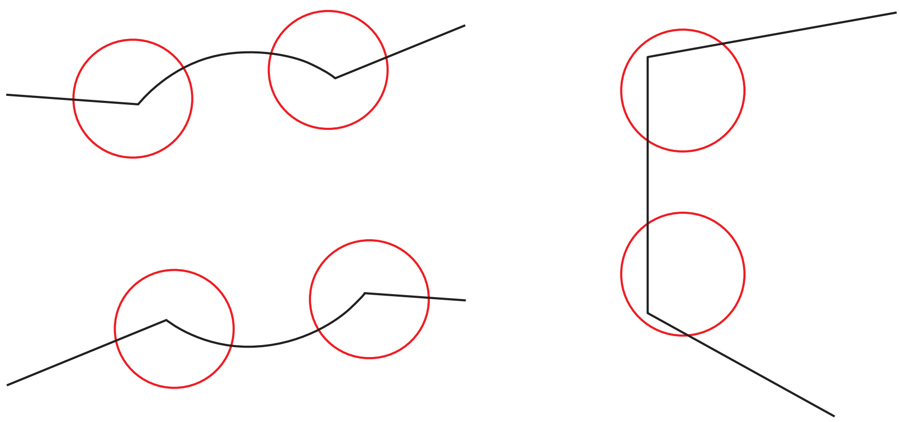
Для построения параллельного алгоритма мы используем пространственную декомпозицию сетки. Поскольку степенями свободы, определяющими деформацию сетки, являются вершины сетки, мы строим последовательное разделение ячеек и вершин сетки: параметрическая область $\Omega_x i$ разбивается на связные подобласти, состоящие из целых ячеек сетки. Вершины сетки, принадлежащие границам между подобластями, распределяются между подобластями. Для вычисления направления минимизации используем параллельный итерационный решатель на основе ILU2 (см. [13], [14]). Входными данными решателя являются правая часть (разбитая на блоки) и разреженная матрица (разбитая на блочные строки). Каждый блок в точности соответствует разбиению вершин сетки. Наша реализация итерационной схемы основана на расширенных подобластях, определяющих двухклеточное перекрытие подобластей. В начале каждой итерации минимизации (7) мы используем обмен данными для сборки текущей итерации в каждой из расширенных подобластей. Такое расширение делает сборку функционала, его градиента, матрицы Гессе полностью локальными операциями. Дополнительный обмен данными для нахождения оптимального значения τ путем приближенного решения задачи одномерной минимизации (8) не требуется, нужно лишь вычислить глобальные суммы. Все операции алгоритма построения сетки полностью масштабируемы. Следовательно, можно ожидать, что общая масштабируемость определяется масштабируемостью параллельного линейного решателя. Заметим, что линейный решатель использует собственные перекрытия и схему обмена данными (см. [14]).

6. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Алгоритм управляемой деформации применен для геометрической адаптации расчетной сетки с целью улучшения разрешения расчетного кода NOISETTE (см. [16]) в задаче для численного моделирования турбулентного течения вокруг винта квадрокоптера. Мы тестируем численную технологию в двух измерениях, используя двумерную проекцию реалистичной геометрии пропеллера (см. [19]) с основной целью применить ее в дальнейшем для моделирования реального трехмерного пропеллера. На данном этапе проводятся несколько упрощенные трехмерные те-



Фиг. 7. Двухмерная модель пропеллера (а) и начальная адаптированная сетка (б).



Фиг. 8. Круги – это зоны влияния изотропной метрики вблизи острых углов.

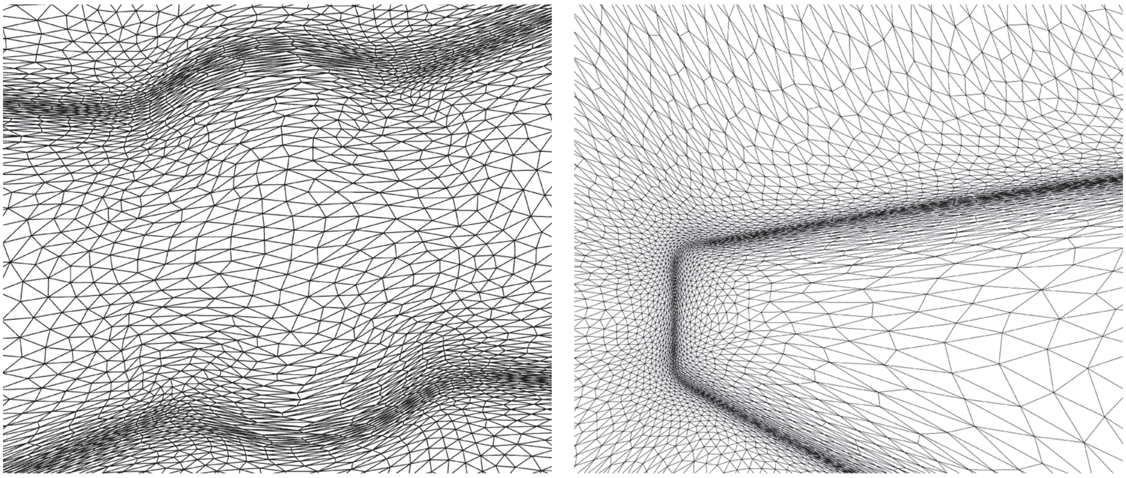
сты, чтобы проверить начальную геометрическую адаптацию, сравнить вычисленное положение слоя сетки с целевым положением движения, а также проверить эффективность и масштабируемость трехмерного алгоритма. На фиг. 7а показана геометрия пропеллера. Из-за естественных геометрических ограничений сетка деформируется только внутри круга, который на 10% больше самого пропеллера, значит, адаптация сетки вблизи кончика лопасти становится нетривиальной задачей. Пропеллер определяется приближенной функцией расстояния со знаком. Мы вводим коэффициент сжатия 30 в нормальном направлении внутри тонкого слоя вблизи лопастей. Чтобы инициировать деформацию, зависящую от времени, мы стартуем с начальной стационарной адаптации сетки (фиг. 7б).

Для того чтобы разрешить углы и сильно изогнутый фрагмент границы, мы вводим локально изотропные зоны влияния метрики, показанные кругами на фиг. 8. Изотропная метрика определяется по тому же закону (16), где считается расстояние до центра окружности, а $R_{\max}$ – радиус окружности. Коэффициент A_n такой же, как для глобальной метрики и $\sigma_2 = \sigma_1$. Для вычисления G_x применяется операция максимума для метрики.

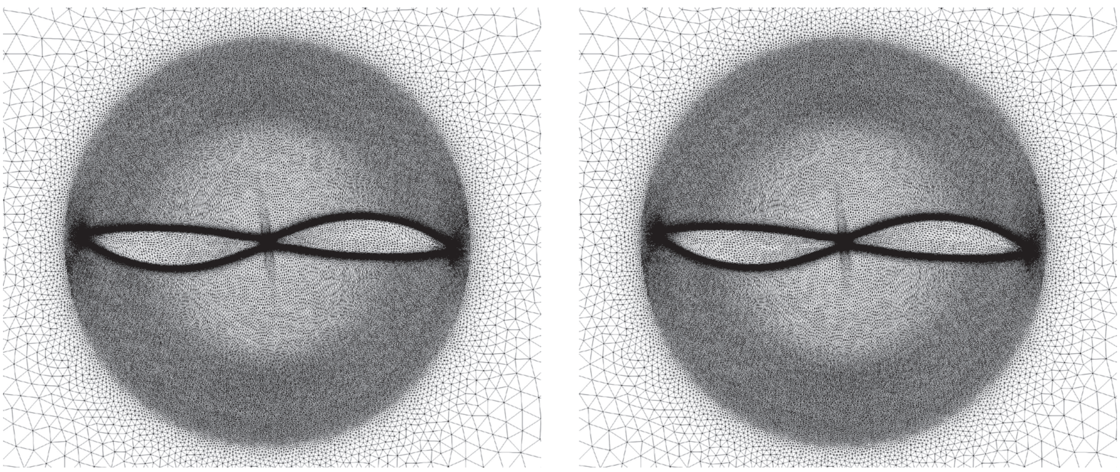
На фиг. 9 показаны фрагменты начальной сетки вблизи зон влияния изотропной метрики.

На фиг. 10 показан общий контур сетки после первого и второго оборотов винта.

На фиг. 11 и 12 показаны фрагменты сетки после первого и второго оборотов.



Фиг. 9. Фрагменты исходной адаптированной сетки вблизи острых углов.



Фиг. 10. Сетка после первого и второго вращений.

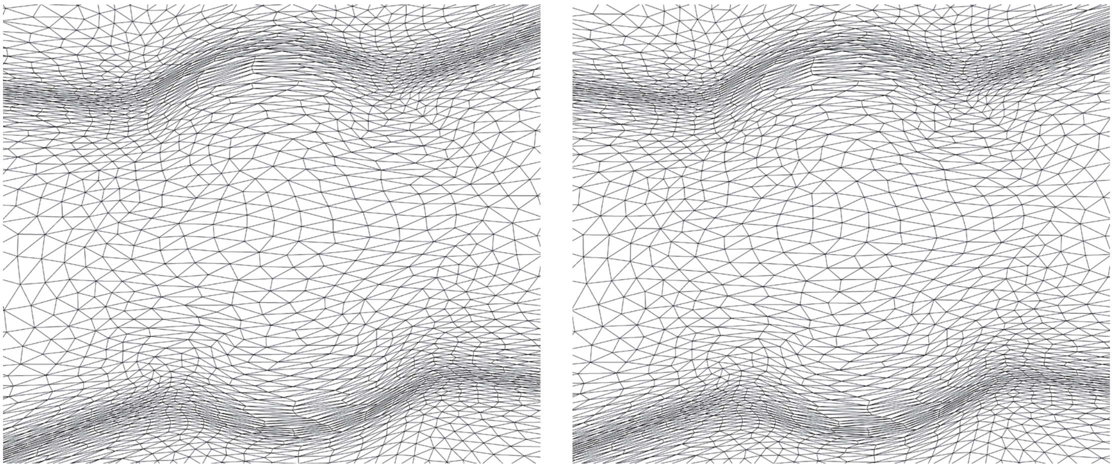
Вычисление долговременной деформации сетки демонстрирует поведение, близкое к периодическому. На фиг. 13 показаны траектории выбранных ячеек в переменных x_1, x_2 и t. Мы выбираем несколько треугольников, сохраняем их координаты каждые 500 шагов по времени и соединяем последовательные позиции, создавая пространственно-временные призмы. Получающиеся “жгуты” треугольного сечения иллюстрируют пространственно-временную деформацию сетки.

На фиг. 14 показана деформация подобластей сетки, когда винт перемещается на четверть оборота.

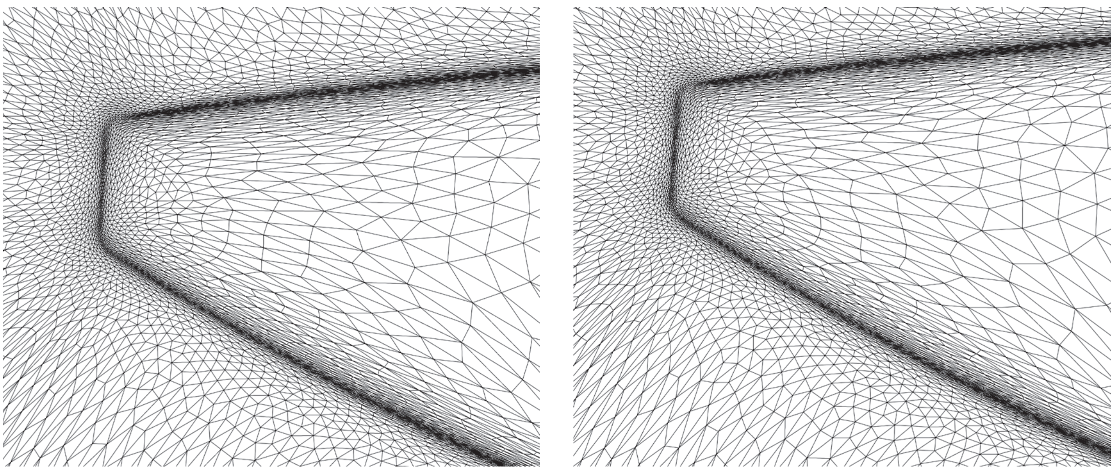
Отметим, что при расчете используется декомпозиция области на основе вершин, поэтому вершины сетки, лежащие на границах цветных областей, фактически отнесены к той или иной подобласти.

На фиг. 15 показаны деформация сетки и перемещение границ подобластей в системе координат, связанной с пропеллером. Количество подобластей больше, чем в фиг. 14. Выделенные слои шириной в одну ячейку показывают треугольники с вершинами, принадлежащими разным подобластям.

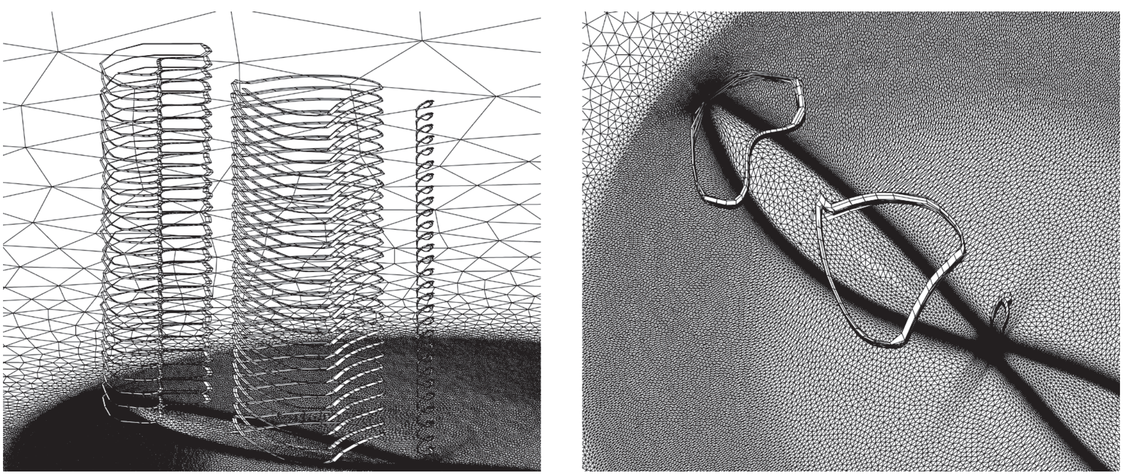
На фиг. 16 показано распределение целевого значения σ_1 во вращающейся системе координат для двух различных временных уровней. Красным цветом обозначено максимальное значение. Можно заметить, что положение слоя сетки довольно точно следует за управлением. Интересный эффект связан с группами ячеек сетки, которые притягиваются к лопасти, затем некоторое



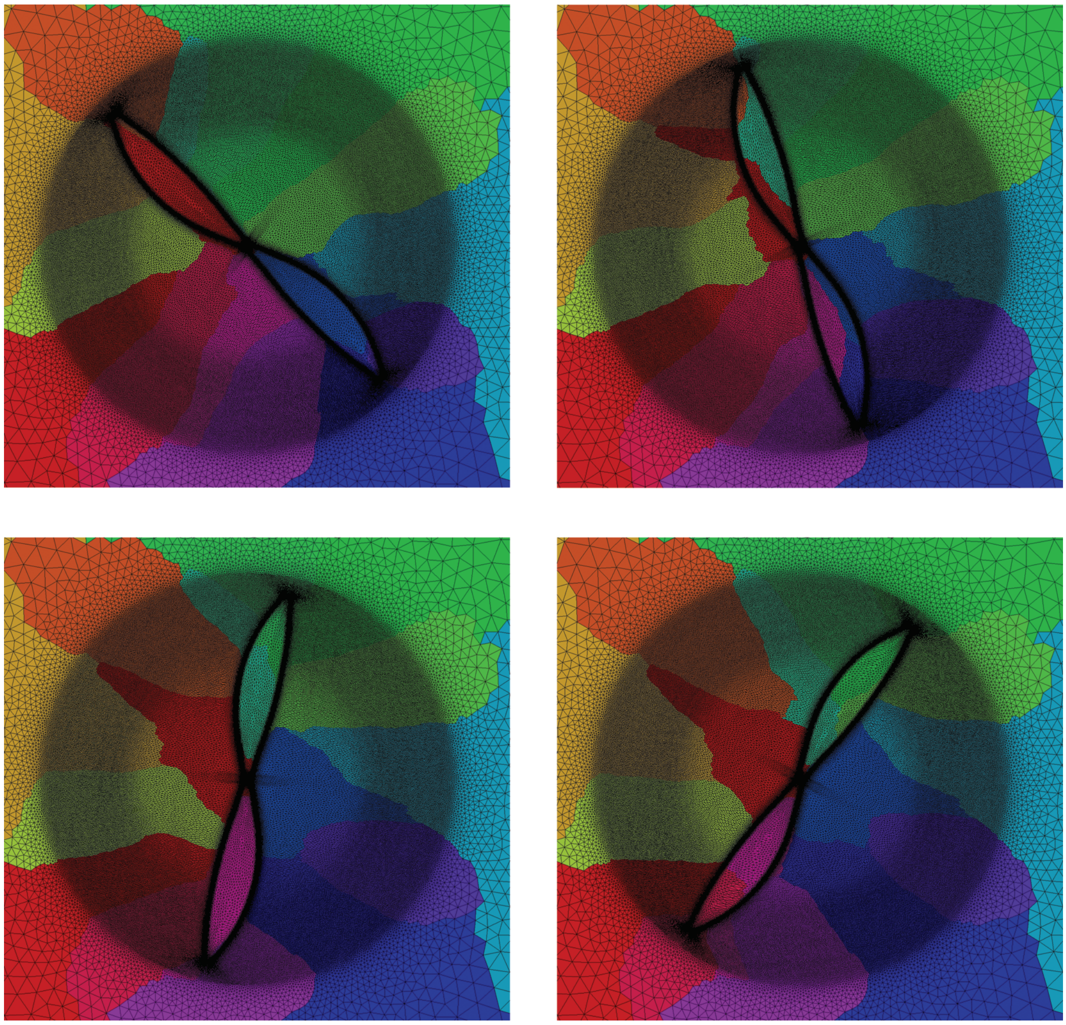
Фиг. 11. Фрагмент сетки после первого и второго оборотов.



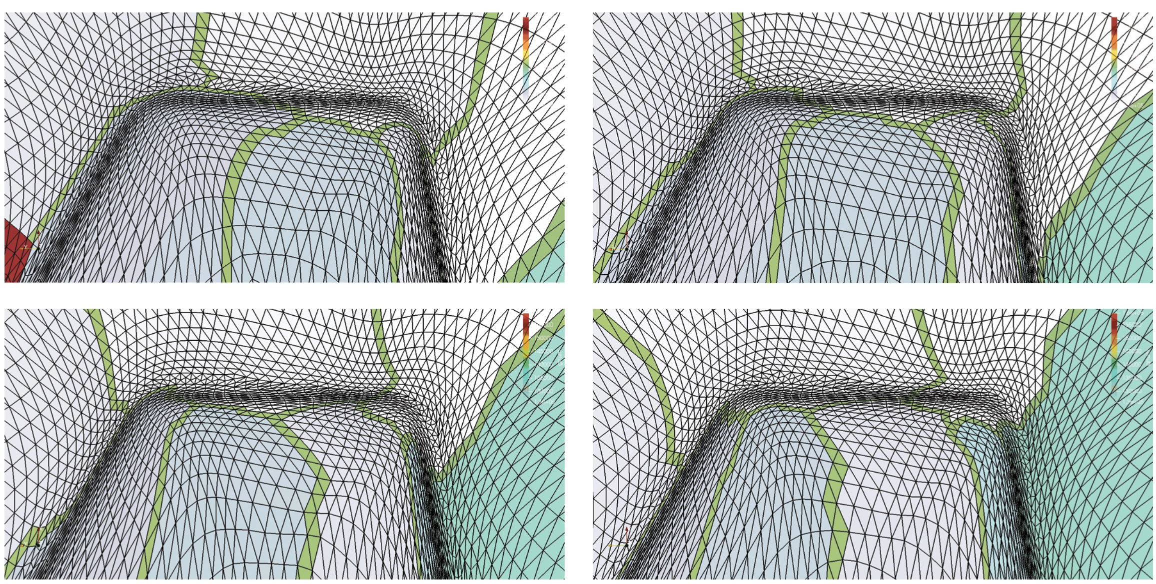
Фиг. 12. Фрагмент сетки после первого и второго оборотов.



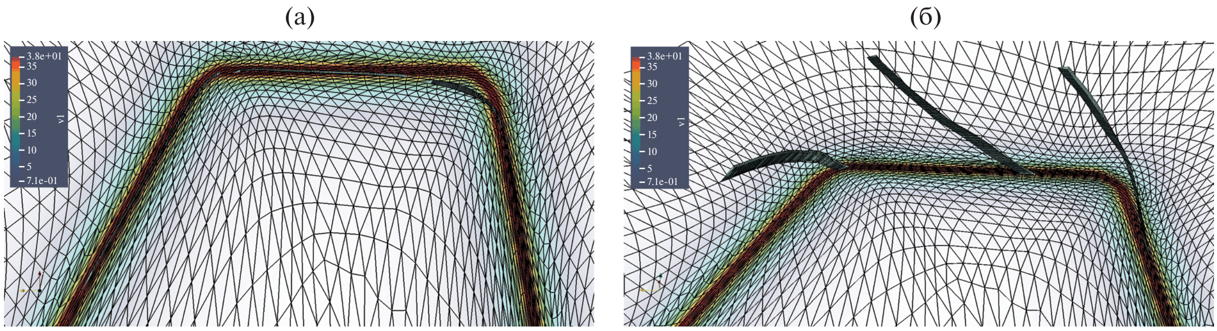
Фиг. 13. Пространственно-временные траектории трех выбранных треугольников для 14 оборотов винта, показанные с разных ракурсов.



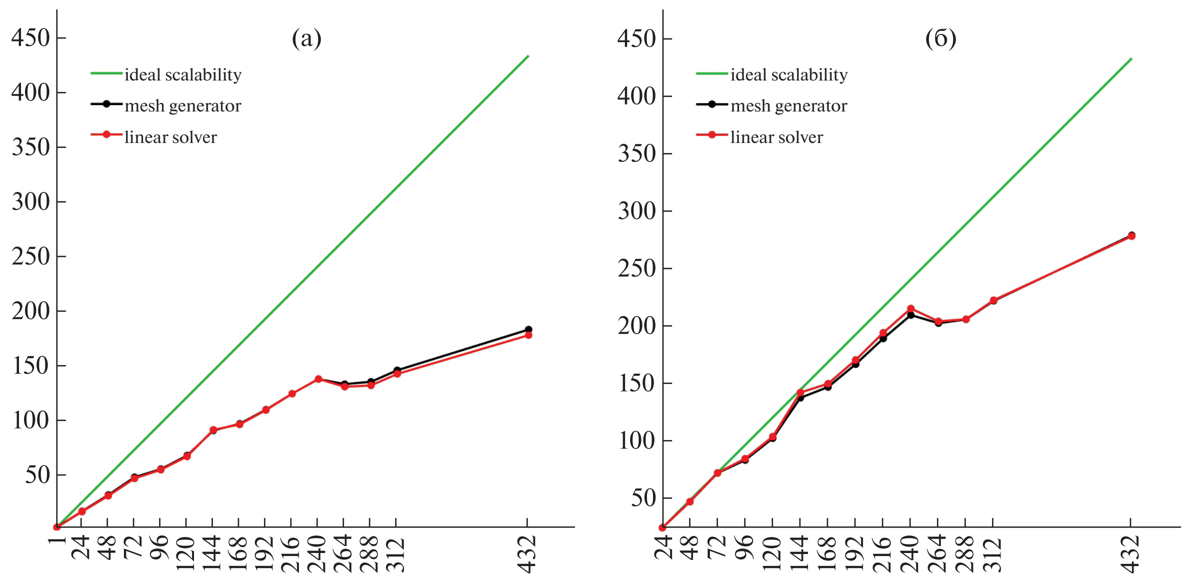
Фиг. 14. Деформация подобластей для четверти оборота, подобласти отмечены разными цветами.



Фиг. 15. Деформация сетки и перемещение границ подобластей во вращающейся системе координат.



Фиг. 16. Локализация слоя сетки в сравнении с управлением σ_1 (а) и траектории ячеек во вращающейся системе координат (б).

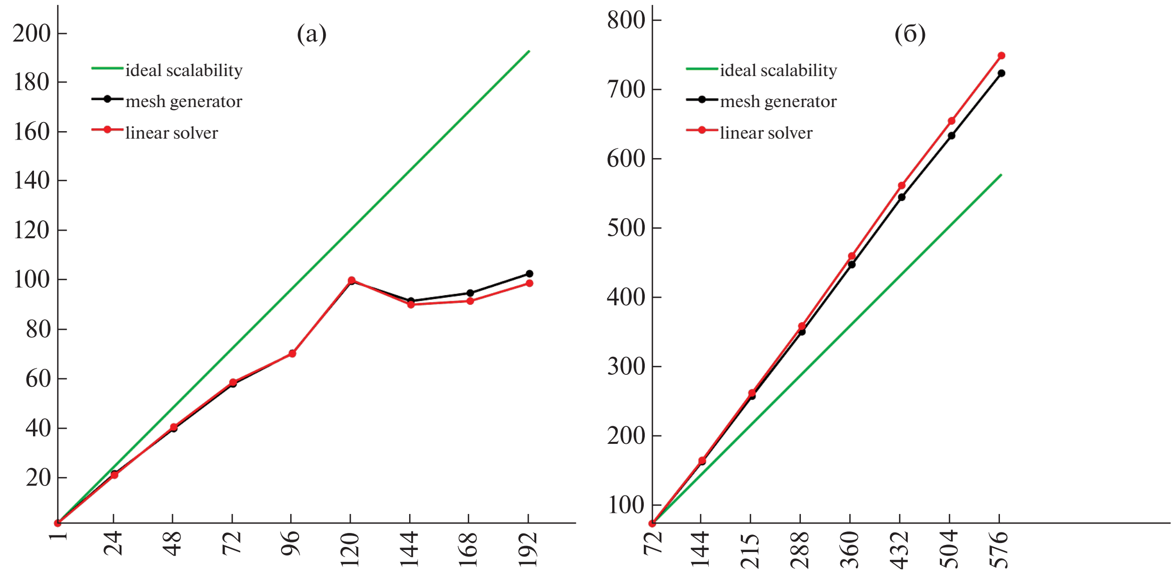


Фиг. 17. Зависимость ускорения от количества вычислительных ядер для двумерной задачи умеренного размера: (а) – ускорение по отношению к одному ядру, (б) – ускорение по отношению к 24 ядрам.

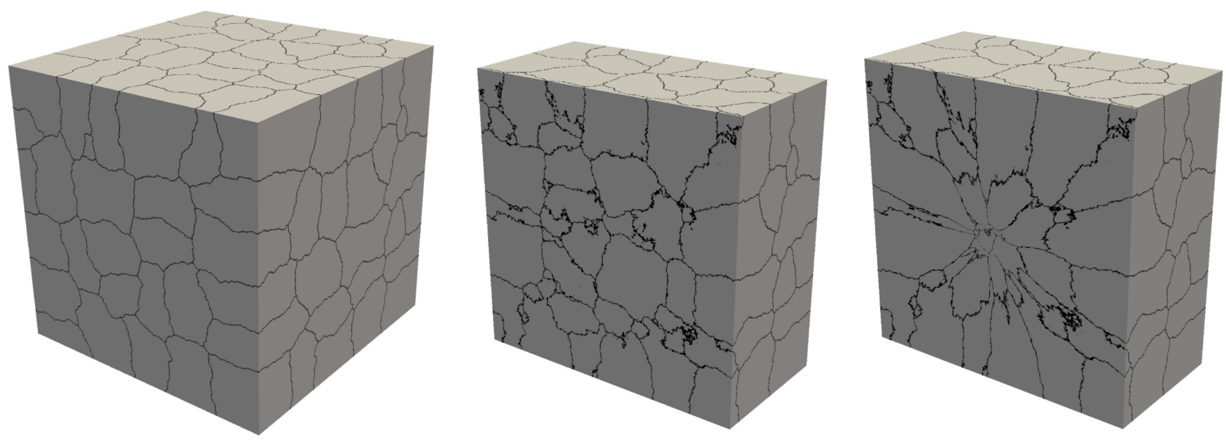
время перемещаются по пограничному слою в сжатом состоянии и, в конце концов, покидают пропеллер. Другая группа ячеек в середине области притягивается к лопастям, пересекает их и выходит с другой стороны. Фигура 16б слегка наклонена в координатах x_1, x_2 и t, чтобы сделать траектории ячеек более заметными.

Чтобы оценить масштабируемость параллельной реализации, мы запустили несколько двух- и трехмерных тестовых примеров. В двухмерном примере мы рассматриваем “маленькую” задачу с 357 781 вершинами и 713 760 треугольниками и “умеренную” задачу с 1 429 321 вершинами и 2 855 040 треугольниками. В трехмерном случае мы рассматриваем деформацию тетраэдральной сетки с 9 586 347 вершинами и 56 715 408 тетраэдрами.

Эксперименты по масштабируемости проводились на параллельном кластере Московского физико-технического института. Это кластер на базе процессоров Intel с 24 ядрами на плату и сетью Infiniband. Фигура 17 иллюстрирует масштабируемость алгоритма деформации сетки. Отдельный график посвящен линейному решателю. Как и следовало ожидать, общая масштабируемость определяется линейным решателем. Обратите внимание, что масштабируемость по отношению к одному ядру не впечатляет, в то время как результаты очень хорошо масштабируются, если стартовать с 24 ядер. Мы не смогли объяснить это наблюдение. Это может быть недостатком алгоритма или артефактом неправильной конфигурации программного/аппаратного обеспечения кластера.



Фиг. 18. Зависимость скорости от количества вычислительных ядер: (а) – небольшая двумерная задача, (б) – трехмерная задача.



Фиг. 19. Подобласти для исходной равномерной сетки и для нестационарной деформированной сетки.

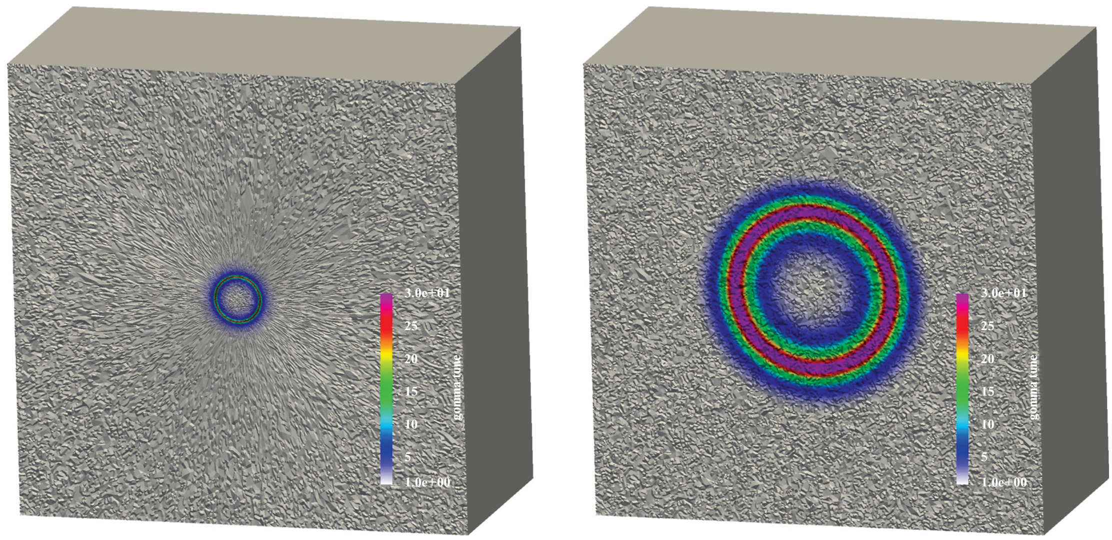
На фиг. 18а показано ускорение для небольшой двумерной задачи, где насыщение достаточно выражено для более чем 120 ядер, в то время как для трехмерного случая на фиг. 18б масштабируемость вполне разумна и насыщение не наблюдается до 600 ядер. Отметим, что наблюдается суперускорение, которое можно объяснить более низкой производительностью трехмерного кода при малом количестве ядер и большом размере локальной сетки на ядро. Мы планируем запустить трехмерный алгоритм на более крупных конфигурациях.

Фигура 19 иллюстрирует подобласти для трехмерной задачи в случае 144 ядер. Показаны след подобластей на границе, сечение исходной равномерной сетки и сечение сетки, адаптированной к движущейся сфере.

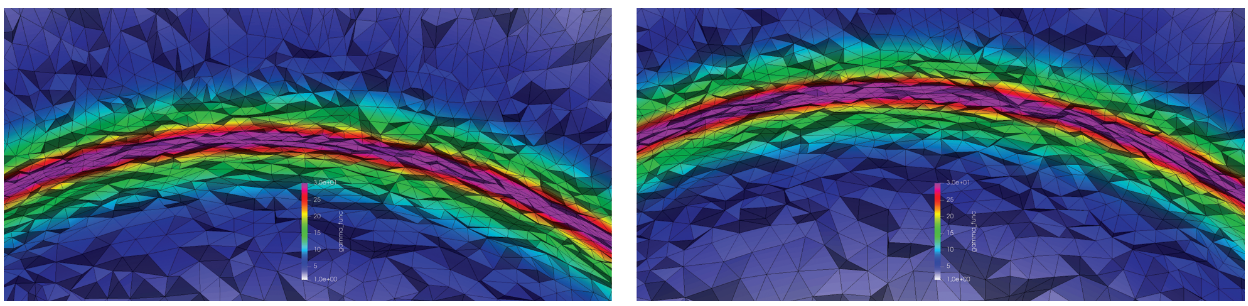
На фиг. 20а показаны исходная адаптированная сетка и целевое распределение σ_1; фиг. 20б – прообраз сжатого пограничного слоя на исходной равномерной трехмерной сетке. В данном примере в пограничном слое задано $\sigma_1 = 30$ и $\sigma_{2,3} \approx 3$.

На фиг. 21 показаны фрагменты сетки с двумя положениями вычисленного слоя сетки в процессе движения сферы.

(а) (б)



Фиг. 20. Распределение коэффициента сжатия сетки в нормальном направлении (а) и его прообраз на исходной сетке (б).



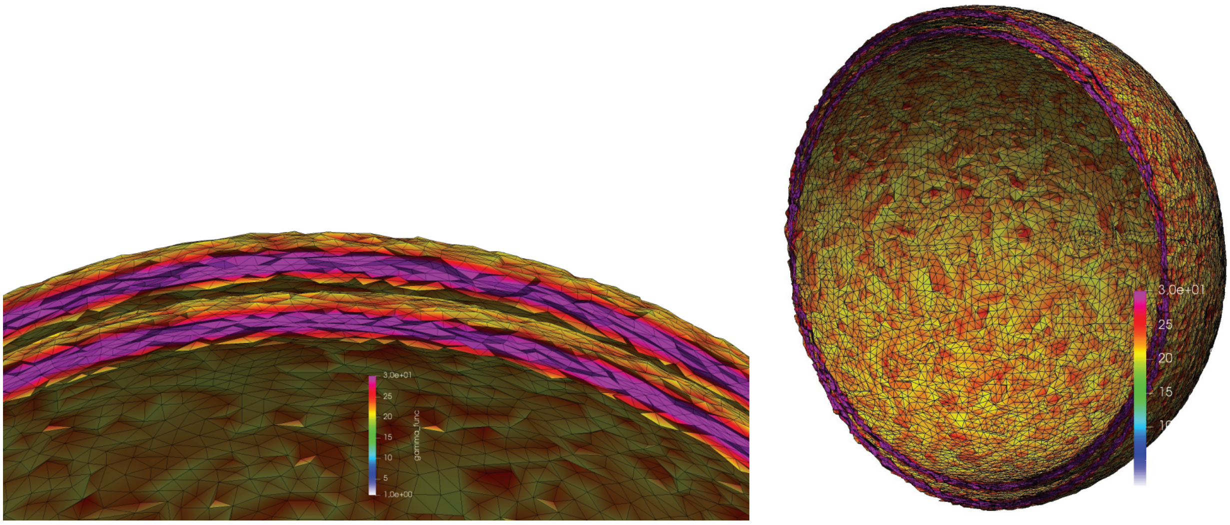
Фиг. 21. Два положения подвижного слоя с наложенным распределением коэффициента сжатия сетки.

На фиг. 22 показаны два положения слоя сетки, выделенного из глобальных сеток с использованием порога 20 для целевого распределения σ_1.

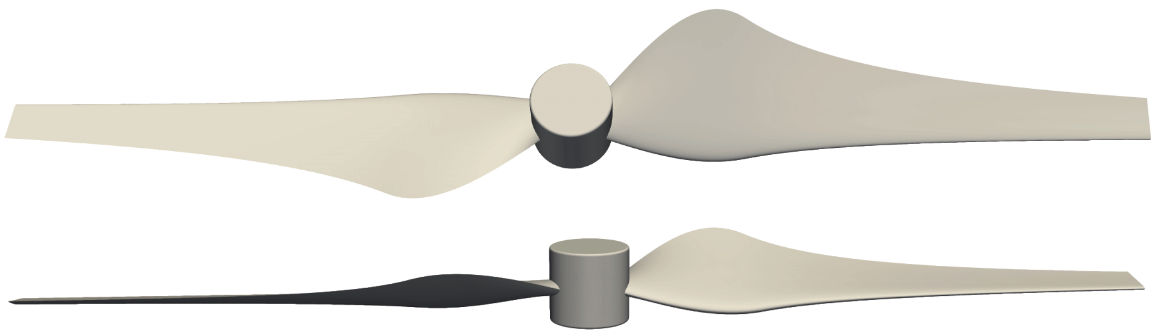
В следующей задаче мы тестируем полностью автоматическую технологию адаптации трехмерной сетки для реалистичной модели ротора (см. [20]). Из-за сложности задачи мы показываем результаты только для стационарной сетки. Технологическую цепочку можно кратко описать так: строится треугольная поверхностная сетка с использованием САПР модели ротора, которая показана на фиг. 23.

Затем вычисляем приблизительную кривизну поверхности, используя алгоритм нелинейной параболической подгонки из [21], [22] и строим медиальные оси с помощью алгоритма PowerCrust, используя реализацию из [18]. На фиг. 24 показаны распределение наибольшей главной кривизны по триангулированной поверхности и расстояние до медиальной оси на поверхности ротора. На фиг. 25 показаны фрагменты зашумленных медиальных осей для модели ротора.

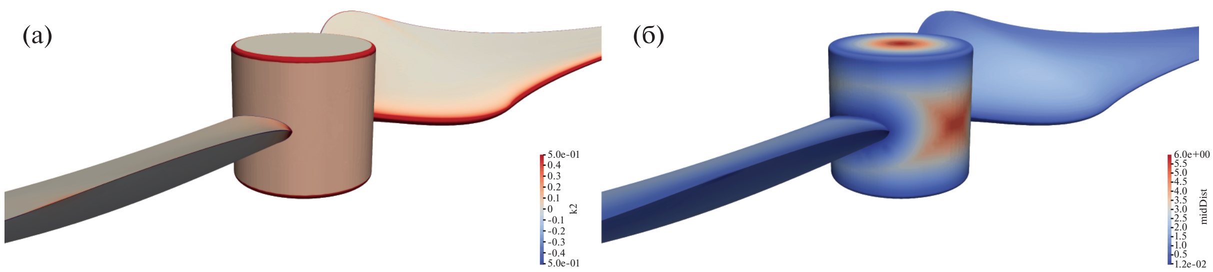
Адаптивная фоновая восьмеричная сетка строится по алгоритму, описанному в [23]. На этой сетке в вершинах кубических восьмеричных ячеек хранятся значения функции расстояния со знаком от поверхности ротора (фиг. 26). Для вычисления функции расстояния в произвольных точках используется трилинейная интерполяция. Этот простой алгоритм приводит к иззубренным изоповерхностям приближенной функции расстояния вблизи резких особенностей и сильно искривленных фрагментов поверхности, поэтому в узком слое около границы тела вычисляется точное расстояние до поверхностной триагуляции. Важно, что алгоритм вычисления расстояния выдает также положение ближайшей точки на поверхности.



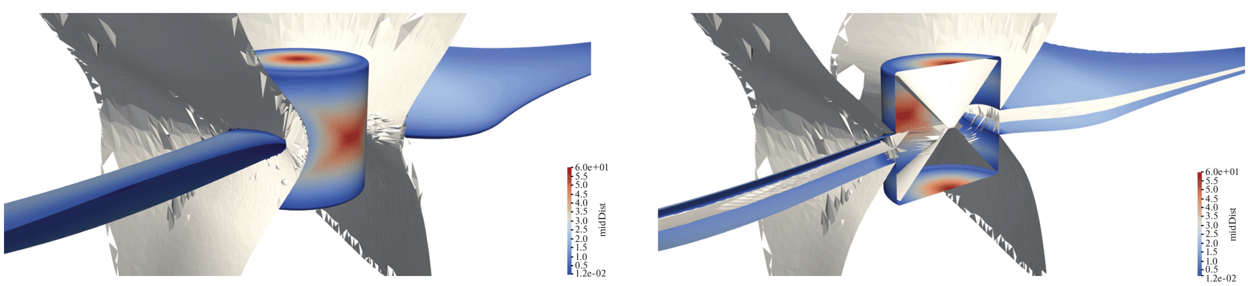
Фиг. 22. Два положения сжатого слоя, извлеченные с использованием порога 20 для коэффициента сжатия по нормали.



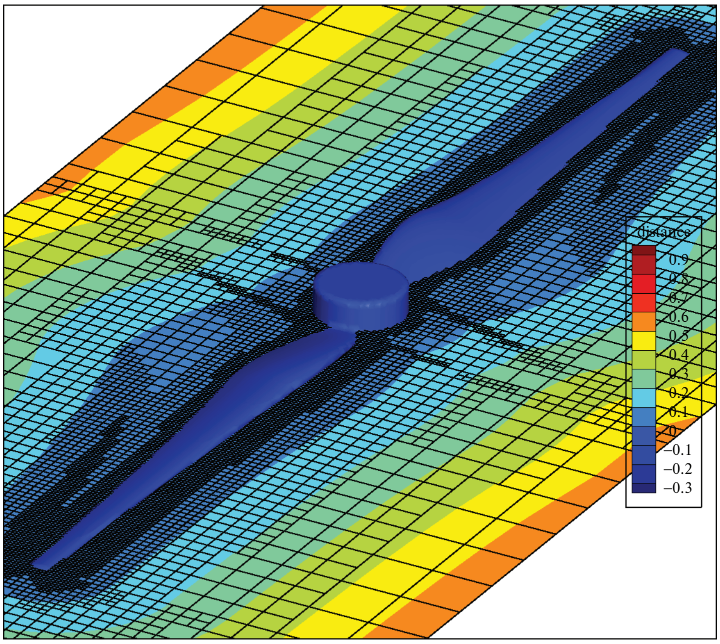
Фиг. 23. Геометрия ротора.



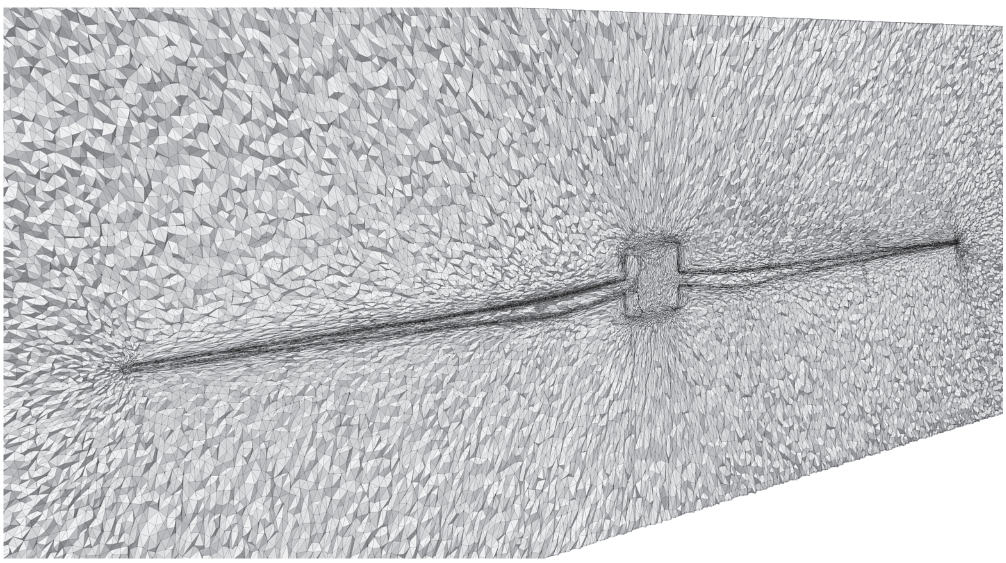
Фиг. 24. (а) – Распределение наибольшей главной кривизны на поверхности, (б) – расстояние от поверхности до медиальной оси.



Фиг. 25. Фрагменты зашумленных медиальных осей для модели ротора.



Фиг. 26. Функция расстояния со знаком для модели ротора, заданная на восьмеричной сетке.

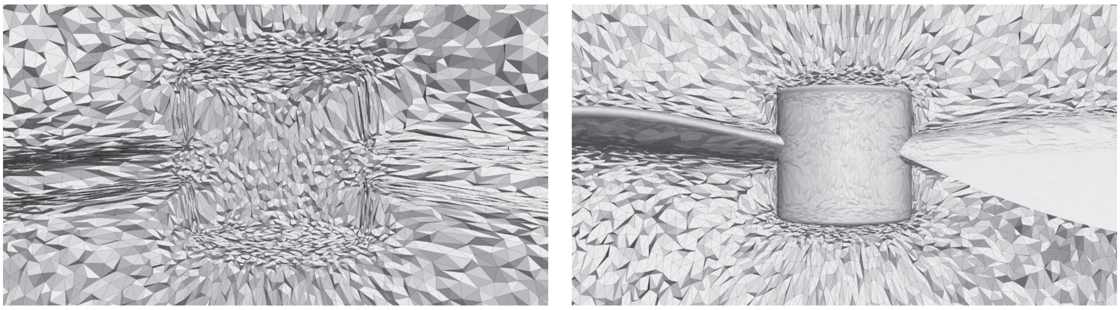


Фиг. 27. Поперечное сечение адаптивной сетки вокруг ротора.

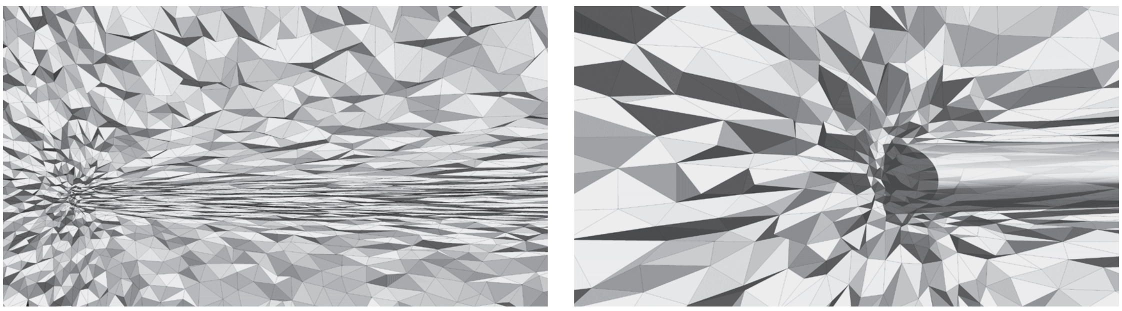
Анизотропная управляющая метрика строится путем комбинирования предписанного закона растяжения вблизи границы, приближенной кривизны поверхности и данных о медиальных осях, и в итоге вычисляется деформация сетки. Нормальный коэффициент сжатия вблизи поверхности в этом тесте равен $\sigma_1 = 10$. На фиг. 27 показано поперечное сечение деформированной сетки.

На фиг. 28 и 29 показаны увеличенные фрагменты адаптированной сетки около втулки и около законцовки лопасти.

Заметим, что касательные растяжения автоматически регулируются для разрешения линий негладкости и зон высокой кривизны на границе ротора. Реальный численный коэффициент нормального сжатия довольно близок к контрольному. Несмотря на то что медиальные оси яв-

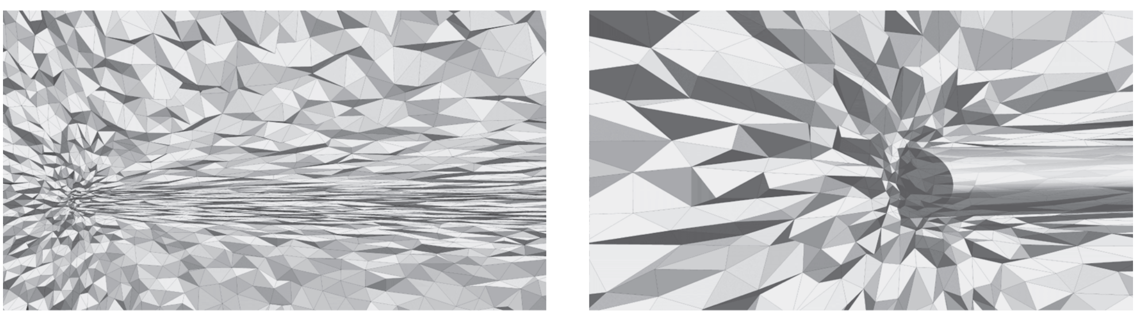


Фиг. 28. Фрагмент адаптивной сетки около втулки.



Фиг. 29. Фрагмент адаптивной сетки вблизи законцовки лопасти ротора.

(а) (б)



Фиг. 30. (а) – Призматическая сетка, охватывающая поверхность ротора внутри и снаружи расчетной области, (б) – адаптивная сетка.

ляются весьма зашумленными, они позволяют извлечь ключевую информацию о локальном размере и передать ее на поверхность модели. Геометрический шум был существенно сглажен во время этой процедуры.

7. ВЫВОДЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Мы описали алгоритм, который позволяет строить нестационарные деформации сеток высокого качества посредством приближенной минимизации квазиизометрического функционала. Представленный алгоритм все еще медленнее по сравнению с построителями сеток, основанных на линейных эллиптических уравнениях (см., например, [5]). Разница, однако, уже не имеет решающего значения, поскольку мы используем d линейных решений с линейными системами, соответствующими конечно-элементным аппроксимациям скалярных уравнений типа Лапласа на несколько шагов по времени. Известно, что алгоритмы, основанные на линейных эллиптических уравнениях, могут достичь приемлемого качества двумерной сетки за счет тщательного выбора метрического тензора/весовых функций (см. [6]), поэтому может оказаться, что преимущество представленного метода в качестве сетки не перевешивает вычислительных затрат. Однако, в отличие от линейных сеточных решателей, представленный алгоритм не накладывает никаких ограничений на размерность и форму области и тип элементов сетки. Он допускает намного более сильное сгущение сетки и может применяться для элементов высокого порядка. Благодаря усовершенствованному параллельному линейному решателю, была продемонстрирована разумная параллельная масштабируемость численного алгоритма.

Используя управляющую метрику, мы продемонстрировали способность алгоритма адаптивной деформации сетки автоматически разрешать геометрические особенности довольно сложных трехмерных тел.

Хотя данная работа не имеет прямого отношения к численному моделированию течений вязкой жидкости с использованием концепции погруженных граничных условий, необходимо четко понимать ограничения метода деформации сетки. Очевидно, что при сильном сжатии деформация сетки при фиксированной связности приведет к сильно искаженным ячейкам сетки в ключевых областях расчетной области, где форма и ориентация ячеек сетки оказывают решающее влияние на качество численных решений. Вопрос заключается в том, возможно ли сохранить преимущество параллельного численного моделирования с фиксированной связностью и совместить ее с гибкостью гибридной сетки? Отметим, что в расчетном коде Noisette (см. [16]) данные из фоновой сетки интерполируются на вершины движущейся деформирующейся сетки. Эта операция полностью локальна, так как фоновая восьмеричная сетка хранится в локальной памяти каждого MPI-процесса. Такую же идею можно использовать для призматического слоя около тела с очень малым количеством ячеек по нормали. Алгоритм, предложенный в [24], позволяет строить достаточно толстые фоновые призматические слои. На фиг. 30 показан призматический слой у поверхности ротора, который довольно толстый с геометрической точки зрения, но имеет ширину всего в одну ячейку в направлении внутрь и наружу.

Видно, что размер ячеек в движущейся деформирующейся сетке достаточен для реализации решателя типа Химера на перекрывающихся сетках (см. [25]), связывающего алгоритм IBC на движущейся сетке с призматическим слоем, который привязан к телу и достигает заданного разрешения пограничных слоев. Отметим, что толстый фоновый слой, показанный на фиг. 30, может служить носителем очень подробного расчетного призматического слоя, который может быть получен одномерным доразбиением. Поскольку различные сетки в зоне перекрытия имеют сопоставимый размер ячеек, устраняется основной недостаток метода Химеры – потеря точности на разномасштабных перекрывающихся сетках. Более того, обмен данными между подобластями на призматических слоях и подобластями на движущейся деформируемой сетке можно сделать простым и асинхронным, используя фоновую призматическую сетку в качестве отсчетного пространства, доступного всем процессам. Мы считаем такую редуцированную версию алгоритма Химера перспективным развитием предложенного алгоритма.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *de Boor C.* Good approximation by splines with variable knots II. Springer Lecture Notes Series 363, Springer-Verlag, Berlin (1973).
2. *Huang W., Ren Y., Russell R.D.* Moving mesh partial differential equations (MMPDES) based on the equidistribution principle // SIAM J. Numer. Anal. 1994. V. 31. № 3. P. 709–730.
3. *Budd C.J., Huang W., Russell R.D.* Adaptivity with moving grids // Acta Numerica. 2009. V. 18. P. 111–241.
4. *Coyle J.M., Flaherty J.E., Ludwig R.* On the stability of mesh equidistribution strategies for time-dependent partial differential equations // J. Comput. Phys. 1986. V. 62. P. 26–39.
5. *Tang H.Z., Tang T.* Adaptive mesh methods for one- and two-dimensional hyperbolic conservation laws // SIAM J. Numer. Anal. 2003. V. 41. № 2. P. 487–515.
6. *Van Dam A., Zegeling P.A.* Balanced monitoring of flow phenomena in moving mesh methods // Comm. Comput. Phys. 2010. V. 7. № 1. P. 138–170.
7. *Godunov S.K., Gordienko V.M., Chumakov G.A.* Quasi-isometric parametrization of a curvilinear quadrangle and a metric of constant curvature // Siber. Adv. Math. 1995. V. 5. № 2. P. 1–20.
8. *Garanzha V.A.* The barrier method for constructing quasi-isometric grids // Comput. Math. Math. Phys. 2000. V. 40. P. 1617–1637.
9. *Garanzha V.A., Kudryavtseva L.N., Utyzhnikov S.V.* Untangling and optimization of spatial meshes // J. Comput. Appl. Math. 2014. V. 269. P. 24–41.

10. *Garanzha V.A., Kudryavtseva L.* Moving deforming mesh generation based on the quasi-isometric functional // In: Garanzha V.A., Kamenski L., Si H. (eds) Numerical Geometry, Grid Generation and Scientific Computing. Lect. Not. Comput. Sci. Engineer. 2021. V. 143. Springer, Cham, P. 157–178.
11. *Abalakin I., Bakhvalov P., Kozubskaya T.* Edge-based reconstruction schemes for unstructured tetrahedral meshes // Inter. J. Numer. Meth. Fluid. 2016. V. 81. № 6. P. 331–356.
12. *Garanzha V.A., Kudryavtseva L.N.* Hyperelastic springback technique for construction of prismatic mesh layers // Procedia Engineer. 2017. V. 203. P. 401–413.
13. *Kaporin I.E.* High quality preconditioning of a general symmetric positive definite matrix based on its UTU4Edecomposition // Numer. Linear Algebra Appl. 1998. V. 5. № 6. P. 483–509.
14. *Kaporin I.E., Milyukova O.Yu.* MPI+OpenMP parallel implementation of explicitly preconditioned conjugate gradient method // Keldysh Inst. Preprint. 2018. V. 008. Mi ipmp2369.
15. *Ivanenko S.A.* Construction of nondegenerate grids // Comput. Math. and Math. Phys. 1988. V. 28. P. 141–146.
16. *Tsvetkova V.O., Abalakin I.V., Bobkov V.G., Zhdanova N.S., Kozubskaya T.K., Kudryavtseva L.N.* Simulation of flow near rotating propeller on adaptive unstructured meshes using immersed boundary method // Matem. Mod. 2021. V. 33. № 8. P. 59–82.
17. *Castro-Díaz M.J., Hecht F., Mohammadi B., Pironneau O.* Anisotropic unstructured mesh adaption for flow simulations // Inter. J. Numer. Meth. Fluid. 1997. V. 25. № 4. P. 475–491.
18. *Amenta N., Choi S., Kolluri R.* The power crust, unions of balls, and the medial axis transform // Comput. Geometry: Theory and Appl. 2001. V. 19. P. 127–153.
19. *Brandt J.B.* Small-scale propeller performance at low speeds. PhD Thesis. Univer. of Illinois at Urbana-Champaign, 2005.
20. *Bobkov V., Gorobets A., Kozubskaya T., Zhang X., Zhong S.* Supercomputer simulation of turbulent flow around isolated UAV rotor and associated acoustic fields // Comm. Comput. Informat. Sci., Springer Inter. Publ., 2021. P. 256–269.
21. *Petitjean S., Boyer E.* Regular and non-regular point sets: properties and reconstruction // Comput. Geometry. 2001. V. 19. P. 101–126.
22. *Garimella R., Swartz B.* Curvature estimation for unstructured triangulations of surfaces, 2015.
23. *Soukov S.A.* Combined signed distance calculation algorithm for numerical simulation of physical processes and visualization of solid bodies movement // Scientif. Visualizat. 2020. V. 12. № 5. P. 86–101.
24. *Garanzha V.A., Kudryavtseva L.N., Belokrys-Fedotov A.I.* Single and multiple springback technique for construction and control of thick prismatic mesh layers // Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. 2021. V. 36. № 1. P. 1–15.
25. *Steger J., Dougherty F.C., Benek J.A.* A chimera grid scheme // Adv. Grid Generat. 1983 V. 5. P. 59–69.

EDN: GQECVL
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1323–1340

ОПТИМАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ

УДК 519.85

УПРАВЛЕНИЕ ЧИСЛЕННОЙ ГЛАДКОСТЬЮ ФУНКЦИИ ЛОКАЛЬНОГО РАЗМЕРА ДЛЯ АДАПТАЦИИ АНИЗОТРОПНЫХ ГИБРИДНЫХ СЕТОК

Л.-М. Тенкес[1],*, Ф. Алозе[1],**

[1] 91190 Инрия Сакле, Палезо, Франция

**e-mail: lucille-marie.tenkes@inria.fr*

***e-mail: frederic.alauzet@inria.fr*

Поступила в редакцию 09.10.2021 г.
Переработанный вариант 21.01.2022 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

Адаптация сетки на основе управляющей метрики применена для построения гибридной треугольно-четырехугольной сетки. На основе метрически-ортогонального размещения вершин сетки создается предварительная квазиструктурированная сетка. Затем структурированные четырехугольные фрагменты сетки восстанавливаются в подобластях с наибольшей анизотропией метрики. Для решения этой задачи обеспечивается численная гладкость метрического поля. Это достигается с помощью процесса контроля роста локального целевого размера по всей сетке. Наименьшие значения локального размера распространяются по области с помощью алгоритма пересечения метрик. Продемонстрирована важность контроля градации размеров в процессе построения гибридной сетки на основе метрики. Основной целью является разработка процесса коррекции градаций, который благоприятствует выравниванию (сонаправленности ячеек сетки) с метрическим полем, увеличивает относительное количество и улучшает качество анизотропных четырехугольников. Сравниваются несколько стратегий управления градацией, чтобы определить, какая из них лучше всего подходит для генерации гибридных сеток. Библ. 14. Фиг. 15.

Ключевые слова: сетка с преобладанием четырехугольников, гибридная сетка, сетка со смешанными элементами, адаптация сеток, метрически-ортогональная сетка, градация метрики.

DOI: 10.31857/S0044466922080130

1. ВВЕДЕНИЕ

Адаптация сеток доказала, что может значительно улучшить численное моделирование, как с точки зрения точности, так и в плане производительности процессора. В частности, генерация на основе метрики – это математически хорошо поставленная задача, которая позволяет автоматически генерировать высокоанизотропные, адаптированные, неструктурированные сетки. Однако по-прежнему существует большая потребность в структурированных сетках, поскольку во многих численных схемах предпочтение отдается четырехугольным или шестигранным элементам, например, в пограничных слоях для моделирования вязких и турбулентных потоков. Поскольку адаптация структурированных сеток не так развита и надежна, как неструктурированных, гибридные сетки представляются подходящим альтернативным решением. Гибридная сетка – это сетка, в которой присутствуют как структурированные, так и неструктурированные области. Данное исследование сосредоточено на формировании сетки с преобладанием четырехугольников с использованием предварительной квазиструктурированной треугольной сетки. Существует несколько стратегий восстановления некоторой структуры в треугольной сетке, и это во многих случаях является предварительным шагом косвенных методов генерации четырехугольных сеток (см. [1]). Например, L^p-центроидальная тесселяция Вороного заключается в перемещении вершин сетки для структурирования ее двойственных ячеек (см. [2], [3]). Она также может быть соединена с некоторыми ограничениями, связанными с выравниванием вдоль полей направлений (см. [4]), или непосредственно применена к четырехугольной (см. [5]). Другим вариантом является ориентация на правильные треугольники при оптимизации формы элементов (см. [6], [7]). Мы решили использовать *метрически-ортогональное* размещение точек (см. [8], [9]) для обеспечения специальной структуры в наших треугольных сетках. Этот процесс сильно зависит от качества метрического поля, особенно от его гладкости. Действительно, резкое изменение размеров приводит к образованию тупых углов треугольников (см. далее фиг. 2), что без необходимости нарушает выравнивание элементов в метрически-ортогональных сетках. Эти разрывы в размерах, вероятно, будут препятствовать формированию четырехугольников.

Следовательно, актуальным является контроль градации размеров. Такая коррекция заключается в обеспечении минимального уменьшения метрики в каждой вершине, чтобы рост размера был ограничен. Это уже является важным шагом в стандартной адаптации сетки, поскольку метрические поля, восстановленные из численных решений, как правило, проявляют сильные вариации, особенно, когда речь идет об очень анизотропных эффектах. Целью данного исследования является модификация существующего метода управления градации размеров, основанного на распространении по области предписанного наименьшего размера и его коррекции с помощью алгоритма пересечения метрик (см. [10]). Сравниваются несколько алгоритмов, способствующих формированию четырехугольников и улучшению их качества.

В разд. 2 речь идет об основах генерации сеток на основе метрики, а в разд. 3 подробно описываются алгоритмы управления градацией размеров. Численные результаты и влияние метода на генерацию гибридных сеток обсуждаются в разд. 4.

2. СОЗДАНИЕ МЕТРИКИ И СЕТКИ

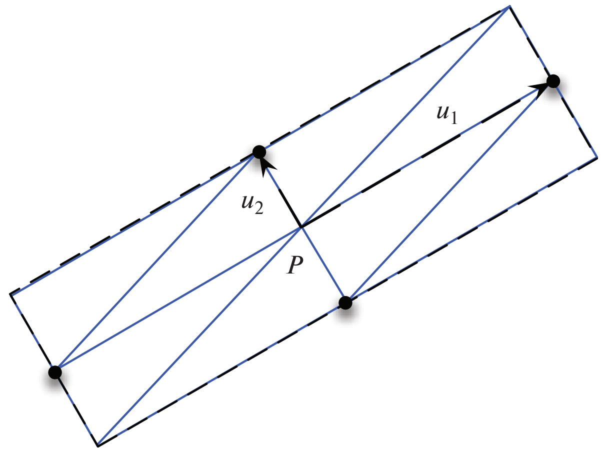
В этом разделе кратко излагаются некоторые полезные определения и свойства римановых метрических полей. Эти поля используются при построении сетки для задания функции размера в области. Более полная информация о метрических полях и понятии единичной сетки представлена в [11]–[13].

Метрический тензор в $\mathbb{R}^n$, $n \in \{2,3\}$, – это симметричный, положительно-определенный тензор размера n, позволяющий определить скалярное произведение. Обозначение $\mathcal{M}$ в данной работе чаще всего относится к метрике. Векторное пространство $(\mathbb{R}^n, \mathcal{M})$, снабженное таким скалярным произведением, называется евклидовым метрическим пространством. Частный случай $(\mathbb{R}^n, \mathcal{I})$, где $\mathcal{I}$ – единичная матрица, в дальнейшем называется *физическим пространством*. Расстояние между двумя точками $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ – это расстояние, определяемое скалярным произведением и нормой $\mathcal{M}$, определяющее также длину отрезка $\mathbf{pq}$, обозначаемого $\ell_{\mathcal{M}}(\mathbf{pq})$. Понятия углов и объемов распространяются на евклидово метрическое поле. В случае переменного метрического поля можно определить риманово метрическое пространство. Оно состоит из непрерывного многообразия Ω, снабженного непрерывным метрическим полем $\mathcal{M}(\cdot)$, обозначаемым $(\mathcal{M}(\mathbf{x}))$. В этом случае поле $(\mathcal{M}(\mathbf{x}))$ не определяет скалярное произведение, но изменяет вычисление расстояний, углов и объемов. Длина ребра $\mathbf{pq}$ вычисляется с помощью параметризации прямой линии $\gamma(t) = \mathbf{p} + t\mathbf{pq}$, $t \in [0,1]$, поэтому

$$\ell_{\mathcal{M}}(\mathbf{pq}) = \int_0^1 \|\gamma(t)\|_{\mathcal{M}}\, dt = \int_0^1 \sqrt{\mathbf{pq}^{\mathrm{T}}\, \mathcal{M}(\mathbf{p} + t\mathbf{pq})\mathbf{pq}}\, dt.$$

Исходя из этого нового вычисления длины, мы определяем единичное ребро как ребро, длина которого находится между $1/\sqrt{2}$ и $\sqrt{2}$ в данном метрическом поле. Таким образом, единичная сетка – это сетка, в которой все ребра единичны. Данная схема дает непрерывный эквивалент проблемы адаптации сетки. Вместо того, чтобы искать наилучшую дискретную сетку для данного решения, мы ищем ее непрерывный эквивалент в метрическом поле. Затем с помощью этого метрического поля создается единичная сетка. В римановом метрическом пространстве эта сетка единична, а в физическом пространстве она является адаптированной сеткой. Однако эта адаптированная сетка очень сильно зависит от качества метрического поля, поэтому необходима предварительная коррекция градаций размера.

Метрическое поле предоставляет свойственную ему информацию о направлении через собственные векторы. Метрически-ортогональный подход (см. [8], [9]) нацелен на использование этого поля направлений для генерации прямоугольных элементов. Точки вставляются итеративно, следуя методу подвижного фронта для размещения точек. Это размещение точек показано



Фиг. 1. Иллюстрация метрически-ортогонального размещения точек.

на фиг. 1. Из вершины $\mathbf{p}$ в центре четыре точки $\mathbf{p}_i^{\pm}$ могут быть созданы на основе метрики в этой вершине, используя собственные векторы $\mathbf{e}_i, i = 1, 2$, и размеры $h_i = 1/\sqrt{\lambda_i}$, где λ_i – собственные значения

$$\mathbf{p}_i^{\pm} = \mathbf{p} \pm h_i\,\mathbf{e}_i, \quad i = 1, 2.$$

Метрические-ортогональные сетки являются квазиструктурными в областях, где коэффициент анизотропии метрики достаточно высок. Прямоугольные треугольники затем объединяются в четырехугольники для получения окончательной гибридной сетки. Чтобы предотвратить образование некачественных четырехугольников, этап объединения начинается с треугольников с наибольшим соотношением сторон и останавливается при достижении заданного порога. Этот метод дает удовлетворительные результаты в областях, где метрика сильно анизотропна, однако, когда она изотропна, ориентация собственных векторов не определена, поэтому не всегда образуются прямоугольные элементы.

Процесс иллюстрируется на примере крестообразного аналитически заданного метрического поля:

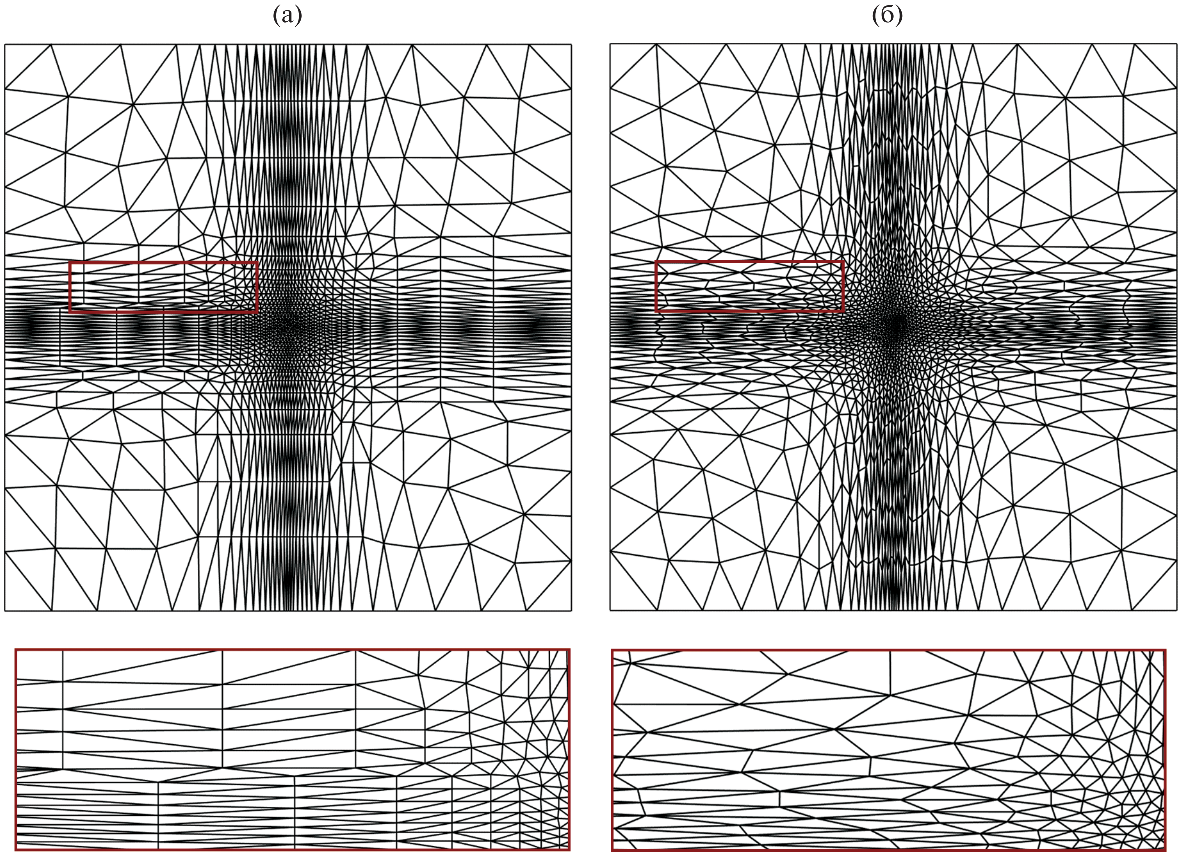
$$\mathcal{M}_{\text{cross}} = \begin{pmatrix} h_x^{-2} & 0 \\ 0 & h_y^{-2} \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad \begin{aligned} & h_x = \min(2^{\alpha_x} \times h_{\min}, h_{\max}), \\ & h_y = \min(2^{\alpha_y} \times h_{\min}, h_{\max}), \\ & h_{\min} = 0.005, \quad h_{\max} = 0.1, \\ & \alpha_x = 20 \times |x - 0.5|, \quad \alpha_y = 20 \times |y - 0.5|. \end{aligned}$$

На фиг. 2 показаны построенные сетки с метрически-ортогональным размещением точек (фиг. 2а) и со стандартной адаптацией сетки (фиг. 2б). Обе сетки являются единичными сетками в одном и том же метрическом поле, разница заключается в стратегии размещения точек. Контроль градации размеров не применялся. Следовательно, на крупном плане метрически-ортогональной сетки (фиг. 2в) можно заметить нарушение выравнивания.

3. УПРАВЛЕНИЕ ГРАДАЦИЕЙ РАЗМЕРОВ ДЛЯ АНИЗОТРОПНЫХ СЕТОК

В разд. 2 была представлена значимость управления градацией размеров для улучшения качества метрически-ортогональных сеток. В данном разделе подробно описывается основной принцип этого метода. Чтобы ввести определения и обозначения, метод сначала описывается для изотропных метрических полей, а затем распространяется на анизотропные метрические поля.

Пусть $\mathcal{M}$ – *изотропное* метрическое поле, определенное во всей области Ω. Метрическое поле можно переписать в виде $\mathcal{M} = h(\mathbf{x})^{-2} I$, $\mathbf{x} \in \Omega$, где I – единичная матрица. Пусть $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ – две точки области с соответствующими размерами h_p и h_q. Для количественной оценки изменения разме-



Фиг. 2. Адаптивные сетки с метрически-ортогональным (а) и стандартным (б) размещениями.

ров мы определяем *H-скачок* (*градацию размера*) $c(\mathbf{pq})$, связанный с отрезком $\mathbf{pq}$ из Ω как величину

$$c(\mathbf{pq}) = \max\left(\frac{h_p}{h_q}, \frac{h_q}{h_p}\right)^{1/\ell_{\mathcal{M}}(\mathbf{pq})},$$

которая представляет собой пространственную геометрическую прогрессию заданного размера в данной метрике.

Это понятие обобщает классическую геометрическую прогрессию размеров элементов: если она ограничена коэффициентом β, то следующий элемент в β раз больше предыдущего. Соответственно, если есть заданный размер h, и мы просим увеличить его со скоростью β, то на расстоянии $\ell_{\mathcal{M}}$ размер будет равен $h\beta^{\ell_{\mathcal{M}}}$. Изотропная коррекция размеров состоит в обеспечении минимального (оптимального) уменьшения $\tilde{\mathcal{M}}$ от $\mathcal{M}$ так, чтобы для всех точек градация размеров была ограничена заданным порогом β. Эта поправка упорядочивает метрическое поле и ограничивает вариации. В дальнейшем предполагается, что $h_{\mathbf{p}} < h_{\mathbf{q}}$, поэтому $\mathbf{p}$ – это вершина, которая корректирует размер в $\mathbf{q}$.

Метрическое поле известно только в вершинах сетки. Чтобы вычислить поправку численно, необходимо выбрать метод интерполяции. В зависимости от этого выбора коэффициент $r(\mathbf{pq}) = \beta^{\ell_{\mathcal{M}}(\mathbf{pq})}$ может быть вычислен непосредственно или с помощью алгоритма Ньютона. Этот аспект подробно рассмотрен в [10]. Например, используя линейную интерполяцию для h, получаем $r(\mathbf{pq}) = 1 + \ell_p(\mathbf{pq})\ln(\beta)$. Чтобы переписать вычисления в терминах метрики вместо размеров, вводится коэффициент $\eta^2(\mathbf{pq}) = r(\mathbf{pq})^{-2}$. Используя ту же интерполяцию, $\eta^2(\mathbf{pq}) =$

$= \left(1 + \ell_{\mathbf{p}}(\mathbf{pq})\ln(\beta)\right)^{-2}$. Таким образом, метрика ограничений размера от $\mathbf{p}$ до $\mathbf{q}$, обозначаемая $\tilde{\mathcal{M}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$, получается из $\mathcal{M}_{\mathbf{p}}$ как

$$\tilde{\mathcal{M}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \eta^2(\mathbf{pq})\,\mathcal{M}_{\mathbf{p}}. \tag{1}$$

Данное уравнение также подходит для формализации управления градацией размеров в двумерных и трехмерных областях, если метрическое поле изотропно, т.е. $\mathcal{M} = h(\mathbf{x})^{-2} I$. В случае сетки $\mathcal{H}$ с дискретным метрическим полем, заданным в ее вершинах, каждая вершина предоставляет метрику для всех остальных вершин, которая накладывает свои ограничения на размер во всех направлениях. Итоговая метрика в вершине $\mathbf{q}$ задается пересечением исправленных метрик, которая является наибольшей метрикой, учитывающей все ограничения:

$$\tilde{\mathcal{M}}(\mathbf{q}) = \left(\bigcap_{\mathbf{p}\in\mathcal{H}} \tilde{\mathcal{M}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})\right) \cap \mathcal{M}(\mathbf{q}).$$

Обратите внимание, что на практике пересечение метрик реализуется как последовательность попарных операций пересечения, которые реализуются посредством решения спектральной задачи для пучка матриц. В этом случае результат зависит от выбора порядка пересечения.

Чтобы избежать квадратичной сложности алгоритма, можно аппроксимировать коррекцию градации сетки алгоритмом линейной сложности, как описано в [10]. Это итерационный процесс, в котором каждая итерация представляет собой цикл коррекции краев сетки. Этот алгоритм быстрый и в большинстве случаев дает хорошие результаты, но чувствителен к топологии сетки.

Градация метрики достаточно интуитивна, когда метрическое поле изотропно. Однако анизотропия добавляет некоторые трудности, в основном, на этапе распространения метрики. Действительно, при анизотропном метрическом поле во всех направлениях действуют различные ограничения на размер, поэтому описанный ранее процесс градации не может быть продолжен простым способом. Необходимо сделать выбор, как распределить ограничения по размерам, чтобы правильно ограничить вариацию размеров. Здесь рассматриваются три стратегии (фиг. 3).

В первом подходе метрика распространяется в соответствии со скалярным коэффициентом роста, т.е.

$$\tilde{\mathcal{M}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \eta^2(\mathbf{pq})\mathcal{M}_{\mathbf{p}},$$

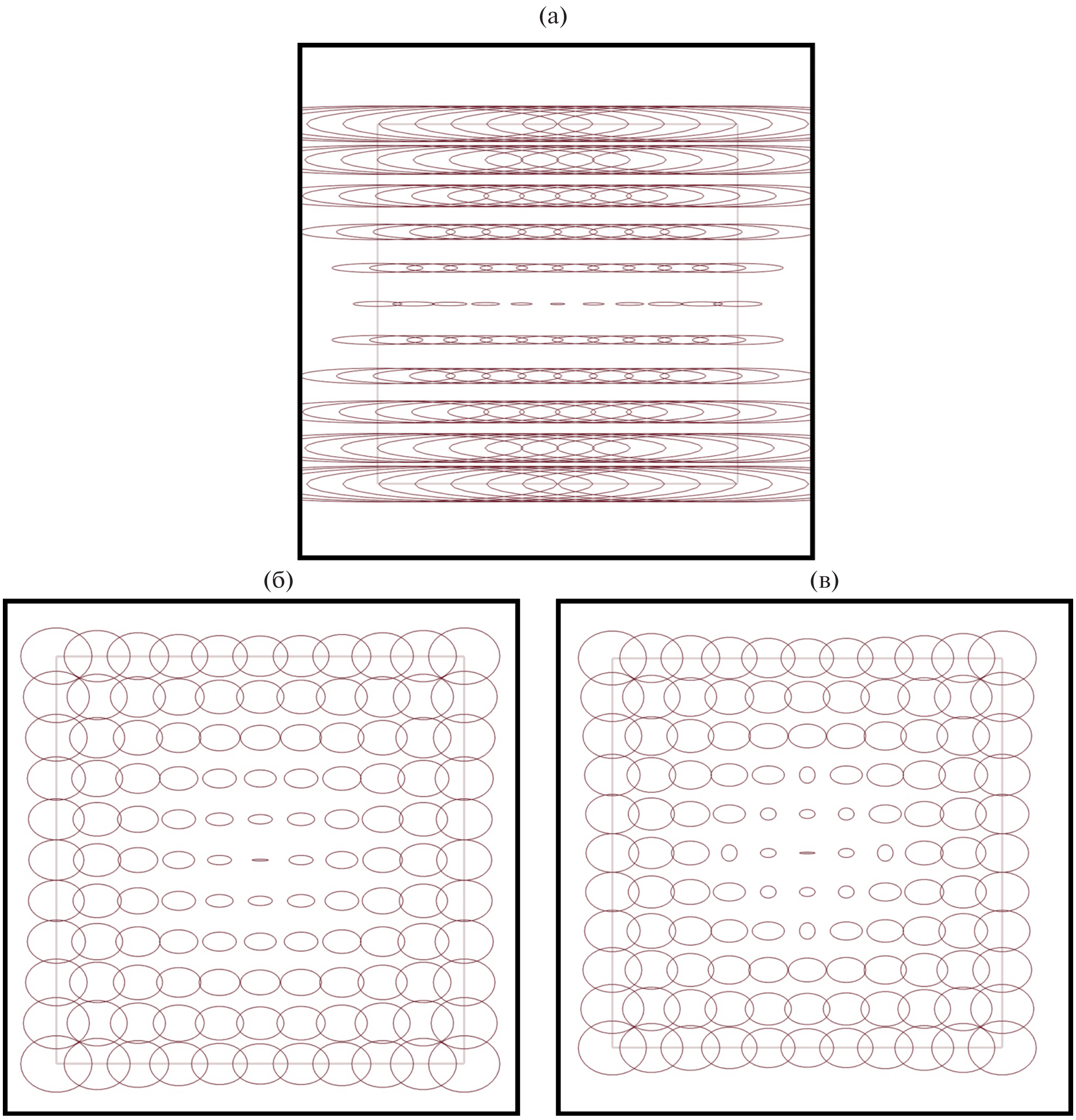
где $\eta^2(\mathbf{pq}) = \left(1 + \ell_{\mathbf{p}}(\mathbf{pq})\ln(\beta)\right)^{-2}$ при h-линейной интерполяции. Полученный рост однороден в метрическом пространстве, так как коэффициент анизотропии постоянен. В дальнейшем этот метод будет называться *ростом в метрическом пространстве* (обозначение на фигурах – Metr).

Вторая стратегия заключается в применении роста, зависящего от направления, путем задания разного коэффициента роста для каждого собственного значения. В этом случае метрика ограничений имеет вид

$$\tilde{\mathcal{M}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \mathcal{R}^{\mathsf{T}}\mathcal{N}(\mathbf{pq})\Lambda\mathcal{R},$$

где $\Lambda = \mathrm{diag}((\lambda_i)_{i=1,\ldots,n})$ – диагональная матрица, содержащая собственные значения $\mathcal{M}_{\mathbf{p}}$, $\mathcal{R}$ – ортогональная матрица ее собственных векторов, $\mathcal{N}(\mathbf{pq}) = \mathrm{diag}((\eta_i^2)_{i=1,\ldots,n})$ и $\eta_i^2(\mathbf{pq}) = \left(1 + \sqrt{\lambda_i}\,\|\mathbf{pq}\|_2 \ln(\beta)\right)^{-2}$. Фактор $\sqrt{\lambda_i}$ ускоряет рост в направлениях малых размеров. Как следствие, $\tilde{\mathcal{M}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$ стремится к изотропному тензору, когда расстояние между $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ увеличивается. Этот процесс называется в дальнейшем *ростом в физическом пространстве* (обозначение на фигурах – Phys).

Мы разработали новую стратегию для получения еще более плавных переходов. В этом случае рост метрики также зависит от направления. Установили порог для соотношения сторон, которого должна достичь метрика, прежде чем начнет расти во всех направлениях. Этот метод называется *рост с ограничением по направлению* (обозначение на фигурах – DC). Чтобы смоделировать его, рассмотрим двумерную начальную метрику в вершине $\mathbf{p}$, $\mathcal{M}_p$, с теми же обозначениями для спектрального разложения. Два собственных значения $\lambda_0 = 1/h_0^2$ и $\lambda_1 = 1/h_1^2$ упорядочены так, что $\lambda_0 < \lambda_1$. В соответствующем направлении наименьший размер растет в соответствии с тем же ко-



Фиг. 3. Рост в метрическом пространстве (а), в физическом пространстве (б) и с ограничением по направлению (в).

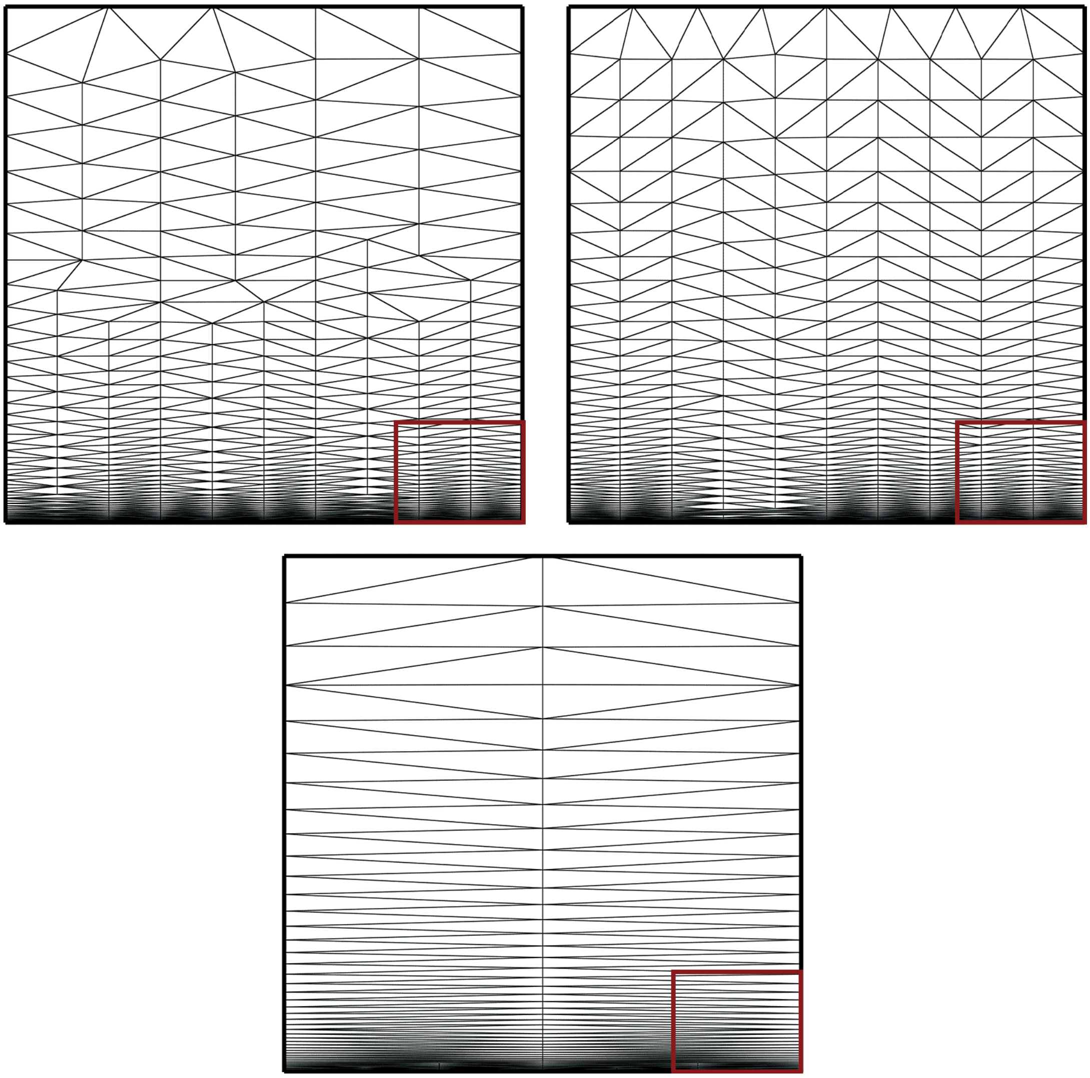
эффициентом, который определен для роста физического пространства. В другом направлении размер не растет, пока метрика ограничений не достигнет заданного соотношения сторон $r_{\min} = h_0/\tilde{h}_1 > 1$. При достижении этого соотношения сторон поправка распространяется как поправка на рост физического пространства:

$$\tilde{\mathcal{M}}_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \mathcal{R}^{\mathrm{T}}\tilde{\Lambda}\mathcal{R}, \quad \tilde{\Lambda} = \mathrm{diag}(\tilde{\lambda}_i)$$

с

$$\tilde{\lambda}_1 = \eta_1^2(\mathbf{pq})\,\lambda_1, \quad \tilde{\lambda}_0 = \begin{cases} \eta_0^2(\mathbf{pq})\,\lambda_0, & \text{если} \quad r_{\min}\tilde{h}_1 > h_0, \\ \lambda_0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Отношение сторон $r_{\min}$ выбирается близким к 1 (в примерах 1.1), но немного больше единицы, чтобы обеспечить сохранение некоторой анизотропии, так чтобы собственные векторы были хорошо определены и информация о направлении сохранялась в процессе градации. Разница между этими тремя процессами роста показана на фиг. 3, где изображен рост анизотропного тензора



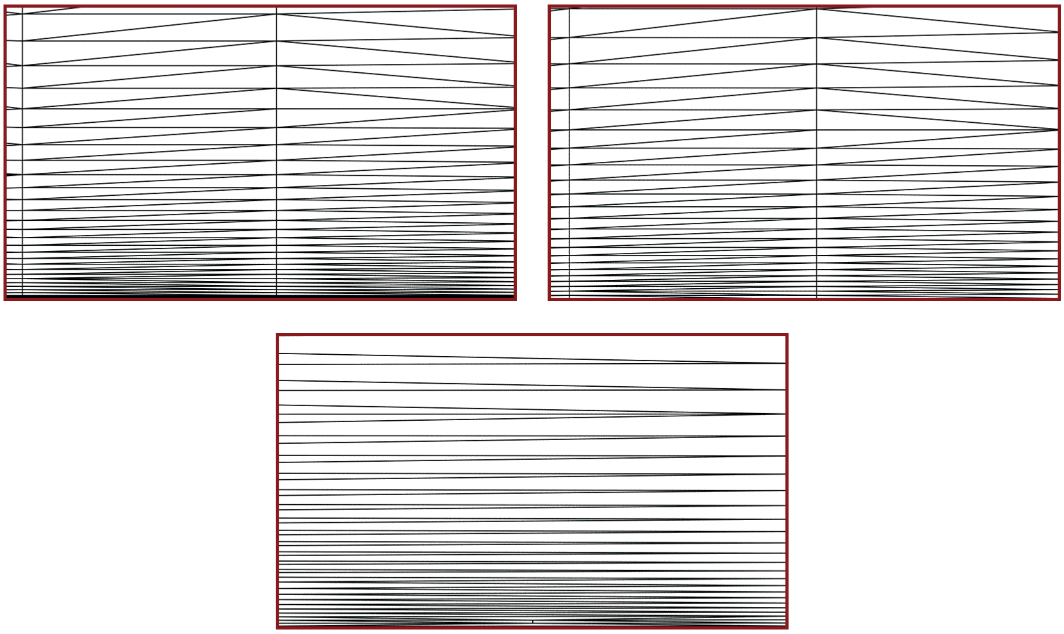
Фиг. 4. Метрически-ортогональные адаптированные сетки для метрики “линия”, общий вид. Красные прямоугольники указывают на увеличенный фрагмент.

в центре по всей области с использованием трех подходов, подчеркивая разницу между ростом в физическом пространстве и ростом с ограничениями по направлению. По мере роста направленно-ограниченная метрика становится изотропной очень быстро перед ростом, что можно наблюдать в центре области. Выбор метода оказывает сильное влияние на результирующую метрически-ортогональную сетку, как показано в следующем разделе.

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В данном разделе сравниваются три процесса роста метрики на двух аналитических примерах и двух примерах расчета течения около аэродинамического профиля NACA. Адекватность получаемых метрически-ортогональных сеток оценивается количественно путем анализа скачков размера и перераспределения углов. Показатель скачка размера оценивается в каждой вершине как отношение между наибольшей и наименьшей площадью окружающих треугольников. Гистограммы углов, представленные в остатке, есть максимальные углы каждого треугольника метрически-ортогональных сеток. Для оценки эффективности гибридных сеток качество четырехугольников оценивается с помощью следующей характеристики качества из [14], основанной на углах четырехугольника:

$$\eta(q) = \max\left(1 - \frac{2}{\pi}\max_k\left(\left|\frac{\pi}{2} - \alpha_k\right|\right), 0\right).$$



Фиг. 5. Метрически-ортогональные адаптированные сетки на основе метрики “линия”, вид крупным планом.

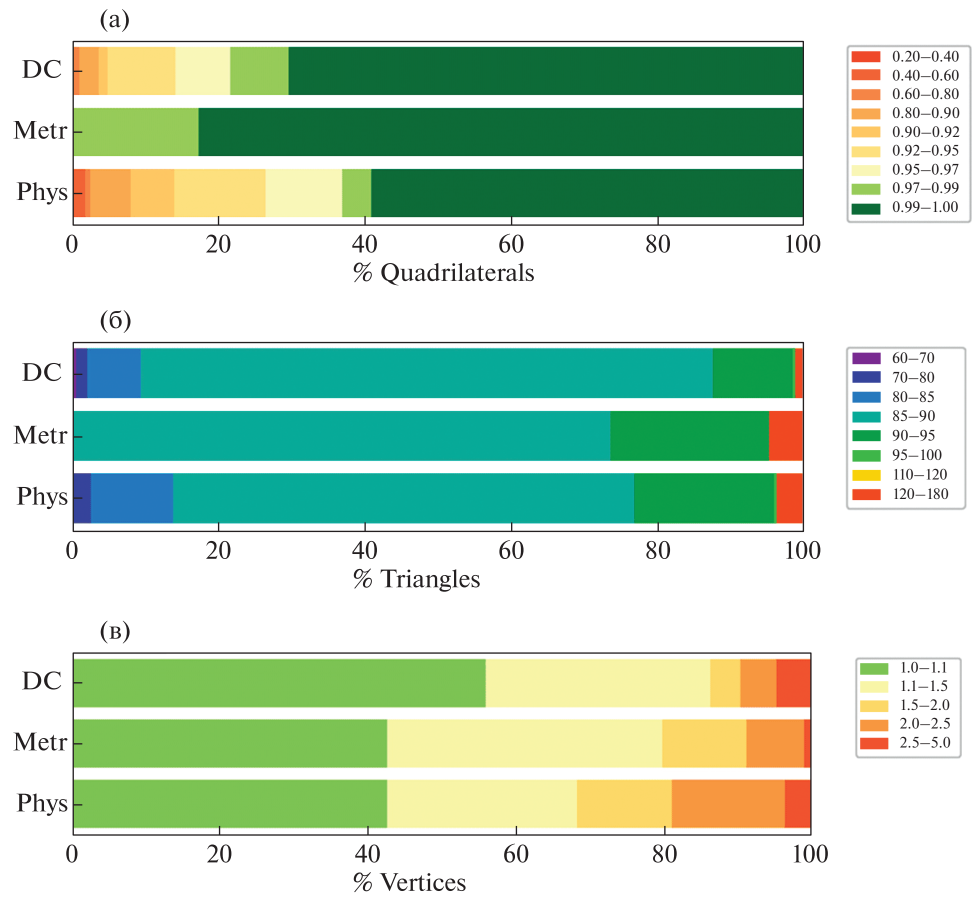
Наконец, структурированные части сетки не должны прерываться несколькими треугольниками. Этот критерий весьма важен для моделирования с ячейками разных типов. Скачки углов и размеров дают некоторую информацию об этом явлении, но в представленных примерах это наблюдение, в основном, качественное.

4.1. Аналитическая метрика “линия”

Первый тест представляет собой аналитическое прямолинейное метрическое поле на квадратной области $\Omega = [0,1]\times[0,1]$. Начальная метрика задана разрывной, чтобы подчеркнуть разницу между тремя процессами:

$$\mathcal{M}_{\text{line}} = \begin{pmatrix} h_1^{-2} & 0 \\ 0 & h_2^{-2} \end{pmatrix}, \quad \text{если} \quad y = 0, \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} h_0^{-2} & 0 \\ 0 & h_0^{-2} \end{pmatrix} \text{ иначе.}$$

Предписанные размеры $h_1 = 0.1$, $h_2 = 0.001$ и $h_0 = 0.5$. Применяется коррекция градации с $\beta = 1.1$. Полученные метрически-ортогональные сетки показаны на фиг. 4 и 5. Гистограммы, сравнивающие качество четырехугольников гибридных сеток, а также показатель разбиения углов и скачков размеров квазиструктурированных сеток представлены на фиг. 6. Этот пример иллюстрирует, насколько по-разному ведут себя три метода роста. Рост в физическом пространстве и рост с ограничением по направлению сохраняют одинаковый размер по горизонтали по мере удаления от нижней границы, в то время как рост в метрическом пространстве сохраняет элемент с одинаковым соотношением сторон, который растет, пока не достигнет максимального размера. Это можно наблюдать в гистограмме распределения углов, поскольку процессы роста в физическом пространстве и роста с ограничением по направлению показывают меньше тупых углов. Следовательно, эти две стратегии, скорее всего, будут способствовать образованию полностью четырехугольных областей. Однако гистограмма качества четырехугольников показывает лучшие результаты при использовании роста в метрическом пространстве. В других тестовых случаях мы обычно наблюдаем обратное, но это наблюдение подчеркивает важность сохранения анизотропии в метрически-ортогональных сетках. Кроме того, хорошие результаты для этого процесса здесь не очень показательны, поскольку наибольший размер достигается очень быстро. В пограничном слое было бы гораздо больше переходов размеров, поскольку отношение между наибольшим размером вдали от аэродинамической поверхности и размером на аэродинамической поверхности значительно больше, чем отношение между h_0 и h_2. Следовательно, на самом деле существует множество резких переходов размеров при использовании роста в метрическом



Фиг. 6. Гистограммы распределения качества четырехугольников (а), углов (б) и скачков размеров (в), пример теста “линия”.

пространстве в тестах пограничного слоя (см. п. 4.4). Более того, проблемы с качеством алгоритмов физического пространства и алгоритма роста с ограничением по направлению обусловлены своего рода появлением волнистых структур в сетке, которые должны быть исправлены путем улучшения алгоритма размещения точек. Эта работа продолжается, и когда она будет выполнена, эти два процесса роста должны в конечном итоге дать лучшие гибридные сетки. Соответствующие гибридные сетки имеют 86, 72 и 79% четырехугольников для роста с ограничением по направлению, роста в физическом пространстве и роста в метрическом пространстве соответственно.

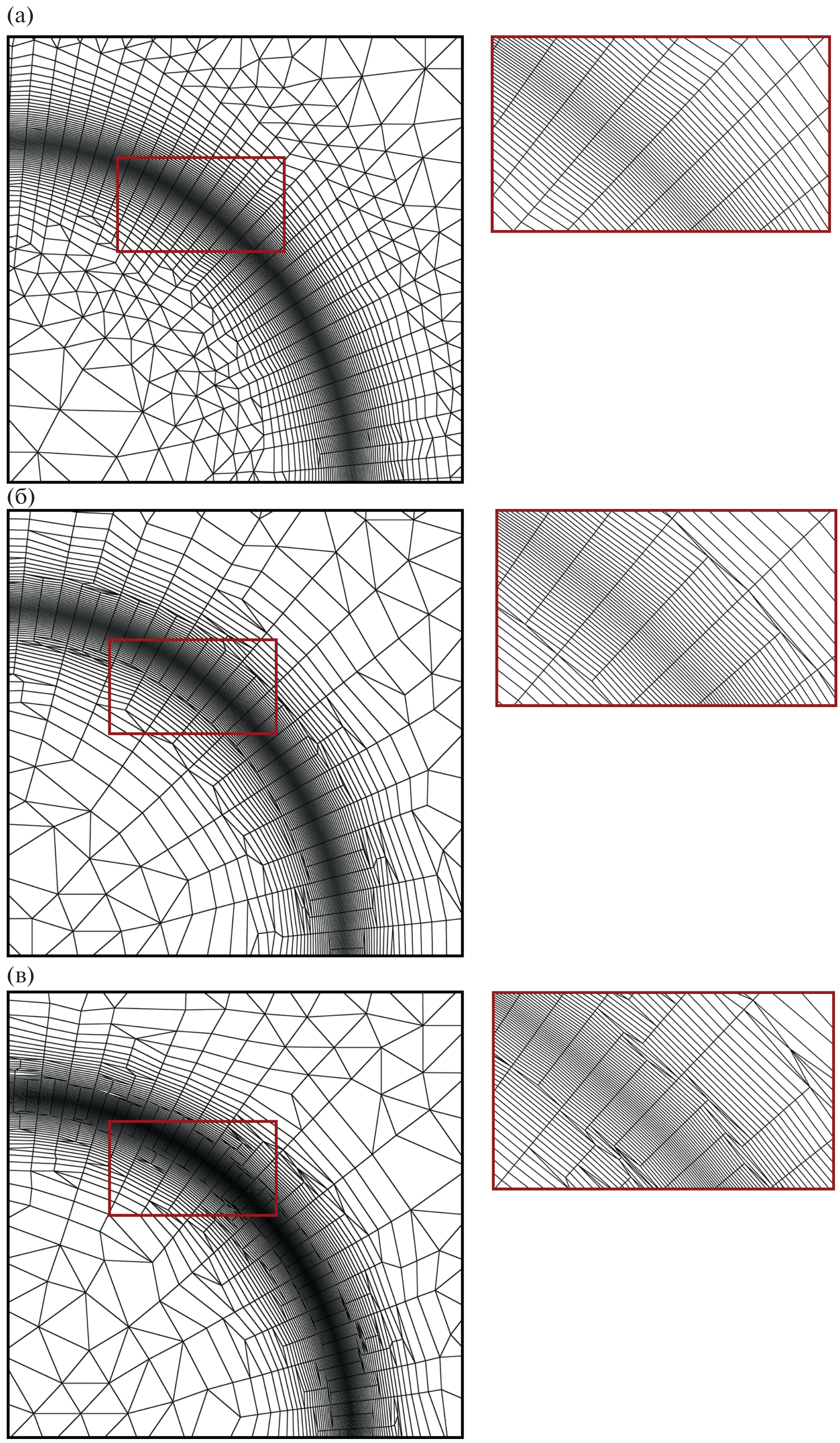
4.2. Аналитическая метрика “окружность”

Данный пример предназначен для изучения того, как метрическая кривизна обрабатывается различными стратегиями. Наш метод применяется к аналитическому метрическому полю, представляющему изогнутую анизотропную структуру, имеющую форму окружности:

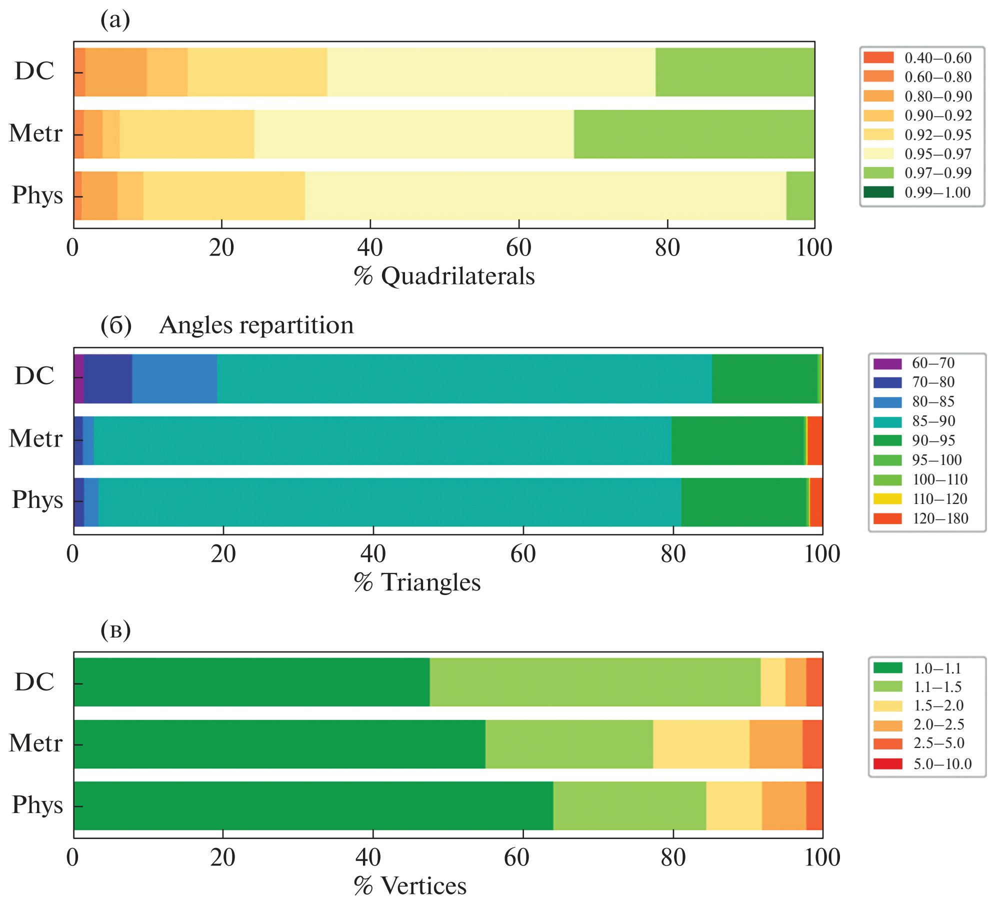
$$\mathcal{M}(x,y)=\begin{pmatrix} h_1^{-2}\cos^2\theta+h_2^{-2}\sin^2\theta & (h_1^{-2}-h_2^{-2})\cos\theta\sin\theta \\ (h_1^{-2}-h_2^{-2})\cos\theta\sin\theta & h_1^{-2}\sin^2\theta+h_2^{-2}\cos^2\theta \end{pmatrix},$$

где $\theta=\arctan(x,y)$, $h_1=\min(0.002\times 5^{\alpha},h_{\max})$, $h_2=\min(0.05\times 2^{\alpha},h_{\max})$, $h_{\max}=0.1$ и $\alpha=10\times \times\left|0.75-\sqrt{x^2+y^2}\right|$.

Здесь мы задаем $\beta=1.2$ для процесса роста в метрическом пространстве и $\beta=1.1$ для роста в физическом пространстве и роста с ограничением по направлению. Действительно, рост в метрическом пространстве дает более подробные сетки, чем другие методы, а мы хотим сравнить



Фиг. 7. Гибридные адаптированные сетки на основе метрического поля в форме окружности после процесса градации с использованием роста с ограничением по направлению (а), роста в физическом пространстве (б), роста в метрическом пространстве (в). Красными прямоугольниками обозначены увеличенные фрагменты.



Фиг. 8. Гистограммы распределения качества четырехугольников (а), углов (б) и скачков размеров (в), пример теста “окружность”.

сетки с одинаковым количеством вершин. Чтобы проиллюстрировать результаты для этого случая, на фиг. 7 показаны окончательные гибридные сетки для трех стратегий роста. Гистограммы, показывающие распределение качества четырехугольников, углов и скачков размеров, собраны на фиг. 8. Как представлено в [10], на адаптированную сетку с использованием роста в метрическом пространстве особенно влияет зависимость нашего алгоритма от топологии сетки. Он создает некоторые “лучи”, которые являются касательными к искривленным областям, метрическое поле ошибочно модифицируется, и также изменяются результирующие сетки. В данном случае исходная метрика довольно гладкая, поэтому этот эффект малозаметен, но он заметен в верхней левой части соответствующей сетки на фиг. 7в.

Доля четырехугольников примерно одинакова в трех случаях: 86.3% при использовании роста с ограничением по направлению, 89.6% при использовании роста в физическом пространстве и 87.9% при использовании роста в метрическом пространстве. Однако кривизна обрабатывается по-разному, и рост в физическом пространстве, и рост с ограничениями по направлению показывают меньшие скачки размера в радиальном направлении. Следовательно, области, состоящие только из четырехугольников, легче формируются при использовании этих двух стратегий роста, как показано на фиг. 7, что больше подходит для численного моделирования. Гистограммы качества лучше для роста в метрическом пространстве, как видно из предыдущего примера, что связано с более высокими коэффициентами анизотропии в скорректированном метрическом поле. Здесь исходная метрика довольно гладкая и ограниченная, поэтому улучшение за счет коррекции градаций размера ограничено.

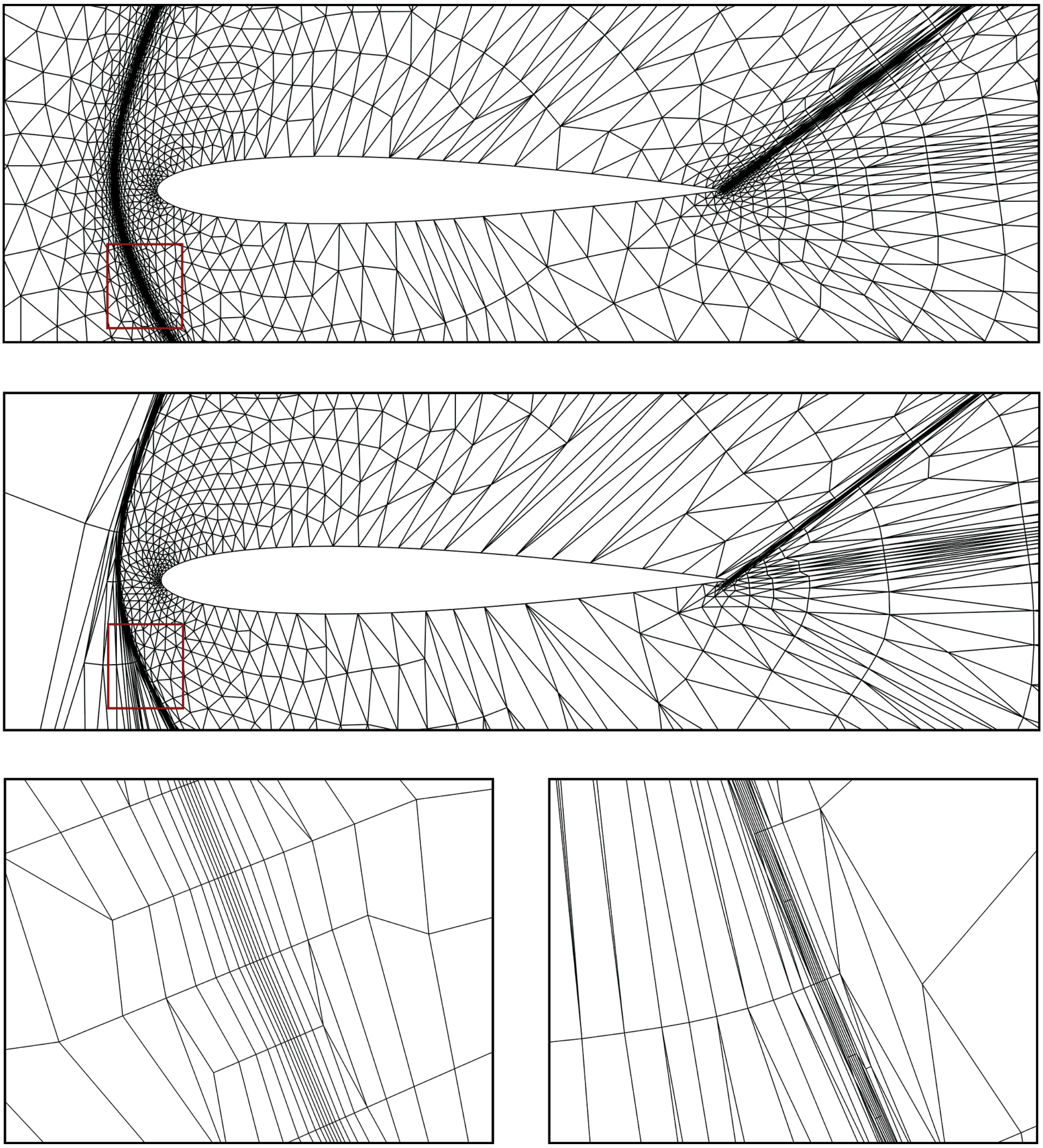
4.3. Моделирование невязкого течения

Данный пример представляет собой численное моделирование невязкого течения вокруг NACA 0012, описываемого уравнениями Эйлера. Рассматривается сверхзвуковой поток с числом

(а)

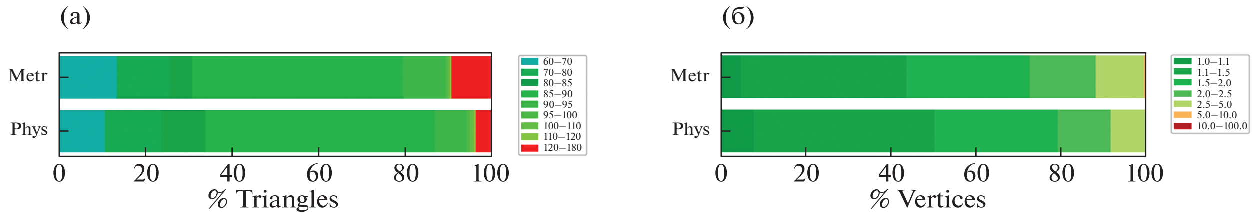
(б)

(в)

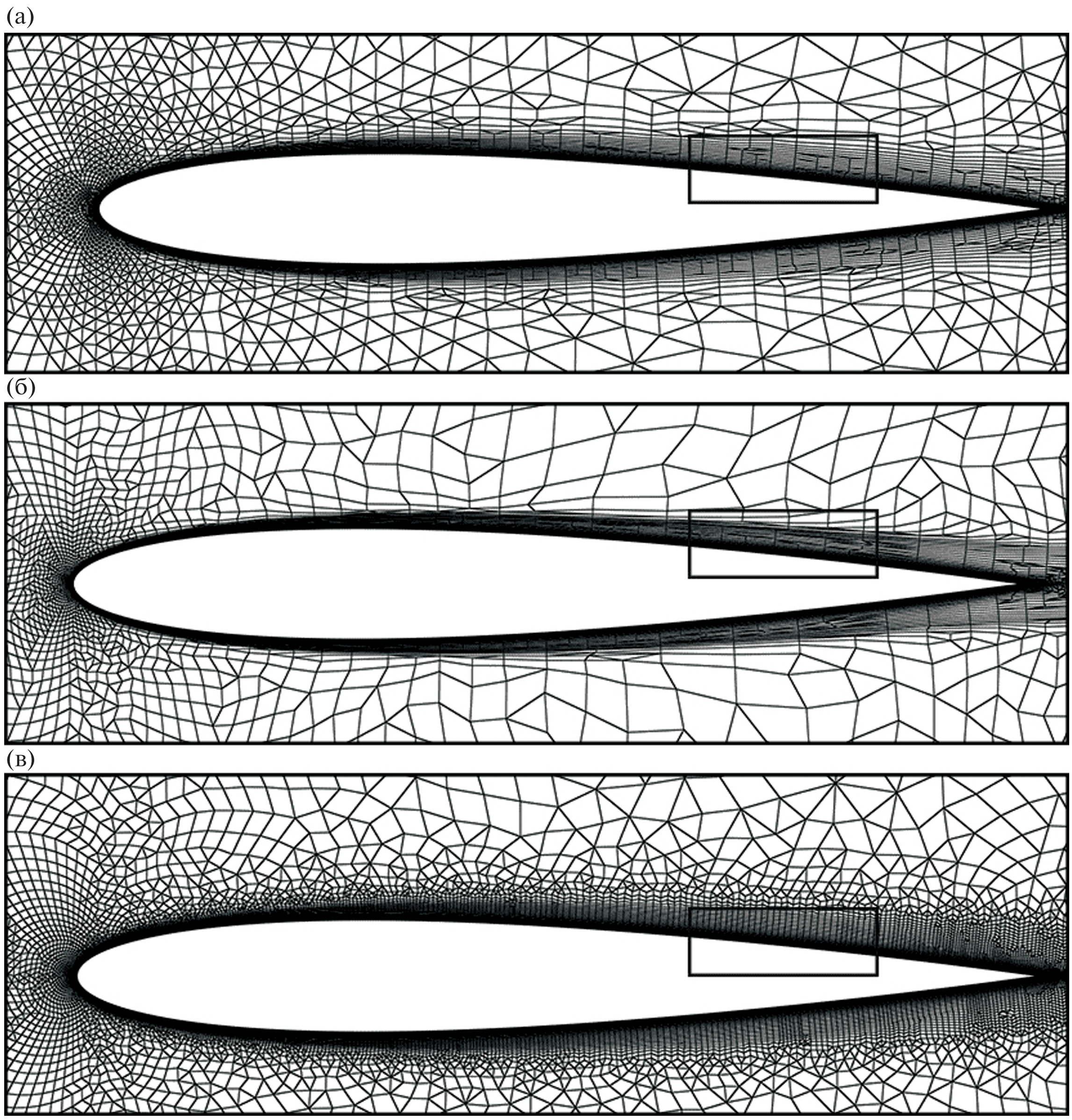


Фиг. 9. Сверхзвуковое невязкое течение около профиля NACA. Показаны крупномасштабные виды адаптированных метрически-ортогональных сеток: (а) – рост в физическом пространстве, (б) – в метрическом пространстве, а также соответствующие виды крупным планом после объединения в четырехугольники (в).

Маха $M = 1.6$ и углом атаки $\alpha = 8$. Была проведена градационная коррекция с использованием роста в метрическом и физическом пространствах с $\beta = 1.5$. Коэффициент $\delta = 1.5$ был добавлен для роста в метрическом пространстве, чтобы смоделировать экспоненциальную метрическую градацию и ограничить лучевые артефакты, упомянутые ранее (подробнее см. в [10]). Рост с ограничением по направлению здесь не рассматривался, поскольку интересными особенностями этого потока являются ударные волны, которые представляют собой анизотропные явления, а эта стратегия роста, как оказалось, теряет значительное количество анизотропии в процессе коррекции.

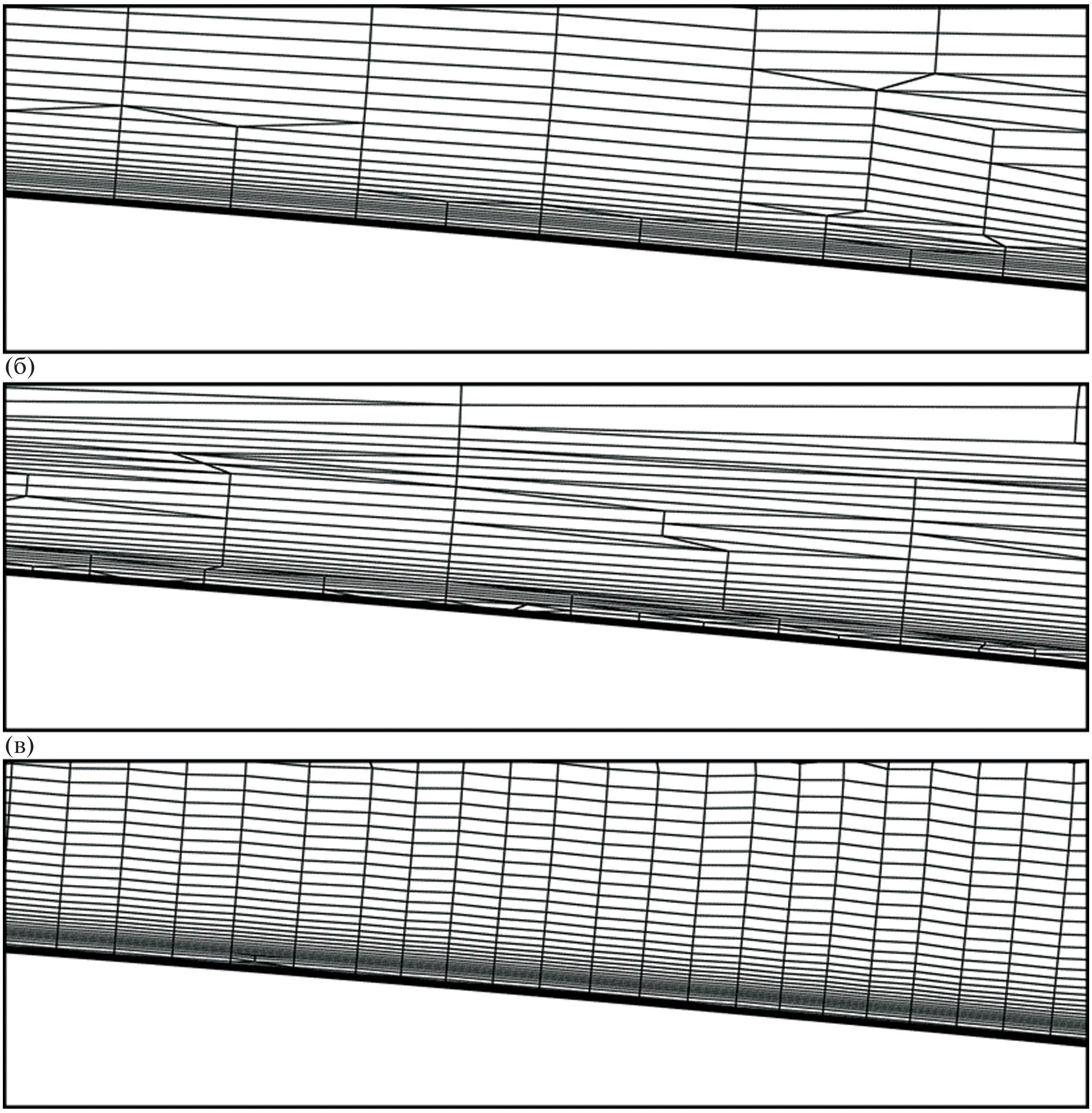


Фиг. 10. Сверхзвуковое невязкое течение около профиля NACA. Гистограммы распределения углов (а) и скачков размеров (б), сравнивающие метрически-ортогональные сетки, полученные при росте в метрическом и физическом пространствах.



Фиг. 11. Дозвуковое турбулентное течение около профиля NACA. Сравнение трех процессов роста, крупномасштабные виды: (а) – рост в физическом пространстве, (б) – в метрическом пространстве, (в) – с ограничением по направлению.

(а)
(б)
(в)

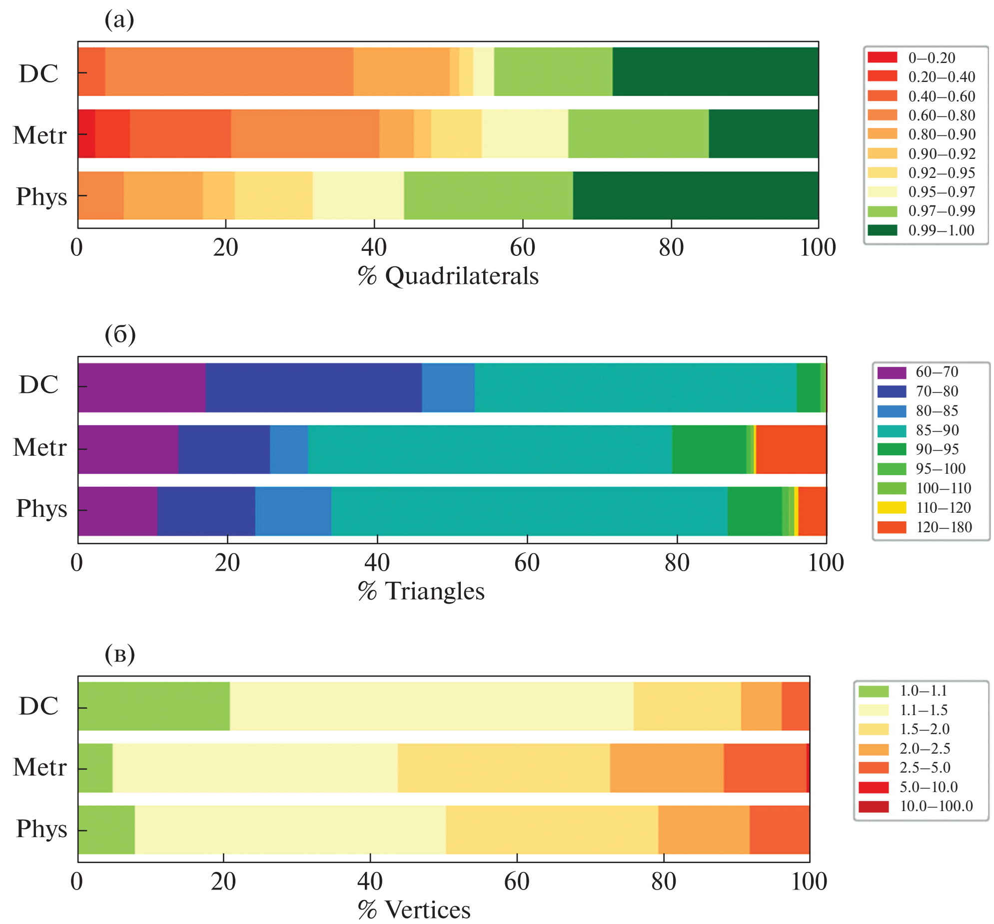


Фиг. 12. Дозвуковое турбулентное течение около профиля NACA с $\mathrm{Re} = 10^5$. Сравнение трех процессов роста, крупный план: (а) – рост в физическом пространстве, (б) – в метрическом пространстве, (в) – с ограничением по направлению.

Адаптированные метрически-ортогональные сетки для обоих процессов роста показаны на фиг. 9, а гистограммы для сравнения – на фиг. 10. Гистограммы показывают, что рост в физическом пространстве – явно лучший вариант для данного теста: доля скачков размеров и тупых углов значительно меньше. Виды гибридных сеток крупным планом также показывают, что этот процесс роста благоприятствует формированию более крупных полностью четырехугольных областей. Хотя рост в метрическом пространстве более точно отражает скачок (см. [10]), он не является лучшим вариантом для гибридной сетки.

4.4. Моделирование турбулентного течения

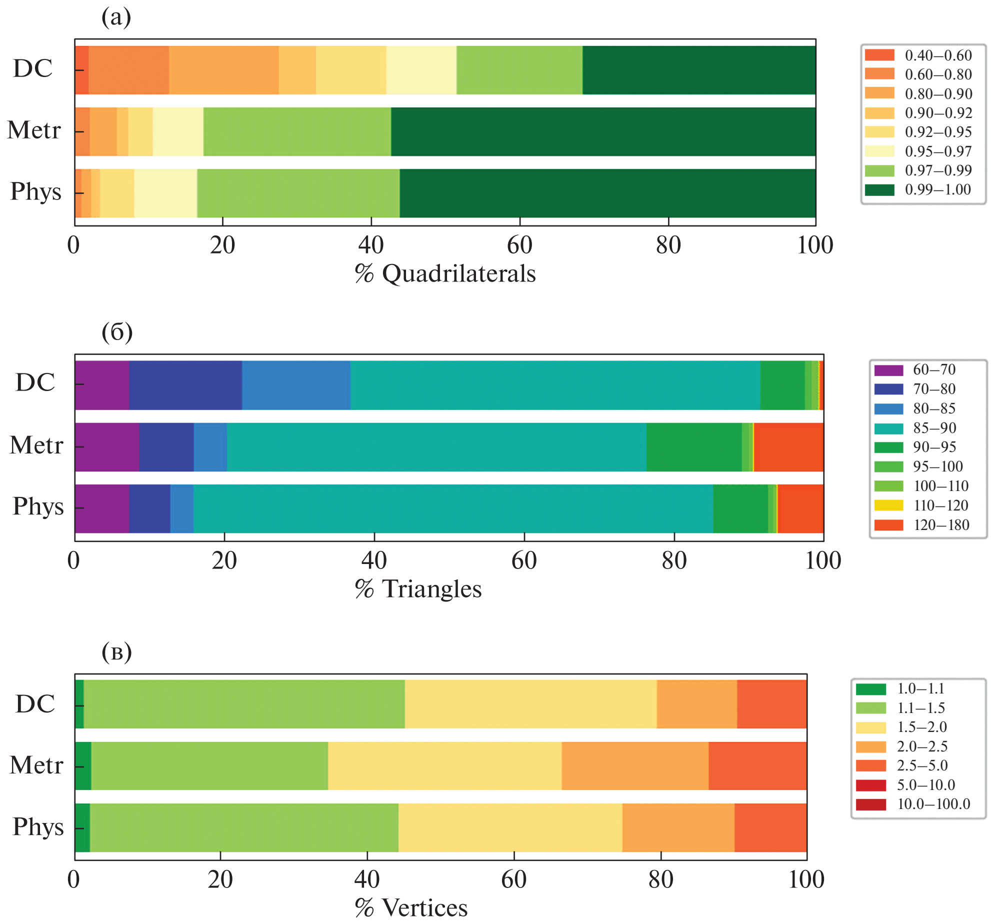
Последний пример – численное моделирование турбулентного течения вокруг NACA0012, описываемого уравнениями Навье–Стокса с усреднением по Рейнольдсу, где мы рассматриваем модель турбулентности Спаларта–Аллмараса с одним уравнением. Моделируемое течение явля-



Фиг. 13. Дозвуковое турбулентное течение около профиля NACA с $\mathrm{Re} = 10^5$. Гистограммы распределения качества четырехугольников (а), углов (б) и скачков размеров (в), сравнивающие метрически-ортогональные сетки, полученные в результате роста с ограничением по направлению, в метрическом пространстве и в физическом пространстве.

ется дозвуковым с числом Маха $M = 0.5$, числом Рейнольдса $\mathrm{Re} = 10^5$ и углом атаки $\alpha = 0$. Адаптированные гибридные сетки показаны на фиг. 11 (крупный план) и 12 (крупный план). Гистограммы углов и скачков размеров представлены на фиг. 13. В этом случае снова лучше работает коррекция с использованием роста в физическом пространстве и роста с ограничением по направлению. Эффект особенно заметен в области пограничного слоя, где плавность переходов очень важна. Малый размер, предписанный на границе, распространяется почти по всей зоне, тогда как многочисленные переходы нарушают выравнивание при использовании градации роста в метрическом пространстве, как показано на фиг. 12. Результаты особенно убедительны для роста в физическом пространстве, так как пограничный слой почти заполнен четырехугольниками. Это многообещающая возможность для создания гибридных сеток, в которых пограничный слой полностью заполнен четырехугольниками. Однако эти четырехугольники менее анизотропны (соотношение сторон в основном от 10 до 50), что, по-видимому, способствует появлению волнистых структур в сетке вне пограничного слоя. Предстоит проделать определенную работу, чтобы устранить такие узоры и улучшить процесс объединения четырехугольников в областях, где соотношение сторон элементов наименьшее.

Аналогичное моделирование с числом Рейнольдса Re, заданным 5×10^6, было выполнено для сравнения поведения градационных процессов при большей заданной анизотропии (на границе она примерно равна 500). Гистограммы для этого случая показаны на фиг. 14, а крупный план сетки граничного слоя – на фиг. 15. Переходы и углы остаются лучше после градации с ограни-



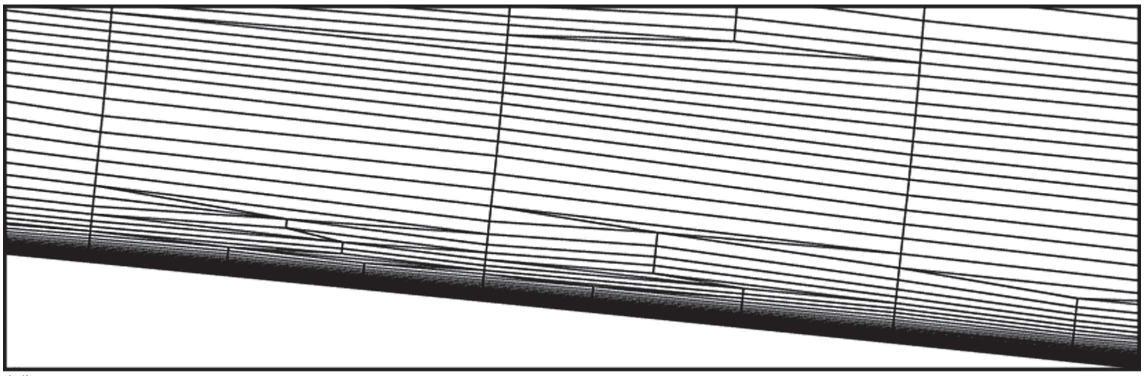
Фиг. 14. Дозвуковое турбулентное течение около профиля NACA с Re = 5×10^6. Гистограммы распределения качества четырехугольников (а), углов (б) и скачков размеров (в), сравнивающие метрически-ортогональные сетки, полученные в результате роста с ограничением по направлению, роста в метрическом пространстве и роста в физическом пространстве.

чением по направлению, однако при использовании этой стратегии качество созданных четырехугольников хуже. Действительно, анизотропия элементов в этом случае может уменьшаться только от границы, в то время как другие процессы роста распространяют анизотропию дальше. Поэтому рост в физическом пространстве представляется здесь наилучшим вариантом. Для улучшения результатов градации с ограничениями по направлению можно использовать корректировку метрически-ортогонального смещения точек на этапе создания сетки. В настоящее время этот вопрос изучается.

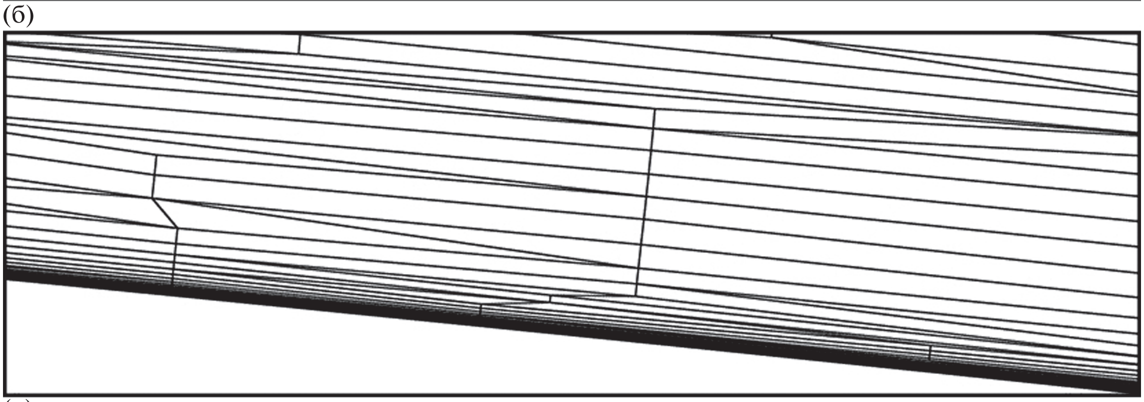
5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Контроль градации метрики является важным шагом в процессе адаптации сетки с использованием метрики. При стандартной адаптации он улучшает качество создаваемой адаптированной сетки и точность решения, как было показано в предыдущей работе. Этот процесс еще более важен для метрически-ортогональных сеток: метрика должна быть еще более гладкой, поскольку вариации размеров могут нарушить выравнивание сетки и помешать формированию четырехугольников на этапе объединения. Для этого был проанализирован наш текущий метод градации метрики, чтобы определить, как он может способствовать формированию ортогональных сеток хорошего качества, а затем гибридных сеток, т.е. увеличить долю четырехугольников и уменьшить количество скачков размеров и тупых углов. Наиболее важным этапом является этап роста метрики, на котором метрика в определенной вершине распространяется по всей области так,

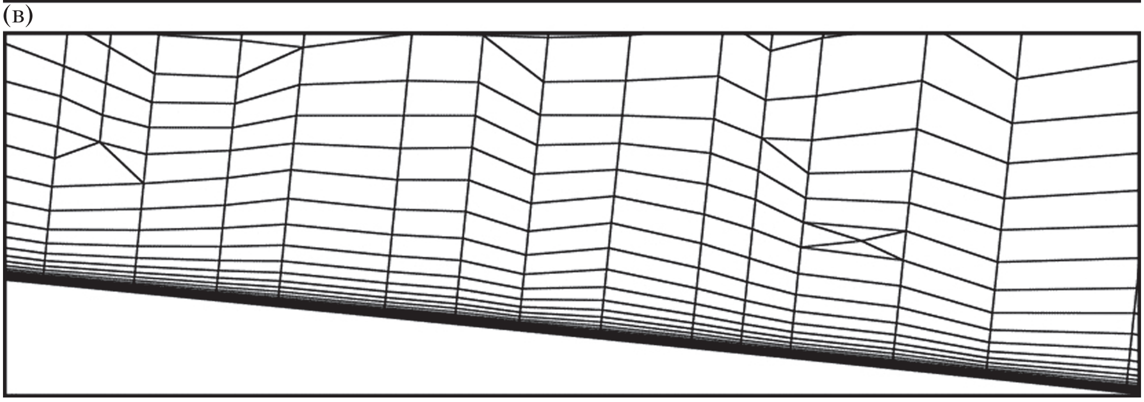
(а)



(б)



(в)



Фиг. 15. Дозвуковое турбулентное течение около профиля NACA с $\mathrm{Re} = 5 \times 10^6$. Сравнение трех процессов роста, крупный план: (а) – рост в физическом пространстве, (б) – в метрическом пространстве, (в) – с ограничением по направлению.

что она влияет, в основном, на ближайшие вершины. Были рассмотрены три возможности. Во-первых, однородный рост в метрическом пространстве, сохраняющий анизотропное соотношение по мере распространения. Во-вторых, однородный рост в физическом пространстве, накладывающий более быстрый рост на наименьший предписанный размер и стремящийся стать изотропным по мере распространения. В-третьих, рост с ограничением по направлению, ограничивающий рост самого большого размера, а затем растущий во всех направлениях. Предполагается, что эта последняя стратегия способствует плавным переходам. В предыдущих работах на эту тему было замечено, что первый процесс роста приводит к лучшим сеткам для рассматриваемых задач вычислительной газодинамики. Однако для создания сеток с преобладанием четырехугольников второй процесс роста является более эффективным, поскольку полученные сетки демонстрируют более плавные переходы размеров и больше потенциальных полностью четырехугольных зон. Для совершенствования процедуры построения сетки с преобладанием четырехугольников необходимо усовершенствовать этапы повторного построения и объединения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bommes D., Lévy B., Pietroni N., Puppo E., Silva C., Tarini M., Zorin D.* Quad-mesh generation and processing: a survey // Computer Graphics Forum. 2013. V. 32. № 6. P. 51–76.
https://doi.org/10.1111/cgf.12014
2. *Lévy B., Liu Y.* Lp centroidal voronoi tessellation and its applications // ACM Trans. Graph. 2010. V. 29. № 4.
https://doi.org/10.1145/1778765.1778856
3. *Liu Y., Wang W., Lévy B., Sun F., Yan D.M., Lu L., Yang C.* On centroidal Voronoi tessellation—energy smoothness and fast computation // ACM Trans. Graph. 2009. V. 28. № 4. Article 101.
https://doi.org/10.1145/1559755.1559758
4. *Ekelschot D., Ceze M., Garai A., Murman S.M.* Robust metric aligned quad-dominant meshing using Lp centroidal Voronoi tessellation.
https://doi.org/10.2514/6.2018-1501
5. *MacLean K., Nadarajah S.* Unstructured anisotropic mesh adaptation for quads based on a local error model.
https://doi.org/10.2514/6.2021-1840
6. *Sharbatdar M., Gooch C.O.* Anisotropic mesh adaptation: recovering quasi-structured meshes.
https://doi.org/10.2514/6.2013-149
7. *Singh J., Gooch C.F.O.* Advancing layer surface mesh generation.
https://doi.org/10.2514/6.2020-0902
8. *Loseille A.* Metric-orthogonal anisotropic mesh generation // Procedia Engineer. 2014. V. 82. P. 403–415.
https://doi.org/10.1016/j.proeng.2014.10.400 . 23rd Inter. Mesh. Roundtable (IMR23).
9. *Marcum D., Alauzet F.* 3d metric-aligned and orthogonal solution adaptive mesh generation // Procedia Engineer. 2017. V. 203. P. 78–90.
https://doi.org/10.1016/j.proeng.2017.09.790 . 26th Inter. Mesh. Roundtable, IMR26, 18–21 September 2017, Barcelona, Spain.
10. *Alauzet F.* Size gradation control of anisotropic meshes // Finite Elements in Analysis and Design. 2010. V. 46. P. 181–202.
https://doi.org/10.1016/j.finel.2009.06.028
11. *Hecht F., Mohammadi B., Hecht F., Mohammadi B.* Mesh adaption by metric control for multi-scale phenomena and turbulence.
https://doi.org/10.2514/6.1997-859
12. *Loseille A., Alauzet F.* Continuous mesh framework part i: Well-posed continuous interpolation error // SIAM J. Numer. Analys. 2011. V. 49. P. 38–60.
https://doi.org/10.1137/090754078
13. *Loseille A., Alauzet F.* Continuous mesh framework part ii: Validations and applications // SIAM J. Numer. Analys. 2011. V. 49. P. 61–86.
https://doi.org/10.2307/23074390
14. *Remacle J.F., et al.* Blossom-quad: A non-uniform quadrilateral mesh generator using a minimum-cost perfect-matching algorithm // Inter. J. Numer. Meth. Engineer. 2012. V. 89. P. 1102–1119.
https://doi.org/10.1002/nme.3279

EDN: VYEMAC
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1341–1359

ОПТИМАЛЬНОЕ УПРАВЛЕНИЕ

УДК 519.85

СИНГУЛЯРНОЕ МНОЖЕСТВО ОПТИМАЛЬНЫХ ТРАНСПОРТНЫХ ОТОБРАЖЕНИЙ[1)]

© 2022 г. Ч. Луо[1,*], В. Чен[2,], Н. Леи[3,***], Я. Гуо[4,****], Т. Чжао[5,*****], Ц. Лиу[6,******], С. Гу[4,*******]**

[1] Ключевая лаборатория повсеместного сетевого и сервисного программного обеспечения провинции Ляонин, Далянь, 116620, Китай

[2] Школа программных технологий, Даляньский технологический университет, Далянь, 116620 Китай

[3] DUT-RU Информационные науки и инженерия, Даляньский технологический университет, Далянь, 116620, Китай

[4] Факультет компьютерных наук, Университет Стоуни Брук, Стоуни Брук, Нью-Йорк 11794, США

[5] INRIA София-Антиполис & Телеком, Париж, Франция

[6] Школа математики и прикладной статистики, Университет Вуллонгонга, Вуллонгонг, Новый Южный Уэльс, 2522, Австралия

**e-mail: zxluo@dlut.edu.cn*
***e-mail: wei.chen@mail.dlut.edu.cn*
****e-mail: nalei@dlut.edu.cn*
*****e-mail: yangguo@cs.stonybrook.edu*
******e-mail: tong.zhao@inria.fr*
*******e-mail: jiakunl@uow.edu.au*
********e-mail: gu@cs.stonybrook.edu*

Поступила в редакцию 09.10.2021 г.
Переработанный вариант 21.01.2022 г.
Принята к публикации 11.03.2022 г.

Транспортные задачи играют важную роль во многих инженерных областях, в частности, в глубоком обучении. По теореме Бренье вычисление оптимальных транспортных отображений сводится к решению уравнений Монжа–Ампера, что, в свою очередь, эквивалентно построению политопов Александрова. Кроме того, теория регулярности уравнения Монжа–Ампера объясняет проблему схлопывания мод в задачах глубокого обучения. Следовательно, вычисление и изучение множеств сингулярностей транспортных отображений являются важной и актуальной задачей. В настоящей работе мы переходим от классического понятия медиальной оси к более общей степенной медиальной оси, которая описывает множества сингулярностей оптимальных транспортных отображений. Предложен вычислительный алгоритм, основанный на вариационном подходе с использованием степенных диаграмм (радикальных разбиений). Более того, доказано, что при гомотопическом изменении мер соответствующие множества сингулярностей оптимальных транспортных отображений тоже гомотопически эквивалентны. Кроме того, мы обобщаем концепцию расстояния Фреше и используем условие скошенности, чтобы дать достаточное условие для существования сингулярностей оптимальных транспортных отображений между плоскими областями. Условие формулируется с использованием кривизны границы. Библ. 20. Фиг. 15.

Ключевые слова: верхняя оболочка, выпуклая оболочка, степенная диаграмма, взвешенная триангуляция Делоне, вторичный политоп, нормальное расстояние Фреше, скошенность, кривизна.

DOI: 10.31857/S0044466922080099

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время теория оптимального транспорта играет важную роль в глубоком обучении, особенно для генеративных моделей, таких как генеративные адверсивные сети (GAN)

[1)]Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Луо, Чена и Леи Национальным фондом естественных наук Китая (гранты № 61720106005, 61772105, 61936002), Фондами фундаментальных исследований для центральных университетов (DUT20TD107, DUT20JC32). Работа Го и Гу поддержана Национальным научным фондом (CMMI-1762287), Программой исследований Университета Форда (URP № 2017-9198R), Национальным институтом здравоохранения (R21EB029733, R01LM012434). Исследование Лю поддержано Австралийским исследовательским советом (DP170100929, DP200101084).

(см. [1]), вариационные автоэнкодеры (VAE) (см. [2]) и т.д. В глубоком обучении одной из основных задач является преобразование заданного распределения в распределение данных, другой — измерение расстояния Вассерштейна между двумя распределениями. Обе эти задачи требуют вычисления оптимальных транспортных отображений.

Теорема Бренье сводит вычисление оптимального транспортного отображения к решению уравнения Монжа—Ампера, что эквивалентно решению задачи Александрова в выпуклой геометрии. Построение политопа Александрова преобразуется в вычисление степенной диаграммы и взвешенной диаграммы Делоне. Таким образом, геометрический подход к решению оптимальной транспортной задачи становится важным для задач глубокого обучения (см. [3], [4]).

Кроме того, одной из основных проблем глубокого обучения является коллапс мод, что делает процесс обучения нестабильным и трудно сходящимся. Теория регулярности оптимального транспортного отображения обнаруживает внутреннюю причину схлопывания мод. В основном, если носитель целевой меры не является просто связным или вогнутым, оптимальная транспортная карта может быть прерывистой в точках сингулярности. Поэтому вычисление и изучение сингулярного множества оптимальных транспортных отображений становится чрезвычайно важным.

В настоящей работе мы обобщаем понятие медиальной оси до степенной медиальной оси, которая описывает сингулярное множество оптимальных транспортных отображений (см. определение 4). Затем мы предлагаем вычислительный алгоритм, основанный на вариационном подходе с использованием степенных диаграмм. Доказываем, что при гомотопическом изменении мер соответствующие сингулярные множества оптимальных транспортных отображений также гомотопически эквивалентны (теорема 8).

Более того, мы даем достаточное условие существования сингулярностей оптимальных транспортных отображений между плоскими областями. Доказательство основано на условии скошенности и обобщенной концепции расстояния Фреше (теорема 9).

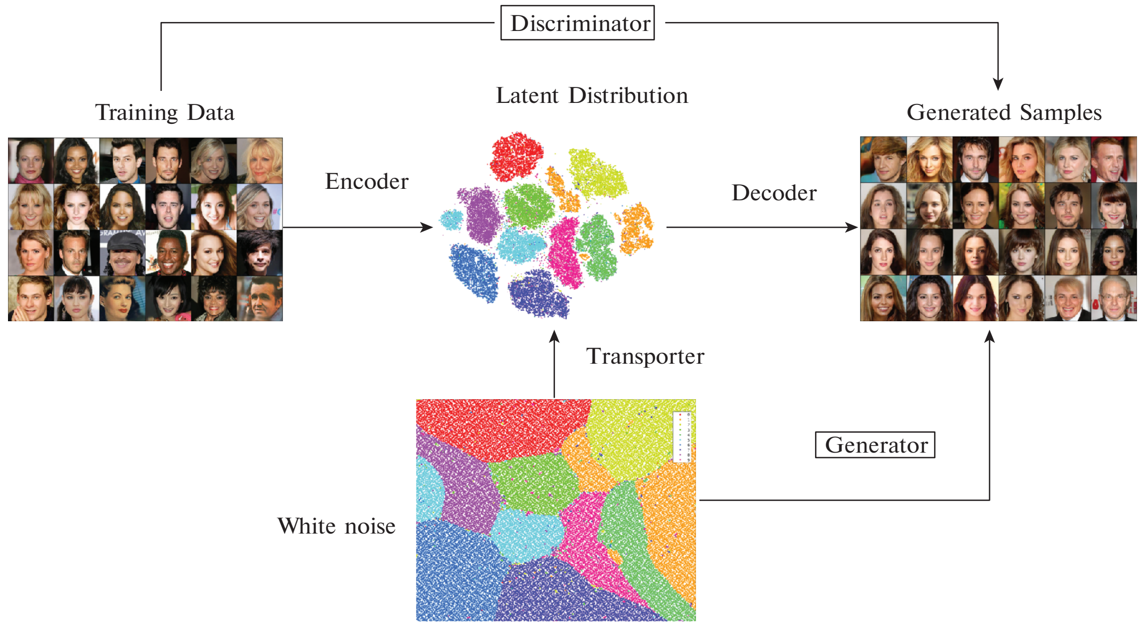
Статья организована следующим образом. В разд. 2 объясняется, как оптимальный транспорт применяется для генеративной модели в глубоком обучении, и почему сингулярное множество имеет решающее значение для предотвращения схлопывания мод. В разд. 3 рассмотрены выпуклое геометрическое представление оптимального транспорта, включая теоремы Александрова и Минковского, геометрический вариационный подход Яу и теорему Гельфанда о вторичном политопе. В разд. 4 доказывается основная теорема, которая показывает отношение гомотопической эквивалентности между сингулярностями оптимального транспортного отображения и медиальной осью носителя целевой меры. В разд. 5 доказывается достаточное условие существования сингулярностей оптимальных транспортных отображений между плоскими областями, основанное на нормальном расстоянии Фреше и условии скошенности. В разд. 6 подведены итоги работы.

2. ГЕНЕРАТИВНЫЕ МОДЕЛИ И ОПТИМАЛЬНЫЙ ТРАНСПОРТ

В области глубокого обучения каждый класс данных моделируется как распределение вероятности на *многообразии данных*, которое вложено в высокоразмерное окружающее пространство. Методы глубокого обучения (DL) направлены на изучение как структуры многообразия, так и распределения класса данных. Процесс изучения распределения сильно зависит от оптимальных транспортных отображений.

Модель GAN. Генеративное моделирование — это задача машинного обучения без надзора, которая способна автоматически обнаружить и изучить закономерность во входных данных, так что модель может быть применена для генерации новых образцов, которые правдоподобно могли быть взяты из исходного набора данных. Генеративно-состязательные сети (Generative Adversarial Network, GAN) (см. [1]) и вариативные автоэнкодеры (Variational Autoencoders, VAE) (см. [2]) становятся доминирующими подходами для безусловной генерации изображений.

На фиг. 1 показана общая схема моделей GAN. Каждый обучающий образец, например, изображение человеческого лица, рассматривается как точка в высокоразмерном пространстве изображений. Естественный класс изображений, например, фотографии человеческого лица, рассматривается как облако точек, которое близко к низкоразмерному многообразию Σ, так называемому многообразию данных. Набор данных моделируется как распределение вероятности μ на многообразии данных Σ. Многообразие данных отображается на область параметров с помощью отображения кодирования, параметр каждого изображения называется латентным кодом, область параметров называется латентным пространством или пространством характеристик Ω,



Фиг. 1. Модель генеративно-состязательных сетей (GAN).

отображение называется картой кодирования $\varphi : \Sigma \to \Omega$. Распределение данных μ переводится φ в латентное распределение данных $\varphi_{\#}\mu$. Отображение декодирования – это обратное отображение кодирования, $\varphi^{-1} : \Omega \to \Sigma$, которое отображает латентный код на изображение на многообразии данных.

В латентном пространстве существует известное распределение вероятности, так называемый белый шум ν, который обычно имеет равномерное распределение или гауссово распределение. Переносчик отображает белый шум в латентное распределение данных, карта переноса обозначается как $T : \nu \to \varphi_{\#}\mu$. Композиция переносчика и декодера называется *генератором*, $\varphi^{-1} \circ T$, который отображает образец белого шума в сгенерированное изображение. Эквивалентно, генератор переносит распределение белого шума в сгенерированное распределение данных на многообразии данных. *Дискриминатор* вычисляет расстояние между реальным распределением данных μ и сгенерированным распределением данных $(\varphi^{-1} \circ T)_{\#}\nu$. Генератор оптимизирует транспортное отображение, чтобы минимизировать расстояние между реальным распределением и сгенерированным распределением; дискриминатор максимизирует некоторый тип функционала для различения двух распределений. Конкуренция между генератором и дискриминатором в конечном итоге достигает равновесия по Нэшу, в этом состоянии человек не может отличить реальные изображения от сгенерированных. В последнее время оптимальный транспорт широко применяется для генеративных моделей. Во многих моделях генератор вычисляет оптимальное транспортное отображение между распределением белого шума и распределением латентного кода; дискриминатор вычисляет расстояние Вассерштейна между распределением реальных данных и сгенерированным распределением данных.

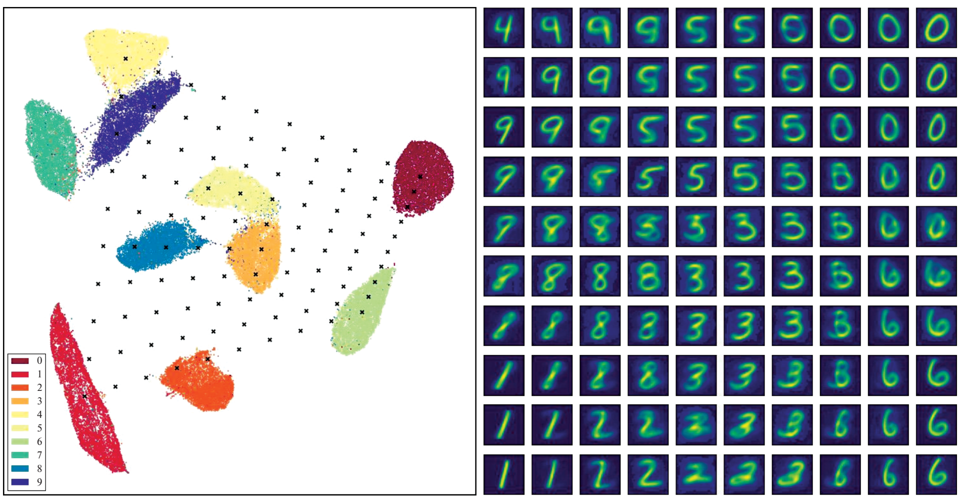
На фиг. 2 показан один из примеров генеративной модели: (а) – набор данных MNIST с изображениями рукописных цифр, (б) – сгенерированные изображения. Набор данных MNIST закодирован моделью UMap, распределение латентных данных показано на фиг. 3а. Каждая цифра соответствует одному кластеру. Мы помещаем 10×10 образцов на латентное пространство, и декодированные изображения показаны на фиг. 3б. Видно, что если сгенерированный латентный код попадает в кластер, то сгенерированное изображение чистое и четкое; в противном случае, если сгенерированный код попадает в промежутки между кластерами, то сгенерированное изображение нечеткое и похоже на смесь двух цифр.

Схлопывание/смешение мод. Несмотря на преимущества GAN, у них есть серьезные недостатки: 1) обучение GAN является сложным и чувствительным к гиперпараметрам; 2) GAN страдают от схлопывания мод, при котором генератор учится генерировать только несколько мод распре-

(а) (б)

Фиг. 2. Входной набор данных MNIST(а) и сгенерированные изображения (б).

(а) (б)

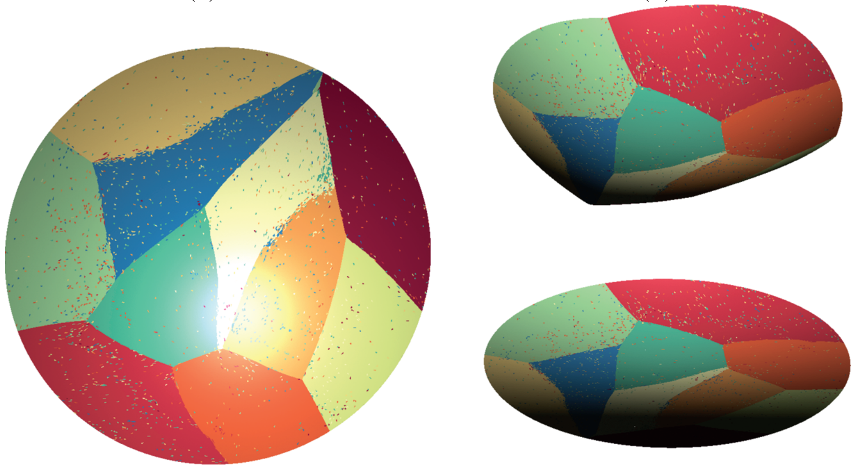


Фиг. 3. (а) – Латентные коды набора данных MNIST, закодированные моделью UMap; (б) – латентные коды декодируются и отображаются обратно на изображения.

деления данных, а остальные пропускает, хотя образцы из пропущенных мод встречаются во всех обучающих данных (см., например, [5]). В то время как для VAE кодер используется для отображения распределения данных на гауссовское латентное распределение, которое затем снова отображается на распределение данных декодером. Хотя стандартные VAE, как правило, улавливают все моды, они часто генерируют неоднозначные изображения на мультимодальных распределениях реальных данных.

В [6], [7] внутренняя причина схлопывания/смешения мод была объяснена с геометрической точки зрения. По теореме Брене о полярной факторизации (см. [8], [9]) и теореме Фигалли о регулярности (см. [10], [11], теорема 5 в приложении B), если носитель целевого распределения не является выпуклым, то на носителе исходного распределения существуют *сингулярные множества* такие, что транспортное отображение является прерывным на этих множествах. Как правило, генераторы/декодеры выражаются глубокими нейронными сетями, которые могут представлять только непрерывные отображения, поэтому они не могут аппроксимировать транспортные отображения с высокой точностью. Это внутреннее противоречие вызывает схлопывание и смешение мод в обычных генеративных моделях.

На фиг. 4 изображено оптимальное транспортное отображение из равномерного распределения на диске в латентное распределение набора данных MNIST, представленных на фиг. 3а. Поскольку латентное распределение имеет 10 мод (связанных компонентов), сингулярное множе-



Фиг. 4. Оптимальное транспортное отображение из равномерного распределения на диске в распределение латентных данных набора данных MNIST.

ство разбивает диск на десять частей, каждый из которых отображается на один кластер. Само отображение является прерывным на сингулярном множестве, поэтому не может быть представлено нейронной сетью. На фиг. 4б показан потенциал Бренье, который является непрерывным и дифференцируемым почти везде. Проекция недифференцируемых точек является сингулярным множеством. Поэтому нейронная сеть может представить потенциал Бренье. Изображение оптимального транспортного отображения будет распространяться на все моды, поэтому схлопывания мод не произойдет. Кроме того, изображение транспортного отображения не будет попадать в промежутки между модами, что исключит смешение мод. Поэтому важно изучить сингулярность оптимальных транспортных отображений.

3. ВЫПУКЛЫЙ ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ ВЗГЛЯД НА ОПТИМАЛЬНЫЙ ТРАНСПОРТ

Существует тесная связь между теоремой Александрова в выпуклой геометрии и теоремой Бренье в оптимальном транспорте. В данном разделе будет объяснена эта внутренняя связь.

3.1. Оптимальное транспортное отображение

Пусть $\Omega, \Omega^* \subset \mathbb{R}^d$ – области в евклидовом пространстве, с вероятностными мерами μ и ν соответственно, удовлетворяющие условию равенства общей массы: $\mu(\Omega) = \nu(\Omega^*)$. Транспортное отображение $T : \Omega \to \Omega^*$ является *сохраняющим меру*, если для любого множества Бореля $B \subset \Omega^*$, $\int_{T^{-1}(B)} d\mu(x) = \int_B d\nu(y)$. Условие сохранения меры обозначим как $T_\# \mu = \nu$.

Монж поставил задачу оптимального транспортного отображения: учитывая функцию стоимости транспорта $c : \Omega \times \Omega^* \to \mathbb{R}^+$, найти транспортное отображение $T : \Omega \to \Omega^*$, которое минимизирует общую стоимость транспорта,

$$\min\left\{\int_\Omega c(x, T(x)) d\mu(x) : T : \Omega \to \Omega^*,\ T_\# \mu = \nu\right\}. \tag{MP}$$

Минимизатор называется *оптимальным транспортным отображением*. Стоимость транспорта оптимального транспортного отображения называется *расстоянием Вассерштейна* между мерами.

Теорема 1 (Бренье, см. [8]). *Пусть для компактной области $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ с абсолютно непрерывными вероятностными мерами μ и ν, $\partial\Omega$ имеет нулевую меру Лебега, а стоимость транспортировки*

$c(x,y) = \frac{1}{2}|x-y|^2$. *Тогда существует выпуклая функция* $u : \Omega \to \mathbb{R}$ *однозначная с точностью до константы, так называемый потенциал Бренье, и оптимальное транспортное отображение задается градиентом* u, $T = \nabla u$.

Потенциал Бренье удовлетворяет уравнению Монжа–Ампера

$$\det D^2 u(x) = \frac{d\mu(x)}{d\nu \circ \nabla u(x)} \tag{1}$$

с граничным условием $\nabla u(\Omega) = \Omega^*$. Однозначное оптимальное транспортное отображение дается в виде $T = \nabla u$.

3.2. Решение Александрова

Для численных расчетов потенциал Бренье аппроксимируется кусочно-линейной выпуклой функцией, график которой представляет собой выпуклый многоугольник. Субградиент выпуклой функции u в точке x определяется как $\partial u(x) := \{p \in \mathbb{R}^d : u(z) \geq \langle p, z - x\rangle + u(x),\ \forall z \in \Omega\}$.

Субградиент определяет отображение, принимающее множества как значения $\partial u : \Omega \to \Omega^*$, $x \mapsto \partial u(x)$. Мы можем использовать карту субградиента для замены карты градиента в уравнении Монжа–Ампера (1) и переписать его как

$$(\partial u)_\# \mu = \nu, \tag{2}$$

или, эквивалентно, $\forall \mathrm{Borel}\ B \subset \Omega^*$, $\mu((\partial u)^{-1}(B)) = \nu(B)$. Таким образом, здесь u называется решением Александрова. На самом деле, решение Александрова эквивалентно политопу Александрова, а теорема Бренье эквивалентна теореме Александрова в выпуклой геометрии.

3.3. Теоремы Минковского и Александрова

Здесь мы кратко напомним основные понятия и теоремы Минковского и теоремы Александрова в выпуклой геометрии, которые могут быть описаны уравнением Монжа–Ампера и тесно связаны со степенными диаграммами и взвешенными триангуляциями Делоне в вычислительной геометрии. Эта внутренняя связь дает теоретический инструмент для изучения пространства политопов Александрова (подробнее см. [12], [13]).

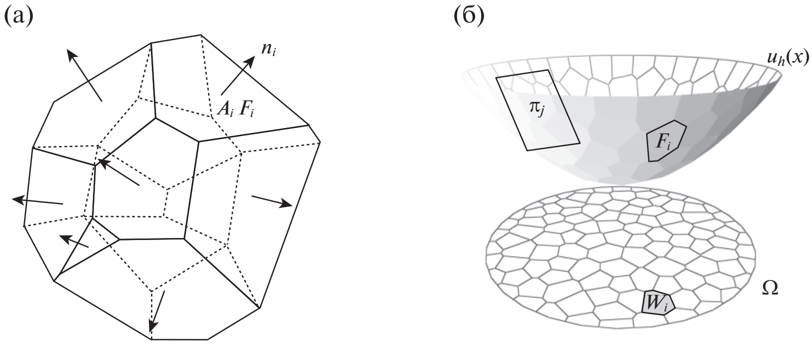
Минковский доказал существование и единственность выпуклого многоугольника с заданными нормалями и площадями граней (фиг. 5).

Теорема 2 (Минковского). *Предположим, что* $n_1,\dots,n_k$ *— единичные векторы, которые охватывают* $\mathbb{R}^n$, *и найдутся положительные числа* $\nu_1,\dots,\nu_k$ *такие, что* $\sum_{i=1}^k \nu_i n_i = 0$. *Тогда существует компактный выпуклый многоугольник* $P \subset \mathbb{R}^n$, *имеющий ровно* k *граней* $F_1,\dots,F_k$ *коразмерности-1, такой, что* n_i *— вектор внешней нормали к* F_i *и* ν_i *— объем* F_i. *Более того, такой* P *единственен с точностью до трансляции.*

Доказательство Минковского является вариационным и предлагает алгоритм нахождения политопа. Теорема Минковского для неограниченных выпуклых многогранников была рассмотрена и решена А.Д. Александровым и его учеником А. Погореловым. В своей книге о выпуклых многогранниках [12] Александров доказал следующую фундаментальную теорему (см. [12, теоремы 7.3.2 и 6.4.2]).

Теорема 3 (Александрова, см. [12]). *Предположим, что* Ω *— компактный выпуклый многоугольник с непустой внутренней частью в* $\mathbb{R}^n$, $n_1,\dots,n_k \subset \mathbb{R}^{n+1}$ *представляют собой* k *различных единичных векторов с отрицательными* $(n+1)$*-ми координатами, и положительные числа* $\nu_1,\dots,\nu_k$ *таковы, что* $\sum_{i=1}^k \nu_i = \mathrm{vol}(\Omega)$. *Тогда существует выпуклый политоп* $P \subset \mathbb{R}^{n+1}$ *с точно* k *гранями коразмерности-1* $F_1,\dots,F_k$ *такой, что* n_i *— нормальный вектор к* F_i *и пересечение* Ω *с проекцией* F_i *имеет объем* ν_i. *Более того, такой* P *единственен с точностью до вертикальной трансляции.*

Доказательство Александрова основано на алгебраической топологии и неконструктивно. Ауренхаммер (см. [14]) дал конструктивное доказательство с использованием степенной диа-



Фиг. 5. Теоремы Минковского (а) и Александрова (б) для выпуклых политопов с предписанными нормалями и областями граней.

граммы. Гу и соавт. (см. [13]) дали другое вариационное доказательство обобщенной теоремы Александрова, изложенное в терминах выпуклых функций. Энергии в [14] и [15] являются двойственными друг другу по Лежандру.

Определение 1 (политоп Александрова). При заданных $Y = \{y_1,\ldots,y_k\}$, $y_i \in \mathbb{R}^n$, $i = 1,2,\ldots,k$, и $h = (h_1,\ldots,h_k) \in \mathbb{R}^k$ верхняя оболочка гиперплоскостей $\pi_i(x) = \langle x, y_i\rangle - h_i$ есть

$$u_h(x) = \max_{i=1}^{k}\{\pi_i(x)\} = \max_{i=1}^{k}\{\langle y_i, x\rangle - h_i\}, \tag{3}$$

где $\langle\,,\rangle$ представляет собой скалярное произведение. Граф u_h называется *политопом Александрова*, обозначается как $P(Y,h)$.

Проекция политопа Александрова приводит к *степенной диаграмме* $\mathbb{R}^n$, каждая ячейка $W_i(h)$ является замкнутым выпуклым политопом:

$$\mathbb{R}^d = \bigcup W_i(h) = \bigcup_{i=1}^{k}\left\{x \in \mathbb{R}^d \,|\, \pi_i(x) \ge \pi_j(x),\ i \ne j\right\}, \tag{4}$$

где $W_i(h)$ называются *степенными ячейками*. Степенная диаграмма может быть сформулирована с помощью степенного расстояния

$$W_i(h) = \left\{x \in \mathbb{R}^d \,|\, \mathrm{pow}_h(x, y_i) \le \mathrm{pow}_h(x, y_j),\ i \ne j\right\},$$

где степенное расстояние между x и y_i определяется как

$$\mathrm{pow}_h(y_i, x) := \frac{1}{2}|x - y_i|^2 - r_i^2, \tag{5}$$

где r_i^2 – степень, связанная с y_i, определяемая как

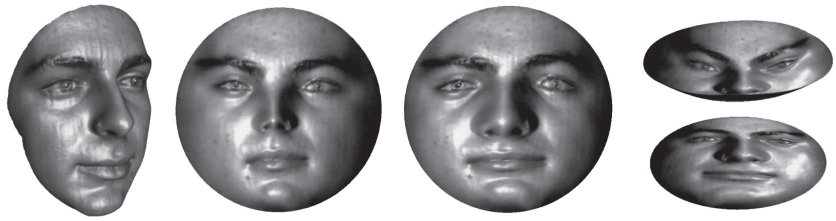
$$r_i^2 := \frac{1}{2}|y_i|^2 - h_i. \tag{6}$$

Для меры вероятности μ, определенной на Ω, объем $W_i(h)$ определяется как

$$w_i(h) := \mu(W_i(h) \cap \Omega) = \int\limits_{W_i(h)\cap\Omega} d\mu.$$

Гу и др. дали конструктивное доказательство теоремы Александрова.

Теорема 4 (Гу–Луо–Сун–Яу, см. [13]). *Пусть Ω – компактная выпуклая область в $\mathbb{R}^n$, $Y = \{y_1,\ldots,y_k\}$ – множество отдельных точек в $\mathbb{R}^n$ и μ – мера вероятности на Ω. Тогда для любых $\nu_1,\ldots,\nu_k > 0$ с $\sum_{i=1}^{k}\nu_i = \mu(\Omega)$ существует $h = (h_1,\ldots,h_k)\mathbb{R}^k$, единственное с точностью до аддитив-*



Фиг. 6. Первый эксперимент: трехмерное лицо (а) отображается на единичный диск с помощью отображения Римана (б). Вычисляется оптимальное транспортное отображение из равномерного распределения в меру, индуцированную отображением Римана; (в), (г) – потенциал Бренье.

ной константы $(c,\ldots,c)$*, так что* $w_i(h) = \nu_i$*, для всех* i*. Векторы* h *являются точными точками максимума вогнутой функции*

$$E(h) = \int_0^h \sum_{i=1}^k w_i(\eta) d\eta_i - \sum_{i=1}^k h_i \nu_i \tag{7}$$

на открытом выпуклом множестве (*пространстве допустимых высот*)

$$\mathcal{H}_\Omega(Y) = \{h \in \mathbb{R}^k \,|\, w_i(h) > 0,\ \forall y_i \in Y\}. \tag{8}$$

Кроме того, ∇u_h *минимизирует квадратичную стоимость* $\int_\Omega |x - T(x)|^2 \, d\mu(x)$ *среди всех транспортных отображений* $T_\# \mu = \nu$*, где мера Дирака определена как* $\nu = \sum_{i=1}^k \nu_i \delta(y - y_i)$.

На фиг. 6 продемонстрировано оптимальное транспортное отображение, полученное методом политопа Александрова. Поверхность лица мужчины оцифрована в треугольную сетку M (фиг. 6а). Поверхность конформно отображается на плоский единичный диск с помощью отображения Римана (фиг. 6б), плоские изображения вершин обозначаются как $y_1,\ldots,y_k$. Для каждой вершины v_i общая площадь прилегающих к ней треугольных граней обозначается как ν_i. При масштабировании общая площадь $\sum_{i=1}^k \nu_i = \pi$. Затем вычисляем оптимальное транспортное отображение (фиг. 6в) из единичного диска с равномерным распределением $\nu = \sum_{i=1}^k \nu_i \delta(y - y_i)$. Потенциал Бренье показан на фиг. 6г.

3.4. Вторичный политоп и вторичная степенная диаграмма

Кратко напомним основные понятия и теоремы теории вторичных политопов Гельфанда и его двойственной вторичной степенной диаграммы (подробнее см. [15]–[17]), которые показывают, что допустимое пространство решений $\mathcal{H}_\Omega(Y)$ имеет разложение по ячейкам.

Вторичный политоп. Пусть $Y = \{y_1,\ldots,y_k\}$ – конфигурация точек, а конечное множество отдельных точек в $\mathbb{R}^d$, $\mathrm{Conv}(Y)$ – выпуклая оболочка Y. Триангуляция T из $(Y, \mathrm{Conv}(Y))$ разбивает внутренний объем, ограниченный $\mathrm{Conv}(Y)$, на симплексы с вершинами в Y. Некоторые $y_i \in Y$ могут не быть вершинами симплекса.

Учитывая триангуляцию T, частично линейная функция $g : \mathrm{Conv}(Y) \to \mathbb{R}$ является аффинно-линейной на каждом симплексе T. Более того, g является вогнутой, если для любых $x, y \in \mathrm{Conv}(Y)$ $g(tx + (1-t)y) \geq tg(x) + (1-t)g(y)$.

Определение 2 (когерентная триангуляция). Триангуляция T из $(Y, \mathrm{Conv}(Y))$ называется *когерентной,* если существует вогнутая кусочно-линейная функция, область линейности которой в точности является (максимальными) симплексами T.

Пусть T – триангуляция $(Y, \mathrm{Conv}(Y))$. Характеристическая функция T, $\varphi_T : Y \to \mathbb{R}$, определяется следующим образом:

$$\varphi_T(\omega) = \sum_{\omega\sim\sigma} \mathrm{vol}(\sigma), \tag{9}$$

где суммирование ведется по всем (максимальным) симплексам T, для которых ω является вершиной. Если ω не является вершиной ни одного симплекса из T, то $\varphi_T(\omega) = 0$.

Определение 3 (вторичный политоп). *Вторичный политоп* $\Sigma(Y)$ – это выпуклая оболочка в пространстве $\mathbb{R}^Y$ векторов ϕ_T для всех триангуляций $(Y, \mathrm{Conv}(Y))$ T.

Свойства вторичного политопа приведены в теореме 5.

Теорема 5. 1) *Вторичный политоп* $\Sigma(Y)$ *имеет размерность* $k - n - 1$, *где* $k = \#(Y)$.

2) *Если* T – *когерентная триангуляция* $(Y, \mathrm{Conv}(Y))$, *то* $\varphi_T \neq \varphi_{T'}$ *для любой другой триангуляции* $(Y, \mathrm{Conv}(Y))$ T'. *Вершины* $\Sigma(Y)$ – *это именно характеристические функции для всех связных триангуляций* $(Y, \mathrm{Conv}(Y))$ T.

Вторичная степенная диаграмма. Первичные взвешенные триангуляции Делоне дуальны к степенным диаграммам; вторичные политопы дуальны к вторичным степенным диаграммам. Вторичная степенная диаграмма – это разбиение на ячейки пространства допустимых высот в (8), где каждая ячейка соответствует взвешенной триангуляции Делоне (когерентной триангуляции) Y. Подробности можно найти в теории вторичных степенных диаграмм (см. [17]).

Фиксируя триангуляцию $(Y, \mathrm{Conv}(Y))$ T, симплекс $\sigma \in T$ имеет объем $\mathrm{vol}(\sigma)$. Учитывая вектор высоты $\mathbf{h}$, линейная функция $\pi_T(\mathbf{h})$ определяется следующим образом:

$$\pi_T(\mathbf{h}) = \frac{1}{n+1} \sum_{y_i \in Y} \sum_{y_i \sim \sigma, \sigma \in T} \mathrm{vol}(\sigma) h_i. \tag{10}$$

Теорема 6 (вторичная степенная диаграмма). *Для заданной конфигурации точек* $Y = \{y_1, \dots, y_k\} \subset \mathbb{R}^n$ *выпуклая область* $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, *содержащая начало координат, имеет следующие свойства:* 1) *Для каждой невырожденной взвешенной триангуляции Делоне* $T \in \mathcal{T}(Y)$, *если ячейка* D_T *непустая, то она выпуклая. Более того, если* $h \in D_T$, *то* $\lambda h \in D_T$ *для всех* $0 < \lambda < 1$. 2) *Разбиение на ячейки пространства степенных диаграмм Александрова*

$$\mathcal{H}_\Omega(Y) = \bigcup_{T \in \mathcal{T}(Y)} D_T \tag{11}$$

есть степенная диаграмма, полученная проекцией верхней оболочки

$$U(Y) = \max_{T \in \mathcal{T}(Y)} \{-\pi_T(\mathbf{h})\}, \tag{12}$$

где гиперплоскость $\pi_T(\mathbf{h}) \subset \mathbb{R}^{k+1}$ – *объем триангуляции* T *в* (10). 3) *Если* T – *невырожденная когерентная триангуляция* $T \in \mathcal{T}(Y)$, *то* D_T *непуста.*

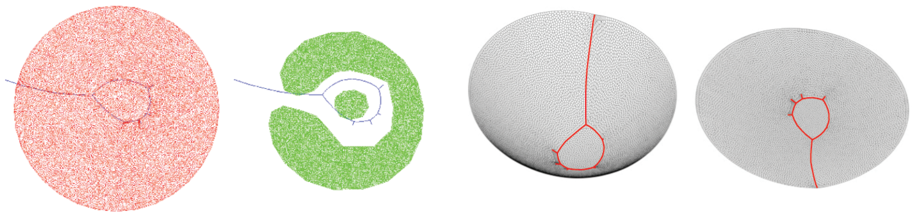
4. СИНГУЛЯРНОЕ МНОЖЕСТВО ОПТИМАЛЬНЫХ ТРАНСПОРТНЫХ ОТОБРАЖЕНИЙ

Оптимальные транспортные отображения не могут быть глобально непрерывными. Сингулярное множество разрывов играет важную роль в генеративных моделях в глубоком обучении.

4.1. Сингулярное множество

Теорема 7 (регулярность Фигалли, см. [18]). *Пусть* $\Omega, \Lambda \subset \mathbb{R}^d$ – *два ограниченных открытых множества,* $f, g : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^+$ – *две плотности вероятности, которые равны нулю вне* Ω, Λ *и ограничены от нуля и бесконечности на* Ω, Λ *соответственно. Пусть* $T = \nabla u : (\Omega, f dx) \to (\Lambda, g dy)$ – *оптимальное транспортное отображение, определяемое теоремой Бренье. Тогда существуют два относительно замкнутых множества* $\Sigma_\Omega \subset \Omega$ *и* $\Sigma_\Lambda \subset \Lambda$ *с* $|\Sigma_\Omega| = |\Sigma_\Lambda| = 0$ *такие, что* $T : \Omega \backslash \Sigma_\Omega \to \Lambda \backslash \Sigma_\Lambda$ *является гомеоморфизмом класса* $C^{0,\alpha}_{\mathrm{loc}}$ *для некоторого* $\alpha > 0$.

(а) (б) (в) (г)



Фиг. 7. Сингулярное множество оптимальных транспортных отображений равномерного распределения на диске на диск в форме острова: (а) – степенная диаграмма, (б) – взвешенная триангуляция Делоне, (в) – потенциал Бернье, вид снизу, (г) – потенциал Бернье, вид сверху. Синие линии показывают сингулярности на области, красные – недифференцируемые точки на потенциале Бренье.

Как показано на фиг. 7, область Ω – единичный диск, область Λ имеет две связные компоненты. Обе функции плотности f, g являются константами, а меры вероятности – равномерными распределениями. Оптимальное транспортное отображение T является градиентным отображением потенциала Бренье $u : \Omega \to \mathbb{R}$. Множество сингулярностей Σ_Ω – это цикл внутри Ω, образ $\Omega \backslash \Sigma_\Omega$ покрывает Λ. На виде снизу легко увидеть, что потенциал Бренье C^1 почти везде, кроме Σ_Ω, где потенциал только C^0. Сингулярное множество Σ_Ω представляет собой граф, который можно разложить на дуги и точки ветвления. Возьмем точку сингулярного множества $x \in \Sigma_\Omega$, если x находится внутри дуги, то субдифференциал $\partial u(x)$ – это отрезок прямой; если x – точка ветвления, то $\partial u(x)$ – это выпуклое множество размерности 2.

Сингулярное множество может быть определено с помощью обобщенной концепции медиальной оси.

Определение 4 (степенная медиальная ось). Пусть $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ – область в евклидовом пространстве, $h : \Lambda \to \mathbb{R}$ – выпуклая функция, которая определяет степенное расстояние как в (5),

$$\mathrm{pow}_h(x, y) := \frac{1}{2}|x - y|^2 - \left(\frac{1}{2}|y|^2 - h(y)\right).$$

Для каждой точки $x \in \mathbb{R}^d$, *ближайшая точка* Λ к x определяется как

$$\mathrm{Cl}_\Lambda(x, h) := \arg\inf_{y \in \Lambda} \mathrm{pow}_h(x, y),$$

степенная медиальная ось определяется как

$$\mathcal{M}_\Lambda(h) := \{x \in \mathbb{R}^d \,||\mathrm{Cl}_\lambda(x, h)| > 1\}.$$

Предложение 1 (сингулярное множество). *Пусть $\Omega, \Lambda \subset \mathbb{R}^d$ – компактные области с абсолютно непрерывными мерами μ и ν, $\partial\Omega$ имеет нулевую меру Лебега. Стоимость транспортировки является квадратичным евклидовым расстоянием. Пусть $u : \Omega \to \mathbb{R}$ – потенциал Бренье, $\nabla u : \Omega \to \Lambda$ – оптимальное транспортное отображение. $u^* : \Lambda \to \mathbb{R}$ – дуал Лежандра для u, тогда сингулярное множество оптимального транспортного отображения задается следующим образом*:

$$\Sigma_\Omega = \mathcal{M}_\Lambda(u^*) \cap \Omega. \tag{13}$$

Доказательство. Пусть функция стоимости $c(x, y) = \langle x, y \rangle$. Пусть $x_0 \in \Omega$, $y_0 \in \Lambda$ и $y_0 \in \partial u$, тогда

$$u(x_0) + u^*(y_0) = \langle x_0, y_0 \rangle,$$
$$u(x_0) + u^*(y) \geq \langle x_0, y \rangle \quad \forall y \in \Lambda.$$

Поэтому для любого $y \in \Lambda$

$$u^*(y_0) - \langle x_0, y_0 \rangle \leq u^*(y) - \langle x_0, y \rangle,$$
$$\frac{1}{2}|x_0 - y_0|^2 - \left(\frac{1}{2}|y_0|^2 - u^*(y_0)\right) \leq \frac{1}{2}|x_0 - y|^2 - \left(\frac{1}{2}|y|^2 - u^*(y)\right).$$

Это означает, что для всех $y \in \Lambda$, $\mathrm{pow}_{u^*}(x_0, y_0) \le \mathrm{pow}_{u^*}(x_0, y)$, поэтому $y_0 \in \mathrm{Cl}_\Lambda(x_0, u^*)$. А именно, y_0 является ближайшей точкой в Λ (по степенному расстоянию) к x_0, оптимальное транспортное отображение T отображает каждую точку x_0 в Ω на ближайшую точку y_0 в Λ. И наоборот, если $y_0 \in \Lambda$ является ближайшей точкой к $x_0 \in \Omega$, то $y_0 \in \partial u(x_0)$.

Предположим, что $x \in \Omega$, и x находится на степенной медиальной оси Λ, $x \in \mathcal{M}_\Lambda(u^*)$, тогда она имеет две ближайшие точки $y_1, y_2 \in \Lambda$, следовательно, $y_1, y_2 \in \partial u(x)$; u не дифференцируема на x, x является сингулярностью u. Тогда имеем

$$\mathcal{M}_\Lambda(u^*) \cap \Omega \subset \Sigma_\Omega.$$

И наоборот, если предположить, что $x \in \Sigma_\Omega$, то $\partial u(x)$ имеет, по крайней мере, две точки $y_1, y_2 \in \Lambda$, которые ближе всего к x и имеют равные степенные расстояния. Следовательно, x лежит на степенной медиальной оси Λ, тогда имеем

$$\Sigma_\Omega \subset \mathcal{M}_\Lambda(u^*) \cap \Omega.$$

Следовательно, уравнение (13) выполняется. Предложение 1 доказано.

4.2. Алгоритм построения сингулярного множества

Предположим, что $\Omega, \Lambda \subset \mathbb{R}^d$ – компактные области, Ω – выпуклая область. Мы плотно сэмплируем границу и внутренность Λ, выборки обозначаются как $Y = \{y_1, \ldots, y_n\}$. Граничные выборки триангулируются, образуя многогранную гиперповерхность, обозначаемую ∂Y. Тогда ∂Y аппроксимирует граничную поверхность Λ, $\partial\Lambda$. При заданных степенях $\{w_1, \ldots, w_n\}$, или, эквивалентно, высоте $\mathbf{h} = (h_1, \ldots, h_n)$ степенная диаграмма обозначается $\mathcal{D}_Y(\mathbf{h})$, как определено в уравнении (4). Степенная медиальная ось задается объединением граней f_{ij} коразмерности 1, которые являются пересечениями двух степенных ячеек Вороного $W_i(\mathbf{h})$ и $W_j(\mathbf{h})$, соответствующие y_i и y_j находятся в граничном многограннике ∂Y, но не являются смежными $y_i \nsim y_j$ в ∂Y,

$$\mathcal{M}_Y(\mathbf{h}) = \bigcup_{y_i, y_j \in \partial Y, y_i \nsim y_j} \{W_i(\mathbf{h}) \cap W_j(\mathbf{h})\}. \tag{14}$$

Сингулярное множество дискретного оптимального транспортного отображения есть

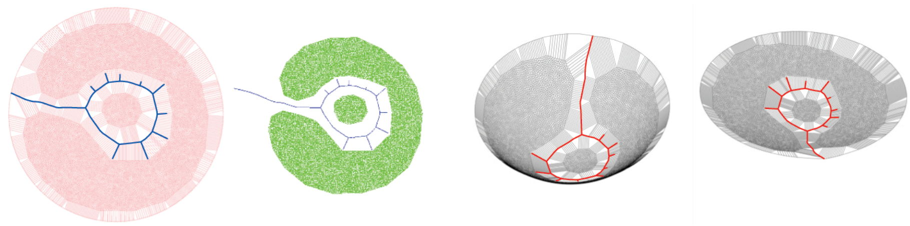
$$\Sigma_\Omega(\mathbf{h}) = \mathcal{M}_Y(\mathbf{h}) \cap \Omega. \tag{15}$$

На фиг. 8 показана степенная медиальная ось, полученная с помощью этого алгоритма, где Ω – единичный диск, Λ – плоский многоугольник в форме острова с двумя соединенными компонентами. Мы плотно сэмплируем внутреннюю часть и границу Λ, чтобы получить дискретное множество точек $Y = \{y_i\}_{i=1}^n$. Граничные выборки последовательно соединяются, образуя ∂Y. Определим все степени равными нулю, $\{r_i = 0\}_{i=1}^n$, что эквивалентно $\{h_i = |y_i|^2/2\}_{i=1}^n$. Тогда на фиг. 8а показана диаграмма Вороного для Y, синий график – условная медиальная ось. На фиг. 8в, г красными линиями показаны недифференцируемые точки на графике потенциала Бренье. Если изменить высоту, то степенная медиальная ось (сингулярности оптимального транспортного отображения) может быть получена с помощью того же самого алгоритма.

4.3. Эквивалентность гомотопии сингулярного множества

Для оптимального транспортного отображения $T = \nabla u : (\Omega, \mu) \to (\Lambda, \nu)$, если мы изменим целевую меру ν, оптимальное транспортное отображение T изменится соответствующим образом. Можно показать, что сингулярные множества оптимальных транспортных отображений гомотопны друг другу. Сначала покажем это в дискретной постановке, а затем обобщим на устойчивость оптимальных транспортных отображений.

Определение 5 (сумма Минковского). Предположим, что A и B – подмножества на $\mathbb{R}^n$. Их сумма Минковского определяется как $A \oplus B := \{p + q \mid p \in A, q \in B\}$.



Фиг. 8. Степенная медианная ось, полученная с помощью алгоритма (15). Синий плоскостной график показывает медиальную ось многоугольника в форме острова. Красная линия показывает недифференцируемые точки на потенциале Бренье.

Теорема 8 (гомотопия сингулярных множеств). *Имея выпуклую область $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ и дискретное множество точек $Y = \{y_i\}_{i=1}^n$, фиксируем исходную меру μ, функция плотности которой абсолютно непрерывна. Целевая мера $\nu = \sum_{i=1}^n \nu_i \delta(y - y_i)$, $\nu_i > 0$, $i = 1, 2, \ldots, n$, такая, что $\mu(\Omega) = \sum_{i=1}^n \nu_i$. Если даны две целевые меры ν_0 и ν_1, соответствующие им высоты $\mathbf{h}_0$ и $\mathbf{h}_1$, то их сингулярные множества гомотопически эквивалентны друг другу: $\Sigma_\Omega(\mathbf{h}_0) \sim \Sigma_\Omega(\mathbf{h}_1)$.*

Теорема 4 показывает, что пространство допустимых высот $\mathcal{H}_Y$ в уравнении (8) выпукло, поэтому отрезок, соединяющий $\mathbf{h}_0$ и $\mathbf{h}_1$, содержится в $\mathcal{H}_Y$, $\gamma(t) := (1-t)\mathbf{h}_0 + t\mathbf{h}_1$. Согласно теореме о вторичной степенной диаграмме 6, $\mathcal{H}_Y$ имеет разбиение на ячейки $\mathcal{H}_Y = \bigcup_{T \in \mathcal{T}(Y)} \mathcal{D}_T$, каждая ячейка соответствует взвешенной триангуляции Делоне (также комбинаторной структуре силовой диаграммы Ω). Предположим, что прямая $\gamma(t)$ пересекает множество ячеек, соответствующих триангуляциям $T_0, \ldots, T_k$. Тогда единичный интервал делится на отрезки $0 = t_0 < \ldots < t_k = 1$, удовлетворяющие следующим условиям:

1) $\gamma(t) \in \mathcal{D}_{T_i}$ $\forall t \in [t_i, t_{i+1}]$,

2) $\gamma(t_i) \in \mathcal{D}_{T_i} \cap \mathcal{D}_{T_{i+1}}$.

Шаг 1. Для любых $t \in (t_i, t_{i+1})$ все взвешенные триангуляции Делоне $T(\gamma(t))$ имеют одинаковую комбинаторную структуру. Все соответствующие степенные диаграммы также имеют одинаковую комбинаторную структуру. Потенциал Бренье $u_{\gamma(t)}(x) = \max_{i=1}^k \{\langle y_i, r\rangle - \gamma(t)_i\}$ может быть записан как линейная комбинация:

$$u_{\gamma(t)} = (1-\lambda)u_{\gamma(t_i)} + \lambda u_{\gamma(t_{i+1})},$$

где $\lambda = (t_{i+1} - t)/(t_{i+1} - t_i)$. Граф потенциала Бренье можно записать в виде линейной комбинации с помощью суммы Минковского:

$$G(\gamma(t)) = \lambda G(\gamma(t_i)) \oplus (1-\lambda) G(\gamma(t_{i+1})),$$

где $G(\gamma(t))$ – граф функции $u_{\gamma(t)}$. Поэтому, как проекция графов потенциалов Бренье, каждая степенная ячейка может быть представлена в виде суммы Минковского $W_i(\gamma(t)) = \lambda W_i(\gamma(t_i)) \oplus (1-\lambda) W_i(\gamma(t_{i+1}))$.

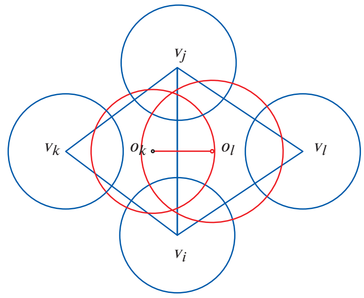
Это означает, что сингулярное множество также удовлетворяет соотношению линейной комбинации:

$$\Sigma_\Omega(\gamma(t)) = \lambda \Sigma_\Omega(\gamma(t_i)) \oplus (1-\lambda)\Sigma_\Omega(\gamma(t_{i+1})).$$

Шаг 2. В критической точке t_i мы хотим показать, что

$$\lim_{t \to t_i^-} \Sigma_\Omega(\gamma(t)) = \lim_{t \to t_i^+} \Sigma_\Omega(\gamma(t)). \tag{16}$$

Сначала мы доказываем это для двумерного случая (фиг. 9), доказательство для случаев общей размерности очень похоже. Зададим взвешенную триангуляцию Делоне T, выберем два смежных треугольника $[v_i, v_j, v_k]$ и $[v_j, v_i, v_l]$. Степенная окружность, связанная с вершиной v_i – $c(v_i, r_i)$,



Фиг. 9. Конфигурация степенной диаграммы.

мощность — r_i^2. Тогда для каждого треугольника существует единственная окружность $c(o,r)$ (красная), ортогональная ко всем трем вершинным окружностям, так называемая силовая окружность грани. Степенной центр o и степенной радиус r удовлетворяют следующим условиям:

$$|v_i - o|^2 = r_i^2 + r^2, \quad |v_j - o|^2 = r_j^2 + r^2, \quad |v_k - o|^2 = r_k^2 + r^2.$$

Как показано на фиг. 9, степенными центрами двух граней являются o_k и o_l соответственно. Отрезок прямой, соединяющий два степенных центра $[o_k, o_l]$ на степенной диаграмме, дуален ребру $[v_i, v_j]$ во взвешенной триангуляции Делоне.

Вдоль кривой $\gamma(t)$ степени вершин непрерывно меняются. Предположим, что когда $t < t_i$ и приближается к t_i, два степенных центра o_k и o_l становятся все ближе и ближе. В критической точке t_i центр o_k совпадает с o_l, и триангуляция меняется путем замены ребер $[v_i, v_j]$ на $[v_k, v_l]$. При дальнейшем увеличении t, где $t > t_i$, степенной центр $[v_k, v_i, v_l]$ и центр $[v_l, v_j, v_k]$ расходятся. Это показывает, что в критический момент времени t_i край степенной диаграммы $[v_i, v_j]$ сжимается до точки и растет до нового края $[v_k, v_l]$. Таким образом, степенная диаграмма изменяется непрерывно. Следовательно, сингулярное множество также меняется непрерывно, а значит, уравнение (16) выполняется. Для пространств больших измерений обмен краями заменяется бистеллярным преобразованием (см. [19]), и доказательство остается точно таким же.

Комбинируя шаги 1 и 2, получаем для $0 \le i < k$

$$\Sigma_\Omega(\gamma(t_i^+)) \sim \Sigma_\Omega(\gamma(t_{i+1}^-)) = \Sigma_\Omega(\gamma(t_{i+1}^+)),$$

следовательно,

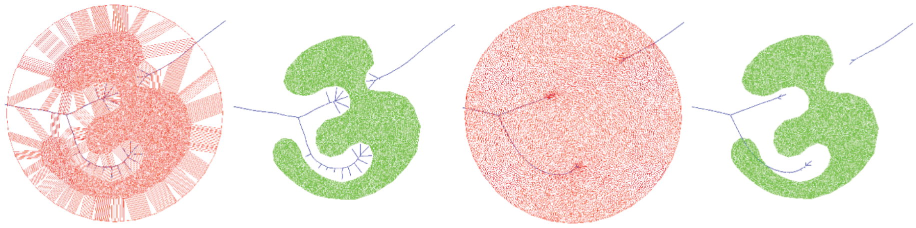
$$\Sigma_\Omega(\gamma(t_0)) \sim \Sigma_\Omega(\gamma(t_1^-)) = \Sigma_\Omega(\gamma(t_1^+)) \sim \cdots \sim \Sigma_\Omega(\gamma(t_k)).$$

Теорема 8 доказана.

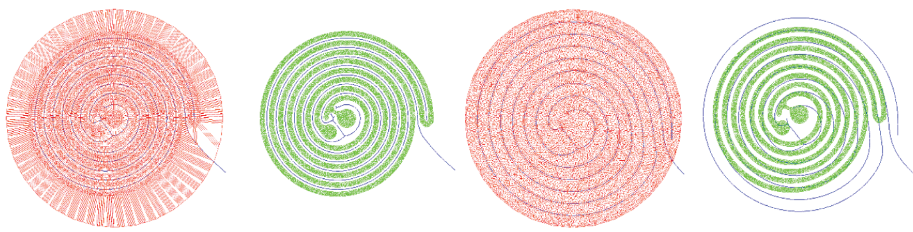
На фиг. 7 и 8 была показана связь гомотопии между сингулярными множествами оптимальных транспортных отображений для различных целевых мер. Мы видим, что мелкие ветви могут исчезнуть, но петли и крупные ветви хорошо сохраняются. На фиг. 10 показана деформация гомотопии между сингулярными множествами оптимальных транспортных отображений с единичного диска на область в форме морского конька с различными целевыми мерами. В начале мы вычисляем условную медиальную ось, а целевая мера на каждом y_i равна площади соответствующей ячейки. Конечной целевой мерой является равномерное распределение.

Более сложный пример показан на фиг. 11. Вычисляются оптимальные транспортные отображения с плоской спиральной формы на единичный диск, и извлекаются соответствующие сингулярные множества. Видно, что сингулярные множества (степенные медиальные оси) гомотопически эквивалентны друг другу.

В приложениях глубокого обучения набор обучающих данных кодируется в латентное пространство (см. фиг. 3), распределение латентных данных является суммой или мерой Дирака $\nu = n^{-1}\sum_{i=1}^{n} \delta(y - \varphi(x_i))$, где n — количество выборок, x_i — обучающая выборка. Оптимальное транспортное отображение может быть вычислено с помощью предложенного алгоритма



Фиг. 10. Сингулярные множества оптимальных транспортных отображений между единичным диском и формой морского конька с различными мерами.



Фиг. 11. Степенные медиальные оси гомотопны для сложной плоской области.

(см. фиг. 4). Сингулярность на опорном участке распределения белого шума и недифференцируемые точки на потенциале Бренье могут быть легко обнаружены. Полученные результаты можно увидеть на фиг. 2, схлопывание и смешение мод были устранены путем тщательной обработки сингулярностей оптимального транспортного отображения.

5. УСЛОВИЕ КРИВИЗНЫ ДЛЯ СУЩЕСТВОВАНИЯ СИНГУЛЯРНОСТЕЙ

В этом разделе мы доказываем достаточное условие существования сингулярностей оптимальных транспортных отображений между плоскими областями. Ключевая идея заключается в обобщении концепции расстояния Фреше и использовании условия скошенности.

5.1. Нормальное расстояние Фреше

Предположим, человек выгуливает свою собаку, он проходит кривую γ_1, а собака проходит γ_2 (фиг. 12а). Ни один из них не может двигаться назад. Расстояние Фреше между этими двумя кривыми равно длине самого короткого поводка. Расстояние Фреше дает лучшее измерение близости двух кривых, чем расстояние Хаусдорфа. Возможно, что две кривые имеют малое расстояние Хаусдорфа, но большое расстояние Фреше.

Пусть M – метрическое пространство; замкнутая кривая γ в M – непрерывное отображение из единичного круга в M, $\gamma : \mathbb{S}^1 \to M$; репараметризация α из $\mathbb{S}^1$ – сохраняющий ориентацию гомеоморфизм $\alpha : \mathbb{S}^1 \to \mathbb{S}^1$.

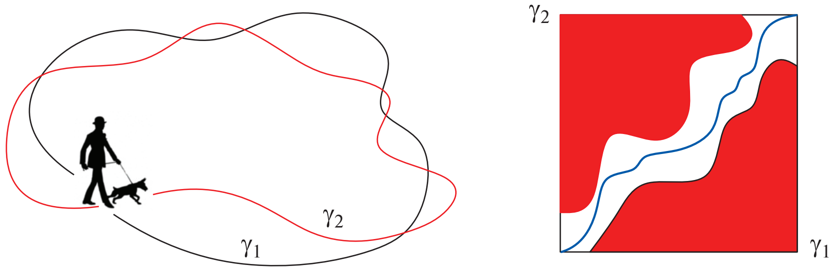
Определение 6 (расстояние Фреше). Пусть γ_1 и γ_2 – две заданные замкнутые кривые в M. Тогда *расстояние Фреше* $d_F(\gamma_1, \gamma_2)$ между γ_1, γ_2 определяется как инфимум по всем репараметризациям α и β из $\mathbb{S}^1$ максимума по всем $t \in \mathbb{S}^1$ расстояния в M между $\gamma_1(\alpha(t))$ и $\gamma_2(\beta(t))$, а именно,

$$d_F(\gamma_1, \gamma_2) = \inf_{\alpha,\beta} \max_{t\in\mathbb{S}^1} \{d_M(\gamma_1 \circ \alpha(t), \gamma_2 \circ \beta(t))\},$$

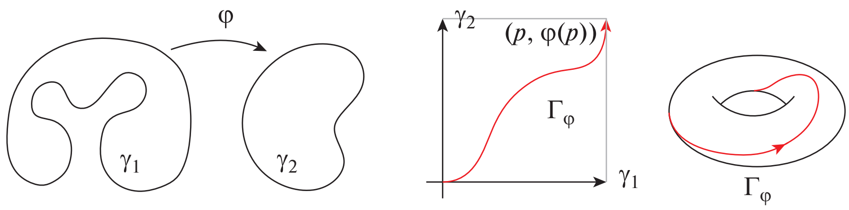
где d_M – геодезическое расстояние на M.

На фиг. 13 прямое произведение $\gamma_1 \times \gamma_2$ представлено в виде тора $T^2 := \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1$. На торе есть два канонических отображения широты и долготы:

$$\mathcal{F}_1 := \{(s,t) \in T^2 : t = \text{const}\}, \quad \mathcal{F}_2 := \{(s,t) \in T^2 : s = \text{const}\}.$$



Фиг. 12. Расстояние Фреше между γ_1 и γ_2 и соответствующее свободное пространство Фреше между ними $F_\varepsilon(\gamma_1, \gamma_2)$.



Фиг. 13. Пространство отображения между γ_1 и γ_2, $H(\gamma_1, \gamma_2)$.

Диагональ обозначается как $\Delta = \{(p, p) \in \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1\}$. Гомеоморфизм между γ_1 и γ_2 есть $\varphi : \mathbb{S}^1 \to \mathbb{S}^1$, представленный в виде замкнутой кривой $\Gamma_\varphi \subset T^2$:

$$\Gamma_\varphi := \{(p, \varphi(p)) \in \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1\},$$

которая гомотопна Δ. Более того, Γ_φ имеет одно и только одно пересечение с каждым из листьев в $\mathcal{F}_1$ или в $\mathcal{F}_2$. Все кривые такого вида представляют все гомеоморфизмы между γ_1 и γ_2.

Определение 7 (пространство отображения). *Пространство отображения* между γ_1 и γ_2, обозначаемое как $H(\gamma_1, \gamma_2)$, есть множество всех замкнутых кривых $\Gamma \subset T^2$, которое

1) гомотопно диагонали Δ,

2) пересекает каждый из листьев в $\mathcal{F}_1$ в одной точке,

3) пересекает каждый из листьев в $\mathcal{F}_2$ в одной точке.

Мы можем представить фундаментальную область тора в виде квадрата, тогда $\Gamma \in H(\gamma_1, \gamma_2)$, если и только если кривая монотонна как в горизонтальной, так и в вертикальной координатах.

Определение 8 (свободное пространство Фреше). Учитывая замкнутые кривые γ_1, γ_2 в метрическом пространстве M и константу $\varepsilon > 0$, свободное пространство между γ_1 и γ_2 определяется как

$$F_\varepsilon(\gamma_1, \gamma_2) := \left\{(s, t) \in \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1 : d_M(\gamma_1(s), \gamma_2(t)) < \varepsilon\right\}.$$

Как показано на фиг. 12б, каждая точка (s, t) на торе имеет красный цвет, если расстояние между соответствующими точками $\gamma_1(s)$ и $\gamma_2(t)$ больше ε, а белый иначе. Гомеоморфизм $\varphi : \gamma_1 \to \gamma_2$ показан синей кривой в свободном пространстве, что подразумевает $d_M(\gamma_1(s), \gamma_2 \circ \varphi(s)) < \varepsilon$, для всех $s \in \mathbb{S}^1$. Следующее предложение 2 очевидно.

Предложение 2. *Расстояние Фреше между* γ_1 *и* γ_2 *меньше* ε, *если и только если существует кривая* Γ *в пространстве отображений* $H(\gamma_1, \gamma_2)$, *и* Γ *также находится в свободном пространстве Фреше* $F_\varepsilon(\gamma_1, \gamma_2)$.

5.2. Нормальное расстояние Фреше

Предположим, что $\gamma : \mathbb{S}^1 \to \mathbb{R}^2$ – замкнутая плоская кривая, γ – C^1, поэтому нормаль везде определена. Кривая параметризуется длиной дуги $\gamma(s)$, единичная внешняя нормаль на $\gamma(s)$ представлена как $n(s) = (\cos\theta(s), \sin\theta(s))$, $\theta \in [0, 2\pi)$. Гауссово отображение $G : \gamma \to \mathbb{S}^1$ отображает каждую точку $\gamma(s)$ на нормаль $n(s)$.

Определение 9 (нормальное расстояние Фреше). Пусть $\gamma_1, \gamma_2 : \mathbb{S}^1 \to \mathbb{R}^2$ – замкнутые C^1-кривые на плоскости. Нормальное расстояние Фреше между ними определяется как расстояние Фреше между их образами отображения Гаусса на единичной окружности $\mathbb{S}^1$, а именно,

$$d_{F_n}(\gamma_1, \gamma_2) := \inf_{\alpha,\beta} \max_{t\in\mathbb{S}^1} \left\{ d_{\mathbb{S}^1}(G \circ \gamma_1 \circ \alpha(t), G \circ \gamma_2 \circ \beta(t)) \right\},$$

где $d_{\mathbb{S}^1}$ – расстояние $\mathbb{S}^1$, $\alpha, \beta : \mathbb{S}^1 \to \mathbb{S}^1$ – репараметризация $\mathbb{S}^1$.

Аналогично, мы можем определить нормальное свободное пространство между γ_1 и γ_2.

Определение 10 (нормальное свободное пространство). Пусть $\gamma_1, \gamma_2 : \mathbb{S}^1 \to \mathbb{R}^2$ – замкнутые C^1-кривые на плоскости. При фиксированном $\varepsilon > 0$ *нормальное свободное пространство* между γ_1 и γ_2 определяется как

$$F_{n,\varepsilon}(\gamma_1, \gamma_2) := \left\{ (s,t) \in \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1 : d_{\mathbb{S}^1}(G \circ \gamma_1(s), G \circ \gamma_2(t)) < \varepsilon \right\}, \tag{17}$$

где $G : \gamma \to \mathbb{S}^1$ – отображение Гаусса.

Предложение 3. *Пусть $\gamma_1, \gamma_2 \subset \mathbb{R}^2$ – две замкнутые C^1-кривые, где γ_1 параметризуется длиной дуги, а γ_2 – строго выпуклая, параметризуемая обратным отображением Гаусса. Нормальное расстояние Фреше между γ_1 и γ_2 меньше ε, если и только если существует кривая Γ в пространстве отображений $H(\gamma_1, \gamma_2)$, и Γ также находится в нормальном свободном пространстве Фреше $F_{n,\varepsilon}(\gamma_1, \gamma_2)$.*

Доказательство. В соответствии с определениями пространства отображения и нормального расстояния Фреше доказательство является простым.

Форма плоской C^2-кривой определяется исключительно ее кривизной, поэтому нормальное расстояние Фреше определяется кривизной обеих кривых γ_1 и γ_2. Для данной цели мы рассмотрим только простой случай, когда γ_2 является строго выпуклой кривой, такой как единичный круг $\mathbb{S}^1$, который параметризуется обратным значением его отображения Гаусса.

Лемма 1 (условие кривизны). *При тех же гипотезах предложения* 3, *если существует сегмент кривой $\gamma \subset \gamma_1$, начинающийся из p и заканчивающийся в q, удовлетворяющий $s(q) > s(p)$ и*

$$\theta(q) \leq \theta(p) - \pi, \tag{18}$$

где s – параметризация длины дуги γ_1, а θ – образ отображения Гаусса, т.е. угол единичной внешней нормали, тогда нормальное расстояние Фреше между γ_1 и γ_2 больше $\pi/2$, $d_{F_n}(\gamma_1, \gamma_2) > \pi/2$.

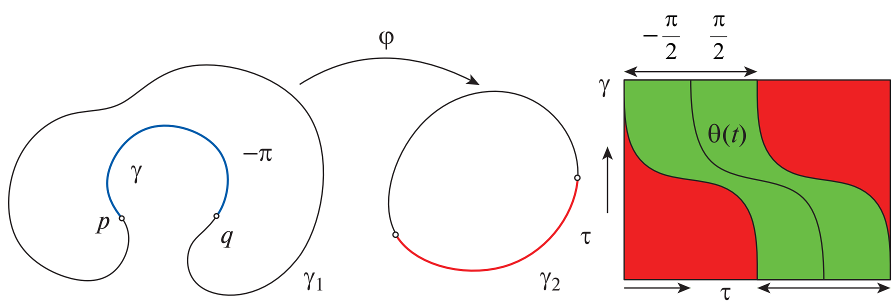
Более того, если γ является C^2, то условие (18) *можно заменить следующим условием кривизны*:

$$\int_p^q \kappa(s)ds \leq -\pi, \tag{19}$$

где κ – знаковая кривизна γ относительно направленного внутрь единичного нормального вектора.

Доказательство. Предположим, что τ – произвольный отрезок γ_2, $\tau \subset \gamma_2$. Построим нормальное свободное пространство между γ и τ, как показано на фиг. 14. Заметим, что когда γ является C^2, (19) подразумевает (18) как из (19),

$$\theta(q) = \theta(p) + \int_p^q \kappa(s)ds \leq \theta(p) - \pi, \tag{20}$$



Фиг. 14. Условие общей кривизны π: если существует сегмент кривой γ с общей кривизной меньше $-\pi$, то нормальное расстояние Фреше между кривой и окружностью больше $\pi/2$.

поэтому достаточно рассмотреть (18).

Нормальное свободное пространство – это зеленая область в прямоугольнике, p и q соответствуют нижнему и верхнему краю. Из (20) имеем, что левый нижний угол и правый верхний угол зеленой области разделены вертикальной линией, следовательно, любая кривая, содержащаяся в зеленой области, не может быть монотонно возрастающей (заметим, что вертикальная линия исключается определением 7). Это показывает, что любой гомеоморфизм $\varphi : \gamma \to \tau$ и его граф Γ_φ должны пересекать красную область. Поэтому нормальное расстояние Фреше между γ_1 и γ_2 должно быть больше, чем $\pi/2$. Лемма 1 доказана.

5.3. Скошенность

Оптимальное транспортное отображение удовлетворяет условию скошенности: угол между нормалью в каждой граничной точке и нормалью в точке ее изображения должен быть не тупым.

Лемма 2 (скошенность). *Пусть* $\Omega, \Omega^* \subset \mathbb{R}^n$ *– ограниченные области,* Ω *– выпуклая,* $\partial\Omega^*$ *–* C^1. *Функции плотности* f *и* g *удовлетворяют условию равновесия* $\int_\Omega f = \int_{\Omega^*} g$ *и ограничены,* $0 < c_0 < f$, $g < c_1 < \infty$, *потенциал Бренье* $u : \Omega \to \mathbb{R}$, *его дуал Лежандра* $u^* : \Omega^* \to \mathbb{R}$. *Предположим, что* $x \in \partial\Omega$ *и* $y \in \partial\Omega^*$, $Du(x) = y$, *тогда*

$$\langle n(x), n(y) \rangle \geq 0. \tag{21}$$

Доказательство. Предположим обратное, как показано на фиг. 15, существует $x \in \partial\Omega^*$ и $y \in \partial\Omega$, $\langle n(x), n(y) \rangle < 0$, тогда $\langle -n(x), n(y) \rangle \geq 0$. Пусть $z = x - \varepsilon n(y)$, имеем $z \in \Omega^*$ для достаточно малого $\varepsilon > 0$. По предположению $\nabla u^*(z) \in \Omega$. Тогда в силу выпуклости u^*

$$\langle \nabla u^*(z) - \nabla u^*(x),\, z - x \rangle \geq 0,$$
$$\langle \nabla u^*(z) - y,\, z - x \rangle \geq 0,$$
$$\langle \nabla u^*(z) - y,\, -n(y) \rangle \geq 0,$$
$$\langle \nabla u^*(z) - y,\, n(y) \rangle \leq 0.$$

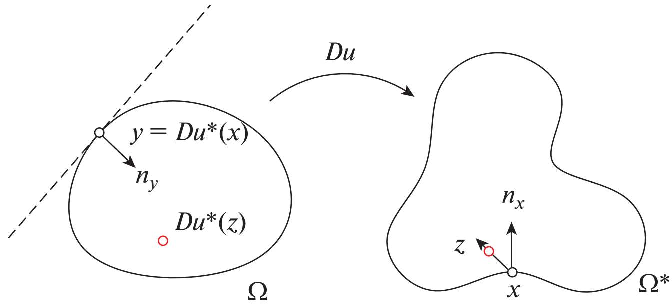
Получаем противоречие тому, что $\nabla u^*(z) \in \Omega$ является внутренней точкой. Лемма 2 доказана.

Далее мы покажем, что если области удовлетворяют умеренным условиям, а оптимальное транспортное отображение не имеет сингулярности, то его ограничение на границе гомеоморфно.

Лемма 3. *Предположим, что* $\Omega, \Omega^* \subset \mathbb{R}^2$ *– ограниченные открытые области,* Ω *– выпуклая,* $\partial\Omega^*$ *есть* C^1*-кривая, функции плотности*

$$0 < c_0 \leq f, \quad g \leq c_1.$$

Если потенциал Бренье u *не имеет сингулярности на* $\bar{\Omega}$, *то* Du, *ограниченный на границе* $Du|_{\partial\Omega} : \partial\Omega \to \partial\Omega^*$, *является гомеоморфным.*



Фиг. 15. Условие скошенности для оптимального транспортного отображения.

Доказательство. Пусть v – дуал Лежандра от u, $v(y) := \sup_{x\in\Omega}\langle x, y\rangle - u(x)$,

$$\tilde{v}(y) := \sup\{L(y) | L \geq v \text{ on } \Omega^*,\ DL \in \Omega,\ L \text{ affine}\},$$

тогда по двумерной теории регулярности, $\tilde{v} \in C^1(\overline{\Omega^*})$, $Du \circ D\tilde{v} = \mathrm{id}$. Это показывает, что Du является гомеоморфизмом из $\overline{\Omega}$ в $\overline{\Omega^*}$.

Теперь мы можем привести доказательство следующей теоремы, которая показывает существование сингулярности оптимального транспортного отображения между плоскими областями. Эта теорема впервые была получена в [20], доказательство здесь намного проще.

Теорема 9 (существование сингулярности). *Пусть $\Omega, \Omega^* \subset \mathbb{R}^2$ – ограниченные области, Ω – выпуклая, $\partial\Omega^*$ есть C^1-кривая, и существует отрезок $\gamma \subset \partial\Omega^*$ такой, что*

$$\int_\gamma k(s)ds < -\pi, \tag{22}$$

тогда для любых функций плотности f и g, удовлетворяющих условию равновесия $\int_\Omega f = \int_{\Omega^*} g$ и ограниченных, $0 < c_0 < f, g < c_1$, оптимальное транспортное отображение должно иметь непустое сингулярное множество в $\overline{\Omega}$.

Доказательство. Предположим, что существуют функции плотности f, g, удовлетворяющие условию равновесия $\int f = \int g$ и условию ограниченности $0 < c_0 < f, g < c_1$, соответствующий потенциал Бренье равен u, такой, что оптимальное транспортное отображение Du не имеет сингулярности на $\overline{\Omega}$.

По лемме 3 ограничение Du на границу $\partial\Omega$ является гомеоморфизмом. По лемме 2 для любых $p \in \partial\Omega$, $Du(p) \in \partial\Omega^*$, $\langle n(p), Du(p)\rangle \geq 0$. Поэтому $F_n(\partial\Omega, \partial\Omega^*) \leq \pi/2$.

По лемме 1 и условию кривизны (22) $F_n(\partial\Omega, \partial\Omega^*) > \pi/2$ получаем противоречие. Следовательно, предположение неверно для любых функций плотности f, g, удовлетворяющих условию равновесия и условию ограниченности, оптимальное транспортное отображение Du должно иметь сингулярности в $\overline{\Omega}$.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы сосредоточились на изучении сингулярных множеств оптимальных транспортных отображений Бренье. Во-первых, мы обобщаем понятие медиальной оси до степенной медиальной оси (определение 4), которая описывает сингулярные множества полудискретных оптимальных транспортных отображений (предложение 1). Во-вторых, мы предлагаем алгоритм, основанный на геометрическом вариационном принципе с использованием степенных диаграмм для вычисления степенной медиальной оси. В-третьих, доказываем, что при непрерывном изменении мер соответствующие сингулярные множества оптимальных транспортных отображений деформируются гомотопически (теорема 8). Кроме того, мы даем достаточное условие существования сингулярностей оптимальных транспортных отображений между плоскими областями с точки зрения кривизны границ, основанное на условии скошенности и нормальном расстоянии Фреше (теорема 9).

Мы планируем продолжить изучение достаточных и необходимых условий существования сингулярных множеств, как топологически, так и геометрически, и обобщить функцию стоимости с квадратичного евклидова расстояния на строго выпуклые функции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Goodfellow I., Pouget-Abadie J., Mirza M., Xu B., Warde-Farley D., Ozair Sh., Courville A., Bengio Y.* Generative adversarial nets. 2014. NIPS. P. 2672–2680.
2. *Kingma D.P., Welling M.* Auto-encoding variational bayes. arXiv:1312.6114, 2013.
3. *Lei N., An D., Guo Y., Su K., Liu Sh., Luo Zh., Yau Sh.-T., Gu X.* A geometric understanding of deep learning // Engineer. 2020. V. 6. № 3. P. 361–374.
4. *An D., Guo Y., Lei N., Luo Zh., Yau Sh.-T., Gu X.* Ae-ot: A new generative model based on extended semi-discrete optimal transport. Inter. Conf. Learn. Representat., 2020.
5. *Goodfellow I.* Nips 2016 tutorial: Generative adversarial networks. arXiv:1701.00160, 2016.
6. *Lei N., Su K., Cu L.i, Yau Sh.-T., Gu D.X.* A geometric view of optimal transportation and generative mode // Comput. Aided Geometr. Design, 2017.
7. *An D., Guo Y., Lei N., Luo Zh., Yau Sh.-T., Gu X.* Ae-ot: A new generative model based on extended semi-discrete optimal transport. Eighth Inter. Conf. Learn. Representat. (ICLR), 2020.
8. *Brenier Y.* Polar factorization and monotone rearrangement of vector-valued functions // Comm. Pure Appl. Math. 1991. V. 44. № 4. P. 375–417.
9. *Brenier Y.* Polar decomposition and increasing rearrangement of vector нelds // C. R. Acad. Sci. Paris Sr. I Math. 1987. V. 305. № 19. P. 805–808.
10. *Figalli A.* Regularity properties of optimal maps between nonconvex domains in the plane // Comm. Part. Different. Equat. 2010. V. 35. № 3. P. 465–479.
11. *Chen Sh., Figalli A.* Partial w2,p regularity for optimal transport maps // J. Funct. Anal. 2017. V. 272. P. 4588–4605.
12. *Alexandrov A.D.* Convex polyhedral. Translated 1950. Russian ed. by N.S. Dairbekov, S.S. Kutateladze, A.B. Sossinsky. Springer Monograph. Math. Springer-Verlag, Berlin, 2005.
13. *Gu X., Luo F., Sun J., Yau Sh.-T.* Variational principles for minkowski type problems, discrete optimal transport, and discrete monge-ampere equations // Asian J. Math. 2016. V. 20. № 2. P. 383–398.
14. *Aurenhammer F.* Power diagrams: properties, algorithms and applications // SIAM J. Comput. 1987. V. 16. № 1. P. 78–96.
15. *Gel'fand I.M., Kapranov M.M., Zelevinsky A.V.* Discriminants, resultants, and multidimensional determinants. Birkhäuser, 1994.
16. *Loera J.A., Rambau J., Santos F.* Triangulations. Structures for algorithms and application, vol. 25 of Algorithms and Comput. in Math. Springer-Verlag, Berlin, 2010.
17. *Lei N., Chen W., Luo Zh., Si H., Gu X.* Secondary power diagram, dual of secondary polytope // Comput. Math. Math. Phys. 2019. V. 59. № 12. P. 1965–1981.
18. *Figalli A.* Regularity properties of optimal maps between nonconvex domains in the plane // Comm. Part. Different. Equat. 2010. V. 35. № 3. P. 465–479.
19. *Joe B.* Construction of three-dimensional delaunay triangulations using local transformations // Comp. Aided Geometr. Design. 1991. V. 8. № 2. P. 123–142.
20. *Chodosh O., Jain V., Lindsey M., Panchev L., Rubinstein Y.A.* On discontinuity of planar optimal transport map. arxiv:1312:2929, 2014.

EDN: EJXHNK
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1360–1373

УРАВНЕНИЯ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

УДК 519.63

ОБНАРУЖЕНИЕ ДВУМЕРНЫХ СТРУКТУР ТИПА “ПАЛЕЦ” В НЕРАВНОВЕСНОЙ СИСТЕМЕ УРАВНЕНИЙ С ЧАСТНЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ С ПОМОЩЬЮ АДАПТИВНЫХ ПОДВИЖНЫХ СЕТОК

П. А. Зегелинг

Утрехтский университет, Утрехт, Нидерланды

e-mail: P.A.Zegeling@uu.nl

Поступила в редакцию 10.10.2021 г.
Переработанный вариант 03.03.2022 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

Рассматривается метод сеточной адаптации, примененный к проблеме бифуркации в неравновесном уравнении Ричардса, возникающем в задачах гидрологии. Расширение этой модели дифференциальных уравнений с частными производными для водонасыщенности с учетом дополнительных эффектов динамической памяти приводит к появлению дополнительного члена третьего порядка – смешанной производной по пространству-времени в дифференциальном уравнении. В случае одномерного пространства предсказывается образование крутых немонотонных нелинейных волн, зависящих от параметра неравновесности. В двумерном пространстве анализ по параметру неравновесности и частоте при малом возмущающем члене предсказывает, что волны могут стать неустойчивыми, тем самым инициируя так называемые гравитационные пальцы. Для выявления крутых подвижных фронтов в решениях нестационарных уравнений используется достаточно изощренный метод построения адаптивной подвижной сетки, основанный на масштабируемой следящей функции. Библ. 25. Фиг. 10.

Ключевые слова: бегущие волны, (не)монотонность, структуры типа “палец”, пористые материалы, адаптивные подвижные сетки.

DOI: 10.31857/S0044466922080166

1. ВВЕДЕНИЕ

В статье обсуждается важность как анализа, так и вычислений в связи с проблемой бифуркации в неравновесном уравнении Ричардса из гидрологии. Расширение этой модели дифференциальных уравнений (ДУ) с частными производными для водонасыщенности с учетом дополнительных эффектов динамической памяти было предложено Хасанизадом и Грэйем (см. [1]) в конце прошлого века. Это приводит к появлению дополнительного члена третьего порядка – смешанной производной по пространству-времени. В одномерном пространстве анализ бегущей волны предсказывает образование крутых немонотонных волн, зависящих от параметра неравновесности. Показано, что в этом случае аналитические оценки, высокоточные численные решения ДУ с частными производными, а также экспериментальные лабораторные наблюдения (см. [2], [3]) могут быть хорошо согласованы. В двумерном пространстве параметр неравновесности τ и частота (появляющаяся в малом члене возмущения) предсказывают, что волны могут стать *неустойчивыми*, тем самым инициируя так называемые гравитационные пальцы. Это явление может быть проанализировано с помощью линейного анализа устойчивости и подтверждено численными экспериментами двумерной модели нестационарных ДУ с частными производными. Для этой цели мы использовали эффективную технику адаптивной подвижной сетки, основанную на масштабируемой следящей функции. Численные эксперименты в одно- и двумерных пространствах подтверждают теоретические оценки и показывают эффективность адаптивного сеточного решателя.

2. НЕРАВНОВЕСНАЯ МОДЕЛЬ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ЧАСТНЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ

Двумерная модель ДУ с частными производными, описывающая неравновесные эффекты в двухфазной пористой среде, описывается следующим образом (см. [1], [4]–[8]):

$$\begin{gathered} S_t = \nabla \cdot (\mathcal{D}(S)\nabla S) + [f(S)]_z + \tau\nabla \cdot [f(S)\nabla(S_t)], \\ (x,z,t) \in [x_L, x_R]\times[z_L, z_R]\times(0,T], \end{gathered} \tag{1}$$

где S – водонасыщенность, τ – параметр неравновесности, $\mathcal{D}(S)$ – функция диффузии, $f(S)$ – так называемая функция фракционного потока.

2.1. Одномерный случай

Сначала давайте кратко рассмотрим одномерный случай. Для этого, предполагая постоянную диффузию и линеаризованный член неравновесности, модель ДУ (1) может быть упрощена до

$$S_t = \mathcal{D}\, S_{zz} + [f(S)]_z + \tau S_{zzt}, \quad (z,t) \in [z_L, z_R]\times(0,T], \tag{2}$$

с начальным условием $S(z,0) = S_0(z)$.

Водонасыщение в одномерном пространстве представлено переменной $S(z,t) \in [0,1]$, $\mathcal{D} > 0$ – коэффициент диффузии и $\tau \geq 0$ – параметр неравновесности (см. также [1], [5], [6]). Функция f удовлетворяет условиям

$$f(0) = 0, \quad f(1) = 1, \quad f'(S) > 0$$

и связана с функцией фракционного потока в модели пористой среды (см. [5]). В частности, рассматриваются два варианта функции f. Первый – это выпуклая функция, представляющая однофазную ситуацию (только вода), т.е.

$$f(S) = \frac{S^2}{2},$$

а вторая – выпукло-вогнутая функция, указывающая на наличие двух фаз (присутствуют и вода, и воздух):

$$f(S) = \frac{S^2}{S^2 + (1-S)^2}.$$

На пространственных границах накладываются условия Дирихле

$$S(z_L,t) = S_- \quad \text{и} \quad S(z_R,t) = S_+.$$

Начальная водонасыщенность $S_0(z)$, границы пространственной области, конечное время T и значения $0 \leq S_- < S_+ \leq 1$, $\mathcal{D}$ и τ будут указаны в описании численных экспериментов.

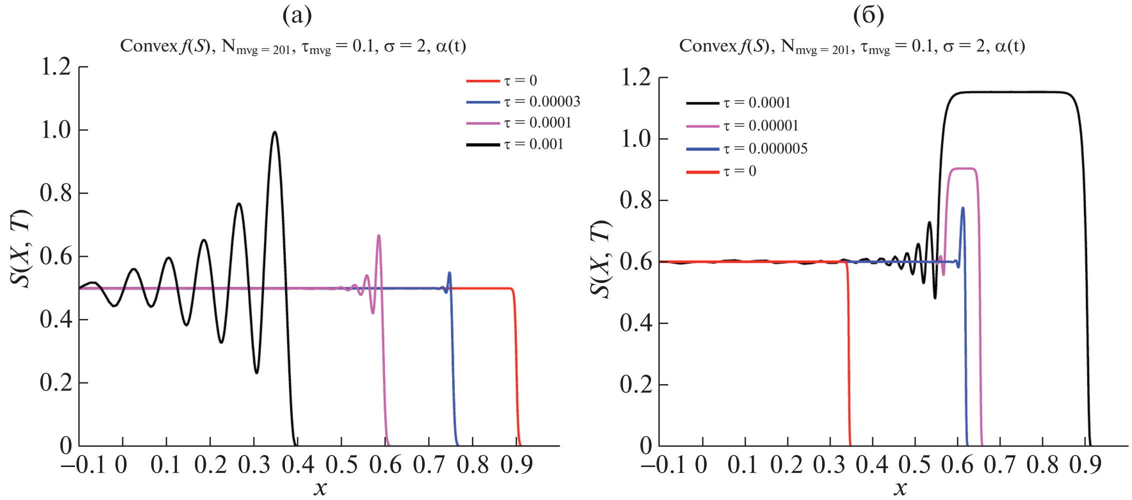
2.2. Бифуркационная диаграмма и бегущие волны

Рассмотрим решения модели дифференциальных уравнений (2) в виде бегущих волн (БВ). Для простоты предположим, что $f(S) = S^2$. Выпукло-вогнутый случай рассматривается в [5], [6], что приводит к еще более богатой структуре динамики (фиг. 1). Подход к описанию БВ, предполагающий положительную постоянную скорость c, может быть записан как

$$S(z,t) = \varphi(z+ct) := \varphi(\eta), \quad \eta \in (-\infty, +\infty), \quad c > 0.$$

Подстановка этой функции в дифференциальное уравнение (2) дает обыкновенное дифференциальное уравнение (ОДУ) третьего порядка

$$c\varphi' = D\,\varphi'' + [\varphi^2]' + c\tau\varphi''', \tag{3}$$



Фиг. 1. (а) – Решения в одномерном пространстве для выпуклой функции фракционного потока, (б) – для выпукло-вогнутого случая при различных значениях параметра неравновесности $\tau \geq 0$.

где ' означает взятие производных по отношению к переменной БВ η. Интегрируя (3) между $-\infty$ и η и используя тот факт, что $\varphi(-\infty) = S_-$, $\varphi'(-\infty) = \varphi''(-\infty) = 0$, получаем следующую систему ОДУ первого порядка:

$$\varphi' = \psi,$$
$$\psi' = \frac{c(\varphi - S_-) + S_-^2 - \varphi^2 - D\psi}{c\tau}. \tag{4}$$

БВ для (2) в исходной системе координат (x,t) представляется траекторией в (φ,ψ)-плоскости, соединяющей неустойчивую стационарную точку (при $\eta = -\infty$) системы (4) с устойчивой точкой (при $\eta = +\infty$). В системе (4) есть только две стационарные точки:

$$(\varphi,\psi) = (S_-, 0) \quad \text{и} \quad (\varphi,\psi) = (S_+, 0).$$

Из этого можно сделать вывод, что немонотонные БВ существуют для

$$\tau > \tau_c = \frac{\mathcal{D}^2}{S_+ - S_-}.$$

Эта ситуация проясняется на бифуркационной диаграмме (фиг. 2а) и на графике фазовой плоскости (фиг. 2б). Для $\tau = 0$ известно, что только монотонные волны удовлетворяют модели дифференциальных уравнений с частными производными (см. [4]). Поскольку мы ищем немонотонные волны, то для описания таких явлений нам нужен дополнительный τ-член в ДУ (2).

2.3. Одномерная адаптивная подвижная сетка

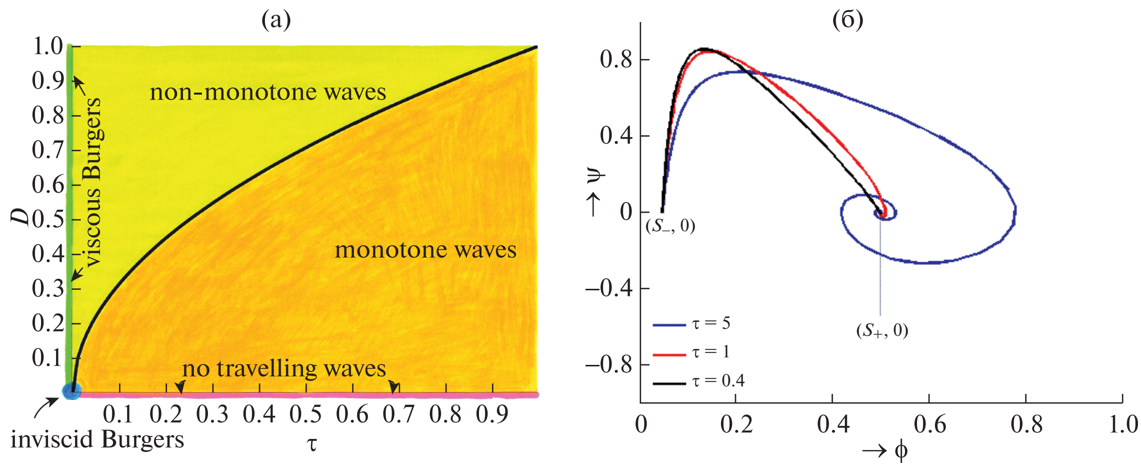
Для численного расчета модельных ДУ (2) в одномерном пространстве мы используем технику адаптивной подвижной сетки, основанную на общем преобразовании координат от (z,t) к (ξ,θ) (подробнее см. [7], [9]–[13]). Преобразованные ДУ в новых переменных ξ и θ связаны с ДУ адаптивной сетки:

$$[\sigma(\mathcal{J}) + \tau_s \mathcal{J}_\vartheta)\mathcal{M}]_\xi = 0, \quad \tau_s \geq 0,$$

где $\mathcal{J} = z_\xi$ – матрица Якоби преобразования, $\mathcal{M} := \sqrt{1 + [S_z]^2}$ – мониторная функция, отражающая зависимость неоднородной сетки от пространственной производной решения ДУ.

Оператор

$$\sigma := \mathcal{J} + \kappa_s(\kappa_s + 1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}$$



Фиг. 2. Бифуркационная диаграмма (а), показывающая существование монотонных и немонотонных волн в зависимости от параметров $\mathcal{D}$ и τ. Черная кривая задается так: $\mathcal{D} = \sqrt{\tau(S_+ - S_-)}$. (б) – Траектории в фазовой плоскости (φ, ψ) для трех различных значений параметра τ. Красная и синяя кривые соответствуют немонотонным волнам ($\tau > \tau_c > 0$), а черная кривая обозначает монотонную волну ($\tau = 0$).

применяется для получения более плавного преобразования сетки в пространстве. Первая константа адаптивности, $\kappa_s > 0$ $(= \mathbb{O}(1))$ является параметром пространственного сглаживания (или фильтрации). Вторая константа адаптивности τ_s $(= \mathbb{O}(10^{-3}))$ заботится о сглаживании в направлении времени. Для $\kappa_s > 0$ и $\tau_s > 0$ после полудискретизации можно показать (см. [11]), что пространственная неоднородная сетка удовлетворяет условию

$$\frac{\kappa_s}{\kappa_s + 1} \le \frac{\Delta z_{i+1}}{\Delta z_i} \le \frac{\kappa_s + 1}{\kappa_s}$$

для всех точек сетки z_i и любого времени $t > 0$. Заметим, что для $\kappa_s = \tau_s = 0$ (без сглаживания) мы возвращаемся к основному принципу равномерного распределения:

$$[z_\xi \mathcal{M}]_\xi = 0.$$

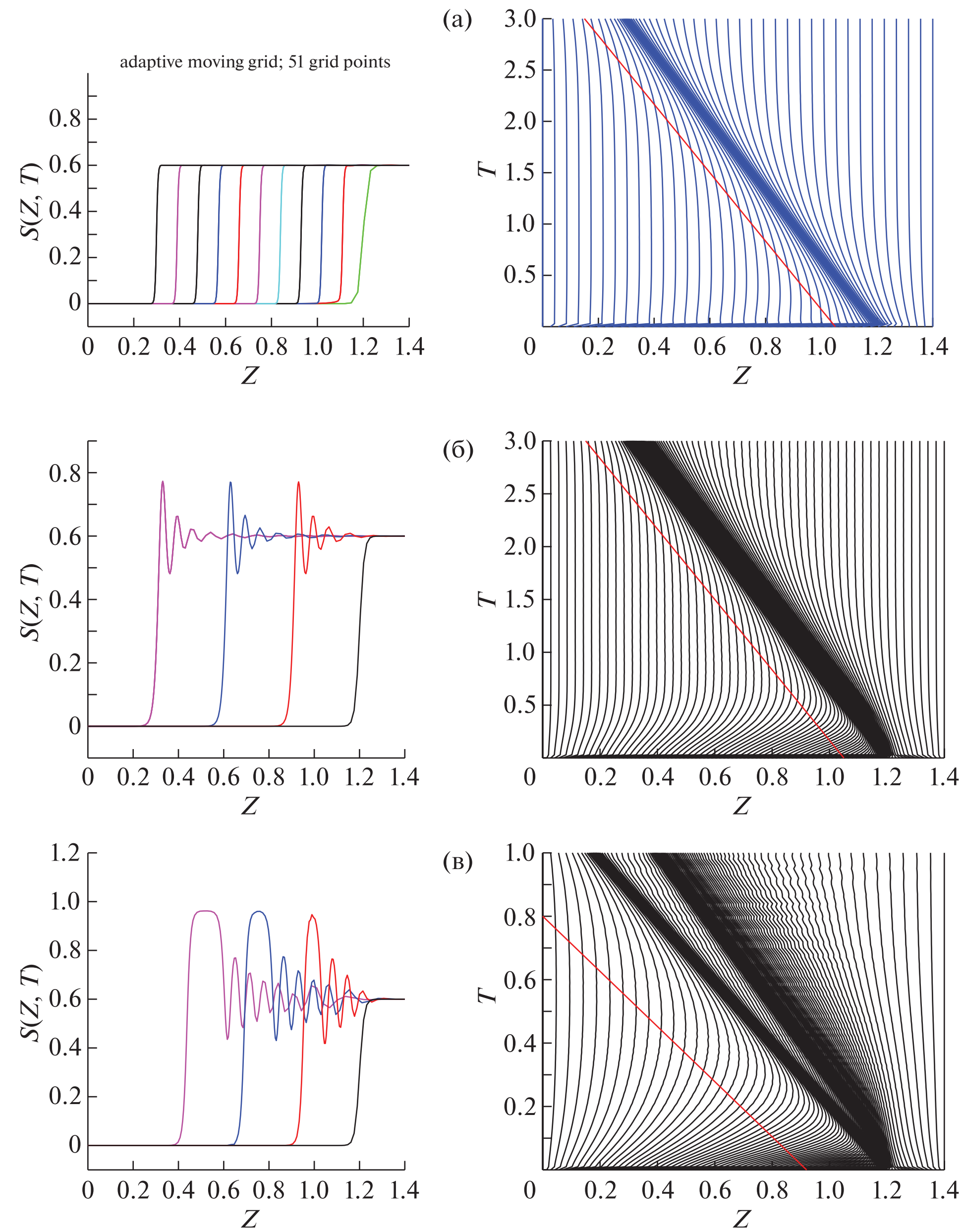
Более подробную информацию об адаптивной сетке и операторах сглаживания можно найти в [11]–[13]. Преобразованное ДУ и ДУ адаптивной сетки одновременно дискретизируются в пространстве с использованием метода линий. Используются центральные разности второго порядка для преобразованных производных в направлении ξ. Интегрирование по времени полученной связанной системы ОДУ производится методом BDF с переменным шагом по времени в среде DASSL (см. [14]).

2.4. Численные результаты в одномерном пространстве

Опишем несколько численных экспериментов для иллюстрации точности и эффективности адаптивной подвижной сетки в одномерном пространстве, а также для подтверждения оценок для БВ из п. 2.2. Параметры адаптивной сетки выбраны следующим образом: $\kappa_s = 2$ и $\tau_s = 0.001$, а допустимая погрешность интегрирования по времени в DASSL установлена 10^{-4}. Начальным условием является крутая волна, начинающаяся на правой границе области и имеющая вид

$$S(z,0) = S_0(z) = S_- + \frac{1}{2}(S_+ - S_-)(1 + \tanh(R(z - z_0))), \tag{5}$$

где $z_L = 0$, $z_R = 1.4$, $S_- = 0$, $S_+ = 0.6$, $R = 50$, и параметры уравнения $\tau = 10^{-4}$ и $\mathcal{D} = 10^{-3}$. На фиг. 3а показаны численные решения для $\tau = 0$ с $N = 51$ адаптивными подвижными точками сетки. В этом случае, как мы знаем, существуют только монотонные решения. Видно, что адаптивная сетка прекрасно отслеживает монотонную волну. Кроме того, график с историей времени адаптивной сетки иллюстрирует плавное распределение и поведение сетки во времени при постоян-



Фиг. 3. История по времени адаптивной сетки (справа), решения в несколько моментов времени (слева) для трех характерных случаев в модели пористой среды: $\tau = 0$ (а), выпуклая f (б) и выпукло-вогнутая f (в). Красные прямые линии показывают точные (асимптотические) скорости волн для трех случаев, как предсказывает формула (6).

ной скорости волны. На фиг. 3б, в показана разница между выпуклым и выпукло-вогнутым случаями: немонотонные БВ и плоские волны. Эти волны предсказаны анализом в п. 2.2 и [5].

Из системы ОДУ (4) можно вывести, что для асимптотической скорости БВ c выполнено равенство

$$c = \frac{f(S_+) - f(S_-)}{S_+ - S_-}. \tag{6}$$

Это дает соответственно для выпуклого случая $c = 0.3$ и для выпукло-вогнутого случая $c \approx 1.1538$. На фиг. 3 красными линиями обозначены постоянные скорости БВ. Мы видим, что адаптивная подвижная сетка очень точно следует за всеми волнами.

3. ДВУМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ

Для двумерного случая модели (1) используем следующие упрощенные формулы для функции фракционного потока f и функции диффузии $\mathcal{D}$:

$$f(S) = S^{\alpha}, \quad \mathcal{D}(S) = \beta S^{\alpha-\beta-1}, \quad \alpha > \beta + 1. \tag{7}$$

3.1. Немонотонные волны и неустойчивости

В отличие от одномерного случая, для которого как монотонные, так и немонотонные волны устойчивы при малых возмущениях, двумерная модель может привести к неустойчивости (структуры типа “палец”). Можно показать, что для определенных значений $\tau > 0$ немонотонные волны могут стать *неустойчивыми*. Анализ основан на следующих наблюдениях, также упомянутых в [15] и [16].

Во-первых, неравновесное ДУ (1) переписывается как система двух уравнений – одно для насыщения S и одно для давления p:

$$\begin{aligned} S_t &= \nabla \cdot (\mathcal{D}(S)\nabla p) + [f(S)]_z, \\ \tau S_t &= p - \mathcal{P}(S), \end{aligned} \tag{8}$$

где $\mathcal{P}(S)$ – равновесное давление. Далее ДУ записываются в координатах БВ, как это сделано в п. 2.2. Волны насыщения и давления затем возмущаются следующим образом:

$$\begin{aligned} S &= S_0(\zeta) + \epsilon e^{i\omega_x + i\omega_z + kt} S_1(\zeta) + \mathcal{O}(\epsilon^2), \\ p &= p_0(\zeta) + \epsilon e^{i\omega_x + i\omega_z + kt} p_1(\zeta) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \tag{9}$$

Эти возмущенные величины подставляются в систему двух уравнений БВ, членами высшего порядка пренебрегают, и в итоге выводятся уравнения для анализа линейной устойчивости. Из них следует, что для $\tau = 0$ фактор роста k всегда будет отрицательным, тогда как для $\tau > 0$ и для определенных частот ω фактор роста может быть положительным, тем самым инициируя неустойчивые волны. Это может быть связано с так называемыми структурами типа “палец”, как мы увидим в п. 3.3.

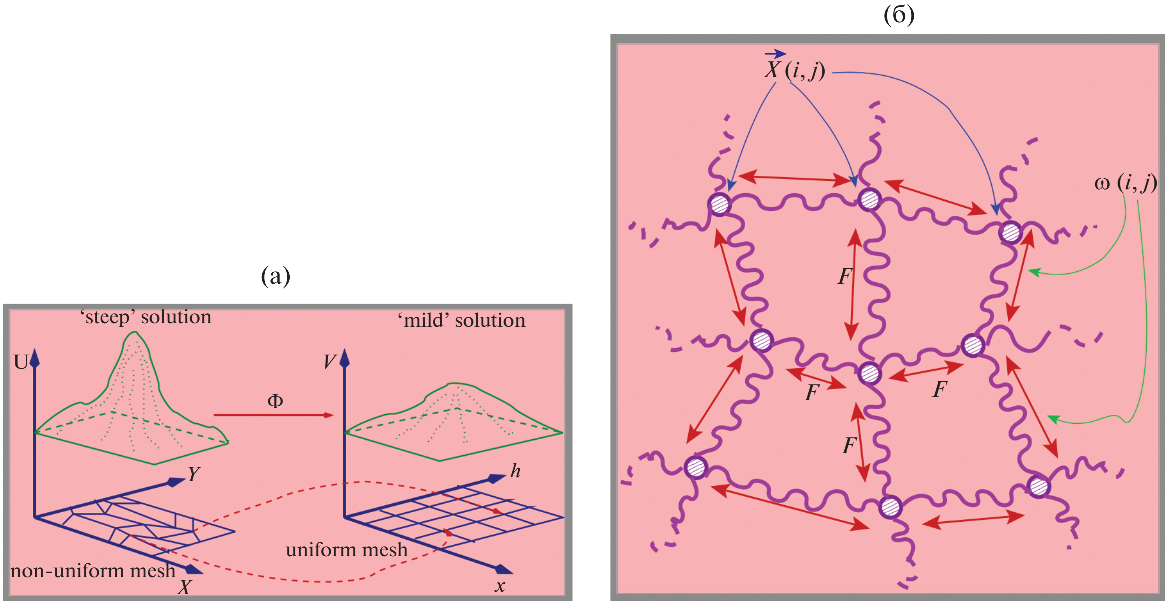
3.2. Адаптивная подвижная сетка в двумерном пространстве

Метод адаптивной сетки в двумерном пространстве следует принципам, аналогичным с одномерной ситуацией, но с некоторыми дополнительными особенностями. Более подробную информацию можно найти, например, в [10], [11], [17]–[19]. Обобщая процедуру, можно сказать, что преобразование двумерной сетки выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} x &= z(\xi, \eta, \vartheta), \\ z &= z(\xi, \eta, \vartheta), \\ t &= t(\xi, \eta, \vartheta) = \vartheta. \end{aligned} \tag{10}$$

На фиг. 4а показана типичная двумерная ситуация преобразования крутого решения ДУ в исходных координатах в более пологое в преобразованных координатах. В качестве примера, первый член нелинейной диффузии с правой стороны в модели ДУ (1) преобразуется в

$$(\mathcal{D}(S)S_x)_x = \frac{1}{\mathcal{J}}\left[\left(\frac{\mathcal{D}(S)z_\eta^2}{\mathcal{J}} S_\xi\right)_\xi - \left(\frac{\mathcal{D}(S)z_\xi z_\eta}{\mathcal{J}} S_\eta\right)_\xi - \left(\frac{\mathcal{D}(S)z_\xi z_\eta}{\mathcal{J}} S_\xi\right)_\eta + \left(\frac{\mathcal{D}(S)z_\xi^2}{\mathcal{J}} S_\eta\right)_\eta\right], \tag{11}$$



Фиг. 4. Преобразование двумерной сетки: (а) – показано, как преобразование переводит крутое решение в более пологое, (б) – адаптивную сетку можно представить как систему пружин с силой пружины F, расположенной в точке $\mathbf{x}(i,j)$ по значениям следящей функции ω.

где $\mathcal{J} = x_\xi z_\eta - x_\eta z_\xi$ обозначает якобиан двумерного преобразования (10). Базовый одномерный принцип равномерного распределения, $[\mathcal{M} z_\xi]_\xi = 0$, распространяется на систему двух связанных нелинейных эллиптических ДУ с частными производными:

$$\nabla \cdot (\mathcal{M}\nabla x) = 0, \quad \nabla := \left[\frac{\partial}{\partial\xi}, \frac{\partial}{\partial\eta}\right]^{\mathrm{T}},$$
$$\nabla \cdot (\mathcal{M}\nabla z) = 0.$$

Здесь следящая функция M теперь определяется следующим образом:

$$\mathcal{M} = \gamma(t) + \sqrt{\nabla S \cdot \nabla S} \quad \text{с} \quad \gamma(t) = \iint_{\Omega_c} \sqrt{\nabla S \cdot \nabla S}\, d\xi d\eta.$$

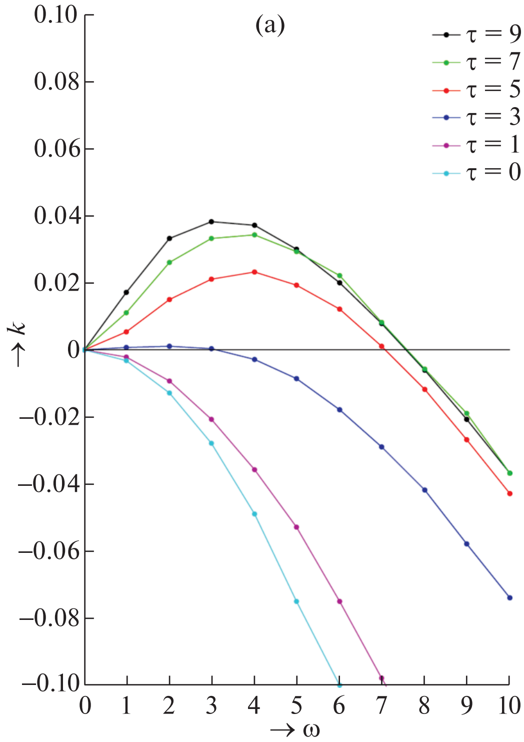
На фиг. 4б показана двумерная адаптивная сетка с точки зрения минимизации функционала “энергии сетки” для системы пружин (соединенные ребрами точки сетки) и сил (контролируемые значения). Очевидно, что можно было бы использовать более сложные следящие функции, но для модели ДУ в данной работе эта относительно простая следящая функция оказалась достаточно эффективной. Отметим, что мы добавили функцию адаптивности, зависящую от времени $\gamma(t)$, которая вычисляется автоматически в процессе интегрирования по времени. Она обеспечивает дополнительное сглаживание распределения сетки и добавляет масштабирование в пространстве и в направлении решения (см. [17] для дополнительной информации об этом выборе). Можно показать, что адаптивное преобразование сетки, следуя этому принципу двумерного эквидистантного распределения с упомянутой следящей функцией $\mathcal{M}$, остается несингулярным.

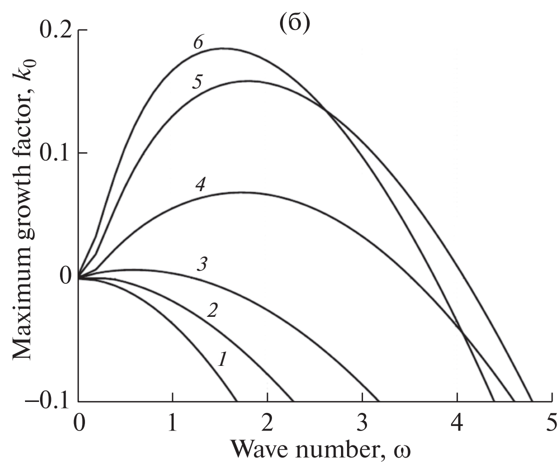
Теорема (подробную информацию о доказательстве см. [20]). *Пусть* $\mathcal{M} > 0$, $\mathcal{M} \in C^1(\Omega_c)$ *и* $\mathcal{M}_\xi, \mathcal{M}_\eta \in C^\gamma(\bar{\Omega}_c)$ *для* $\gamma \in (0,1)$. *Тогда существует единственное решение* $(x,z) \in C^2(\bar{\Omega}_c)$, *которое является биекцией из* $\bar{\Omega}_c$ *в себя. Более того, якобиан* $\mathcal{J}$ *удовлетворяет неравенству*

$$\mathcal{J} = x_\xi z_\eta - x_\eta z_\xi > 0.$$

Некоторые важные компоненты доказательства включают теорему о кривой Жордана, теорему Карлемана–Хартмана–Винтнера и принцип максимума для эллиптических ДУ.

В [21] дан глубокий анализ обратимости более общих, так называемых σ-гармонических отображений. Преобразованная модель ДУ пространственно дискретизируется на равномерной





Фиг. 5. (а) – Определенный численно фактор роста k как функция волнового числа ω возмущения для различных значений τ, (б) – теоретическое предсказание, взятое из [10]. Обращаем внимание, что масштабы по обеим осям на этих двух рисунках разные: для (а) ω – это численная частота, добавленная к начальному условию, тогда как для (б) ω получена из теоретического анализа. Глобальное поведение одинаково, но точные значения различны. Аналогичное замечание справедливо и для фактора роста k.

декартовой сетке в координатах ξ, η. Для численного интегрирования по времени преобразованного двумерного неравновесного ДУ и уравнений адаптивной сетки мы использовали подход IMplicitEXplicit (см. [22], [23]). В качестве примера диффузионный член (11) аппроксимируется следующим образом:

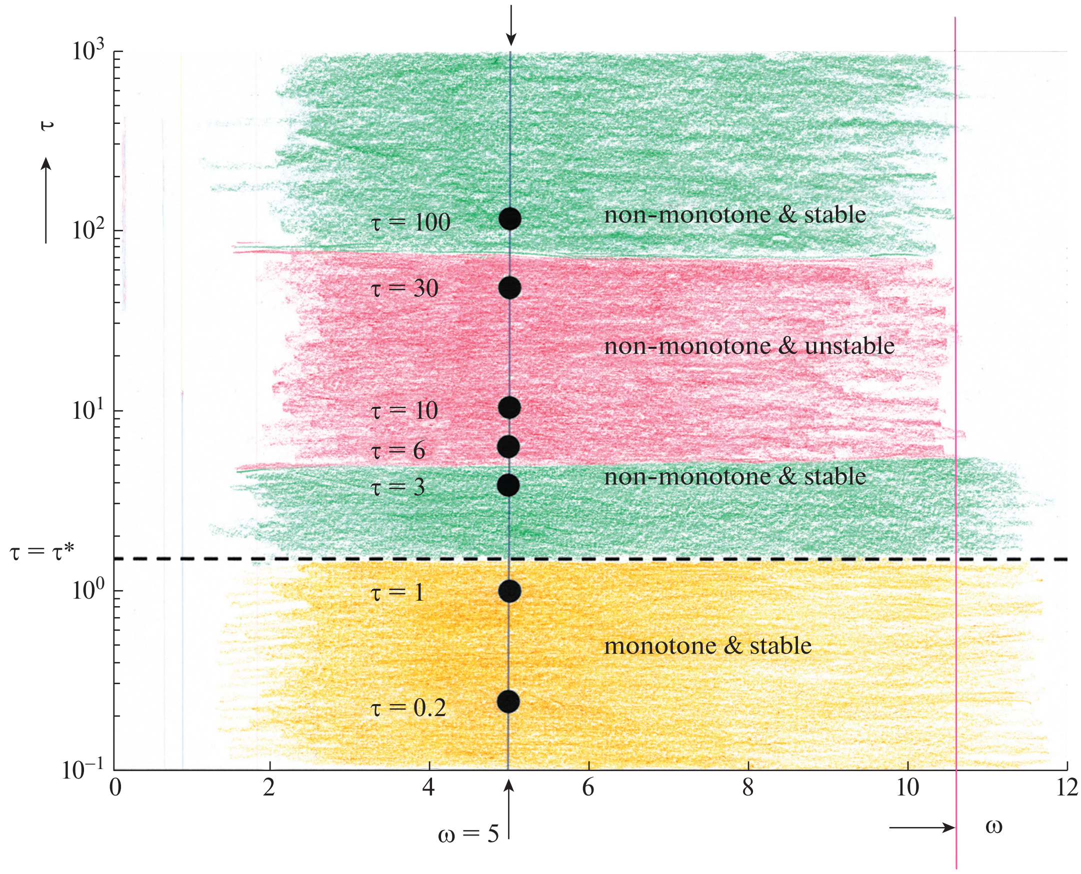
$$\begin{aligned}(\mathcal{D}(S)S_x)_x\big|_{i,j}^n \approx \frac{1}{\mathcal{J}_{i,j}^n}\Bigg[&\frac{C_1\big|_{i+1,j}^n + C_1\big|_{i,j}^n}{2}\,\frac{S_{i+1,j}^{n+1} - S_{i,j}^{n+1}}{(\Delta\xi)^2} - \frac{C_1\big|_{i,j}^n + C_1\big|_{i-1,j}^n}{2}\,\frac{S_{i,j}^{n+1} - S_{i-1,j}^{n+1}}{(\Delta\xi)^2} - \\ &- C_2\big|_{i+1,j}^n\,\frac{S_{i+1,j+1}^{n+1} - S_{i+1,j-1}^{n+1}}{4\Delta\xi\Delta\eta} + C_2\big|_{i-1,j}^n\,\frac{S_{i-1,j+1}^{n+1} - S_{i-1,j-1}^{n+1}}{4\Delta\xi\Delta\eta} - C_2\big|_{i,j+1}^n\,\frac{S_{i+1,j+1}^{n+1} - S_{i-1,j+1}^{n+1}}{4\Delta\xi\Delta\eta} + \\ &+ C_2\big|_{i,j-1}^n\,\frac{S_{i+1,j-1}^{n+1} - S_{i-1,j-1}^{n+1}}{4\Delta\xi\Delta\eta} + \frac{C_3\big|_{i,j+1}^n + C_3\big|_{i,j}^n}{2}\,\frac{S_{i,j+1}^{n+1} - S_{i,j}^{n+1}}{(\Delta\eta)^2} - \frac{C_3\big|_{i,j}^n + C_3\big|_{i,j-1}^n}{2}\,\frac{S_{i,j}^{n+1} - S_{i,j-1}^{n+1}}{(\Delta\eta)^2},\end{aligned} \tag{12}$$

где

$$C_1 := \frac{1}{\mathcal{J}}\mathcal{D}(S)z_\eta^2, \quad C_2 := \frac{1}{\mathcal{J}}\mathcal{D}(S)z_\xi z_\eta, \quad C_3 := \frac{1}{\mathcal{J}}\mathcal{D}(S)z_\xi^2$$

соответственно. Вместо “умных” операторов сглаживания в пространстве и времени, используемых в одномерном режиме, здесь, как в [18], [19], на каждом временном шаге следующим образом несколько раз применяется фильтр для следящей функции:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{M}}_{i,j} = \frac{1}{4}\mathcal{M}_{i,j} + \frac{1}{8}[\mathcal{M}_{i-1,j} + \mathcal{M}_{i+1,j} + \mathcal{M}_{i,j-1} + \mathcal{M}_{i,j+1}] + \\ + \frac{1}{16}[\mathcal{M}_{i-1,j-1} + \mathcal{M}_{i+1,j-1} + \mathcal{M}_{i-1,j+1} + \mathcal{M}_{i+1,j+1}].\end{aligned}$$



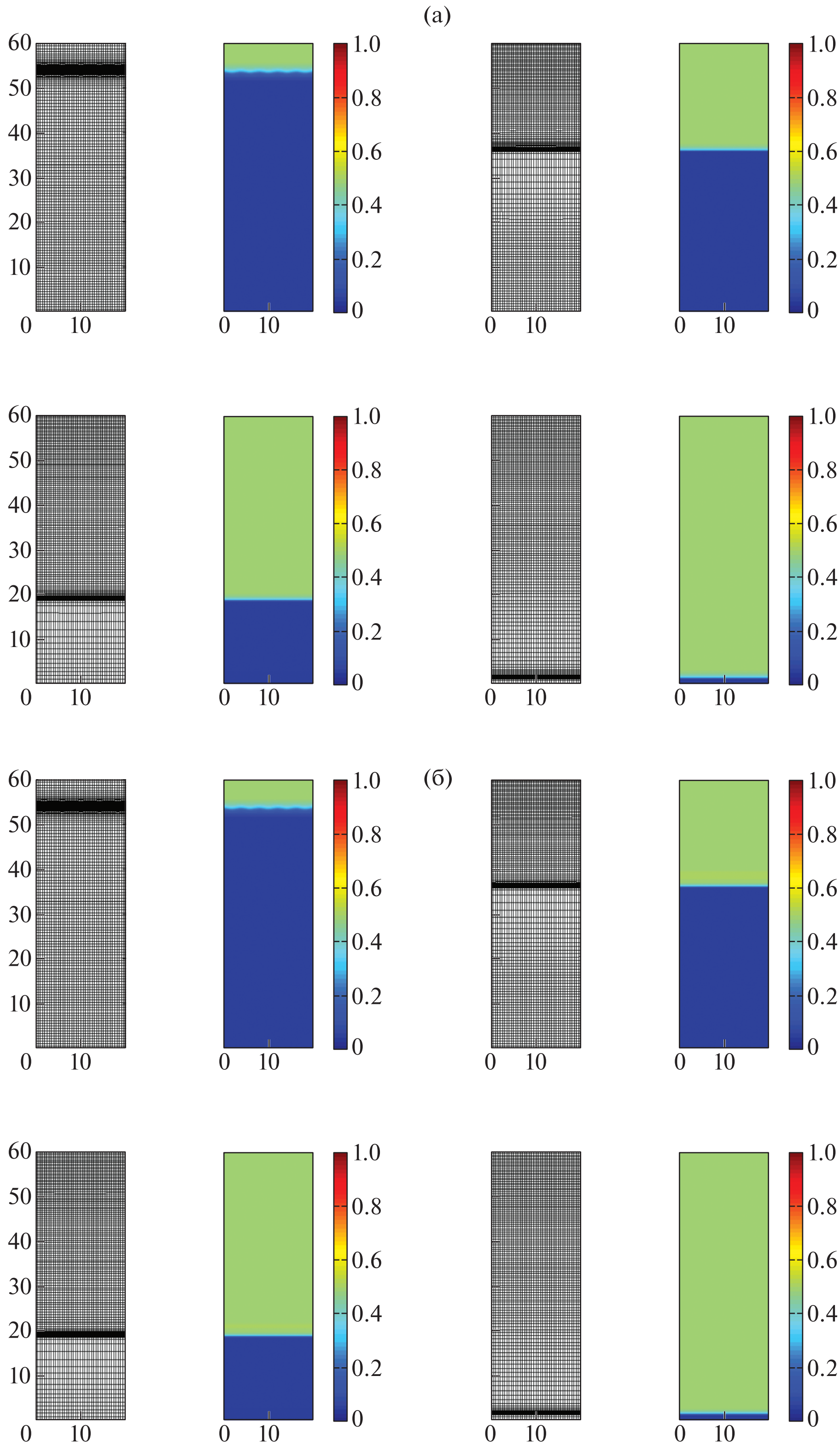
Фиг. 6. (ω, τ)-Диаграмма, отображающая зависимость свойств устойчивости и монотонности решения ДУ в двумерном пространстве. Семь черных точек соответствуют семи численным экспериментам на фиг. 7–10.

Эта модификация позволяет получить более гладкое распределение сетки и улучшает процесс интегрирования по времени.

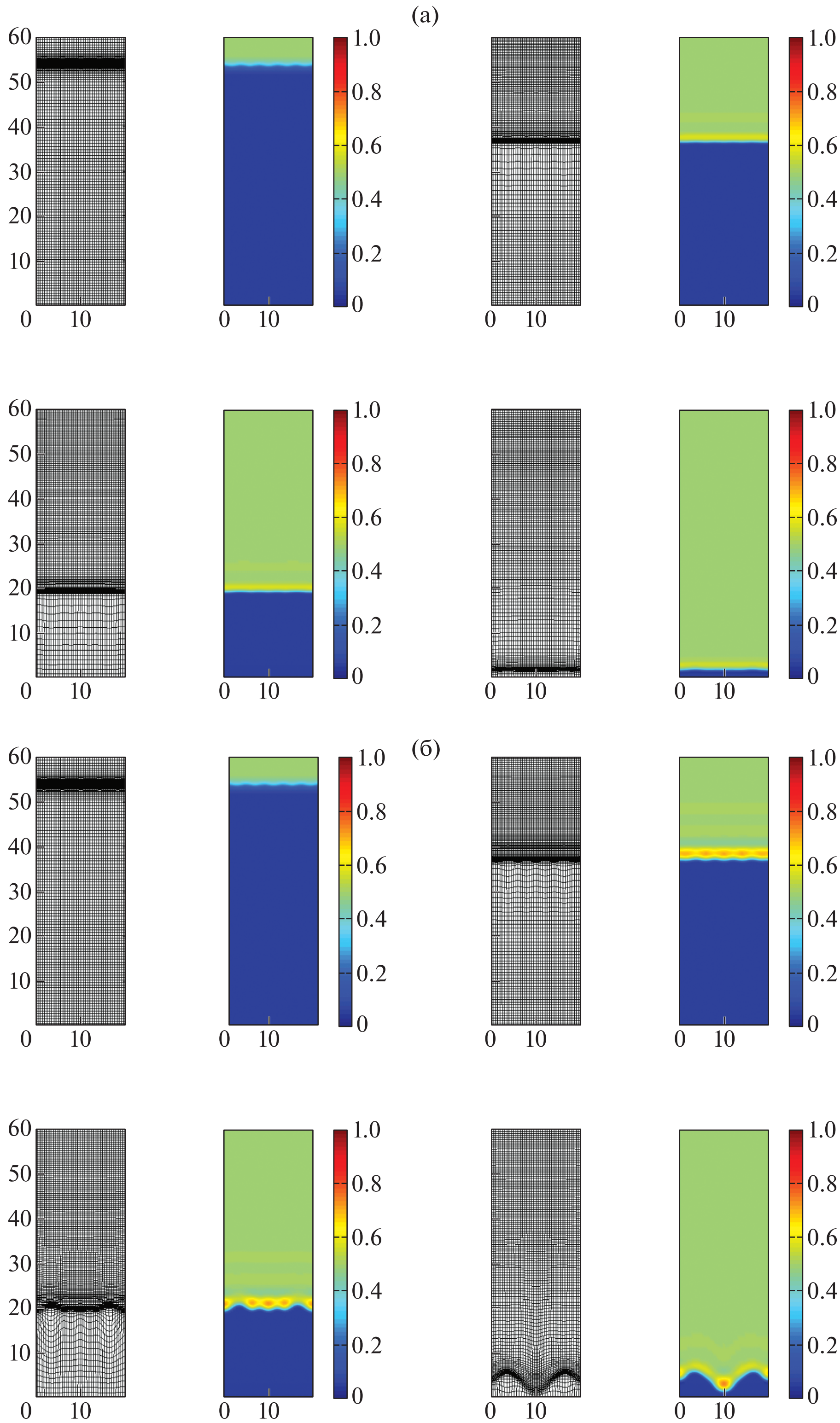
3.3. Численные результаты

Для подтверждения и подкрепления теоретических предсказаний в анализе в п. 3.1 мы проводим некоторые численные эксперименты для двумерной модели. Пространственная область определяется прямоугольником $[0,10]\times[0,60]$, и начальным решением является функция типа “тангенс”, как и в одномерной модели, определенная в уравнении (5), но теперь расположенная около значения $z = 55$. Мы добавляем небольшое периодическое возмущение с частотой ω для проверки устойчивости двумерных волн. В численных экспериментах, если не указано иное, используется пространственная сетка с 41×121 узлами.

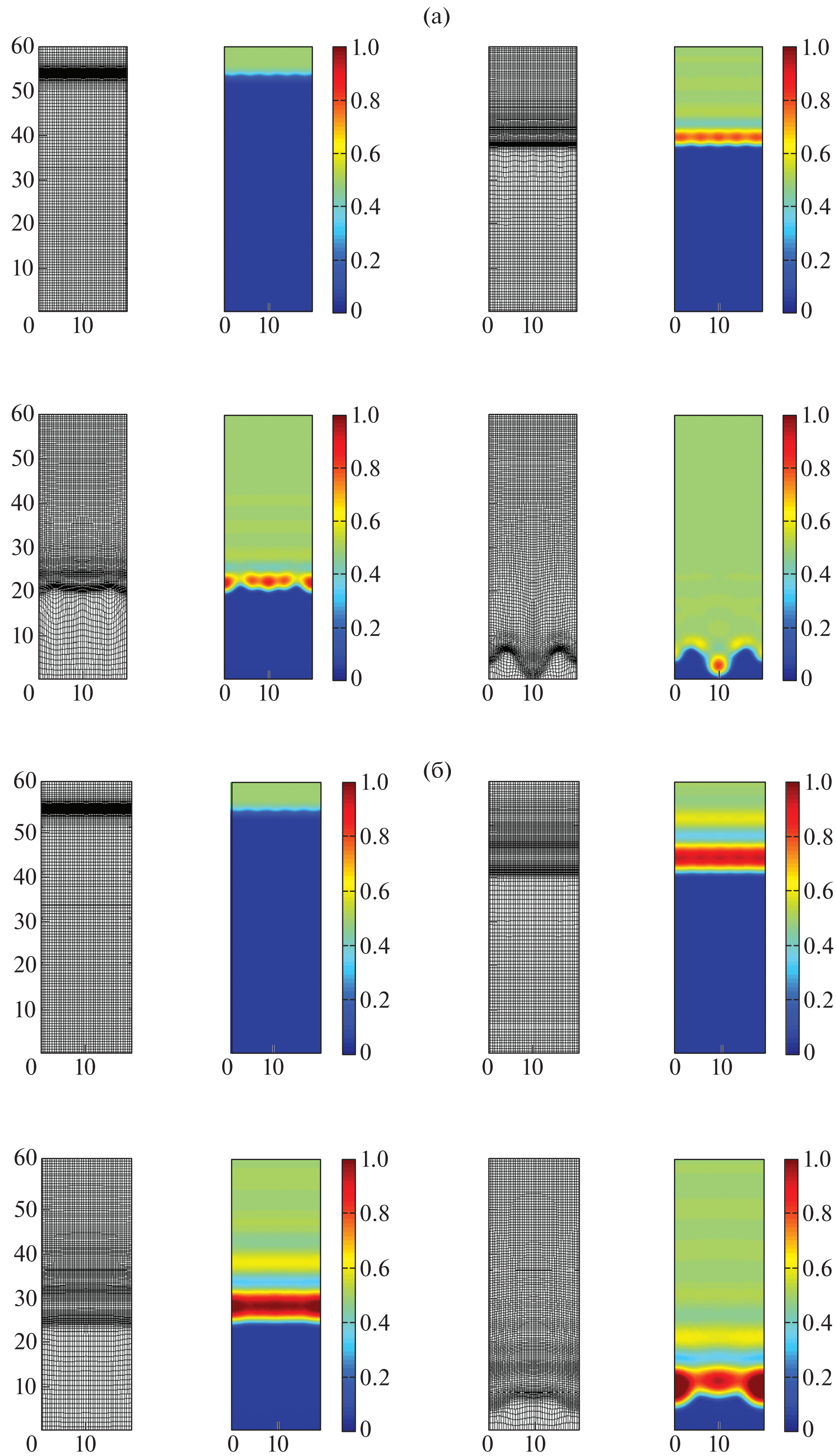
Фигура 5 действительно подтверждает и иллюстрирует анализ устойчивости, проведенный в [15] и [16], также кратко описанный в п. 3.1. На фиг. 5а показан численно рассчитанный коэффициент роста k возмущения как функции начальной частоты ω для нескольких значений параметра неравновесности τ, используя метод адаптивной сетки из п. 3.2. На фиг. 5б показана очень похожая зависимость $k(\omega)$. Фигуру 6 можно извлечь из фиг. 5, если построить диаграмму зависимости τ от частоты ω. Семь черных точек обозначают семь значений τ для $\omega = 5$ в численных экспериментах. Для $\tau = 0.2$ и $\tau = 1$ можно найти монотонную и стабильную волну, как и предсказывалось (см. фиг. 7). Для $\tau = 3$ (фиг. 8а) возникает немонотонная стабильная волна. На фиг. 8б мы видим появление немонотонной и неустойчивой волн для $\tau = 6$. На фиг. 9а для $\tau = 10$ и для $\tau = 30$ (фиг. 9б) мы видим больше немонотонных и неустойчивых волн. Можно также предсказать, что для $\omega = 5$ и $\tau \gg 1$ (в данном случае $\tau = 100$) немонотонные волны снова “становятся” стабильными из-за дополнительного эффекта диффузии при больших значениях параметра неравновесности. Это видно на фиг. 10а. Наконец, на фиг. 10б мы уменьшили коэффициент диф-



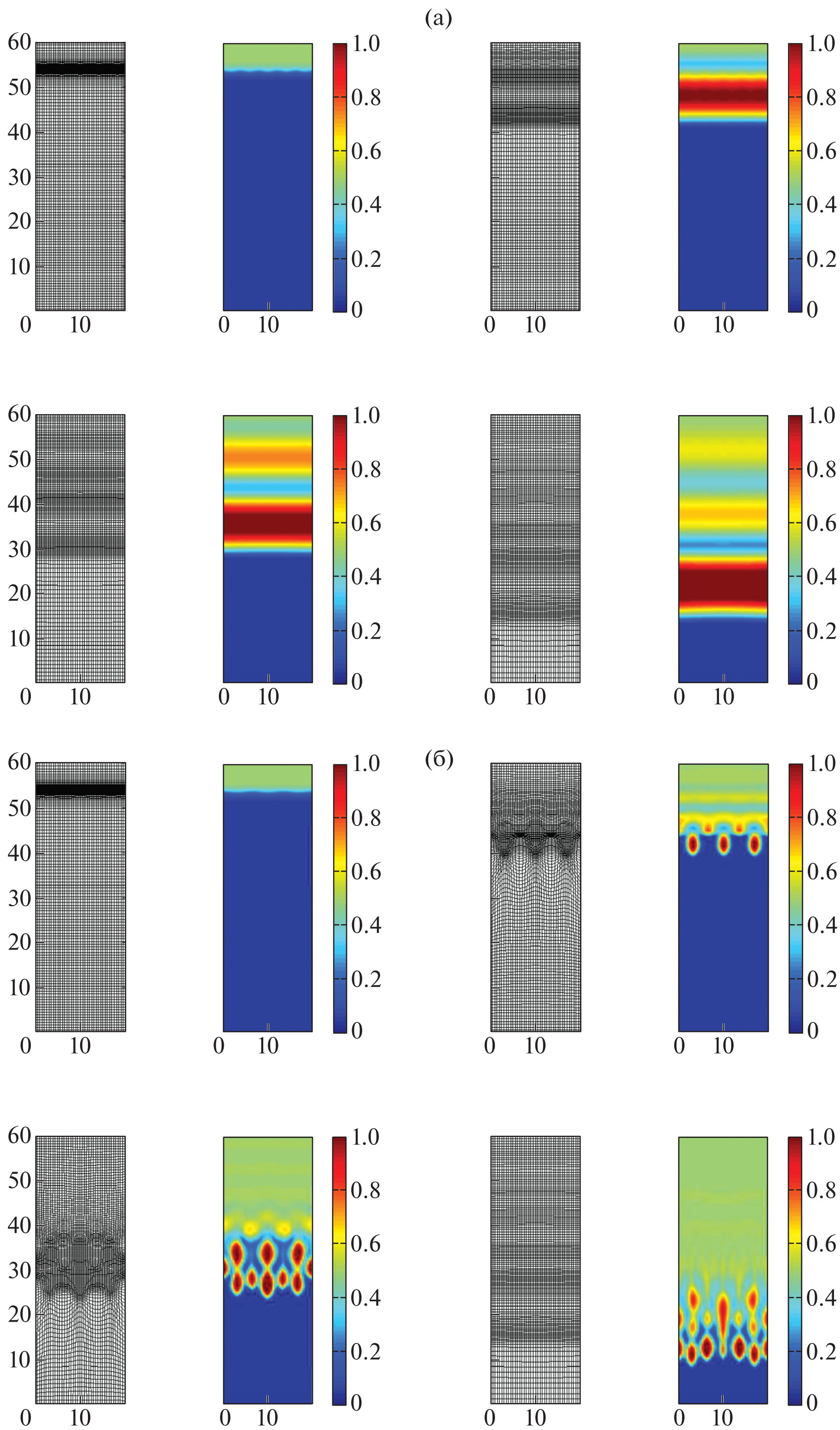
Фиг. 7. (а) – Для $t = 0,100,150,250$ показаны численные результаты для случая $\tau = 0.2 < \tau_*$ (монотонная устойчивая волна), (б) – для $\tau = 1 < \tau^*$.



Фиг. 8. (а) – Для $t = 0, 100, 150, 250$ показаны численные результаты для случая $\tau = 3 > \tau_*$ (немонотонная устойчивая волна), (б) – для $\tau = 6 > \tau_*$ (немонотонная и неустойчивая волна).



Фиг. 9. (а) – Для $t = 0, 100, 150, 250$ показаны численные результаты для случая $\tau = 10 > \tau_*$, (б) – для $\tau = 30 > \tau_*$ (обе волны немонотонные и неустойчивые).



Фиг. 10. (а) – Для $t = 0,100,150,250$ показаны численные результаты для случая $\tau = 100 \geqslant \tau_*$ (снова немонотонная устойчивая волна), (б) – для $\mathfrak{D} = 0.1$ вместо $\mathfrak{D} = 1$ (неустойчивая структура типа “палец”).

фузии $\mathfrak{D}$ с 1 до 0.1, тем самым создав еще более неустойчивые структуры в виде “пальцев”. Все расчеты проводились с параметрами $\alpha = 3$, $\beta = 0.5$, с пространственной сеткой 41×121 узлами, 4000 шагов по времени и частотой $\omega = 5$ в возмущенном начальном состоянии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Alessandrini G., Nesi V.* Univalent σ-harmonic mappings // Arch. Rational Mech. Anal. 2001. V. 158. P. 155–171.
2. *Budd C., Huang W., Russell R.* Adaptivity with moving grids // Acta Numerica. 2009. P. 1–131.
3. *Clement Ph., Hagmeijer R., Sweers G.* On the invertibility of mappings arising in 2D grid generation problems // Numerische Mathematik. 1996. V. 73. No. 1. P. 37–52.
4. *Cuesta C., van Duijn C.J., Hulshof J.* Infiltration in porous media with dynamic capillary pressure: travelling waves // Eur. J. Appl. Math. 2000. V. 11. P. 397.
5. *van Dam A., Zegeling P.A.* A robust moving mesh finite volume method applied to 1d hyperbolic conservation laws from magnetohydrodynamics // J. of Comput. Phys. 2006. V. 216. P. 526–546.
6. *van Dam A., Zegeling P.A.* Balanced monitoring of flow phenomena in moving mesh methods // Commun. Comput. Phys. 2010. V. 7. P. 138–170.
7. *DiCarlo D.* Experimental measurements of saturation overshoot on infiltration // Water Resources Res. 2004. V. 40. W04215.
8. *van Duijn C.J., Fan Y., Peletier L.A., Pop I.S.* Travelling wave solutions for a degenerate pseudo-parabolic equation modelling two-phase flow in porous media // Nonlin. Anal. Real World Appl. 2013. P. 1361–1383.
9. *van Duijn C.J., Hassanizadeh S.M., Pop I.S., Zegeling P.A.* Non-equilibrium models for two-phase flow in porous media: the occurence of saturation overshoot // Proc. of the Fifth Inter. Conf. on Appl. of Porous Media, Cluj-Napoca, 2013.
10. *Egorov A.G., Dautov R.Z., Nieber J.L., Sheshukov A.Y.* Stability analysis of gravity-driven infiltrating flow // Water Resources Res. 2003. V. 39. P. 1266.
11. *Hassanizadeh S.M., Gray W.G.* Thermodynamic basis of capillary pressure on porous media // Water Resources Res. 1993. V. 29. P. 3389–3405.
12. *Hilfer R., Doster F., Zegeling P.A.* Nonmonotone saturation profiles for hydrostatic equilibrium in homogeneous porous media // Vadose Zone J. 2012. V. 11. No. 3. P. 201.
13. *Hu G., Zegeling P.A.* Simulating finger phenomena in porous media with a moving finite element method // J. of Comp. Phys. 2011. YJCPH 3432.
14. *Huang W., Russell R.D.* Analysis of moving mesh partial differential equations with spatial smoothing // SIAM J. Num. Anal. 1997. V. 34. P. 1106–1126.
15. *Huang W., Russell R.D.* Adaptive moving mesh methods. Springer, New York, 2011, XVII, 432 p.
16. *Hundsdorfer W., Verwer J.* Numerical solution of ‘time-dependent advection-diffusion-reaction equations. Springer, Berlin, 1993.
17. *Nicholl M.J., Glass R.J.* Infiltration into an analog fracture: experimental observations of gravity-driven fingering // Vadose Zone J. 2005. V. 4. P. 1123–1151.
18. *Kampitsis A.E., Adam A., Salinas P., Pain C.C., Muggeridge A.H., Jackson M.D.* Dynamic adaptive mesh optimisation for immiscible viscous fingering // Comput. Geoscienc. 2020. V. 24. P. 1221–1237.
19. *Nieber J.L., Dautov R.Z., Egorov A.G., Sheshukov A.Y.* Dynamic capillary pressure mechanosm for instability in gravity-driven flows; review and extension to very dry conditions // Transp. Porous Media. 2005. V. 58. P. 147–172.
20. *Petzold L.R.* A Description of DASSL: A Differential/Algebraic System Solver, in: IMACS Transact. on Scient. Comput., Eds.: R.S. Stepleman, 1983. P. 65–68.
21. *Ruuth S.J.* Implicit-explicit methods for reaction-diffusion problems in pattern formation // J. of Math. Biolog. 1995. V. 34. P. 148–176.
22. *Tang T., Tang H.* Adaptive mesh methods for one- and two-dimensional hyperbolic conservation laws // SIAM J. on Numer. Anal. 2003. V. 41. Iss. 2. P. 487–515.
23. *Zegeling P.A.* On resistive MHD models with adaptive moving meshes // J. of Scient. Comput. 2005. V. 24. No. 2. P. 263–284.
24. *Zegeling P.A., Lagzi I., Izsak F.* Transition of Liesegang precipitation systems: simulations with an adaptive grid PDE method // Commun. in Comput. Phys. 2011. V. 10. No. 4. P. 867–881.
25. *Zegeling P.A.* Theory and application of adaptive moving grid methods, Chapter 7 in Adaptive Computations: Theory and Computation, Sci. Press, Beijing, 2007.

EDN: YKBHGZ
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1374–1385

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.63

ГРАНИЧНОЕ УСЛОВИЕ НА ДАВЛЕНИЕ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНЫХ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ–СТОКСА МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ОБЪЕМОВ С СОВМЕЩЕННЫМ РАСПОЛОЖЕНИЕМ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ[1)]

© 2022 г. К. М. Терехов[1,2]

[1] 119333 Москва, ул. Губкина, 8, Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН, Россия
[2] 141701 Долгопрудный, М.о., Институтский пер., 9, Московский физико-технический институт, Россия
e-mail: terekhov@inm.ras.ru

Поступила в редакцию 10.10.2021 г.
Переработанный вариант 21.01.2022 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

Предложены граничные условия на давление для решения стационарных несжимаемых уравнений Навье–Стокса методом конечных объемов с совмещенным расположением степеней свободы. Работа основана на inf-sup устойчивом методе аппроксимации совмещенного потока импульса и массы. На основе предположения о линейности неизвестных скорости и давления выводятся односторонние выражения совмещенного потока. Обеспечивая непрерывность этих выражений на внутренних гранях, получаем скорость и давление на грани и единственное выражение для совмещенного потока. В результате сохранение импульса и массы является дискретно точным. Однако для восстановления давления и расчета совмещенного потока на границе области требуется дополнительное граничное условие на давление. Библ. 28. Фиг. 2. Табл. 3.

Ключевые слова: уравнения Навье–Стокса, несжимаемая жидкость, метод конечных объемов, граничные условия.

DOI: 10.31857/S0044466922080142

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] был представлен полностью неявный конечно-объемный метод с совмещенным расположением степеней свободы и кусочно-линейной аппроксимацией скорости и давления. В указанной работе применялось простое искусственное граничное условие для давления, предложенное Грешо (см. [2]): отсутствие изменения градиента давления в нормальном направлении между текущим и следующим временными шагами. Из-за этого условия предложенный метод ограничен нестационарными задачами. В [3] был представлен полностью неявный конечно-объемный метод с совмещенным расположением степеней свободы и кусочно-постоянной аппроксимацией поля давления. Он не требовал никаких граничных условий на давление и позволял моделировать стационарную постановку задачи, но требовал настраиваемого параметра для компенсации ошибки давления в течениях с преобладанием адвекции. Основной мотивацией для полностью неявного подхода является совмещение жесткого каскада реакций в единую систему с уравнениями течения жидкости в модели свертываемости крови (см. [4], [5]). В данной работе мы исследуем улучшение метода конечных объемов (см. [1], [3]) и рассматриваем граничные условия давления, которые позволяют линейно реконструировать поле давления в стационарной постановке.

Типичной проблемой методов с совмещенным расположением степеней свободы является проблема неустойчивости inf-sup (см. [6]). Обычным подходом к решению этой проблемы является использование разнесенного расположения скоростей (см. [7]–[9]). Однако при использовании разнесенной схемы трудно удовлетворить свойствам консервативности (см. [10]).

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант 19-71-10094).

Другим решением является использование метода интерполяции Ри–Чоу (см. [11]) с совмещенным расположением неизвестных. Он является стандартным в промышленных приложениях (см. [12]–[16]).

В настоящей работе используется гипотеза о том, что inf-sup устойчивость удовлетворяется, если все матричные коэффициенты в выражении векторного потока имеют положительные собственные значения. Ранее мы применяли эту гипотезу к смешанной постановке задачи Дарси с седловой точкой (см. [17]), задаче Навье–Стокса (см. [3]) и к задаче гидроразрыва пласта, заданной уравнениями Дарси и пороупругости в разных областях (см. [18]).

Схема, предложенная в [1], [3], получена с использованием метода осреднения в гармонической точке. Первоначально концепция гармонической точки была предложена для задачи анизотропной диффузии (см. [19], [20]). Позже она была расширена для задач анизотропной упругости и поромеханики (см. [21], [22]). Выражение осреднения в гармонической точке вытекает из непрерывности совмещенного потока импульса и массы на границе раздела. Оно позволяет получить единственное выражение для совмещенного потока.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 определяется задача и описывается метод конечных объемов. В разд. 3 подробно описаны отдельные нюансы дискретизации одностороннего совмещенного потока. Единственное выражение аппроксимации потока выводится из непрерывности односторонних приближений в разд. 4. Граничные условия и аппроксимация потока на границе объясняются в разд. 5. В разд. 6 подробно описывается метод восстановления градиента, а в разд. 7 – шаги по сборке и решению нелинейной системы. Численные тесты проводятся в разд. 8.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД КОНЕЧНЫХ ОБЪЕМОВ

Мы ищем решение системы стационарных уравнений Навье–Стокса:

$$\begin{aligned} &\left.\begin{aligned}&\operatorname{div}\left(\rho\mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}} - \tau(\mathbf{u}) + p\mathbb{I}\right) = \mathbf{f},\\ &\operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0,\end{aligned}\right\} \quad \text{в} \quad \Omega, \\ &\text{граничные условия} \quad \text{на} \quad \partial\Omega. \end{aligned} \tag{1}$$

Система (1) замкнута с соответствующими граничными условиями, которые вводятся в разд. 5. В (1) $\mathbf{u} = [u, v, w]^{\mathrm{T}}$ – вектор скорости, p – давление, $u, v, w, p \in H^1(\Omega)$ с соответствующей поправкой на пространство на границе, $\rho = \mathrm{const}$ – плотность жидкости, постоянная из-за несжимаемости, $\tau(\mathbf{u})$ – тензор напряжений:

$$\tau(\mathbf{u}) = 2\mu\mathbf{D}(\mathbf{u}), \quad \mathbf{D}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}\left[\mathbf{u}\nabla^{\mathrm{T}} + \nabla\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\right], \tag{2}$$

где $\mu = \mathrm{const}$ – динамическая вязкость жидкости, $\nabla^T = [\partial_x \ \partial_y \ \partial_z]$ и $\mathbb{I}$ – единичная матрица соответствующего размера. Условие бездивергентности поля скорости читается как

$$\operatorname{div}(\mathbf{u}) = \nabla\cdot\mathbf{u} = \nabla^{\mathrm{T}}\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\mathrm{T}}\nabla = [u \ v \ w]\begin{bmatrix}\partial_x\\ \partial_y\\ \partial_z\end{bmatrix} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \tag{3}$$

Учитывая член напряжения, получаем

$$\begin{aligned}\operatorname{div}(\tau(\mathbf{u})) &= \mu\left(\mathbf{u}\nabla^{\mathrm{T}} + \nabla\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\right)\nabla = \mu\mathbf{u}\nabla^{\mathrm{T}}\nabla + \mu\nabla\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\nabla = \mu\begin{bmatrix}u\\ v\\ w\end{bmatrix}[\partial_x \ \partial_y \ \partial_z]\begin{bmatrix}\partial_x\\ \partial_y\\ \partial_z\end{bmatrix} + \mu\begin{bmatrix}\partial_x\\ \partial_y\\ \partial_z\end{bmatrix}[u \ v \ w]\begin{bmatrix}\partial_x\\ \partial_y\\ \partial_z\end{bmatrix} = \\ &= \mu\begin{bmatrix}\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial z^2}\\ \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2 v}{\partial z^2}\\ \dfrac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2 w}{\partial z^2}\end{bmatrix} + \mu\begin{bmatrix}\partial_x\left(\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial u}{\partial z}\right)\\ \partial_y\left(\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial w}{\partial z}\right)\\ \partial_z\left(\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial w}{\partial z}\right)\end{bmatrix},\end{aligned} \tag{4}$$

таким образом, второй член исчезает для бездивергентного поля скорости. Однако это приводит к другому приближению, которое влияет на устойчивость метода. В данной работе мы предполагаем, что компоненты вектора скорости и давления являются кусочно-линейными.

В методе конечных объемов мы используем формулу Остроградского–Гаусса для оператора дивергенции на каждой ячейке $V \in \mathcal{V}(\Omega)$, что приводит к

$$\begin{gathered} \int\limits_V \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}} - \tau(\mathbf{u}) + p\mathbb{I}\right) \mathrm{d}V \approx \sum_{\sigma \in \mathcal{F}(V)} |\sigma| \left[\rho \mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}} - \tau(\mathbf{u}) + p\right]\Big|_{\mathbf{x}_\sigma} \mathbf{n}, \\ \int\limits_V \nabla \cdot \mathbf{u} \, \mathrm{d}V \approx \sum_{\sigma \in \mathcal{F}(V)} |\sigma| \left[\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}\right]\Big|_{\mathbf{x}_\sigma}. \end{gathered} \tag{5}$$

Здесь $\mathbf{n}$ – средняя единичная нормаль грани σ, направленная наружу клетки V.

3. АППРОКСИМАЦИЯ ПОТОКА НА ГРАНИ

Уравнения в (5) вводят потоки импульса $\mathbf{t}$ и непрерывности q:

$$\mathbf{t} = \rho \mathbf{u}\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \tau(\mathbf{u})\mathbf{n} + p\mathbf{n}, \quad q = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \tag{6}$$

где $\mathbf{t}$ состоит из адвективной части $\mathbf{t}_A = \rho \mathbf{u}\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$, вязкостной части $\mathbf{t}_T = -\tau(\mathbf{u})\mathbf{n}$ и вклада давления $\mathbf{t}_P = p\mathbf{n}$. Потоки $\mathbf{t}$ и q непрерывны на любой поверхности, т.е. на любом сеточном интерфейсе σ. Заметим, что в силу уравнения непрерывности скорость $\mathbf{u}$ непрерывна во всей области.

Адвективная часть $\mathbf{t}_A$ потока импульса $\mathbf{t}$ линеаризуется для получения эффективного тензора скорости. Пусть $\mathbf{u}_1 = [u_1, v_1, w_1]^{\mathrm{T}}$ – вектор скорости, расположенный в барицентре $\mathbf{x}_1$ ячейки V_1. Используя простую формулу разложения Тейлора, аппроксимация второго порядка адвективной части $\mathbf{t}_A$ потока импульса в барицентре $\mathbf{x}_\sigma$ грани σ имеет следующий вид:

$$\mathbf{t}_A\big|_{\mathbf{x}_\sigma} \approx \rho \, \mathbf{u}\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}\big|_{\mathbf{x}_1} + \frac{\rho \mathbf{u}\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}}{\partial \mathbf{u}}\bigg|_{\mathbf{x}_1} \left(\mathbf{u}\nabla^{\mathrm{T}}\right)\Big|_{\mathbf{x}_1} \left(\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1\right), \tag{7}$$

который при предположении линейности скорости и использовании неизвестной скорости интерфейса $\mathbf{u}_\sigma$ может быть упрощен до

$$\mathbf{t}_A\big|_{\mathbf{x}_\sigma} \approx \frac{\rho}{2}\left(\mathbf{u}_1\mathbf{n}^{\mathrm{T}} + \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}\mathbb{I}\right)\left(2\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{u}_1\right). \tag{8}$$

Аппроксимация вязкостной части $\mathbf{t}_T$ формулируется следующим образом:

$$\mathbf{t}_T\big|_{\mathbf{x}_\sigma} \approx -\tau(\mathbf{u})\big|_{\mathbf{x}_1} \mathbf{n} \approx -\mu\left(\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^{\mathrm{T}} + \mathbf{n}^{\mathrm{T}} \otimes \mathbb{I}\right)\left(\mathbf{u} \otimes \nabla\right)\big|_{\mathbf{x}_1}. \tag{9}$$

Здесь $\otimes$ обозначает произведение Кронекера, вектор градиента $\mathbf{u} \otimes \nabla$ размера 9×1 и матрица $\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^T + \mathbf{n}^T \otimes \mathbb{I}$ размера 3×9 выражаются следующим образом:

$$\mathbf{u} \otimes \nabla = \begin{bmatrix} \nabla u \\ \nabla v \\ \nabla w \end{bmatrix}, \quad \mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^{\mathrm{T}} + \mathbf{n}^{\mathrm{T}} \otimes \mathbb{I} = \begin{bmatrix} 2n_x & n_y & n_z & n_y & & & n_z & & \\ & n_x & & n_x & 2n_y & n_z & & n_z & \\ & & n_x & & & n_y & n_x & n_y & 2n_z \end{bmatrix}. \tag{10}$$

При предположении линейности разложение для градиента является точным:

$$\mathbf{u}_1 \otimes \nabla = r_1^{-1}\left(\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}\right)\left(\mathbf{u}_\sigma - \mathbf{u}_1\right) + \left(\mathbb{I} - r_1^{-1}\left(\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}\right)\mathbb{I} \otimes \left(\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1\right)^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{u}_1 \otimes \nabla. \tag{11}$$

Применим (11) к (9) и получим

$$\mathbf{t}_T\big|_{\mathbf{x}_\sigma} \approx \mu r_1^{-1}\left(\mathbb{I} + \mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\right)\left(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_\sigma\right) - \mu\left(\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^{\mathrm{T}} + \mathbf{n}^{\mathrm{T}} \otimes \mathbb{I} - r_1^{-1}\left(\mathbb{I} + \mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\right) \otimes \left(\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1\right)^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{u}_1 \otimes \nabla, \tag{12}$$

где $r_1 = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1)$ и $\left(\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^{\mathrm{T}} + \mathbf{n}^{\mathrm{T}} \otimes \mathbb{I}\right)\left(\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}\right) = \mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^{\mathrm{T}}\mathbf{n} + \mathbf{n}^{\mathrm{T}} \otimes \mathbf{n} = \mathbb{I} + \mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}}$.

Вклад давления в поток импульса $\mathbf{t}_P$ и поток непрерывности q образуют систему с седловой точкой:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{t}_P \\ q \end{bmatrix}_{\mathbf{x}_\sigma} = \begin{bmatrix} p_\sigma \mathbf{n} \\ \mathbf{u}_\sigma \cdot \mathbf{n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & \mathbf{n} \\ \mathbf{n}^T & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_\sigma \\ p_\sigma \end{bmatrix} = S(\mathbf{n}) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_\sigma \\ p_\sigma \end{bmatrix}, \tag{13}$$

где неопределенная матрица $S(\mathbf{n})$ размера 4×4 имеет два собственных значения: ± 1. Аппроксимация второго порядка для совмещенного потока (13) имеет вид

$$\begin{bmatrix} \mathbf{t}_P \\ q \end{bmatrix}_{\mathbf{x}_\sigma} \approx A \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} - (A - S(\mathbf{n})) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_\sigma \\ p_\sigma \end{bmatrix} + A \otimes (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes \nabla, \tag{14}$$

где 4×4 матрица $A > 0$ используется для стабилизации метода. Введем матрицу A вместе с другими матричными коэффициентами:

$$\begin{gathered} A(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{n}) = \begin{bmatrix} a\left(\mathbb{I} + \mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\right) & c\mathbf{n} \\ c\mathbf{n}^{\mathrm{T}} & b \end{bmatrix}, \quad Q(\mathbf{u}, \mathbf{n}) = \begin{bmatrix} \frac{\rho}{2}(\mathbf{u}\mathbf{n}^{\mathrm{T}} + \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}\mathbb{I}) & \end{bmatrix}, \\ W(\mathbf{n}) = \begin{bmatrix} \mu\left(\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^{\mathrm{T}} + \mathbf{n}^{\mathrm{T}} \otimes \mathbb{I}\right) & \end{bmatrix}, \\ T(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{n}) = A(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{n}) + \begin{bmatrix} \mu r^{-1}\left(\mathbb{I} + \mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\right) & \end{bmatrix}, \end{gathered} \tag{15}$$

где $r = \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}$ и параметры a, b и c зависят от $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$, $\mathbf{n}$. Определяя $T_1 = T(\mathbf{u}_1, \mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1, \mathbf{n})$, $Q_1 = Q(\mathbf{u}_1, \mathbf{n})$, $S_1 = S(\mathbf{n})$ и $W_1 = W(\mathbf{n})$, мы получаем полное выражение для совмещенного потока:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{t} \\ q \end{bmatrix}_{\mathbf{x}_\sigma} \approx (T_1 - Q_1) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} - (T_1 - S_1 - 2Q_1) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_\sigma \\ p_\sigma \end{bmatrix} + \left(T_1 \otimes (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} - W_1\right) \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes \nabla. \tag{16}$$

Мы требуем положительности собственных значений в $T(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{n}) - Q(\mathbf{u}, \mathbf{n})$ и $T(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{n}) - S(\mathbf{u}, \mathbf{n}) - 2Q(\mathbf{u}, \mathbf{n})$ путем выбора параметров a, b, c с минимальными абсолютными значениями. Для краткости опускаем анализ и ссылаемся на [1], но для полноты представляем выбор параметров. Пусть $\nu = \rho \mathbf{n}^{\mathrm{T}} \mathbf{u}/2$, тогда

$$a = \max\left(2\nu - \mu r^{-1}, 0\right) + \rho \sqrt{\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\left(\mathbb{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{u} + \varepsilon^2} > 0. \tag{17}$$

Пусть $\zeta = a + \mu r^{-1} - 2\nu > 0$ и $\zeta + \nu \geq 0$, тогда b и c даются в виде

$$c = \begin{cases} 1 + t - \sqrt{t + t^2}, & \nu > 0, \\ 1/2, & \nu = 0, \\ 1 + t + \sqrt{t + t^2}, & \nu < 0, \end{cases} \qquad b = \begin{cases} \left(1/2 + t - \sqrt{t + t^2}\right)/\nu, & \nu > 0, \\ 1/(8\zeta), & \nu = 0, \\ \left(1/2 + t + \sqrt{t + t^2}\right)/\nu, & \nu < 0, \end{cases} \tag{18}$$

где $t = \zeta/\nu$ и $b\zeta \in [0, 1/2]$.

4. НЕПРЕРЫВНОСТЬ ПОТОКА НА ВНУТРЕННЕЙ ГРАНИ

Определим p_i, ∇p_i, $\mathbf{u}_i$, $\nabla \mathbf{u}_i$, давление, скорость и градиент скорости в ячейке V_i с барицентром $\mathbf{x}_i$. Пусть внутренняя грань $\sigma \in \mathcal{F}(\Omega \backslash \partial\Omega)$ является общей для двух ячеек V_1 и V_2, т.е. $\sigma = V_1 \cap V_2$, $V_1, V_2 \in \mathcal{V}(\Omega)$. Мы предполагаем, что нормаль $\mathbf{n}$ ориентирована из V_1 в V_2.

Пусть $T_2 = T(\mathbf{u}_2, \mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_2, -\mathbf{n})$, $Q_2 = Q(\mathbf{u}_2, -\mathbf{n})$, $S_2 = S(-\mathbf{n})$ и $W_2 = W(-\mathbf{n})$, тогда аппроксимация потока со стороны ячейки V_2 имеет вид

$$\begin{bmatrix}\mathbf{t}\\ q\end{bmatrix}\Bigg|_{\mathbf{x}_\sigma} \approx (T_2 - S_2 - 2Q_2)\begin{bmatrix}\mathbf{u}_\sigma\\ p_\sigma\end{bmatrix} - (T_2 - Q_2)\begin{bmatrix}\mathbf{u}_2\\ p_2\end{bmatrix} - \left(T_2 \otimes (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_2)^{\mathrm{T}} - W_2\right)\begin{bmatrix}\mathbf{u}_2\\ p_2\end{bmatrix} \otimes \nabla. \quad (19)$$

Подход к выбору параметров сохраняется для матричных коэффициентов в (19) с учетом обратного направления нормали. Приравнивая приближения потоков (16) и (19), получим вектор неизвестных на грани:

$$\begin{bmatrix}\mathbf{u}_\sigma\\ p_\sigma\end{bmatrix} = (T_1 + T_2 - S_1 - S_2 - 2Q_1 - 2Q_2)^{-1}\begin{pmatrix}(T_1 - Q_1)\begin{bmatrix}\mathbf{u}_1\\ p_1\end{bmatrix} + \left(T_1 \otimes (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} - W_1\right)\left(\begin{bmatrix}\mathbf{u}_1\\ p_1\end{bmatrix} \otimes \nabla\right) + \\ + (T_2 - Q_2)\begin{bmatrix}\mathbf{u}_2\\ p_2\end{bmatrix} + \left(T_2 \otimes (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_2)^{\mathrm{T}} - W_2\right)\left(\begin{bmatrix}\mathbf{u}_2\\ p_2\end{bmatrix} \otimes \nabla\right)\end{pmatrix}. \quad (20)$$

Единственное выражение для аппроксимации потока получается путем подстановки (20) в (16) или (19):

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix}\mathbf{t}\\ q\end{bmatrix}\Bigg|_{\mathbf{x}_\sigma} &\approx (T_2 - S_2 - 2Q_2)(T_1 + T_2 - S_1 - S_2 - 2Q_1 - 2Q_2)^{-1} \times \\ &\times\left((T_1 - Q_1)\begin{bmatrix}\mathbf{u}_1\\ p_1\end{bmatrix} + (T_1 \otimes (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} - W_1)\left(\begin{bmatrix}\mathbf{u}_1\\ p_1\end{bmatrix} \otimes \nabla\right)\right) - \\ &- (T_1 - S_1 - 2Q_2)(T_1 + T_2 - S_1 - S_2 - 2Q_1 - 2Q_2)^{-1} \times \\ &\times\left((T_2 - Q_2)\begin{bmatrix}\mathbf{u}_2\\ p_2\end{bmatrix} + (T_2 \otimes (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_2)^{\mathrm{T}} - W_2)\left(\begin{bmatrix}\mathbf{u}_2\\ p_2\end{bmatrix} \otimes \nabla\right)\right).\end{aligned} \quad (21)$$

5. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

Граничные условия на грани $\sigma \in \mathcal{F}(\partial\Omega)$ заданы следующим образом:

$$\begin{aligned}\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\left(\alpha_\perp \mathbf{u} + \beta_\perp (\tau(\mathbf{u}) - p\mathbb{I})\,\mathbf{n}\right)\big|_{\mathbf{x}_\sigma} &= r_\perp, \\ \left(\mathbb{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\right)\left(\alpha_\parallel \mathbf{u} + \beta_\parallel (\tau(\mathbf{u}) - p\mathbb{I})\,\mathbf{n}\right)\big|_{\mathbf{x}_\sigma} &= \mathbf{r}_\parallel.\end{aligned} \quad (22)$$

Граничные условия (22) используются для вывода выражения для вектора неизвестных на грани. Для этого граничные условия дополняются условием на давление:

$$\left(\alpha_p p + \beta_p \mathbf{n} \cdot \nabla p\right)\big|_{\mathbf{x}_\sigma} = r_p. \quad (23)$$

В (23) $r_p = \alpha_p p_b + \beta_p \xi$ с предписанным граничным давлением p_b. В [1] для простоты мы использовали граничное условие для давления $\xi = \mathbf{n} \cdot \nabla p^n$, предложенное в [2], где p^n – давление на предыдущем временном шаге. Такой выбор невозможен в настоящей работе из-за отсутствия времени. Прямой подход определения граничных условий состоит в том, чтобы вывести ξ из уравнения импульса или непрерывности (см. [23]). Воспользуемся первым вариантом и из первого уравнения в (1) получим

$$\xi = \mathbf{n} \cdot \operatorname{div}(p\mathbb{I}) = \mathbf{n} \cdot \nabla p = \mathbf{n} \cdot \mathbf{f} - \mathbf{n} \cdot \operatorname{div}\left(\rho \mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}} - \tau(\mathbf{u})\right). \quad (24)$$

В силу предположения о локальной линейности $\mathbf{u}$ и с учетом (4) член $\mathbf{n} \cdot \operatorname{div}(\tau(\mathbf{u}))$, состоящий из вторых производных вектора скорости, обращается в нуль в (24).

Таблица 1. Коэффициенты для распространенных типов граничных условий

	Коэффициенты Γ_D	Γ_{NS}	Γ_S	Γ_{TF}	Γ_P	Γ_{MN}
$\alpha_\perp$	1	1	1	0	0	1
$\alpha_\parallel$	1	1	0	0	0	λ
$\beta_\perp$	0	0	0	1	1	0
$\beta_\parallel$	0	0	1	1	1	1
α_p	0	0	0	0	1	0
β_p	1	1	1	1	0	1
$r_\perp$	$\mathbf{n}\cdot\mathbf{u}_b$	0	0	0	$-p_b$	0
$\mathbf{r}_\parallel$	$\mathbf{u}_b - \mathbf{nn}\cdot\mathbf{u}_b$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$

Учитывая вклад адвективного члена в (24) и используя условие бездивергентности (3), получаем

$$\mathbf{n}\cdot\operatorname{div}\left(\rho\mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\right) = \rho\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\nabla = \rho\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} u^2 & uv & uw \\ uv & v^2 & vw \\ uw & vw & w^2 \end{bmatrix}\nabla = \rho\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} u\left(2\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial w}{\partial z}\right) + v\dfrac{\partial u}{\partial y} + w\dfrac{\partial u}{\partial z} \\ u\dfrac{\partial v}{\partial x} + v\left(\dfrac{\partial u}{\partial x} + 2\dfrac{\partial v}{\partial y} + \dfrac{\partial w}{\partial z}\right) + w\dfrac{\partial v}{\partial z} \\ u\dfrac{\partial w}{\partial x} + v\dfrac{\partial w}{\partial z} + w\left(\dfrac{\partial u}{\partial x} + \dfrac{\partial v}{\partial y} + 2\dfrac{\partial w}{\partial z}\right) \end{bmatrix} =$$
$$= \rho\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} u\dfrac{\partial u}{\partial x} + v\dfrac{\partial u}{\partial y} + w\dfrac{\partial u}{\partial z} \\ u\dfrac{\partial v}{\partial x} + v\dfrac{\partial v}{\partial y} + w\dfrac{\partial v}{\partial z} \\ u\dfrac{\partial w}{\partial x} + v\dfrac{\partial w}{\partial z} + w\dfrac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} = \rho\left(\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\otimes\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{u}\otimes\nabla. \tag{25}$$

Наконец, отметим, что ξ является кусочно-постоянным из-за кусочно-линейности давления. В результате мы оцениваем ξ в барицентре $\mathbf{x}_1$ ячейки, смежной с σ. Это упрощает вычисление проекции объемной силы $\mathbf{n}\cdot\mathbf{f}$, которая обычно задана в центре ячейки, а адвективный член (25) превращается в $\rho\left(\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\otimes\mathbf{u}_1^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{u}_1\otimes\nabla$.

Окончательное приближение для ξ имеет вид

$$\xi \approx \mathbf{n}\cdot\mathbf{f}\big|_{\mathbf{x}_1} - \rho\left(\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\otimes\mathbf{u}_1^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{u}_1\otimes\nabla. \tag{26}$$

Выбор коэффициентов для граничных условий типа Дирихле Γ_D, условия без проскальзывания Γ_{NS}, условия скольжения Γ_S, условия без трения Γ_{TF}, условия предписанного давления Γ_P и условия типа Максвелла–Навье Γ_{MN} с длиной скольжения λ представлены в табл. 1.

Объединим (22) и (23) в единую блочную систему, чтобы получить

$$D\begin{bmatrix}\mathbf{u}_\sigma \\ p_\sigma\end{bmatrix} + N\begin{bmatrix}\tau(\mathbf{u})\mathbf{n} \\ \mathbf{n}\cdot\nabla p\end{bmatrix}\Bigg|_{\mathbf{x}_\sigma} = \begin{bmatrix}\mathbf{n}r_\perp + \mathbf{r}_\parallel \\ r_p\end{bmatrix}, \tag{27}$$

где

$$D = \begin{bmatrix}\alpha_\parallel\mathbb{I} + \left(\alpha_\perp - \alpha_\parallel\right)\mathbf{nn}^{\mathrm{T}} & -\beta_\perp\mathbf{n} \\ & \alpha_p\end{bmatrix}, \quad N = \begin{bmatrix}\beta_\parallel\mathbb{I} + \left(\beta_\perp - \beta_\parallel\right)\mathbf{nn}^{\mathrm{T}} & \\ & \beta_p\end{bmatrix}. \tag{28}$$

Используя приближения (12), $\mathbf{n}\cdot\nabla p\big|_{\mathbf{x}_\sigma} \approx \mathbf{n}\cdot\nabla p_1$ и расширяя r_p с помощью (26), получаем

$$D\begin{bmatrix}\mathbf{u}_\sigma \\ p_\sigma\end{bmatrix} + NW_b\begin{bmatrix}\mathbf{u}_1 \\ p_1\end{bmatrix}\otimes\nabla = \begin{bmatrix}\mathbf{n}r_\perp + \mathbf{r}_\parallel \\ \beta_p\mathbf{n}\cdot\mathbf{f} + \alpha_p p_b\end{bmatrix}, \tag{29}$$

где

$$W_b = \begin{bmatrix} \mu\left(\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}^{\mathrm{T}} + \mathbf{n}^{\mathrm{T}} \otimes \mathbb{I}\right) & \\ \rho\mathbf{n}^{\mathrm{T}} \otimes \mathbf{u}_1^{\mathrm{T}} & \mathbf{n}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}. \tag{30}$$

Мы используем разложение для градиента, аналогичное (11), но для скорости и давления:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes \nabla = r_1^{-1}(\mathbb{I} \otimes \mathbf{n})\left(\begin{bmatrix} \mathbf{u}_\sigma \\ p_\sigma \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix}\right) + \left(\mathbb{I} - r_1^{-1}(\mathbb{I} \otimes \mathbf{n})\mathbb{I} \otimes (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}}\right)\begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes \nabla, \tag{31}$$

и введем

$$T_b = r_1^{-1} W_b (\mathbb{I} \otimes \mathbf{n}) = r_1^{-1} \begin{bmatrix} \mu\left(\mathbb{I} + \mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}}\right) & \\ \rho\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_1\mathbf{n}^{\mathrm{T}} & 1 \end{bmatrix}. \tag{32}$$

Используя (31) и (32) в (29), получаем выражение для скорости и давления на грани:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{u}_\sigma \\ p_\sigma \end{bmatrix} = (D + NT_b)^{-1}\left(\begin{bmatrix} \mathbf{n}r_\perp + \mathbf{r}_\parallel \\ \beta_p\mathbf{n} \cdot \mathbf{f} + \alpha_p p_b \end{bmatrix} + NT_b\begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} + N\left(T_b \otimes (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} - W_b\right)\begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes \nabla\right). \tag{33}$$

Для аппроксимации потока на границе подставим выражение (33) в формулу (16).

6. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ГРАДИЕНТА

Для численного расчета потоков остается вычислить градиент скорости и давления в каждой ячейке V_i. Рассмотрим ячейку V_1 с набором граней $\sigma \in \mathcal{F}(V_1)$. Для внутренней грани $\sigma \in \mathcal{F}(\Omega \backslash \partial\Omega)$, $\sigma = V_1 \cap V_2$ мы накладываем следующее условие на градиент:

$$\mathbb{I} \otimes (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes \nabla = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_2 \\ p_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix}, \tag{34}$$

а на границе $\sigma \in \mathcal{F}(\partial\Omega)$, $\sigma = \partial\Omega \cap V_1$ воспользуемся условием линейности

$$\begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} + \mathbb{I} \otimes (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes \nabla = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_\sigma \\ p_\sigma \end{bmatrix}, \tag{35}$$

чтобы вывести из (33) следующее условие на градиент:

$$\left(D \otimes (\mathbf{x}_\sigma - \mathbf{x}_1)^{\mathrm{T}} + NW_b\right)\begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes \nabla = \begin{bmatrix} \mathbf{n}r_\perp + \mathbf{r}_\parallel \\ \beta_p\mathbf{n} \cdot \mathbf{f} + \alpha_p p_b \end{bmatrix} - D\begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix}. \tag{36}$$

Дополняем систему условием бездивергентности:

$$[1\ 0\ 0\ 0\ 1\ 0\ 0\ 0\ 1\ 0\ 0\ 0]\begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes \nabla = 0. \tag{37}$$

Условия (34) и (36) по всем интерфейсам V_1 и (37) образуют линейную систему с матрицей $A \in \Re^{4|\mathcal{F}(V_1)|+1\times 12}$ и правой частью $B \in \Re^{4|\mathcal{F}(V_1)|+1\times 1}$. Прямоугольная система решается методом наименьших квадратов:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 \\ p_1 \end{bmatrix} \otimes \nabla = \left(A^{\mathrm{T}}A\right)^{-1} A^T B, \tag{38}$$

что требует обращение положительно-определенной матрицы $A^{\mathrm{T}}A$ размера 12×12.

Мы обнаружили, что на практике для точности полезно масштабировать на r_1 строку, соответствующую давлению в (36).

7. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ

Для определения стационарного состояния нелинейной задачи используется метод Ньютона. На каждой итерации k метода Ньютона соберем вектор правой части $\mathcal{R}^k$ размером $4|\mathcal{V}(\Omega)|\times 1$ и соответствующую матрицу $\mathcal{J}^k$ размером $4|\mathcal{V}(\Omega)|\times 4|\mathcal{V}(\Omega)|$. В данной работе используется автоматическое дифференцирование для сборки разреженных матриц, в результате чего рассматривается только сборка невязки. Сборка происходит следующим образом:

1. Предварительно вычислим градиенты скорости и давления $\begin{bmatrix}\mathbf{u}_i & p_i\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \otimes \nabla$ вместе с производными по каждой ячейке $V_i \in \mathcal{V}(\Omega)$, собирая и решая систему (38).

2. Соберем невязку в ячейке $V_i \in \mathcal{V}(\Omega)$, вычисляя (5):

$$\mathcal{R}_{V_i}^k = \sum_{\sigma\in\mathcal{F}(V_i)} |\sigma| \begin{bmatrix}\mathbf{t}\\ q\end{bmatrix}\Bigg|_{\mathbf{x}_\sigma}, \tag{39}$$

где потоки аппроксимируются, согласно (21) и (16)–(33), на внутренней и граничной σ соответственно.

3. Для каждой ячейки $V_i \in \mathcal{V}(\Omega)$ вычтем правую часть из невязки $\mathcal{R}_{V_i}^k$.

Скорость и давление на следующей итерации Ньютона $k+1$ получаются из решения системы

$$\mathcal{J}^k\left(\begin{bmatrix}\mathbf{u}^{k+1}\\ p^{k+1}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\mathbf{u}^{k}\\ p^{k}\end{bmatrix}\right) = -\mathcal{R}^k, \tag{40}$$

и следующая итерация продолжается с $\mathbf{u}^{k+1}$ и p^{k+1} до тех пор, пока не будет достигнута относительная τ_{rel} или абсолютная τ_{abs} точность падения нормы невязки. Линейная система решается итерационно методом стабилизированного градиента с многоуровневым предобуславливателем второго порядка Crout-ILU (см. [5], [24]). Программная реализация метода основана на инструментарии INMOST для распределенного математического моделирования (см. [5], [25], [26]), который обеспечивает обработку сетки, сборку линейной системы с помощью автоматического дифференцирования, решение линейной системы и визуализацию.

8. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Сначала мы продемонстрируем влияние новых граничных условий для давления на аналитическом решении для уравнений Навье–Стокса, предложенном Эшером и Штейнманом (см. [27]). Аналитическое решение имеет вид

$$\begin{aligned}
u(x,y,z) &= -\frac{\pi}{4}\left(e^{\frac{\pi x}{4}}\sin\left(\frac{\pi}{4}(y+2z)\right) + e^{\frac{\pi z}{4}}\cos\left(\frac{\pi}{4}(x+2y)\right)\right)e^{\frac{-\mu\pi^2 t}{4}},\\
v(x,y,z) &= -\frac{\pi}{4}\left(e^{\frac{\pi y}{4}}\sin\left(\frac{\pi}{4}(z+2x)\right) + e^{\frac{\pi x}{4}}\cos\left(\frac{\pi}{4}(y+2z)\right)\right)e^{\frac{-\mu\pi^2 t}{4}},\\
w(x,y,z) &= -\frac{\pi}{4}\left(e^{\frac{\pi z}{4}}\sin\left(\frac{\pi}{4}(x+2y)\right) + e^{\frac{\pi y}{4}}\cos\left(\frac{\pi}{4}(z+2x)\right)\right)e^{\frac{-\mu\pi^2 t}{4}},
\end{aligned} \tag{41}$$

$$\begin{aligned}
p(x,y,z) = -\frac{\pi^2}{32}\Bigg(& e^{\frac{\pi x}{2}} + e^{\frac{\pi y}{2}} + e^{\frac{\pi z}{2}} + 2\sin\left(\frac{\pi}{4}(x+2y)\right)\cos\left(\frac{\pi}{4}(z+2x)\right)e^{\frac{\pi(y+z)}{4}} +\\
&+ 2\sin\left(\frac{\pi}{4}(y+2z)\right)\cos\left(\frac{\pi}{4}(x+2y)\right)e^{\frac{\pi(z+x)}{4}} + 2\sin\left(\frac{\pi}{4}(z+2x)\right)\cos\left(\frac{\pi}{4}(y+2z)\right)e^{\frac{\pi(x+y)}{4}}\Bigg)e^{\frac{-\mu\pi^2 t}{2}}.
\end{aligned} \tag{42}$$

Таблица 2. Нормы ошибок для задачи Эшера–Штейнмана

ξ	0		$\mathbf{n}\cdot\nabla p(x,y,z)\vert_{\mathbf{x}_\sigma}$		по (26)	
Ошибка	$\Vert\mathbf{u}_h-\mathbf{u}\Vert_{L_2}$	$\Vert p_h-p\Vert_{L_2}$	$\Vert\mathbf{u}_h-\mathbf{u}\Vert_{L_2}$	$\Vert p_h-p\Vert_{L_2}$	$\Vert\mathbf{u}_h-\mathbf{u}\Vert_{L_2}$	$\Vert p_h-p\Vert_{L_2}$
$N=4$	0.04	0.25	0.025	0.14	0.026	0.21
$N=8$	0.023	0.083	0.01	0.027	0.011	0.037
$N=16$	0.012	0.034	0.0035	0.0054	0.0037	0.0077
$N=32$	0.006	0.016	0.001	0.0012	0.0011	0.0017
θ	0.97	1.06	1.74	2.17	1.74	2.17

Мы вводим множитель Лагранжа и накладываем ограничение на интеграл давления, следуя [3] для единственного решения по давлению:

$$\sum_{V_i\in\mathcal{V}(\Omega)} p_i|V_i| = \sum_{V_i\in\mathcal{V}(\Omega)} p(x_i,y_i,z_i)|V_i| \approx \int_\Omega p(x,y,z)\mathrm{d}V. \qquad (43)$$

Задача решается в единичном кубе $\Omega\in[0,1]^3$ до стационарного состояния для невязкой жидкости с $\rho=1$ и $\mu=0$. Заметим, что для невязкой жидкости аналитическое решение не зависит от времени. Аналитическое решение удовлетворяет $\mathbf{f}=\mathbf{0}$. По всей границе накладываются граничные условия типа Дирихле $\partial\Omega=\Gamma_D$. Скорость на границе $\mathbf{u}_b$ определяется из аналитического решения в центрах граней. Для ускорения сходимости мы задаем аналитическое решение в качестве начального решения как для давления, так и для скорости.

Введем декомпозицию Ω на регулярную $N\times N\times N$ кубическую сетку и рассмотрим три варианта задания граничных условий на давление. Первый вариант – $\xi=0$, второй – $\xi=\mathbf{n}\cdot\nabla p(x,y,z)|_{\mathbf{x}_\sigma}$ и в третьем варианте ξ определяется по формуле (26).

Результаты для всех трех вариантов приведены в табл. 2 при различном сгущении сетки. В таблице $\theta=\log_2(\mathscr{E}_{32}/\mathscr{E}_{16})$ обозначает скорость сходимости, где $\mathscr{E}_N$ – L_2-норма ошибки на $N\times N\times N$ кубической сетке. Полученные результаты явно мотивируют использование формулы (26) для ξ. Хотя аналитически заданное ξ дает немного лучшие результаты, скорость сходимости восстанавливается с ξ, определенным по формуле (26).

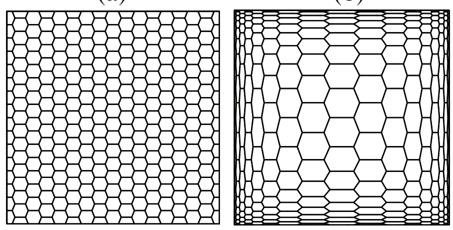
Нелинейная задача на каждом временном шаге требует до трех итераций для падения нормы невязки к точности $\tau_{\text{abs}}=10^{-7}$ и $\tau_{\text{rel}}=10^{-4}$. Для сравнения наименьшая начальная норма невязки составляет 1.6×10^{-4}, что соответствует аналитическому граничному условию на самой мелкой сетке.

Далее мы рассмотрим двумерную версию задачи о каверне с подвижной крышкой (см. [28]). Как и в [3] область единичного куба $\Omega\in[0,1]^3$ аппроксимируется полигональной призматической сеткой с одним слоем ячеек в z-направлении. Узлы исходной регулярной сетки искажены для улучшения разрешения вблизи границ. Формула преобразования для координат исходной сетки $x_i,(x_1,x_2,x_3)=(x,y,z)$ имеет вид

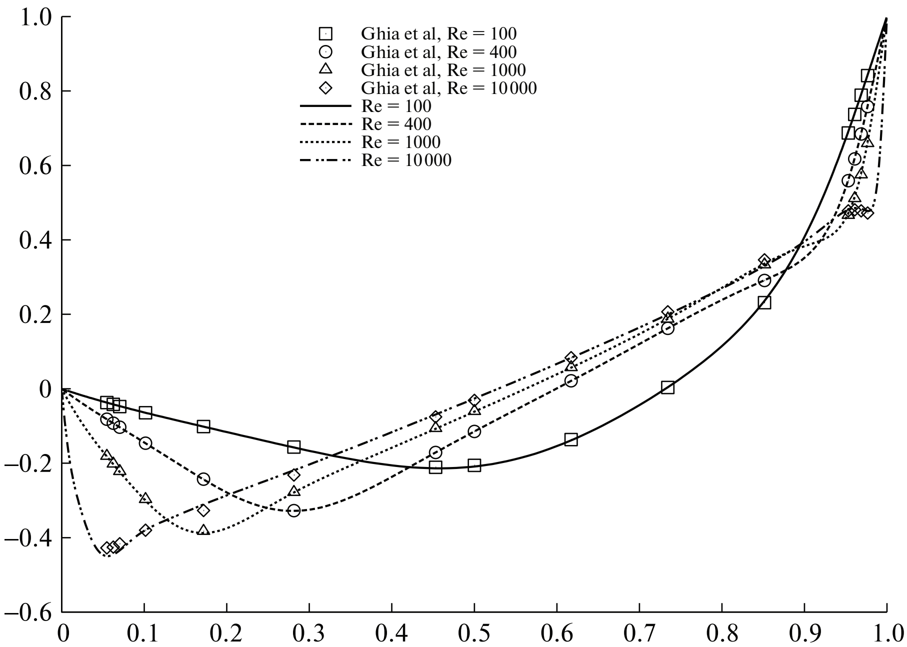
$$\tilde{x}_i=\frac{1}{2}+\left(x_i-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{4}+\gamma^2\right)^1/2\left[\left(x_i-\frac{1}{2}\right)^2+\gamma^2\right]^{-1/2}, \qquad (44)$$

где $\tilde{x}_i$ – новая координата сетки, во всех случаях мы выбираем $\gamma=1/4$. Регулярная и искаженная сетка с 280 элементами показана на фиг. 1. Для теста мы используем искаженную полигональную призматическую сетку с 65920 элементами, что приводит к системе из 263 680 неизвестных.

Граничное условие типа Дирихле Γ_D с $\mathbf{u}_b=(1,0,0)^{\mathrm{T}}$ предписано на верхней стороне куба на $\Gamma_1=\partial\Omega\cap\{y=1\}$, граничные условия скольжения Γ_S заданы на фронтальной и тыловой сторонах куба $\Gamma_2=\partial\Omega\cap\{z=0\cup z=1\}$ и отсутствие скольжения Γ_{NS} на левой, правой и нижней сторонах $\Gamma_3=\partial\Omega\backslash\Gamma_1\cup\Gamma_2$. Интересующие нас числа Рейнольдса $\mathrm{Re}\in\{100,400,1000,3200,10000\}$,



Фиг. 1. Полигональная призматическая сетка с 280 элементами в единичном кубе, оригинальная регулярная сетка (а), после искажения (44) с $\gamma = 1/4$ (б).



Фиг. 2. Сравнение u-компоненты скорости для $\mathrm{Re} = \{100, 400, 1000, 10\,000\}$ вдоль $y = 0.5$ с данными из [28].

вязкость $\mu = 1/Re$ и плотность $\rho = 1$. Для единственного решения по давлению система дополнена множителем Лагранжа и ограничением (43).

Стационарная задача для $\mathrm{Re}_i \in \{100, 400, 1000, 3200, 10\,000\}$ решается с ξ, определяемым (26). Начальным состоянием задачи при $\mathrm{Re}_0 = 100$ являются нулевая скорость и давление, затем для ускорения сходимости мы повторно используем стационарное решение предыдущей задачи с Re_{i-1} для определения начального состояния для каждой последующей задачи с более высоким числом Рейнольдса Re_i. Решение стационарных задач требует до восьми итераций Ньютона с параметром точности $\tau_{\mathrm{abs}} = 10^{-5}$.

Таблица 3. Сравнение u-компоненты скорости для $\mathrm{Re} = 100$ вдоль $y = 0.5$ с данными из [28] и с различным выбором граничного условия ξ

y	0.9766	0.9531	0.7344	0.4531	0.1719	0.0547
Данные [28]	0.84123	0.68717	0.00332	–0.21090	–0.10150	–0.03717
ξ из (26)	0.84443	0.69016	0.00357	–0.21367	–0.10155	–0.03707
$\xi = 0$	0.84256	0.68682	0.00068	–0.20823	–0.10424	–0.03737

Сравнение с эталонными данными [28] представлено на фиг. 2. Детальное сравнение в нескольких контрольных точках с различным выбором ξ для наиболее вязкого случая $Re = 100$ приведено в табл. 3. В результате при $\xi = 0$ метод немного сглаживает отрицательную вершину при $y = 0.4531$, а новый метод немного проскакивает ее. Метод Ньютона не сходится к стационарному состоянию при $Re = 10\,000$ и $\xi = 0$.

9. ВЫВОДЫ

В настоящей работе предложен и исследован подход к определению искусственных граничных условий на давление для стационарных уравнений Навье–Стокса. Новый подход достаточно прост для интеграции в конечно-объемную схему. Он демонстрирует явное улучшение скорости сходимости на задаче с известным аналитическим решением и работает в нескольких сложных эталонных задачах.

В дальнейших работах будет рассмотрен другой подход к аппроксимации диффузионного члена, учитывающий условие бездивергентности и применимый к неньютоновским жидкостям. Другим возможным направлением исследований является метод восстановления градиента с меньшим шаблоном.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Terekhov K.* Fully-implicit collocated finite-volume method for the unsteady incompressible navier-stokes problem. In Numerical Geometry, Grid Generation and Scientific Computing, Lect. Not. in Comput. Sci. and Engineer. Springer, Cham, 2021.
2. *Gresho P.M.* On the theory of semi-implicit projection methods for viscous incompressible ow and its implementation via a nite element method that also introduces a nearly consistent mass matrix. part 1: Theory // Inter. J. Numer. Meth. Fluid. 1990. V. 11. № 5. P. 587–620.
3. *Terekhov K.* Collocated finite-volume method for the incompressible Navier Stokes problem // J. of Numer. Math. 2021. V. 29. № 1. P. 63–79.
4. *Bouchnita A., Terekhov K., Nony P., Vassilevski Yu., Volpert V.* A mathematical model to quantify the effects of platelet count, shear rate, and injury size on the initiation of blood coagulation under venous ow conditions // Plos one. 2020. V. 15. № 7. e0235392.
5. *Vassilevski Yu., Terekhov K., Nikitin K., Kapyrin I.* Parallel finite volume computation on general meshes. Springer Inter. Publ., 2020.
6. *Ladyzhenskaya O.A.* The mathematical theory of viscous incompressible flow, V. 12. Gordon & Breach, New York, 1969.
7. *Lebedev V.I.* Difference analogues of orthogonal decompositions, basic differential operators and some boundary problems of mathematical physics // USSR Comput. Math. and Math. Phys. 1964. V. 4, № 3. P. 69–92.
8. *Harlow F.H., Welch J.E.* Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible ow of fluid with free surface // Phys. Fluid. 1965. V. 8. № 12. P. 2182–2189.
9. *Olshanskii M.A., Terekhov K.M., Vassilevski Yu.V.* An octree-based solver for the incompressible Navier Stokes equations with enhanced stability and low dissipation // Comput. Fluid. 2013. V. 84. P. 231–246.
10. *Perot B.* Conservation properties of unstructured staggered mesh schemes // J. of Comput. Phys. 2000. V. 159. № 1. P. 58–89.
11. *Rhie C.M., Chow W.L.* Numerical study of the turbulent ow past an airfoil with trailing edge separation // AIAA J. 1983. V. 21. № 11. P. 1525–1532.
12. *Brewster R., Carpenter C., Volpenhein E., Baglietto E., Smith J.* Application of cd-adapco best practices to nestor omega mvg benchmark exercises using star-ccm+," // Proc. of NURETH-16. Chicago. IL. 2015.
13. ANSYS CFX-Solver. Theory guide. Release ll, 2006.
14. *Markovic J.D., Lukic N.L., Ilic J.D., Nikolovski B.G., Milan N Sovilj M.N., Sijacki I.M.* Using the ansys fluent for simulation of two-sided lid- driven ow in a staggered cavity // Acta Period. Technolog. 2012. V. 43. P. 169–178.
15. *Rutkowski D.R., Roldan-Alzate A., Johnson K.M.* Enhancement of cerebrovascular 4d flow mri velocity fields using machine learning and computational fluid dynamics simulation data // Sci. Rep. 2021. V. 11. № 1. P. 1–11.
16. *Karrholm F.P.* Rhie-chow interpolation in openfoam. Depart.t of Appl. Mech., Chalmers Univer. of Technology: Goteborg, Sweden, 2006.
17. *Terekhov K., Vassilevski Yu.* Finite volume method for coupled subsurface ow problems, I: Darcy problem // J. of Comput. Phys. 2019. V. 395. P. 298–306.
18. *Terekhov K.* Multi-physics flux coupling for hydraulic fracturing modelling within INMOST platform // Rus. J. of Numer. Analys. and Math. Model. 2020. V. 35. № 4. P. 223–237.

19. *Agelas L., Eymard R., Herbin R.* A nine-point nite volume scheme for the simulation of di usion in heterogeneous media // Comptes Rendus Math. 2009. V. 347. P. 673–676.
20. *Terekhov K., Mallison B., Tchelepi H.* Cell-centered nonlinear finite-volume methods for the heterogeneous anisotropic diffusion problem // J. of Comput. Phys. 2017. V. 330. P. 245–267.
21. *Terekhov K.* Cell-centered finite-volume method for heterogeneous anisotropic poromechanics problem // J. of Comput. and Appl. Math. 2020. V. 365. P. 112357.
22. *Terekhov K., Tchelepi H.* Cell-centered finite-volume method for elastic deformation of heterogeneous media with full-tensor properties // J. of Comput. and Appl. Math. 2020. V. 364. P. 112331.
23. *Gresho P.M., Sani R.L.* On pressure boundary conditions for the incompressible navier-stokes equations // Inter. J. Numer. Meth. Fluid. 1987. V. 7. № 10. P. 1111–1145.
24. *Terekhov K.* Parallel multilevel linear solver within INMOST platform. In Voevodin V., Sobolev S. (eds) Supercomputing. RuSCDays 2020. Comm. in Comput. and Inform. Sci. Springer, Cham, 2020.
25. *Terekhov K., Vassilevski Yu.* INMOST parallel platform for mathematical modeling and applications. In Voevodin V., Sobolev S. (eds) Supercomputing. RuSCDays 2018. Comm. in Comput. and Inform. Sci. V. 965. P. 230–241. Springer, Cham, 2018.
26. *Terekhov K., Vassilevski Yu.* Mesh modification and adaptation within INMOST programming platform. In Numer. Geometry, Grid Generat. and Sci. Comput. P. 243–255. Springer, 2019.
27. *Ethier C.R., Steinman D.A.* Exact fully 3D Navier Stokes solutions for benchmarking // Inter. J. Numer. Meth. Fluid. 1994. V. 19. № 5. P. 369–375.
28. *Ghia U., Ghia K.N., Shin C.T.* High-re solutions for incompressible ow using the navier-stokes equations and a multigrid method // J. Comput. Phys. 1982. V. 48. № 3. P. 387–411.

EDN: QLHJPQ
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1386–1401

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.63

АНАЛИЗ ЗАКОНОВ СГУЩЕНИЯ СЕТОК В ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ НА ПРИМЕРЕ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОБТЕКАНИЯ ПЛАСТИНЫ ВЯЗКИМ ГАЗОМ[1)]

© 2022 г. А. Н. Кудрявцев[1,2,*], В. Д. Лисейкин[2,3,], А. В. Мухортов[2,***]**

[1] 630090 Новосибирск, ул. Институтская, 4/1, Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, Россия

[2] 630090 Новосибирск, ул. Пирогова, 1, Новосибирский государственный университет, Россия

[3] 630090 Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, 6, Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, Россия

**e-mail: alex@itam.nsc.ru*

***e-mail: liseikin.v@gmail.com*

****e-mail: a.mukhortov@g.nsu.ru*

Поступила в редакцию 10.10.2021 г.
Переработанный вариант 21.01.2022 г.
Принята к публикации 11.03.2022 г.

Численно исследуется решение задачи о течении вязкого сжимаемого газа над плоской пластиной, помещенной в сверхзвуковой поток под нулевым углом атаки. Решаются двумерные уравнения Навье–Стокса для различных чисел Рейнольдса с применением адаптивных сеток, сгущающихся в зоне пограничного слоя. Рассматриваются разностные сетки, построенные с помощью координатных преобразований, устраняющих пограничные слои различных типов. В серии вычислительных экспериментов проведен анализ характеристик численных решений (значение и порядок погрешности, значение и порядок скачка решения, время расчета) и сделаны выводы о преимуществах и недостатках, а также допустимости использования каждого закона сгущения сетки в пограничном слое для нахождения численного решения данной задачи. Новизна работы состоит в анализе специальных адаптивных сеток и их использовании для решения задач, имеющих применение в различных областях сверхзвуковой аэродинамики и газодинамики. Библ. 16. Фиг. 14. Табл. 7.

Ключевые слова: адаптивная сетка, пограничный слой, обтекание пластины, уравнения Навье–Стокса, вязкий газ, сверхзвуковой поток.

DOI: 10.31857/S0044466922080075

ВВЕДЕНИЕ

Конструирование специальных разностных сеток является одним из подходов в создании алгоритмов решения задач с пограничными и внутренними слоями. Такими являются задачи, характеризуемые наличием малого параметра ε в коэффициентах при старших производных. Наиболее популярной и хорошо изученной является двухточечная задача для обыкновенного дифференциального уравнения:

$$-[\varepsilon + d(y)]^{\alpha} u'' + a(y,u)u' + f(y,u) = 0, \quad \alpha > 0, \quad d(y) \geqslant 0, \quad 0 < y < 1,$$
$$u(0) = A_0, \quad u(1) = A_1, \tag{1}$$

моделирующая качественное поведение решений различных многомерных задач относительно координаты y, трансверсальной к пограничному слою (см. [1]). Задача (1) для $d(y) = 0$ аналитически исследована в [2], [3] и [4], где было показано, что ее решение может иметь экспоненциальные пограничные слои и степенные II рода внутренние слои, а в [1] продемонстрировано, что для более произвольных функций $d(y)$, $a(y,u)$ и $f(y,u)$ решения могут иметь другие слои, в час-

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке А.Н. Кудрявцева РНФ (проект № 18-11-00246) и В.Д. Лисейкина, А.В. Мухортова РФФИ (код проекта № 20-01-00231).

ности, степенные I рода, логарифмические и смешанные пограничные и внутренние слои. Для экспоненциального пограничного слоя возле $y = 0$ справедливы следующие оценки производных решения:

$$\left|u^{(p)}(y,\varepsilon)\right| \leqslant M\left[\varepsilon^{-pk}\exp\left(-by/\varepsilon^{k}\right)+1\right], \quad b>0, \quad 1 \leqslant p \leqslant n, \quad 0 \leqslant y \leqslant m, \tag{2}$$

для степенного первого типа –

$$\left|u^{(p)}(y,\varepsilon)\right| \leqslant M\left[\varepsilon^{bk}/(\varepsilon^{k}+y)^{b+p}+1\right], \quad b>0, \quad 1 \leqslant p \leqslant n, \quad 0 \leqslant y \leqslant m, \tag{3}$$

для степенного второго типа –

$$\left|u^{(p)}(y,\varepsilon)\right| \leqslant M\left[\left(\varepsilon^{k}+y\right)^{b-p}+1\right], \quad 1>b>0, \quad 1 \leqslant p \leqslant n, \quad 0 \leqslant y \leqslant m, \tag{4}$$

для логарифмического пограничного слоя –

$$\left|u^{(p)}(y,\varepsilon)\right| \leqslant M\left[1+\left(\varepsilon^{k}+y\right)^{-p}\Big/\ln(1/\varepsilon)\right], \quad 1 \leqslant p \leqslant n, \quad 0 \leqslant y \leqslant m, \tag{5}$$

где M, b и m – некоторые положительные константы, не зависящие от ε, а $k > 0$ – масштаб пограничного слоя, т.е. первая производная в точке $y = 0$ оценивается величиной m/ε^k. В частности, для задач газовой динамики с граничным условием прилипания масштаб пограничного слоя равен $1/2$ в предположении $\varepsilon = M/\mathrm{Re}$.

Конечно, для реальной задачи пограничный слой может быть и нового типа, который еще предстоит открыть, однако, выражения (2)–(5) показывают многообразие структур пограничных слоев.

Очевидным, но не единственным, представителем функции пограничного слоя является для: экспоненциального типа –

$$u(y,\varepsilon) = \exp\left(-y/\varepsilon^{k}\right), \quad y>0, \tag{6}$$

степенного первого рода –

$$u(y,\varepsilon) = \varepsilon^{k}\Big/\left(\varepsilon^{k}+y\right), \quad y>0, \tag{7}$$

степенного второго рода –

$$u(y,\varepsilon) = \left(\varepsilon^{k}+y\right)^{b}, \quad 0<b<1, \quad y>0, \tag{8}$$

логарифмического типа –

$$u(y,\varepsilon) = \ln\left(\varepsilon^{k}+y\right)\Big/\ln(\varepsilon), \quad y>0. \tag{9}$$

Слоем для n-й производной функции является узкий интервал, в котором значения данной производной не ограничены при ε, стремящемся к нулю, а вне слоя они равномерно ограничены (см. [1, с. 17]). Длина этого интервала будет шириной слоя. Так, для функции (6) с экспоненциальным пограничным слоем его ширина равна $(kn/b)\varepsilon\ln(1/\varepsilon)$; для функции (7) ширина равна $m\varepsilon^{k/(n+1)}$; для функции (8) ширина равна m; для функции (9) ширина равна $m/(\ln(1/\varepsilon))^{1/n}$, где m – константа, не зависящая от ε.

Высокоэффективными для решения задачи (1) с экспоненциальными слоями являются сетки Бахвалова (см. [2]) и Шишкина (см. [5]). Однако для других слоев вида (3)–(5) их сетки не столь эффективны, так как эти слои несравнимо шире экспоненциальных (см. [6]). Сетки для решения задачи (1) с такими слоями описаны в [7].

Перспективными для численного решения задачи (1) являются алгоритмы, использующие координатные преобразования $y(\xi,\varepsilon) : [0, 1] \to [0, 1]$, устраняющие сингулярности высокого порядка решений $u(y,\varepsilon)$, т.е. производные относительно зависимой переменной $u_1(\xi,\varepsilon) = u[y(\xi,\varepsilon),\varepsilon]$ по ξ должны быть равномерно ограничены по ε:

$$\left|\frac{d^{j}}{d\xi^{j}}u\left[y(\xi,\varepsilon),\varepsilon\right]\right| \leqslant M, \quad j \leqslant n, \quad 0 \leqslant \xi \leqslant 1, \tag{10}$$

где константа M не зависит от параметра ε, число n зависит от порядка аппроксимации задачи (чем больше порядок, тем больше n). Координатные преобразования $y(\xi,\varepsilon):[0,1]\to[0,1]$, устраняющие сингулярности, порождают сгущающиеся в слоях сетки y_i, $i=0,1,\ldots,N$, $y_0=0$, $y_N=1$ с помощью формулы $y_i=y(i/N,\varepsilon)$. На таких сетках разности значений численного решения в соседних узлах (как в слое, так и вне слоя) при увеличении числа узлов уменьшаются равномерно по ε в такой же пропорции, т.е. при утроении числа узлов скачок решения уменьшается втрое. Принцип построения таких преобразований для $n\leqslant 3$ был сформулирован в [1] для решения задачи (1) со специальными функциями $d(y)$, $a(y,u)$ и $f(y,u)$ на простой схеме первого порядка с направленными разностями. Была доказана равномерная по малому параметру сходимость первого порядка численного решения к точному. Однако для гарантии большего порядка сходимости для схем высокого порядка эти преобразования не подходят. Причина в том, что сетки, полученные с помощью этих координатных преобразований, не обеспечивают сгущение узлов в слоях для высших производных, входящих в погрешность аппроксимации задачи схемами высокого порядка, так как эти слои шире слоев для производных меньшего порядка. Далее, схемы высокого порядка, в отличие от схемы с направленными разностями, не обладают, как правило, свойством обратной монотонности, которая позволяет установить связь между ошибкой решения и погрешностью аппроксимации и, таким образом, доказать равномерную по малому параметру сходимость. Для таких схем равномерную сходимость можно обосновать только численными расчетами (см. [8]). В этих случаях координатные преобразования для построения сеток, обеспечивающих равномерную сходимость высокого порядка, должны удовлетворять (10) для больших n. Такие преобразования могут быть использованы для формулировки метрик в методах построения адаптивных многомерных сеток как структурных (см. [9]), так и неструктурных (см. [10]).

Оценки (10) могут гарантировать равномерную сходимость для преобразованной задачи относительно зависимой переменной $u_1(\xi,\varepsilon)=u\left[y(\xi,\varepsilon),\varepsilon\right]$ на равномерной сетке, так как погрешность аппроксимации будет равномерно ограничена для $n\geqslant p+2$, где p – порядок схемы. Возможно, равномерная сходимость высокого порядка будет и для задачи в физической переменной y. Более того, численное решение может быть равномерно проинтерполировано на весь интервал $[0,1]$.

Ранее созданные алгоритмы генерации сеток (см. [1]), ориентированные на применение только схем первого порядка точности и только для постоянного коэффициента вязкости при старшей производной, были модифицированы в [7] для обеспечения равномерности погрешности решения как в слое, так и вне слоя при использовании схем произвольного порядка точности и при зависимости от координаты параметра при второй производной. В модифицированном алгоритме обеспечивается ограниченность в новых переменных производных до порядка, равного порядку производной в главном члене погрешности разностной схемы, тем самым осуществляется автоматическая настройка механизма генерации сетки к конкретной разностной схеме, порядок точности которой является входным параметром специального координатного преобразования, генерирующего сетку (см. [8]).

На практике часто приходится решать задачи, в которых нет точной информации о структуре пограничного слоя или эта структура может существенно меняться. В частности, к таким задачам относятся многочисленные задачи об обтекании тел вязким сжимаемым газом, при численном решении которых в настоящее время обычно применяются схемы сквозного счета высоких порядков. Простейшим прототипом подобных задач является задача о сверхзвуковом обтекании плоской пластины. Уже в ней явно построить координатное преобразование, удовлетворяющее (10), затруднительно, поскольку течение вблизи передней кромки не описывается уравнениями пограничного слоя, и здесь нужно использовать полные уравнения Навье–Стокса. Кроме того, существенное влияние на течение оказывает исходящая с передней кромки искривленная ударная волна.

В настоящей статье на примере данной задачи рассматривается стратегия построения эффективных расчетных сеток в подобных случаях. Она основана на использовании для построения сеток известных координатных преобразований, устраняющих особенности (2)–(5). Можно надеяться, что такой подход позволит строить более эффективные сетки и повысить точность решения и при численном моделировании обтекания тел сложной формы, часто встречающихся в различных практических приложениях.

1. ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Рассматривается двумерная задача о сверхзвуковом обтекании плоской пластины под нулевым углом атаки потоком вязкого теплопроводного газа. Решаются уравнения Навье–Стокса, записанные в виде системы законов сохранения

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = \frac{M}{\mathrm{Re}}\left(\frac{\partial F^v}{\partial x} + \frac{\partial G^v}{\partial y}\right). \tag{11}$$

Здесь векторы консервативных переменных Q, невязких потоков F, G и вязких потоков F^v, G^v равны соответственно

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (e+p)u \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (e+p)v \end{pmatrix},$$

$$F^v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + \varkappa\dfrac{\partial T}{\partial x} \end{pmatrix}, \quad G^v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + \varkappa\dfrac{\partial T}{\partial y} \end{pmatrix}, \tag{12}$$

$$\tau_{xx} = \mu\left(\frac{4}{3}\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\frac{\partial v}{\partial y}\right), \quad \tau_{xy} = \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right), \quad \tau_{yy} = \mu\left(\frac{4}{3}\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\frac{\partial u}{\partial x}\right).$$

Система уравнений замыкается уравнением состояния совершенного газа

$$p = \frac{\rho T}{\gamma}. \tag{13}$$

В (11)–(13) u, v – компоненты вектора скорости вдоль осей x и y соответственно; ρ – плотность; p – давление; $e = p/(\gamma - 1) + \rho\left(u^2 + v^2\right)/2$ – полная энергия на единицу объема; τ – тензор вязких напряжений; $\varkappa = \mu/[(\gamma-1)\mathrm{Pr}]$ – коэффициент теплопроводности; T – температура; γ – отношение удельных теплоемкостей; μ – коэффициент динамической вязкости (зависимость вязкости от температуры аппроксимировалась по формуле Сазерленда $\mu = T^{1.5}(1 + C/T_\infty^*)/(T + C/T_\infty^*)$, C – постоянная Сазерленда); $\mathrm{Re}_L = \rho_\infty^* U_\infty^* L^*/\mu_\infty^*$ – число Рейнольдса, вычисляемое по параметрам набегающего потока (индекс "∞") и длине пластины L^*; M, U_∞ – число Маха и скорость набегающего потока; Pr – число Прандтля; индекс "*" соответствует размерным величинам.

Расчетная область для численного решения представляет собой прямоугольник размером 1×0.32. Для системы уравнений (11)–(13) ставятся следующие граничные и начальные условия. На поверхности пластины требуется выполнение условия прилипания: $u|_\Gamma = 0$. Кроме того, требуется задать граничное условие для температуры: на поверхности пластины было наложено адиабатическое температурное условие, т.е. тепловой поток через поверхность пластины предполагается равным нулю, что означает равенство нулю производной по нормали к поверхности: $(\partial T/\partial n)|_\Gamma = 0$. На входной границе значения всех переменных задаются равными определенным значениям, соответствующим параметрам входного потока. Выходная граница полагается свободной.

Если часть границы расчетной области лежит на оси $y = 0$, то продольная компонента $u(x, y)$ вектора скорости $\mathbf{u} = (u, v)$ решения задачи для уравнений (11)–(13) является функцией пограничного слоя в окрестности этой части границы относительно переменной y. В общем случае структура пограничного слоя для данной задачи неизвестна. Однако некоторую информацию о возможной структуре можно получить из анализа модельной задачи с малым параметром ε:

$$\begin{gathered} -\varepsilon u'' + a(y)u' + f(y, u, \varepsilon) = 0, \quad a(0) = 0, \quad 0 < y < 1, \\ u(0) = 0, \quad u(1) = A_1, \end{gathered} \tag{14}$$

являющейся частным случаем задачи (1). Уравнение в (14) получается из стационарного уравнения ($u_t = 0$) для компоненты u, которое может быть записано в виде

$$-\frac{M}{\mathrm{Re}}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \rho v\frac{\partial u}{\partial y} = g\left(u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial v}{\partial x}, \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y}, x, y\right), \tag{15}$$

если предположить, что $\varepsilon = M/\mathrm{Re}$, x – параметр, правая часть равномерно ограничена по ε, $a(y)$ соответствует $\rho v(x, y)$, а $f(y, u, \varepsilon)$ соответствует правой части уравнения (15).

В [1] было показано, что если $f_u(y, u, \varepsilon) > 0$, то в зависимости от значения производной функции $a(y)$ в точке $y = 0$ решение задачи (14) может иметь экспоненциальный пограничный слой, если $a'(0) = 0$; степенной слой первого типа, если $a'(0) > 0$; смешанный (комбинация экспоненциального и степенного слоя второго типа), если $a'(0) < 0$.

Оценки производных функции $u(x, y)$ по переменной y в пограничном слое для обтекания пластины вязким несжимаемым газом можно было бы получить из автомодельного уравнения $f''' + ff'' = 0$, $\quad u = f'\partial\xi/\partial y$, $\quad \xi = 1/2y\sqrt{u_\infty/\mu x}$, если было бы известно его аналитическое решение. Однако такое решение неизвестно, а из численных расчетов непонятно, как получить оценки производных.

В данной работе исследуется гиперзвуковое течение газа (число Маха M = 6, 10). Уравнения решались для различных чисел Рейнольдса Re (10000, 100000, 1000000). Число Прандтля Pr предполагается равным 0.72.

Расчеты численного решения производились разработанным в ИТПМ СО РАН (см. [11]) расчетным кодом CFS. При вычислении невязких потоков использовалась схема MP5 (Monotonicity–Preserving, 5th–order), имеющая 5-й порядок на гладких решениях, вязкие члены вычислялись с помощью центральных разностей 4-го порядка на компактном шаблоне (см. [11]). Уравнения интегрировались по времени с помощью схемы Рунге–Кутты 2-го порядка. Расчеты производились до установления стационарного решения (бралось значение времени установления стационарного решения $T_{\mathrm{setsol}} = 1$), шаг Δt интегрирования по времени выбирается из условия Куранта–Фридрихса–Леви

$$\Delta t \leqslant \frac{CFL}{\max\limits_{i,j}\left[\dfrac{|u_{ij}| + a_{ij}}{\Delta x_i} + \dfrac{|v_{ij}| + a_{ij}}{\Delta y_j} + \dfrac{2\gamma\mu M}{\rho\,\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}\left(\dfrac{1}{(\Delta x_i)^2} + \dfrac{1}{(\Delta y_j)^2}\right)\right]},$$

где a – скорость звука, CFL – число Куранта–Фридрихса–Леви, предполагаемое равным 0.4 в данной задаче.

Данный программный код создан для расчета на многопроцессорных ЭВМ и был распараллелен с помощью библиотеки MPI (Message Passage Interface) путем геометрической декомпозиции расчетной области на подобласти, каждая из которых присваивается определенному вычислительному ядру процессора. В расчетах использовалось восемь шестиядерных процессоров Intel Xeon X5670 с тактовой частотой 2932 МГц вычислительного комплекса Информационно-вычислительного центра НГУ (см. [12]).

1.1. Преобразования, генерирующие адаптивные сетки

Для построения сетки вблизи границы $y = 0$ берется бесконечно дифференцируемая функция $\phi(\xi, \varepsilon)$, $0 \leqslant \xi \leqslant \xi_0$, а для значений $\xi_0 \leqslant \xi \leqslant 1$ эта функция доопределяется многочленом с соблюдением гладкости класса $C^l[0, 1]$:

$$y = \Phi(\xi, \varepsilon, l, \xi_0) = \begin{cases} c_1\phi(\xi, \varepsilon), \quad 0 \leqslant \xi \leqslant \xi_0, \\ c_1[\phi(\xi_0, \varepsilon) + \phi'(\xi_0, \varepsilon)(\xi - \xi_0) + \dfrac{1}{2}\phi''(\xi_0, \varepsilon)(\xi_0)(\xi - \xi_0)^2 + \ldots \\ \ldots + \dfrac{1}{l!}\phi^{(l)}(\xi_0, \varepsilon)(\xi_0)(\xi - \xi_0)^l + c_0(\xi - \xi_0)^{l+1}], \quad \xi_0 \leqslant \xi \leqslant 1, \end{cases} \tag{16}$$

где $l \leqslant n$, $c_0 > 0$, и, например, $c_0 = 1$; константа $c_1 > 0$ выбирается из условия $\Phi(1,\varepsilon,l,\xi_0) = 1$. Параметр ξ_0 в (16) означает долю длины отрезка, отображаемую в предполагаемую зону пограничного слоя, границей которого условно считается точка, в которой производная решения по физической координате равна константе, не зависящей от ε. В частности, при равномерной сетке по ξ число ξ_0 означает долю от общего числа шагов сетки, попадающих в пограничный слой.

1.1.1. Базисные локальные преобразования. Для построения адаптивных сеток, сгущающихся в слое возле границы $y = 0$, в качестве функции $\Phi(1,\varepsilon,l,\xi_0)$ в (16) используются локальные преобразования $y_i(\xi,\varepsilon,k,a)$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, имеющие следующий вид:

$$y_1(\xi,\varepsilon,k,a) = -\frac{\varepsilon^k}{a}\ln(1-d\xi), \quad k > 0, \quad a > 0, \quad 0 \leqslant \xi \leqslant \xi_0, \tag{17}$$

$$y_2(\xi,\varepsilon,k,a) = \varepsilon^k\left[(1-d\xi)^{-1/a}-1\right], \quad k > 0, \quad a > 0, \quad 0 \leqslant \xi \leqslant \xi_0, \tag{18}$$

$$y_3(\xi,\varepsilon,k,a) = \left(\varepsilon^{ka}+d\xi\right)^{1/a}-\varepsilon^k, \quad k > 0, \quad 1/n > a > 0, \quad 0 \leqslant \xi \leqslant \xi_0, \tag{19}$$

$$y_4(\xi,\varepsilon,k,a) = \varepsilon^k\left[(1+\varepsilon^{-k})^{a\xi}-1\right], \quad k > 0, \quad a > 0, \quad 0 \leqslant \xi \leqslant \xi_0, \tag{20}$$

$$y_5(\xi,\varepsilon,k,a) = 2\sigma\xi, \quad \sigma = \min\left\{0.5,(n/a)\varepsilon^k\ln N\right\}, \quad 0 \leqslant \xi \leqslant \xi_0. \tag{21}$$

В качестве малого параметра ε рассматривается M/Re.

Параметр k отвечает за масштаб и ширину пограничного слоя, а параметр a влияет на ширину пограничного слоя.

Преобразование $y_1(\xi,\varepsilon,k,a)$ при $k = 1$ было предложено в [2], а $y_5(\xi,\varepsilon,k,a)$ – в [5] для генерации сеток в экспоненциальных слоях, тогда как $y_i(\xi,\varepsilon,k,a)$, $i = 2, 3, 4$, были предложены в [13], [14], а $y_2(\xi,\varepsilon,k,a)$ при $a = 1$, $k = 1/2$ в [15]. Преобразование $y_2(\xi,\varepsilon,k,a)$ применяется для построения сеток в экспоненциальных и степенных слоях первого рода, $y_3(\xi,\varepsilon,k,a)$ – в степенных слоях II рода и $y_4(\xi,\varepsilon,k,a)$ – в логарифмических слоях.

1.1.2. Глобальные модифицированные преобразования, устраняющие пограничные слои. Локальные преобразования (17)–(21) используются для построения глобальных преобразований, устраняющих пограничные слои (2)–(4), с помощью их масштабирования и склейки с полиномиальной функцией.

Преобразования для экспоненциальных пограничных слоев. Модифицированное преобразование Г.И. Шишкина класса $C^2[0, 1]$, действующее из $[0, 1]$ на $[0, 1]$, полученное из функции (21), имеет вид

$$y_{\mathrm{Sh}}(\xi,\varepsilon,k,a) = \begin{cases} 2\sigma\xi, & 0 \leqslant \xi \leqslant 1/2, \\ \sigma + 2\sigma(\xi-1/2) + \omega(\xi-1/2)^3, & 1/2 \leqslant \xi \leqslant 1, \end{cases} \tag{22}$$

где $\sigma = \min\left\{0.5,(n/a)\varepsilon^k\ln N\right\}$, число $\xi_0 = 1/2$ и ω выбирается из соотношения $y_{\mathrm{Sh}}(1,\varepsilon,k,a) = 1$, т.е. $\omega = 8(1-2\sigma)$.

Преобразование класса $C^2[0, 1]$, действующее из $[0, 1]$ на $[0, 1]$, полученное из локального преобразования Н.С. Бахвалова (17) путем гладкого продолжения за пределом интервала пограничного слоя, устраняющее экспоненциальные особенности масштаба k, имеет вид

$$y_{\mathrm{Bakh}}(\xi,\varepsilon,k,a) = \begin{cases} c_1\left[-\dfrac{\varepsilon^k}{a}\ln(1-d\xi)\right], \quad 0 \leqslant \xi \leqslant \xi_0, \\ c_1\left[\dfrac{k\varepsilon^k}{na}\ln\left(\varepsilon^{-1}\right) + \dfrac{d\varepsilon^{k(1-1/n)}}{a}(\xi-\xi_0) + \dfrac{d^2\varepsilon^{k(1-2/n)}}{2a}(\xi-\xi_0)^2 + c_0(\xi-\xi_0)^3\right], \\ \xi_0 \leqslant \xi \leqslant 1, \end{cases} \tag{23}$$

где $d = \left(1-\varepsilon^{k/n}\right)\big/\xi_0$, $a > 0$, $c_0 > 0$ и константа c_1 выбирается из соотношения $y_{\text{Bakh}}(1,\varepsilon,k,a) = 1$, т.е.

$$\frac{1}{c_1} = \left[\frac{k\varepsilon^k}{na}\ln\left(\varepsilon^{-1}\right) + \frac{d\varepsilon^{k(1-1/n)}}{a}(1-\xi_0) + \frac{d^2\varepsilon^{k(1-2/n)}}{2a}(1-\xi_0)^2 + c_0(1-\xi_0)^3\right].$$

Константа a влияет на ширину пограничного слоя, а константа ξ_0 задает количество точек сетки в пограничном слое. В [7] было доказано, что это преобразование устраняет экспоненциальную особенность (2) до порядка n при $0 < a \leqslant b/n^2$.

Преобразования для экспоненциальных и степенных пограничных слоев. Преобразование класса $C^2[0, 1]$, действующее из $[0, 1]$ на $[0, 1]$, предложенное В.Д. Лисейкиным в [7] и устраняющее в пограничном слое экспоненциальные и степенные I рода особенности масштаба k, имеет вид

$$y_{\text{Lis1}}(\xi,\varepsilon,k,a) = \begin{cases} c_1\varepsilon^k\left[(1-d\xi)^{-1/a}-1\right], \quad 0 \leqslant \xi \leqslant \xi_0, \\ c_1\left[\varepsilon^{k\beta n} - \varepsilon^k + d\dfrac{1}{a}\varepsilon^{k\beta(n-1)}(\xi-\xi_0) + \dfrac{1}{2}d^2\dfrac{1}{a}\left(\dfrac{1}{a}+1\right)\varepsilon^{k\beta(n-2)}(\xi-\xi_0)^2 + c_0(\xi-\xi_0)^3\right], \\ \xi_0 \leqslant \xi \leqslant 1, \end{cases} \qquad (24)$$

где $d = \left(1-\varepsilon^{k\beta}\right)\big/\xi_0$, при этом $\beta = a/(1+na)$, $a > 0$, $c_0 > 0$ и константа $c_1 > 0$ выбирается из условия $y_{\text{Lis1}}(1,\varepsilon,k,a) = 1$, т.е.

$$\frac{1}{c_1} = \left[\varepsilon^{k\beta n} - \varepsilon^k + d\frac{1}{a}\varepsilon^{k\beta(n-1)}(1-\xi_0) + \frac{1}{2}d^2\frac{1}{a}\left(\frac{1}{a}+1\right)\varepsilon^{k\beta(n-2)}(1-\xi_0)^2 + c_0(1-\xi_0)^3\right].$$

В [7] было доказано, что это преобразование устраняет экспоненциальную особенность (2) до порядка n при произвольном $a > 0$, а степенную особенность I рода (3) при $0 < a \leqslant b/n^2$.

Для устранения степенной особенности II рода (4) используется масштабированное преобразование (19):

$$y_3(\xi,\varepsilon,k,a) = \frac{\left(\varepsilon^{k_1 a} + d\xi\right)^{1/a} - \varepsilon^{k_1}}{\left(\varepsilon^{k_1 a} + d\right)^{1/a} - \varepsilon^{k_1}}, \quad k_1 = \frac{k}{1-a}, \quad k > 0, \qquad (25)$$

для которого в [7] было доказано, что это преобразование устраняет до порядка n степенную особенность II рода при $0 < a \leqslant \min(b/n, 1/n)$.

Преобразование для логарифмических особенностей. Преобразование класса $C^2[0, 1]$, действующее из $[0, 1]$ на $[0, 1]$, предложенное в [7] для логарифмических особенностей масштаба k (5), имеет вид

$$y_{\text{Lis2}}(\xi,\varepsilon,k) = \begin{cases} c_1\varepsilon^k\left[\left(1+\dfrac{1}{\varepsilon^k\ln(\varepsilon^{-k})}\right)^{\xi/\xi_0} - 1\right], \quad 0 \leqslant \xi \leqslant \xi_0, \\ c_1\left[\ln^{-1}\left(\varepsilon^{-k}\right) + 2\left(\varepsilon^k + \ln^{-1}\left(\varepsilon^{-k}\right)\right)\ln\left(1+\dfrac{1}{\varepsilon^k\ln\left(\varepsilon^{-k}\right)}\right)(\xi-\xi_0) + c_0(\xi-\xi_0)^2\right], \\ \xi_0 \leqslant \xi \leqslant 1, \end{cases} \qquad (26)$$

где $c_0 > 0$ и константа $c_1 > 0$ выбирается из условия $y_{\text{Lis2}}(1,\varepsilon,k) = 1$, т.е.

$$\frac{1}{c_1} = \left[\ln^{-1}\left(\varepsilon^{-k}\right) + 2\left(\varepsilon^k + \ln^{-1}\left(\varepsilon^{-k}\right)\right)\ln\left(1+\frac{1}{\varepsilon^k\ln\left(\varepsilon^{-k}\right)}\right)(1-\xi_0) + c_0(1-\xi_0)^2\right].$$

Преобразование (20) (при не очень малом ε) применяется также в качестве глобального для логарифмических особенностей масштаба k:

$$y_4(\xi,\varepsilon,k,a) = \frac{\left(1+\varepsilon^{-k}\right)^{a\xi}-1}{\left(1+\varepsilon^{-k}\right)^{a}-1}, \quad k>0, \quad a>0. \tag{27}$$

При этом преобразование (27) имеет отношение к известному преобразованию Эриксона (см. [16]) $y(\xi,d) = \left(e^{d\xi}-1\right)\Big/\left(e^{d}-1\right)$, которое не имеет явную зависимость от ε, но при $d = \ln\left(1+\varepsilon^{-k}\right)$ совпадает с преобразованием (27) для $a = 1$.

1.2. Исследуемые характеристики численных решений

Расчетная область численного решения представляет собой прямоугольник размером 1×0.32, нижняя сторона которого совпадает с поверхностью пластины. Расчеты численных решений задачи выполнялись на прямоугольной сетке, состоящей из N_{xy} ячеек. Сетка по продольной координате x равномерная с фиксированным числом узлов $N_x = 192$; при построении сетки в нормальном к пластине направлении y использовались исследуемые адаптивные сетки.

Важной особенностью расчетного кода является способ задания точек, в которых вычисляются неизвестные значения величин. Точки расположены в центрах ячеек, а не в узлах ячеек построенной сетки.

Так как точное решение не известно, то под "точным" решением подразумевается численное решение, полученное на самой подробной сетке в процессе ее детализации. Для апостериорной оценки погрешности (т.е. разности между приближенным и точным решением) на сгущающихся сетках при неизвестном точном решении использовалась разность приближенных решений на двух последовательных сетках

$$\delta_t = \max_{i=1}^{N_t}\left|u_{3i}^{N_{t+1}} - u_i^{N_t}\right|, \quad t = 1, 2, \tag{28}$$

где u^{N_t} – приближенное решение на сетке с N_t узлами.

По оценкам погрешности вычислялась оценка реально наблюдаемого порядка точности

$$p_1 = \log_3(\delta_1/\delta_2). \tag{29}$$

Важной характеристикой специальных адаптивных сеток является значение скачка численного решения в близлежащих узлах в зоне пограничного слоя. Для оценки данной характеристики использовался модуль приращения решения на шаге

$$du_t = \max_{i=1}^{\hat{N}_t}\left|u_{i+1}^{N_t} - u_i^{N_t}\right|, \quad t = 1, 2, 3, \tag{30}$$

где $\hat{N}_t$ – количество узлов сетки ниже положения ударной волны.

По полученным значениям скачка численного решения оценивался порядок скачка решения

$$p_2^t = \log_3(du_t/du_{t+1}), \quad t = 1, 2. \tag{31}$$

Заметим, что если решение задачи не имеет пограничных и внутренних слоев, то для численного решения этой задачи с использованием схемы порядка p на равномерной сетке значения p_1 близки к p, а p_2 близки к 1.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

2.1. Выбор параметров и рассмотренные случаи

Во всех рассматриваемых случаях предполагается, что параметр k, отвечающий за масштаб пограничного слоя, для данного типа задач равен 0.5 (см. [7]). Параметр n, характеризующий порядок схемы, предполагается равным 4.

Для каждого преобразования подбирались оптимальные значения неизвестных параметров. Идея алгоритма поиска заключается в следующем: значения параметров варьировались в интер-

Таблица 1. Значения погрешности и скачка решения с использованием преобразования (25)

$N_{y,t}$	M = 6, Re = 10000					M = 6, Re = 100000				
	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t
51	1	–	–	0.297	–	1	–	–	0.568	–
153	6	0.017	–	0.099	1	4	0.052	–	0.192	0.987
459	420	0.003	1.58	0.033	1	72	0.009	1.6	0.064	1

Примечание. В табл. 1–7 $N_{y,t}$ – количество узлов в поперечном направлении y, T_{clock} – время расчета в часах.

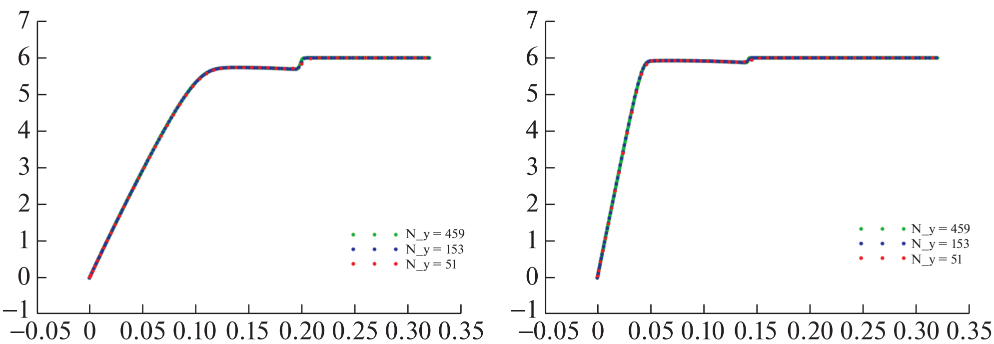
вале их допустимых значений и подбирались так, чтобы их влияние на время расчетов и значение погрешности численного решения было минимальным при изменении малого параметра $\varepsilon = \mathrm{M}/\mathrm{Re}$, т.е. при изменении чисел M и Re.

Для всех предложенных преобразований были произведены расчеты численных решений при параметре Маха M = 6 для двух различных чисел Рейнольдса Re (10000, 100000).

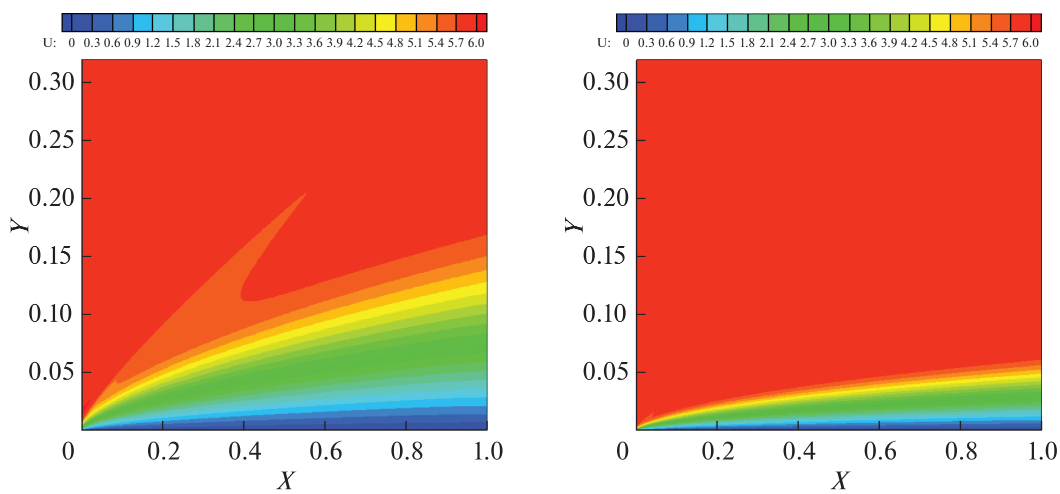
Для каждого численного эксперимента помимо характеристик (28)–(31) приводится время расчета в часах T_{clock}.

2.2. *Расчеты с использованием глобальных модифицированных преобразований*

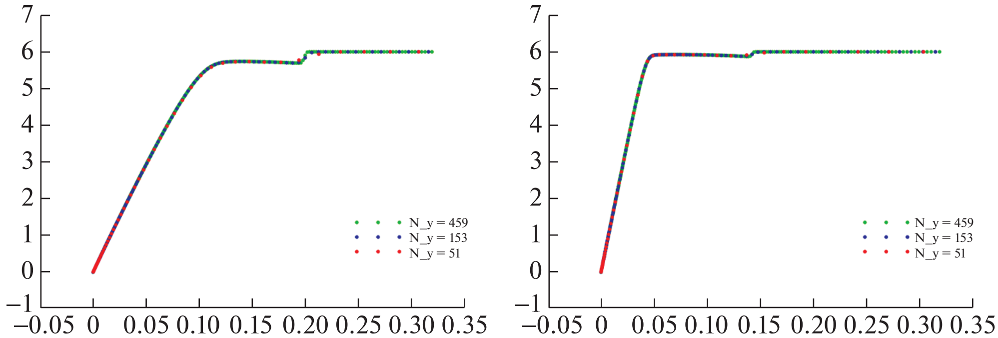
Были произведены расчеты с использованием преобразования (25) $y_3(\xi, \varepsilon, a, k)$, где $d = 1$ и значение параметра a равно 0.65. Полученные результаты предвставлены в табл. 1 и на фиг. 1, 2.



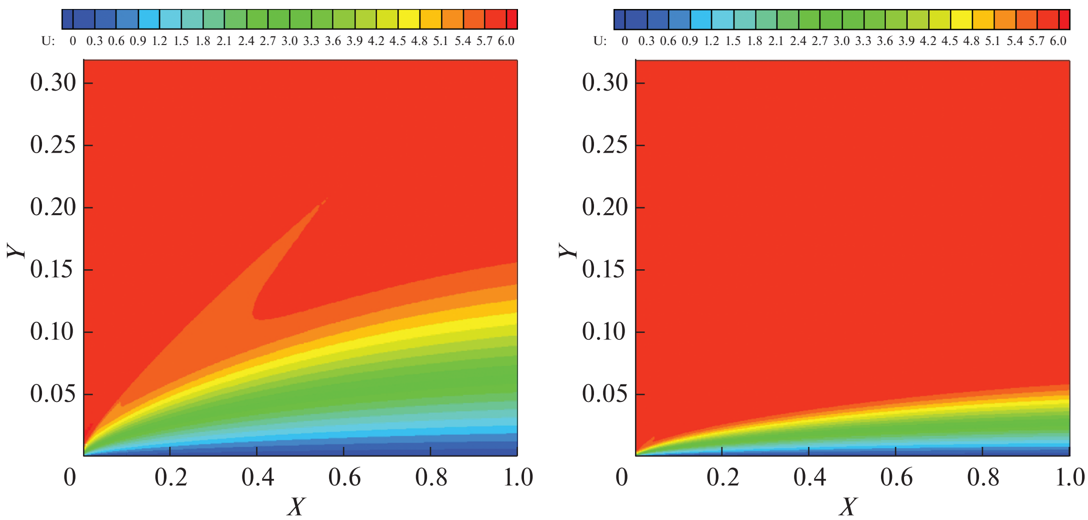
Фиг. 1. Профили продольной скорости и значения в узлах сетки с использованием преобразования (25): (а) – при Re = 10000, (б) – при Re = 100000 (M = 6).



Фиг. 2. Расчетные поля продольной скорости с использованием преобразования (25): (а) – при Re = 10000, (б) – при Re = 100000) (M = 6).



Фиг. 3. Профили продольной скорости и значения в узлах сетки с использованием преобразования (27): (а) – при Re = 10000, (б) – при Re = 100000 (M = 6).



Фиг. 4. Расчетные поля продольной скорости с использованием преобразования (27): (а) – при Re = 10000, (б) – при Re = 100000 (M = 6).

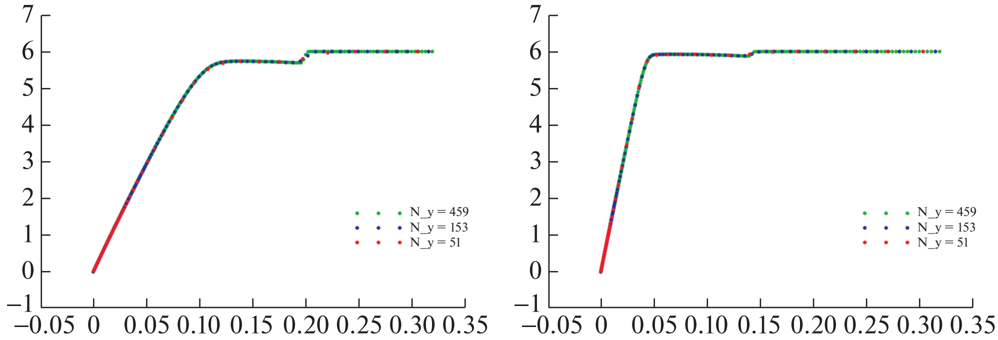
Можно сделать следующие выводы: использование данного преобразования возможно только при больших (>100 000) значениях числа Рейнольдса Re, иначе время расчетов T_{clock} превышает 400 ч. Кроме того, большая часть узлов попадает в зону вне пограничного слоя.

Так же были произведены расчеты с использованием преобразования (27) $y_4(\xi, \varepsilon, a, k)$ при значении $a = 1$. Полученные результаты представлены в табл. 2 и на фиг. 3, 4. Можно сделать следующие выводы: использование данного преобразования невозможно из-за слишком большого времени расчетов T_{clock}, требующегося для достижения установившегося решения.

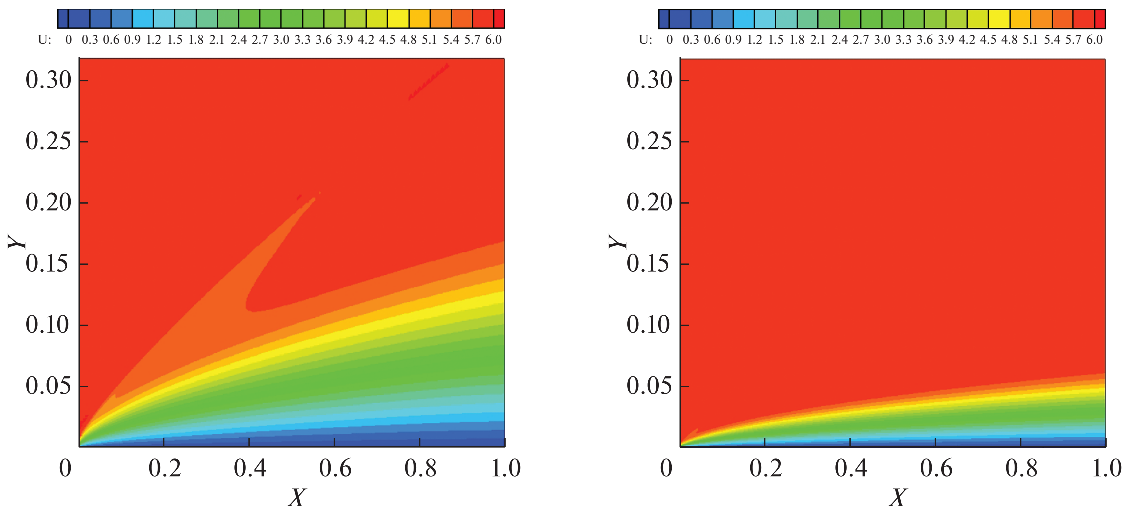
Были произведены расчеты с использованием преобразования (22) $y_{\text{Sh}}(\xi, \varepsilon, a, k)$ при значении параметра $a = 2$. Полученные результаты представлены в табл. 3 и на фиг. 5, 6. Можно сделать

Таблица 2. Значения погрешности и скачка решения с использованием преобразования (27)

$N_{y,t}$	M = 6, Re = 10000					M = 6, Re = 100000				
	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t
51	1	–	–	0.152	–	2	–	–	0.25	–
153	15	0.003	–	0.056	0.909	18	0.001	–	0.093	0.9
459	336	0.002	0.3669	0.019	0.984	373	0.001	0	0.033	0.943



Фиг. 5. Профили продольной скорости и значения в узлах сетки с использованием преобразования (22): (а) – при Re = 10000, (б) – при Re = 100000 (M = 6).



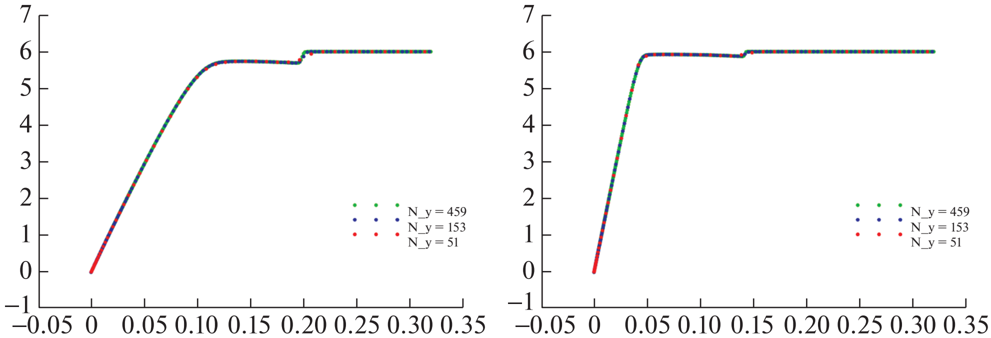
Фиг. 6. Расчетные поля продольной скорости с использованием преобразования (22): (а) – при Re = 10000, (б) – при Re = 100000 (M = 6).

следующие выводы: использование данного преобразования возможно при любых значениях числа Рейнольдса Re, время расчетов T_{clock} оказалось одним из наименьших среди всех рассмотренных законов сгущения. Недостаток данного преобразования – высокое значение погрешности, которое не уменьшается при увеличении значения числа N_y. Кроме того, сгущение узлов осуществляется только на части пограничного слоя, что свидетельствует о том, что пограничный слой не экспоненциального типа.

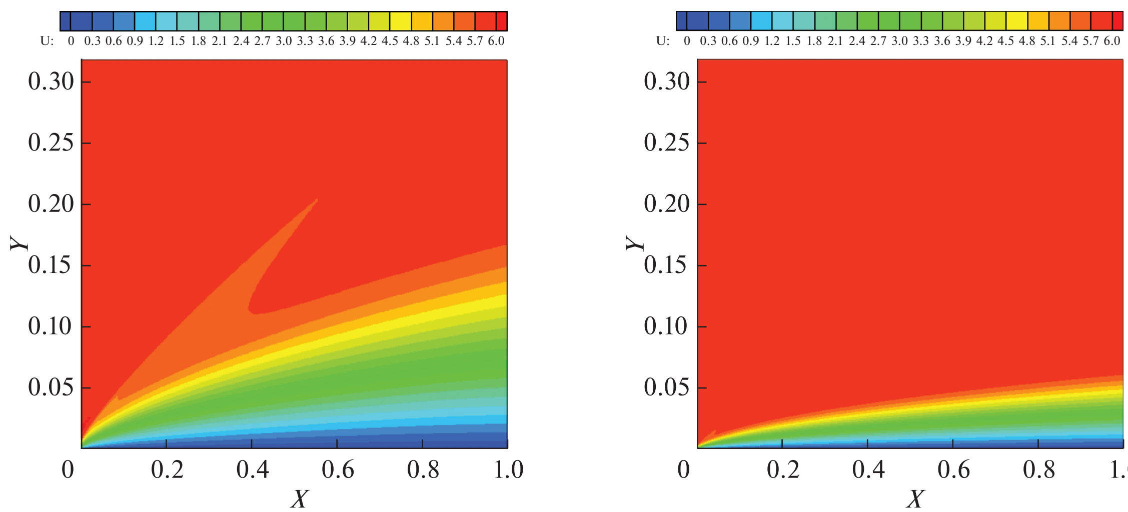
Расчеты с использованием преобразования (23) $y_{\text{Bakh}}(\xi, \varepsilon, k, a)$ оказались безуспешными, так как ни варьирование параметра a, отвечающего за ширину пограничного слоя, ни варьирование параметра ξ_0, отвечающего за долю длины отрезка, отображаемую в предполагаемую зону погра-

Таблица 3. Значения погрешности и скачка решения с использованием преобразования (22)

$N_{y,t}$	M = 6, Re = 10000					M = 6, Re = 100000				
	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t
51	1	–	–	0.0628	–	1	–	–	0.0468	–
153	1	0.406	–	0.0269	0.773	1	0.305	–	0.02	0.774
459	12	0.411	–0.011	0.011	0.813	20	0.319	–0.041	0.0081	0.823



Фиг. 7. Профили продольной скорости и значения в узлах сетки с использованием преобразования (26): (а) – при Re = 10000, (б) – при Re = 100000 (M = 6).



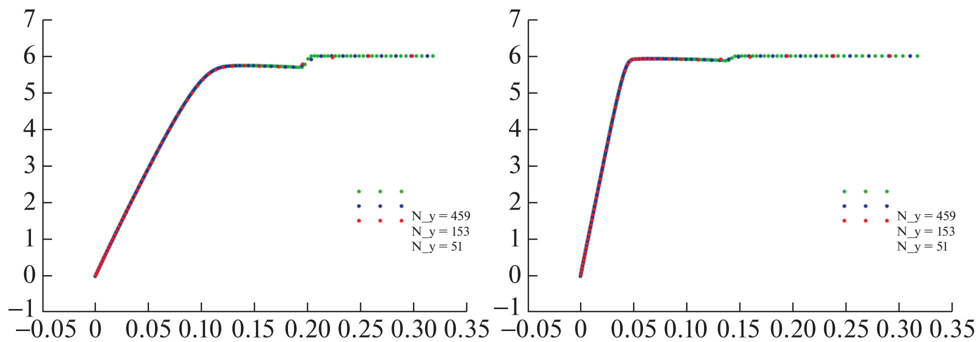
Фиг. 8. Расчетные поля продольной скорости с использованием преобразования (26): (а) – при Re = 10000, (б) – при Re = 100000 (M = 6).

ничного слоя, не дало таких значений параметров, при которых расчеты численных решений производились бы за “разумное” время – данное преобразование чрезмерно сильно сгущает расчетную сетку вблизи точки $\xi = 0$, вследствие чего шаг по времени слишком мал. Данное преобразование не подходит для расчета численных решений задач с таким типом слоев.

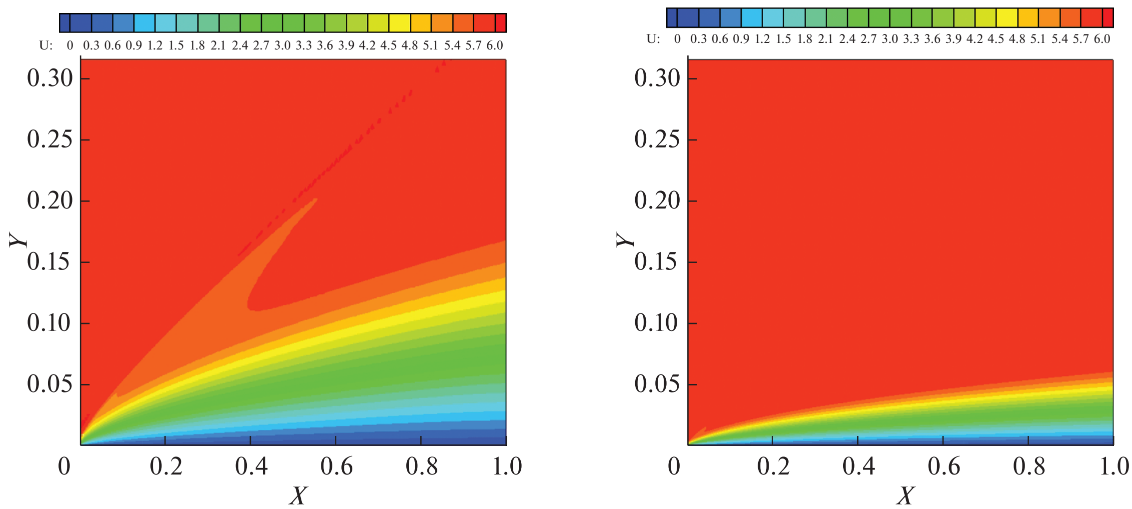
Были произведены расчеты с использованием преобразования (26) $y_{\mathrm{Lis2}}(\xi, \varepsilon, k)$ при значении параметра $\xi_0 = 0.5$. Полученные результаты представлены в табл. 4 и на фиг. 7, 8. Можно сделать следующие выводы: использование данного преобразования возможно при любых значениях числа Рейнольдса Re, но время расчетов T_{clock} превышает 160 ч при значении числа $N_y = 459$. Кроме того, сгущение узлов происходит на части пограничного слоя.

Таблица 4. Значения погрешности и скачка решения с использованием преобразования (26)

$N_{y,t}$	M = 6, Re = 10000					M = 6, Re = 100000				
	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t
51	1	–	–	0.36	–	1	–	–	0.76	–
153	8	0.009	–	0.133	0.906	9	0.056	–	0.237	1.06
459	204	0.001	2	0.046	0.966	168	0.003	2.66	0.079	1



Фиг. 9. Профили продольной скорости и значения в узлах сетки с использованием преобразования (24): (а) – при Re = 10 000, (б) – при Re = 100 000 (M = 6).



Фиг. 10. Расчетные поля продольной скорости с использованием преобразования (24): (а) – при Re = 10 000, (б) – при Re = 100 000 (M = 6).

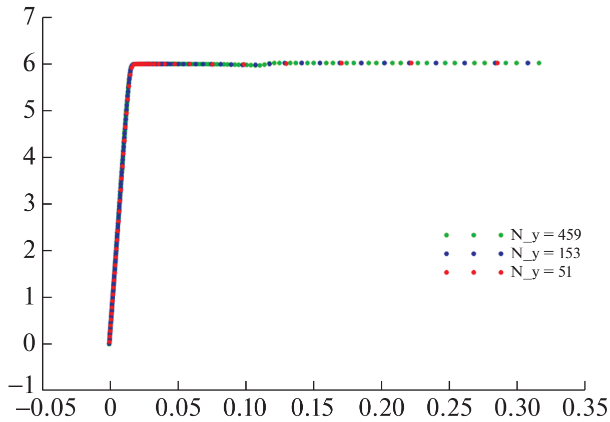
Были произведены расчеты с использованием преобразования (24) $y_{\mathrm{Lis1}}(\xi, \varepsilon, a, k)$ при значении параметров ξ_0, равном 0.8 и $a = 2$. Полученные результаты представлены в табл. 5 и на фиг. 9, 10. Можно сделать следующие выводы: использование данного преобразования возможно при любых значениях числа Рейнольдса Re, время расчетов T_{clock} оказалось самым наименьшим среди всех рассмотренных законов сгущения. Так же отметим малое значение погрешности, которое стремительно уменьшается при увеличении значения числа N_y.

2.3. Расчеты для других чисел M *и* Re *с использованием преобразования для экспоненциальных и степенных особенностей*

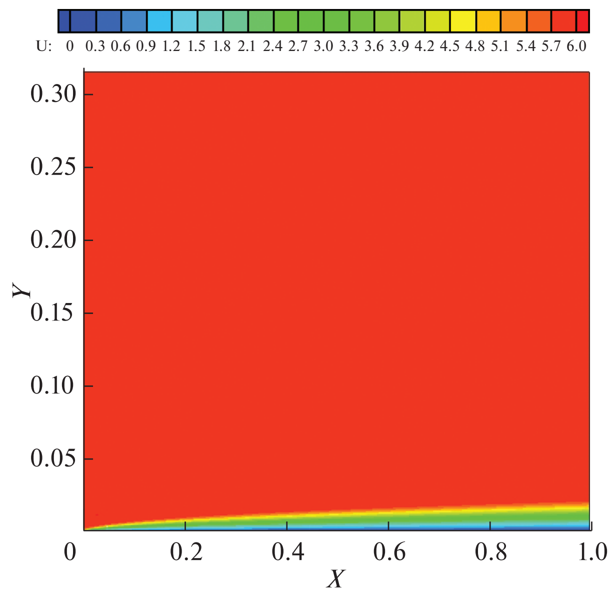
Проанализировав результаты численных экспериментов с использованием каждого из рассматриваемых законов сгущения для числа Маха M = 6 и чисел Рейнольдса 10 000 и 100 000, было

Таблица 5. Значения погрешности и скачка решения с использованием преобразования (24)

$N_{y,t}$	M = 6, Re = 10 000					M = 6, Re = 100 000				
	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t
51	1	–	–	0.15	–	1	–	–	0.213	–
153	4	0.005	–	0.052	0.964	3	0.017	–	0.074	0.962
459	18	0.002	0.834	0.018	0.966	12	0.003	1.58	0.025	0.988



Фиг. 11. Профили продольной скорости и значения в узлах сетки с использованием преобразования (24) при Re = 1 000 000 и M = 6.

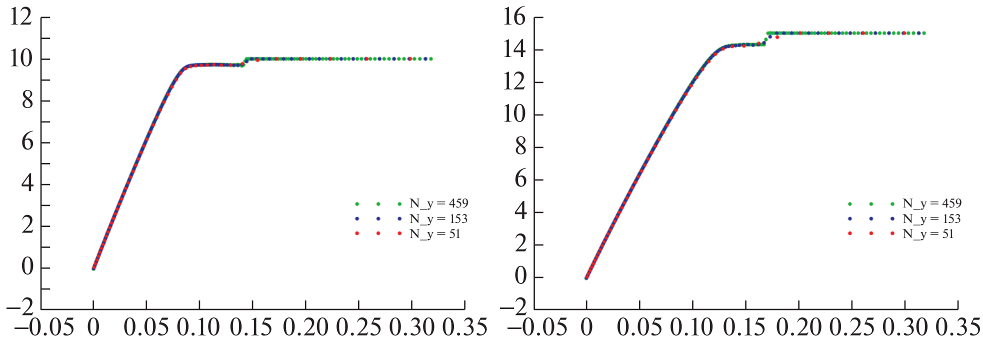


Фиг. 12. Расчетное поле продольной скорости с использованием преобразования (24) при Re = 1 000 000 и M = 6.

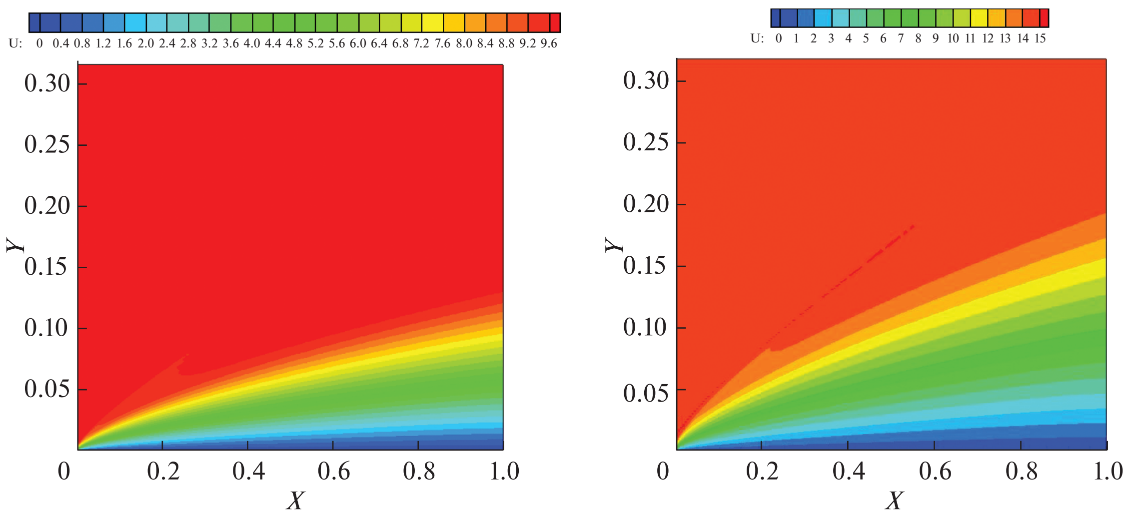
выявлено, что преобразование (24) $y_{\mathrm{Lis1}}(\xi,\varepsilon,a,k)$ отличается от всех других глобальных преобразований не только значительно меньшим временем расчетов, но и лучшими значениями исследуемых численных характеристик, а также лучшим распределением узлов в зоне пограничного слоя (так как узлы не только наиболее распределены в зоне пограничного слоя, но и также более равномерно) по сравнению с другими сетками. Поэтому были произведены расчеты с использо-

Таблица 6. Значения погрешности и скачка решения с использованием преобразования (24)

$N_{y,t}$	M = 6, Re = 1 000 000				
	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t
51	1	–	–	0.283	–
153	2	0.064	–	0.099	0.956
459	10	0.005	2.32	0.034	0.973



Фиг. 13. Профили продольной скорости и значения в узлах сетки с использованием преобразования (24): (а) – при M = 10, (б) – при M = 15 (Re = 100000).



Фиг. 14. Расчетные поля продольной скорости с использованием преобразования (24): (а) – при M = 10, (б) – при M = 15 (Re = 100000).

ванием данного преобразования при тех же значениях параметров ξ_0 и b, но при других значениях чисел Маха M и Рейнольдса Re, чтобы проанализировать поведение закона сгущения сеток при различных числах M и Re.

Произведены расчеты с использованием преобразования (24) $y_{\mathrm{Lis1}}(\xi,\varepsilon,a,k)$ при значении числа Маха $M = 6$ и числа Рейнольдса $\mathrm{Re} = 1000000$. Полученные результаты представлены в табл. 6 и на фиг. 11, 12. Можно сделать следующие выводы: время расчетов T_{clock} не превысило 10 ч, а значение погрешности также осталось невелико.

Также были произведены расчеты с использованием преобразования (24) $y_{\mathrm{Lis1}}(\xi,\varepsilon,b,k)$ при значении чисел Маха M = 10 и 15 и числа Re = 100000. Полученные результаты представлены в

Таблица 7. Значения погрешности и скачка решения с использованием преобразования (24)

$N_{y,t}$	M = 10, Re = 100000					M = 15, Re = 100000				
	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t	T_{clock}	δ_t	p_1	du_t	p_2^t
51	1	–	–	0.313	–	1	–	–	0.348	–
153	2	0.018	–	0.108	0.969	3	0.022	–	0.12	0.969
459	18	0.004	1.37	0.037	0.975	57	0.008	0.921	0.041	0.978

табл. 7 и на фиг. 13, 14. Можно сделать следующие выводы: время расчетов T_{clock} значительно не увеличилось после увеличения числа Маха М, и значение погрешности так же осталось невелико.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе исследования были проанализированы базисные преобразования для генерации адаптивных сеток и преобразования Н.С. Бахвалова, В.Д. Лисейкина и Г.И. Шишкина с оптимальными значениями параметров для построения сеток в пограничных слоях. В серии численных экспериментов для задачи сверхзвукового обтекания плоской пластины вязким газом были исследованы оценки погрешности и порядка точности численных решений, оценки значений скачка решения в близлежащих узлах и порядок скачка решения, а также рассмотрено время расчетов с использованием данных сеток. Показано, что преобразование (24), сконструированное для численных расчетов задач с экспоненциальными и степенными слоями, является наиболее эффективным для исследования сверхзвукового обтекания плоской пластины вязким газом и может использоваться при численных расчетах задач такого типа для достижения качественных результатов с наименьшими затратами времени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Liseikin V.D.* Layer Resolving Grids and Transformations for Singular Perturbation Problems. VSP, Utrecht, 2001.
2. *Бахвалов Н.С.* Об оптимизации методов решения краевых задач при наличии пограничного слоя // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1969. Т. 9. № 4. С. 841–859.
3. *Berger A.E., Han H., Kellog R.B.* A priori estimates of a numerical method for a turning point problem // Math. Comput. 1984. V. 42. № 166. P. 465–492.
4. *Farrell P.A.* A uniformly convergent difference scheme for turning point problems. In Miller J.J.H. ed. Boundary and Interior Layers, Computational and Asymptotic Methods, Boole Press, Dublin, 1980. P. 270–274.
5. *Шишкин Г.И.* Разностная схема для сингулярно возмущенного уравнения параболического типа с разрывным начальным условием // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1988. Т. 28. № 11. С. 1649–1662.
6. *Liseikin V.D., Karasuljic S.* Numerical analysis of grid-clustering rules for problems with power of the first type boundary layers // Comput. Technolog. 2020. V. 25. № 1. P. 49–65.
7. *Liseikin V.D.* Grid generation for problems with boundary and interior layers // Novosibirsk: NGU, 2018.
8. *Liseikin V.D., Paasonen V.I.* Compact difference schemes and layer-resolving grids for numerical modeling of problems with boundary and interior layers // Numer. Anal. and Appl. 2019. V. 12. № 1. P. 1–17.
9. *Liseikin V.D.* Grid Generation Methods. Springer, third ed. Berlin, 2017.
10. *Белокрыс-Федотов А.И., Гаранжа В.А., Кудрявцева Л.Н.* Построение сеток Делоне в неявных областях с обострением ребер // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2016. Т. 56. № 11. С. 1931–1948.
11. *Кудрявцев А.Н., Поплавская Т.В., Хотяновский Д.В.* Применение схем высокого порядка точности при моделировании нестационарных сверхзвуковых течений // Матем. моделирование. 2007. Т. 19. № 7. С. 39–55.
12. Информационно-вычислительный центр Новосибирского государственного университета. [Электронный ресурс]. URL: http://nusc.nsu.ru/ (дата обращения: 25.01.2021).
13. *Лисейкин В.Д.* О численном решении уравнений со степенным пограничным слоем // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1986. Т. 26. № 12. С. 1813–1820.
14. *Лисейкин В.Д.* О численном решении сингулярно возмущенных уравнений с точками поворота // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1984. Т. 24. № 12. С. 1812–1818.
15. *Vulanovic R.* Mesh construction for numerical solution of a type of singular perturbation problems // Numer. Meth. Approx. Theory. 1984. P. 137–142.
16. *Eriksson L.E.* Generation of boundary-conforming grids around wing-body configurations using transfinite interpolation // AIAA J. 1982. V. 20. P. 1313–1320.

EDN: VRMMLN
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1402–1427

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.63

ПОСТРОЕНИЕ СЕТКИ В ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ С БЫСТРЫМ ОБНАРУЖЕНИЕМ ПЕРЕСЕЧЕНИЙ ФРОНТОВ[1)]

Дж. Као[1,2], Дж. Гуан[1,2,*], Ю Фей[1,2], С. Х. Ло[3], Дж. Шан[4], Х. Янг[1,2]

[1] 116024 Далянь, Государственная ключевая лаборатория структурного анализа промышленного оборудования, Даляньский технологический университет, Китай

[2] 116024 Далянь, Даляньский технологический университет, факультет инженерной механики, Китай

[3] Университет Гонконга, факультет гражданского строительства, Гонконг, Китай

[4] 201620 Шанхай, Отдел исследований и разработок, Shanghai Geyu Software Co. Ltd., Китай

**e-mail: guanzhq@dlut.edu.cn*

Поступила в редакцию 10.10.2021 г.
Переработанный вариант 03.03.2022 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

Вычисление нормалей и определение пересечения фронтов при генерации сетки в пограничном слое являются наиболее трудоемкими частями при реализации надежного алгоритма построения гибридных сеток для моделирования вязких течений. В данной работе представлен общий метод построения сетки в пограничном слое с использованием алгоритма быстрого обнаружения столкновений. Основные результаты работы заключаются в следующем. Во-первых, предлагается новый приближенный линейный по сложности метод представления непрерывной медиальной поверхности, основанный на разбиении триангуляции Делоне с ограничениями (CDT) граничных точек. Во-вторых, мы улучшаем метод Jump-and-Walk для обнаружения пересечений сетки, повышая его устойчивость с помощью разделителя на медиальных поверхностях, введенного между маршевыми фронтами. Разделитель основан только на CDT и прост в реализации, поскольку не требует дополнительных структур данных. И, наконец, для значительного сокращения времени обычных вычислений для построения сетки и операций обнаружения пересечений используется прецизионный метод декомпозиции и роста подобластей, который позволяет значительно сократить время вычислений за счет совместного использования CDT на разных этапах алгоритма. Возможности предложенного алгоритма продемонстрированы на примере построения гибридных сеток высокого качества для очень сложных геометрических моделей. Продемонстрировано значительное ускорение работы алгоритма построения гибридных сеток при сохранении его надежности. В частности, показано, что предложенный алгоритм примерно в 4 раза быстрее алгоритма из известного коммерческого пакета Pointwise. Библ. 41. Фиг. 27. Табл. 3.

Ключевые слова: сетка в пограничном слое, призматический слой, гибридная сетка, обнаружение столкновений, триангуляция Делоне с ограничениями, медиальная поверхность, декомпозиция области.

DOI: 10.31857/S0044466922080105

1. ВВЕДЕНИЕ

Вычислительная гидродинамика (CFD) – это отрасль механики жидкости, которая занимается проблемами течения жидкости с помощью численного моделирования. Расчет вязкой жидкости вокруг объектов обычно основан на уравнениях Навье–Стокса, осредненных по Рейнольдсу (Reynolds-averaged Navier–Stokes, сокращенно RANS). В типичном анализе первым шагом является генерация численной сетки. Типы сеток, обычно используемые в расчетах RANS, в основном включают структурированную сетку, неструктурированную сетку, сетку с перекрытием, декартову сетку, гибридную сетку и т.д. Различные типы сеток имеют свои собственные характеристики и недостатки. Однако, учитывая простоту использования и численную точность, гибридная сетка, которая использует все преимущества структурированных и неструктурированных сеток с должным учетом эффекта пограничного слоя, считается наилучшей формой сет-

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке Национального фонда естественных наук Китая (11272074).

ки для расчетов RANS (см. [1]–[3]). Этот тип сетки использует уплощенные полуструктурированные элементы типа призм вблизи поверхности объекта, что не только более адаптивно к сложной геометрической форме в направлении, параллельном поверхности объекта, но и точно передает чрезвычайно тонкие характеристики поля жидкости в направлении, перпендикулярном поверхности объекта, путем управления количеством слоев сетки. Оставшийся объем заполняется неструктурированными элементами автоматически без ручного разбиения, что значительно снижает сложность генерации сетки и обеспечивает надежность всего алгоритма. Более того, общее количество элементов может быть уменьшено по сравнению с ситуацией, когда неструктурированные сетки используются на всем поле с тем же количеством точек сетки.

Пользуясь зрелостью методов триангуляции Делоне с ограничениями (Constrained Delaunay Triangulation, сокращено CDT) (см. [4]–[8]) основное внимание уделяется построению призматической сетки на границе. Как правило, размер характеристик жидкости намного меньше, чем размер расчетных моделей. Расстояние между ячейками призматических сеток в нормальном направлении может достигать порядка $O(10^{-3}–10^{-5})$ по сравнению с тангенциальным направлением. Благодаря быстрому росту мощности компьютеров, моделирование вязкой жидкости с $10^7–10^8$ узлами часто используется для более точного решения. Кроме того, для сложных геометрических моделей с большим разбросом размеров элементов трудно создать правильную сетку, соответствующую геометрическим особенностям с правильным расстоянием между узлами и соотношением сторон. Надежность и эффективность – вот задачи для создания качественной сетки пограничного слоя.

Одним из популярных алгоритмов построения сеток пограничного слоя является метод продвигающегося слоя. Треугольная сетка на нескользящей стенке продвигается в направлении, нормальном к стенке, для создания призматической сетки с высоким искажением формы. Ранние попытки применения этого метода были предложены Лонером (Lohner) (см. [6]) и Пирзаде (Pirzadeh) (см. [9]). Основное различие заключается в том, что Лонер расширял всю граничную поверхность за один раз (одноразовое продвижение, OTA), в то время как Пирзаде продвигал треугольные грани слой за слоем (послойное продвижение, LLA). Предполагая, что количество треугольников на стене равно n_{cell}, а количество слоев равно n, время вычислений для продвижения одной грани в процессе OTA и LLA составляет n_{cell} и ($n_{\text{cell}} \times n$) соответственно. Очевидно, что по сравнению с LLA, OTA намного эффективнее, но должен следовать в фиксированном направлении. Оба процесса сталкиваются с проблемой само- или глобального пересечения сетки, особенно в узких углах ложбин или на смежных поверхностях. Как надежно и эффективно обнаружить столкновение сеток – один из основных вопросов для построения пограничного слоя. В целом алгоритмы обнаружения столкновений можно разделить на две категории в соответствии с используемыми вычислительными стратегиями: 1) тест пересечения элементов, 2) обнаружение пространства.

Если тест на пересечение используется для нахождения пересекающихся или перекрывающихся призм в OTA (см. [6], [10], [11]) или LLA (см. [12]), то область исследования обычно ограничена вокруг проверяемых призм. Для OTA, из-за фиксированных направлений марша, многие призмы в углах ложбин могут быть чрезмерно усечены. Этой проблемы не существует в LLA, которая является более надежным и широко распространенным методом. Однако обнаружение столкновений в трехмерном пространстве – нетривиальный процесс, поскольку необходимо тщательно реализовать геометрические вычисления, чтобы избежать проблем с устойчивостью, вызванных вычислениями с конечной точностью. Кроме того, необходима дополнительная структура данных, например, октодерево или alternating digital tree (ADT) (см. [13]), чтобы уменьшить время поиска, требуемое алгоритмом.

Пересечения сеток также могут быть определены путем оценки пространства продвижения передних точек (см. [1], [9], [14]–[18]), из которых CDT обычно используется в качестве фоновой сетки для алгоритмов поиска, не полагающихся на дополнительную структуру данных. Один из способов определения размера пространства заключается в том, что сетка CDT сначала заполняется в проблемной области, а передние точки маршируют, сохраняя объем тетраэдров положительным (см. [14], [15], [17]). Этот метод прост и надежен, но для настройки CDT требуется большое количество итераций, включающих сглаживание сетки, настройку локальной топологии и другие операции, что существенно снижает эффективность генерации сетки. Ванг и соавт. (см. [18]) вычислили максимальные расстояния до передних точек, проходящих по тетраэдрам с помощью метода прыжков и ходьбы (Jump and Walk, JW). Эффективность процесса построения сетки значительно повышается. Однако, как косвенный способ, метод Ванга все еще не обладает достаточной надежностью при сложных углах и прилегающих поверхностях, что является общей проблемой для алгоритмов обнаружения пространства по сравнению с прямым вычислением пересечений.

В данной работе мы улучшаем метод JW, повышая его робастность для обнаружения столкновений с медиальной поверхностью, используемой для контроля маршевого расстояния передних точек в LLA. Требуемая структура данных проста и может сделать процедуру зацепления пограничного слоя простой в построении и быстрой в исполнении с приемлемым качеством сетки.

Более того, если OTA и LLA используются соответственно в различных областях вязкой стенки (т.е. расширение пограничной поверхности в открытой области с помощью OTA и продвижение границ в узкой области с помощью LLA), можно добиться хорошего эффекта ускорения и качества сетки одновременно. Сложность этого метода заключается в создании эффективного алгоритма разделения области. Поэтому был разработан метод продвигающегося разделенного слоя (Advancing Divided-Layer, AdvDL), который также основан на медиальной поверхности для разделения и продвижения доменов.

Остальная часть статьи организована следующим образом. В разд. 2 сначала перечислены некоторые термины, определения и параметры сетки, которые будут встречаться в последующем тексте. Затем мы представляем процедуру создания гибридной сетки и подробно описываем некоторые ключевые шаги. В разд. 3 мы кратко рассматриваем метод JW и его применение к обнаружению столкновений сеток пограничного слоя, доказывая, что существуют два условия, при которых метод JW не является безопасным. В разд. 4 мы представляем метод разбиения медиальной поверхности для построения независимого маршевого пространства для каждой части фронтальной поверхности. Метод JW улучшается благодаря введению метода медиального разбиения поверхности. В разд. 5 кратко описываются метод AdvDL и его сочетание с усовершенствованным методом JW для повышения эффективности. В разд. 6 на некоторых примерах, включающих модели внутреннего и внешнего потоков, были проведены тесты с использованием усовершенствованного метода JW, чтобы показать его эффективность. В разд. 7 приведены выводы по данной работе.

2. ОБЩИЕ ШАГИ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ГИБРИДНОЙ СЕТКИ

Параметры сетки:

T: граничные треугольные сетки,

n: количество пограничных слоев,

d_0: толщина первого слоя,

r: скорость роста толщины слоя,

d_i^l: толщина i^{th}-слоя, $d_i^l = d_0 r^{i-1}, i = 1,\ldots,n$,

d_{all}: общая толщина слоев, $d_{all} = \sum_{i=1}^{n} d_i^l$.

Основная процедура построения гибридной сетки, предложенная в данной работе, показана на фиг. 1. Сетка пограничного слоя сначала строится методом продвигающегося слоя, при этом вычисление направления и расстояния марша и проверка пересечения сетки являются основными в процессе построения сетки. Затем удаляются нестеновые пограничные поверхности, такие как свободный поток, периодическая поверхность, поверхность симметрии и т.д. Наконец, оставшееся поле потока заполняется изотропной тетраэдральной сеткой.

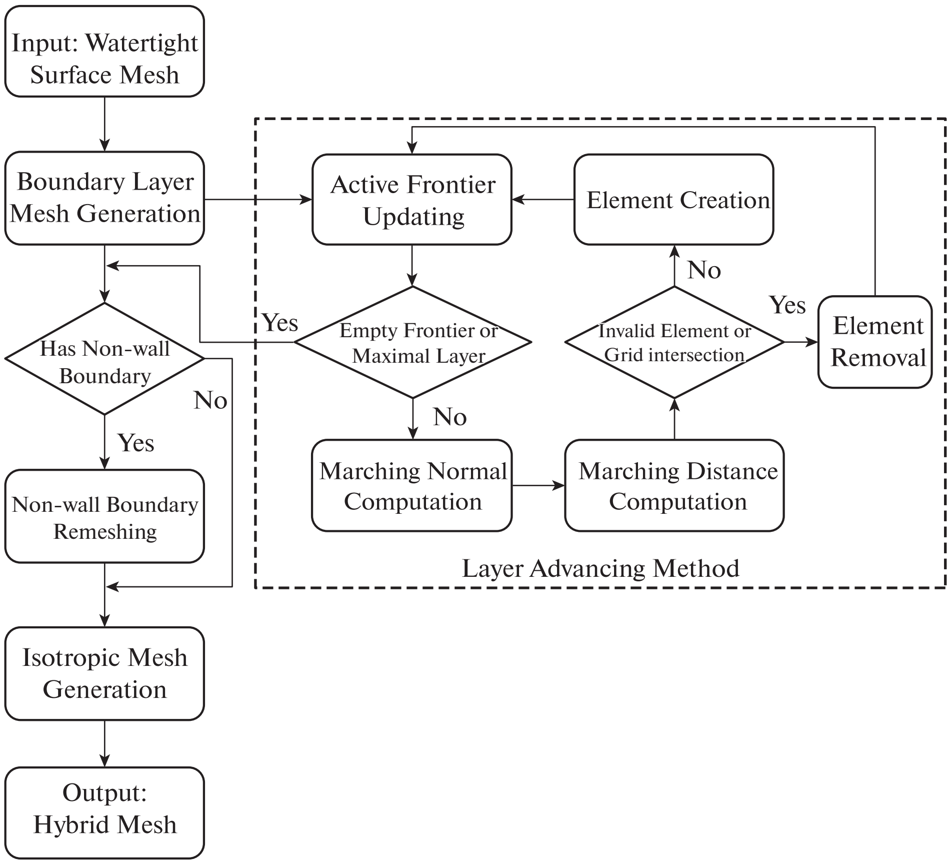
2.1. Направление и дистанция марша

Вычисление направления марша. Ортогональность призм является важным свойством при построении сетки для точности расчетов жидкости. Начальное направление движения передней точки определяется нормалями треугольных граней, соединенных с точкой. Предположим, что существует n граней, как показано на фиг. 2а. Пусть $p_1,\ldots,p_n$ – вершины, соединяющиеся с p так, что k^{th} треугольная грань обозначается через $pp_k p_{k+1}$. Приведем следующие определения:

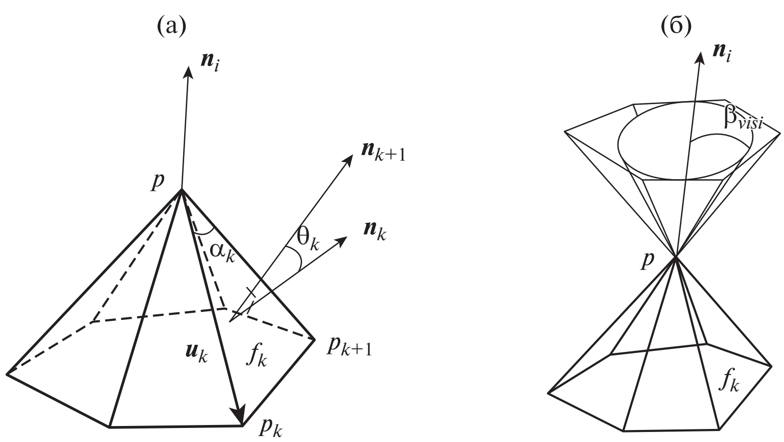
$\mathbf{n}_k$: единичный нормальный вектор грани f_k,

$\mathbf{u}_k$: единичный вектор в направлении pp_k,

α_k: угол $p_k p p_{k+1}$,



Фиг. 1. Процедура построения гибридной сетки.



Фиг. 2. Методы вычисления нормали в точке: (а) – средневзвешенное значение нормалей поверхности, (б) – построение конуса видимости.

θ_k: угол между нормальными векторами соседних граней,

Ω: телесный угол в точке p, $\Omega = 2\pi - \sum_{k=1,n} \theta_k$; для плоских поверхностей $\Omega = 2\pi$, для впадин $\Omega > 2\pi$, для пиков $\Omega < 2\pi$. Угол θ_k может принимать положительное или отрицательное значение в зависимости от тройного произведения $(\mathbf{n}_k \times \mathbf{n}_{k+1}) \cdot \mathbf{u}_{k+1}$.

Обычно берется среднее угловое взвешенное этих нормалей, чтобы получить приемлемую нормаль поверхности в данной точке. Мы обозначаем эту нормаль через

$$\mathbf{n}_i = \frac{\sum \alpha_k \mathbf{n}_k}{\sum \alpha_k}, \quad \overline{\mathbf{n}}_i = \frac{\mathbf{n}_i}{\|\mathbf{n}_i\|}, \tag{1}$$

где последняя формула представляет вектор нормали единичной длины.

Однако это может привести к недействительному условию видимости для дискретных поверхностей с прерывистым наклоном, таких как стыки крыла и фюзеляжа, острые кромки, впадины и пики. Этой ситуации можно избежать, используя вписанный конус с максимальной видимостью, построенный путем расширения граней вокруг передней точки. Как показано на фиг. 2б, конус имеет полуконический угол β_{visi} и его центральная ось может создать правильный нормальный вектор, наиболее ортогональный к острому участку (см. [2]). Учитывая, что большая часть граничной поверхности гладкая, неэффективно вычислять конусы видимости для всех точек фронта. Чтобы сбалансировать надежность и эффективность алгоритма, предлагается альтернативная стратегия относительно $\theta_{\max}$:

– если $\theta_{\max} < 30°$, принимается средневзвешенное значение нормалей поверхности;

– если $\theta_{\max} \geq 30°$ или нормаль невидима для любой соседней грани, вычисляется конус видимости.

Вычисление маршевого расстояния. Чтобы увеличить ортогональность сетки по мере роста слоев, маршевое расстояние может быть линейной функцией β_{visi}, которая дает относительно большое значение в вогнутых углах и малое значение в выпуклых углах (см. [18]). Для i-го слоя начальное маршевое расстояние d_i настраивается следующим образом:

$$d_i = (1+\alpha)d_i^l, \tag{2}$$

где $|\alpha| = |\cos\beta_{\text{visi}}|$. Когда поверхность выпуклая, т.е. $\Omega < 2\pi$, знак α отрицательный; когда поверхность вогнутая, т.е. $\Omega > 2\pi$, знак α положительный. Значение функции cos находится в пределах от -1 до 1 и нечувствительно к небольшому изменению β_{visi}, что обеспечивает относительно плавный переход маршевого расстояния между соседними точками.

Сглаживание. После вычисления начальных маршевых векторов необходимо сгладить направления маршей или расстояния между фронтальными точками, чтобы упорядочить генерируемую сетку. Для этого можно использовать метод взвешенного сглаживания Лапласа:

$$V_i = \omega V_i' + (1-\omega)\frac{\sum_j w_{ij} V_j}{\sum_j w_{ij}}, \tag{3}$$

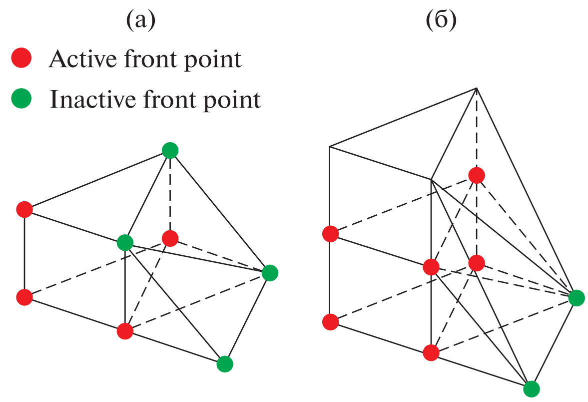
где V_i' – старое направление марша или расстояние точки p_i, а w_{ij} – вес, определенный в p_j, который связан с расстоянием d_{ij} между p_i и p_j; d_{ij}^{-1} был предложен в качестве веса сглаживания расстояния Каллиндерисом и др. (см. [1]) и хороший переход может быть достигнут особенно в местах с близко расположенными точками. Ю и соавт. (см. [19]) отметили, что выгодно, чтобы нормали на выпуклых углах были ближе к своим соседям, и наоборот, для вогнутых углов. Чтобы достичь этого при сглаживании направлений, w_{ij} определяется в виде

$$w_{ij} = \begin{cases} k_{ij}^2, & \theta_{\max} \geq 5°, \quad \Omega \leq 2\pi, \\ 1/k_{ij}^2, & \theta_{\max} \geq 5°, \quad \Omega > 2\pi, \\ 1 & \text{иначе}, \end{cases} \quad k_{ij} = \frac{n d_{ij}}{\sum_{j=1,n} d_{ij}}, \tag{4}$$

2.2. Проверка правильности сетки пограничного слоя

Перед созданием призмы будет проведено несколько тестов на валидность, включая качество элементов, обнаружение столкновений и топологическую связь. Если какой-либо тест не пройдет, призма будет отброшена.

Качество элемента. Ортогональность боковых граней и соотношение сторон треугольных граней – два важных фактора качества призмы. В нашем алгоритме используется масштабная мера



Фиг. 3. Переход элементов между сеткой пограничного слоя и изотропной сеткой: (а) – хорошие переходы пирамидального и тетраэдрического элементов, (б) – плохие переходы.

качества по соотношению сторон (см. [16]). Призма является свернутым элементом, если ее коэффициент качества $\rho \le 0$, что не допускается. Кроме того, если максимальная длина h боковых граней и средняя длина l нижних граней удовлетворяют условию, что $h/l > \alpha$ (по умолчанию α принимает значение 0.8), фронтальная грань прекращает марширование для поддержания плавного перехода размера к изотропной сетке.

Обнаружение столкновений. Глобальные и локальные пересечения сетки запрещены при продвижении фронтальных граней. Выдающийся алгоритм обнаружения столкновений должен обладать как хорошей надежностью, так и эффективностью. Улучшенный метод JW, предложенный в следующем тексте, может стать хорошим выбором для крупномасштабного построения сеток пограничного слоя.

Переход элемента. Если статус марширования точки выключен, все грани вокруг нее перестают маршировать, а между призмами и изотропной сеткой строятся переходные элементы пирамида/тетраэдр. Разность номеров слоев смежных граней будет оставаться меньше 2, чтобы сохранить качество переходного элемента, как показано на фиг. 3.

2.3. Обработка на граничных сетках без стен

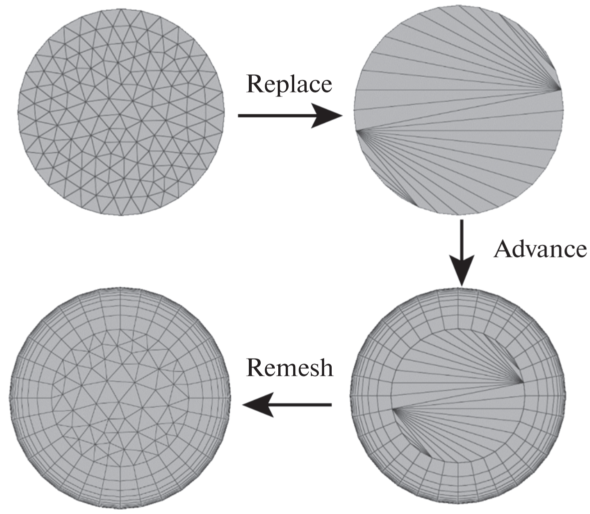
Некоторые модели течения содержат нестеновые граничные поверхности, примыкающие к нескользящей стенке, такие как свободный поток, периодическая поверхность, поверхность симметрии и т.д. Ее сетка будет изменяться вдоль направления продвижения пограничных слоев. В данной работе сетка нестеночной поверхности заменяется триангуляцией Делоне ее граничных точек, как показано на фиг. 4, что требуется для предлагаемого обнаружения столкновений. После того, как сетка пограничного слоя будет сгенерирована, мы переделаем сетку нестеновой поверхности, ограниченной расширенной границей.

2.4. Построение изотропных сеток

С закрытой расширенной границей в качестве входных данных изотропные тетраэдральные сетки могут быть созданы в оставшемся поле потока. Существует множество эффективных, стабильных и открытых генераторов тетраэдральных сеток, таких как Gmsh, NetGen, TetGen и др. В данной работе построение фоновой сетки и изотропной сетки осуществляется с помощью программы TetGen.

3. ОБНАРУЖЕНИЕ СТОЛКНОВЕНИЙ МЕТОДОМ Jump-and-Walk

Нахождение точек широко используется при построении сетки и в других численных алгоритмах, таких как триангуляция Делоне (см. [5]), техника движущегося фронта (AFT) (см. [20]), алгоритм отпечатка сетки (см. [21]) и т.д. Для ускорения поиска объектов, включая точки, края, ячейки и т.д., обычно требуется фоновая сетка. В общем случае может быть использовано k-е де-



Фиг. 4. Процедура построения сетки для нестенных границ.

рево с вычислительным временем от $O(N \log N)$ до $O(N^2)$ для предварительной обработки дерева и $O(\log N)$ для каждого запроса (см. [22], [23]). Кроме того, алгоритм поиска ближайшей точки на основе равномерных кубов может достичь временной эффективности $O(1)$, но это при идеальном условии для равномерно распределенного множества точек. Наиболее распространенным алгоритмом для определения положения целевой точки в триангуляции является метод Walk-through (см. [18], [24]–[28]), который можно быстро и легко построить, опираясь только на триангуляцию. Его вычислительная сложность в целом составляет $O(N^{1/4})$ на точку, что обусловлено связностью треугольной сетки (см. [29]).

Метод JW как вариант метода Walk-through был применен к обнаружению столкновений при построении сеток пограничного слоя Вангом и Маре (см. [18]). В сочетании с обычным сглаживанием и запретом на многоуровневую разницу в количестве слоев между соседними фронтальными гранями он может исправить большинство пересечений сетки, но все еще не обладает достаточной надежностью.

3.1. Алгоритм

Барицентрические координаты точки p относительно тетраэдра $V(p_1p_2p_3p_4)$ можно обозначить через $L_i, i = 1,2,3,4$, путем вычисления объема тетраэдра, где

$$L_1 = \mathrm{Volume}(pp_2p_3p_4), \quad L_2 = \mathrm{Volume}(p_1pp_3p_4), \tag{5}$$

$$L_3 = \mathrm{Volume}(p_1p_2pp_4), \quad L_4 = \mathrm{Volume}(p_1p_2p_3p). \tag{6}$$

Если p находится на стороне грани, направленной в сторону $V(p_1p_2p_3p_4)$, то знак координаты положительный, в противном случае – отрицательный. Для всех возможных положений существует не более трех отрицательных значений.

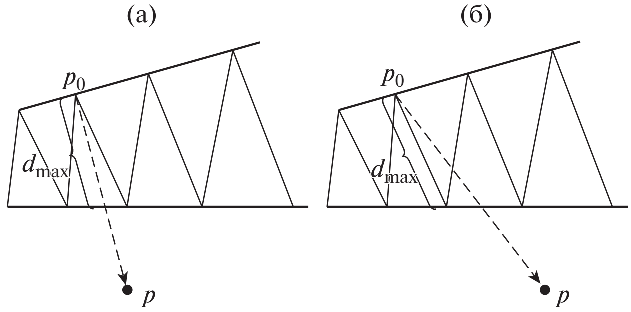
Algorithm 1. JW

Require: A CDT сетки граничных поверхностей T и ее топологической структуры данных со сложностью запроса $O(1)$; начальная точка $p \in T$; целевая точка q достаточно далеко от p вдоль направления движения; объективная функция: *Барицентрический координатный поиск*.

Ensure: Максимальное маршевое расстояние $d_{\max}$ для p.

Инициализируем случайный d-симплекс $\sigma_0 \in$ CDT с p в качестве одной из вершин. State $\sigma \leftarrow \sigma_0$.

while do $n < n_{\max}$



Фиг. 5. Максимальные маршевые расстояния вычисляются с помощью JW в двух случаях: (а) – $\sigma = \sigma_0$, (б) – $\sigma \neq \sigma_0$.

Определите грань τ от σ с помощью целевой функции:

- Если не выбрано τ, q находится внутри σ, то $d_{\max} = \|\mathbf{q} - \mathbf{p}\|$. Возврат.
- Если τ выбрано и лежит на границе, то q находится вне CDT:
  – Если $\sigma = \sigma_0$, то $d_{\max} = \|\mathbf{p}_{\text{inter}} - \mathbf{p}\|$, где $\mathbf{p}_{\text{inter}}$ – пересечение лучей n_p и τ (фиг. 5а). Возврат.
  – Если $\sigma \neq \sigma_0$, то $d_{\max} = \|\mathbf{p}_\tau - \mathbf{p}\|$, где $\mathbf{p}_\tau$ – координата вершины τ, ближайшей к p (фиг. 5б). Возврат.
- Если τ выбрана и σ_{neigh} может быть получена, движение продолжается.

Перейдите через τ к σ_{neigh}.

$\sigma \leftarrow \sigma_{\text{neigh}}$.

$n = n + 1$.

end while

Простым способом избежать пересечения сеток является определение максимального расстояния марша передней точки на границе, как показано на фиг. 5. Проходя по тетраэдрам CDT вдоль направления движения передней точки, будет найден тетраэдр, содержащий целевую точку, или движение, наконец, достигнет границы. Тогда общее расстояние движения можно принять за максимальное расстояние марша. Подробно это показано в алгоритме 3.1. Ключом к повышению эффективности поиска является выбор приемлемой объективной функции для определения того, через какую грань нужно перепрыгнуть, чтобы достичь соседнего тетраэдра. Обычно используются следующие методы:

Тест на пересечение сегмента с гранью (см. [26]). Этот метод является точным, но самым трудоемким.

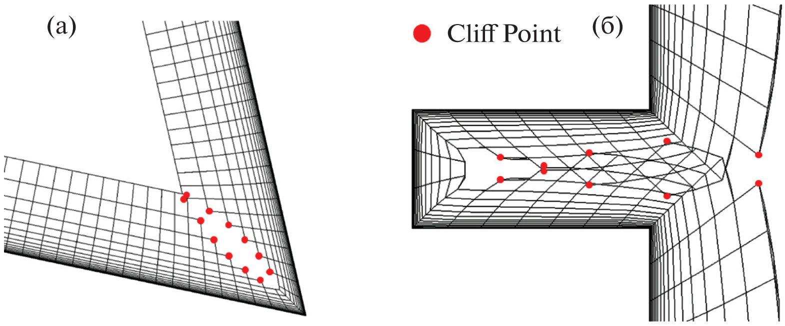
Поиск против часовой стрелки (см. [25]). Эта простая стратегия заключается в том, что выбирается случайная грань с $L < 0$ относительно целевой точки. Но если более одной барицентрической координаты отрицательны, то образуется извилистый путь.

Поиск по барицентрическим координатам (см. [27], [28]). В этом поиске используется шагание, подобное *градиентному спуску*. Если существует несколько граней с $L < 0$, предполагая, что $L_i > L_j > L_k$, то грань τ_k является оптимальным выбором.

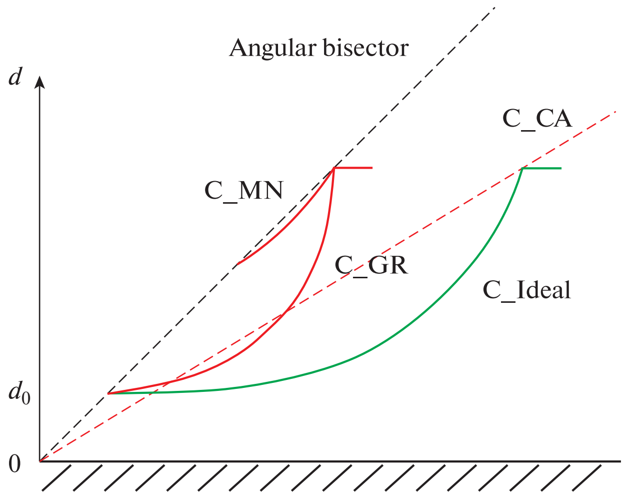
Очевидно, что барицентрический поиск координат позволяет достичь хорошего баланса между точностью и эффективностью. После получения $d_{\max}$ общее расстояние марша изменяется как

$$d_{\text{all}} = \min\{d'_{\text{all}}, d_{\max} r_{\text{gap}}\}, \tag{7}$$

где r_{gap} – коэффициент сжатия толщины слоя. В данной работе r_{gap} принимается равным 0.3, чтобы обеспечить четкое расстояние между сетками пограничного слоя.



Фиг. 6. Два типичных положения, в которых обнаружение столкновений может не сработать в зависимости от метода JW: (а) – на углу, (б) – на выходе из узкого канала.



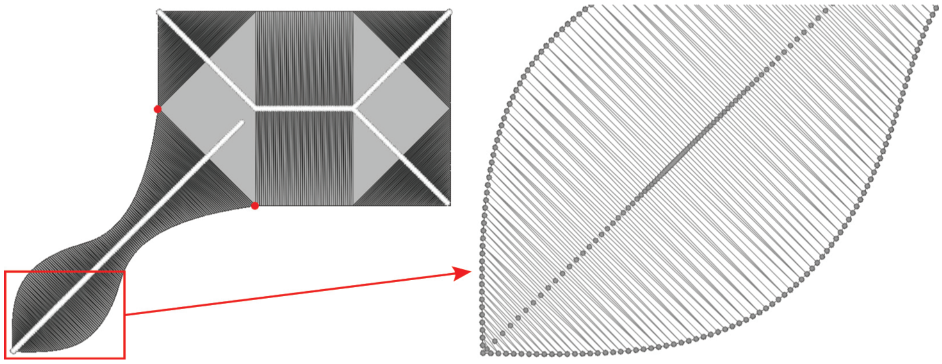
Фиг. 7. Факторы, вызывающие столкновения сетки на углу или выходе из узкого канала: C_Ideal – идеальное состояние, C_CA – малый угол, C_MN – большое минимальное количество слоев, C_GR – большой нарастающий градиент толщины слоя.

3.2. Недостаток: рискованные точки обрыва

Обнаружение столкновений сеток, основанное на методе JW, не всегда надежно. На фиг. 6 показаны два типичных примера, когда обнаружение может не сработать. В углу, когда максимальные расстояния между фронтальными точками достаточно велики, идущие лучи перекрывают друг друга и призмы, созданные на этих лучах, вырождаются, из чего формируется ступенчатая сетка пограничного слоя. При увеличении числа слоев сетка локально пересекается. На выходе из узкого канала пространство поля резко увеличивается, и пересечения сетки появляются в аналогичной форме. Каждый слой ступенчатой сетки создает несколько точек обрыва, которые представляют собой точки с неполным участком поверхности вокруг. Если последовательно соединить точки обрыва на одной стороне угла или разрыва, можно построить инкрементальную кривую, как показано на фиг. 7. Когда кривая касается биссектрисы угла или разрыва, сетка может пересечься, а побуждающими факторами являются малый угол, большое минимальное количество слоев, большой градиент толщины слоя и т.д. Первые два фактора связаны с геометрической сложностью. Кроме того, сглаживание сетки может увеличить минимальное количество слоев, а градиент приращения связан с размером сетки и скоростью роста толщины слоя.

4. УСОВЕРШЕНСТВОВАННЫЙ МЕТОД Jump-and-Walk (EJW)

Для исправления сетки вблизи точек обрыва предлагается усовершенствованный метод JW, при котором граница медиальной поверхности вводится в фоновую сетку для предотвращения локального пересечения сетки.



Фиг. 8. Точки медиальной поверхности в 2D.

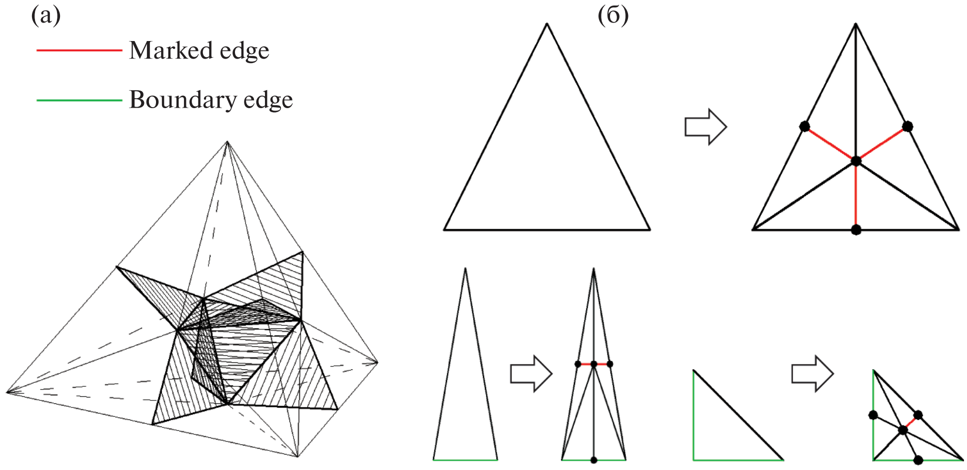
4.1. Медиальная поверхность (*MS*)

MS как скелетная абстракция твердого объекта обеспечивает представление, которое просто фиксирует геометрическую близость граничных элементов, которая описывается локусом центра максимальной сферы при ее качении вдоль границы. Благодаря хорошим свойствам в распознавании смежных признаков и сегментации областей, MS используется во многих приложениях, таких как планирование траектории, контроль размеров (см. [30], [31]), построение структурированных сеток (см. [32]–[35]) и т.д. Однако эффективная стратегия построения непрерывного представления по геометрической поверхности или треугольной сетке оказалась сложной, особенно в 3D. Часто используется DT набора точек на границе благодаря своей простоте и надежности. Описанные сферы тетраэдров в DT в общем случае намного больше и могут выходить за пределы области, в то время как максимальные сферы MS всегда находятся в пределах области. Ю и соавт. (см. [36]) доказали, что при увеличении плотности граничных точек описанные сферы стремятся к максимальным сферам. Шии и соавт. (см. [37]) и Редди и Туркия (см. [38]) проделали работу по оптимизации оптимальной плотности и распределения точек на границе объекта и достигли неплохих результатов.

В данной работе MS будет построена как естественная стена, чтобы разделить противоположные границы в узких областях и избежать столкновений глобальной и локальной сетки. Предлагается новый метод для приблизительного представления MS с помощью треугольной сетки. Более того, простое приближенное представление используется для определения размера областей для разделения фронтальной поверхности.

Приближенное представление 1: точки медиальной поверхности (MSP). Самый простой способ представить MS – это построить набор точек, состоящий из центров описанных сфер всех тетраэдров в CDT граничного набора точек, а именно MSP, которая обычно используется для определения размера геометрических особенностей в твердом объекте (см. [30], [31]). Возьмем в качестве примера двумерный случай, показанный на фиг. 8, область заполнена CDT, а точки внутри области являются окружностями треугольников. Видно, что эти точки в основном распределены по средней оси плоской геометрии с плотным интервалом, связанным с дискретными размерами границы. На увеличенном фиг. 8 видно, что угол наклона краев границы с двух сторон треугольника ближе к 0°, расстояние между окружностями плотнее и отклонение MSP от фактической MS меньше.

Приблизительное представление 2: медиальные поверхностные сетки (MSM). Хотя MSP может соответствовать положению MS с высокой точностью, пока граничные точки достаточно плотные, непрерывное выражение геометрическими поверхностями или треугольной сеткой обычно необходимо во многих приложениях, таких как абстракция скелета твердого тела и сегментация области для генерации четырехугольной/шестигранной сетки (см. [32]–[35]). Поскольку CDT разбивается по биссектрисе тетраэдров, как показано на фиг. 9, MS может быть получена как треугольная сетка с гранями из части тетраэдров в разложенной CDT (DCDT), а именно MSM. Подробности описаны в алгоритме 4.1.



Фиг. 9. (а) – Тетраэдр разлагается на 17 маленьких тетраэдров, (б) – грань, содержащая 0, 1 или 2 граничных ребра, декомпозируется путем вставки дополнительных точек.

Algorithm 2. Построение MSM

Require: CDT.
Ensure: MSM встроена в DCDT.
for каждый тетраэдр $T \in$ CDT **do**
Разделите его на 17 маленьких тетраэдров, вставляя точки на ребрах или внутри граней.
- 6 точек ставятся на серединах граней.
- 4 точки размещаются внутри граней. Для грани, содержащей 1 граничное ребро, точка ставится на середине линии, соединяющей середины двух не граничных ребер; в противном случае, точка ставится в барицентр грани.

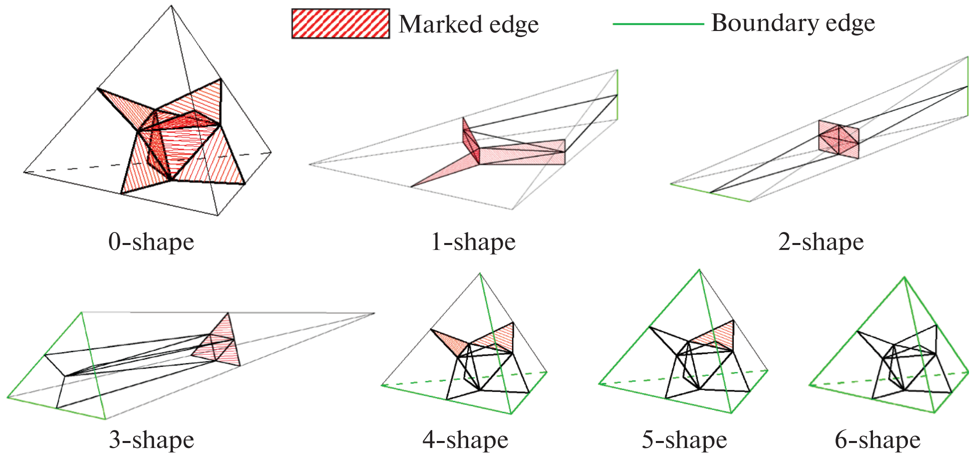
Отметьте грани внутри T.
- Отметьте все грани, состоящие из трех новых вставленных точек.
- Если тетраэдр содержит граничные ребра, отметьте грани, соединяющиеся со средней точкой граничного ребра; если число граничных ребер $\neq 2$, отметьте грани, противоположные конечной точке граничного ребра.

end for
Соберите все отмеченные грани как MSM.

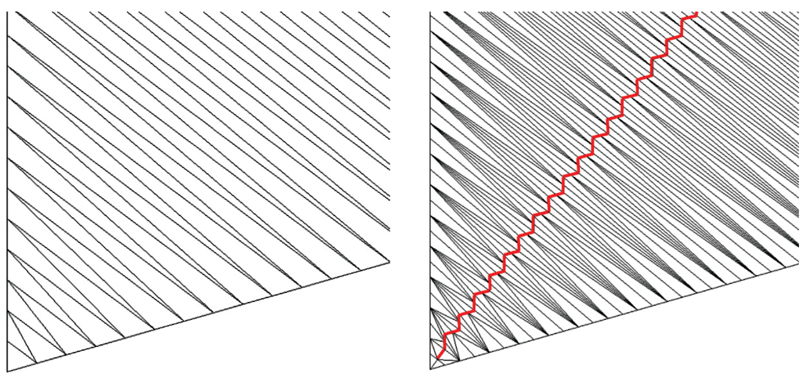
Как показано на фиг. 10, существует семь видов тетраэдров в зависимости от количества содержащихся граничных ребер. Этот алгоритм может построить сетку с плотной стенкой в линейной сложности путем двухэтапной маркировки, как показано на фиг. 11. Топология MSM тесно связана с тетраэдрализацией, которая аналогична двойственному графу CDT, т.е. диаграмме Вороного. Дополнительная фильтрация для MSM не допускается, чтобы избежать образования небольших отверстий. Грани MSM параллельны граничным треугольникам попеременно с половиной размера. Если угол между нормальными векторами граничных поверхностей близок к 180°, то MSM стремится быть плоской поверхностью с минимальной ошибкой аппроксимации.

4.2. Обнаружение столкновений сеток пограничного слоя

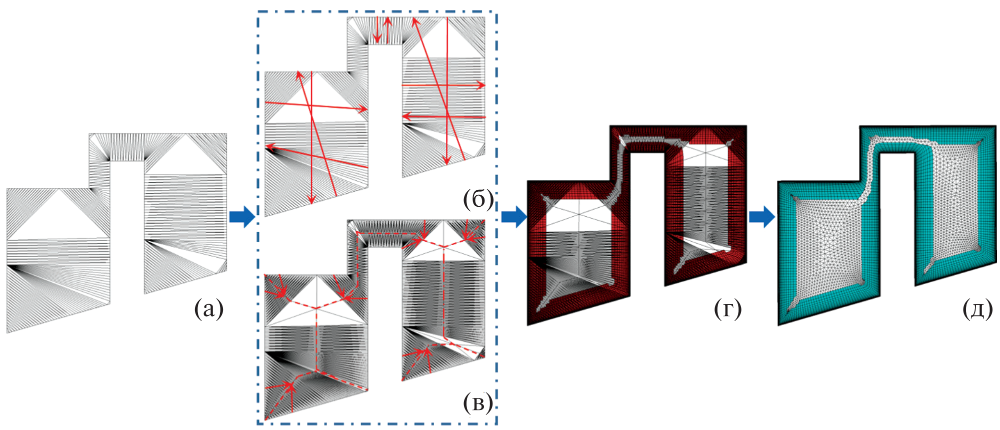
Согласно свойству MS, траектория движения фронтальной точки ясна без пересечения с другими траекториями, если она не пересекает MS. Поэтому MSM может быть использована как новая граница метода JW для обнаружения столкновений при генерации сетки пограничного слоя. Как показано на фиг. 12, улучшенный метод JW использует быструю корректировку общего маршевого расстояния фронтальных точек с помощью CDT и тщательный расчет расстояния для точек обрыва с помощью DCDT для более надежного обнаружения столкновений сетки.



Фиг. 10. Тетраэдры, содержащие $0 \sim 6$ граничных ребер с гранями, отмеченными внутри.

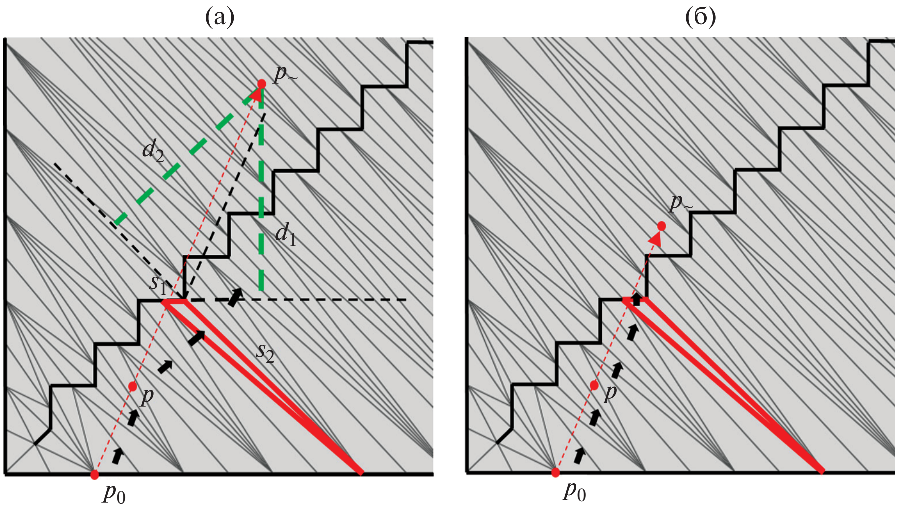


Фиг. 11. MSM, встроенная в DCDT.



Фиг. 12. Создание сетки пограничного слоя с помощью EJW для обнаружения столкновений: (а) – построение CDT граничных точек, (б) – обнаружение столкновения сеток с помощью EJW-A, (в) – обнаружение столкновения сетки с помощью EJW-B, (г) – построение сеток пограничного слоя, (д) – заполнение изотропных сеток в оставшейся области.

Пусть p – фронтальная точка, которая может создать точку обрыва в следующем слое, p_0 – начальная точка p на границе, а q – целевая точка $(d_i + d_{\text{meshsize}})$, удаленная от p по вектору марша, что достаточно безопасно, так как ошибка построения MSM близка к $0.5d_{\text{meshsize}}$. Максимальные



Фиг. 13. Jump-and-Walk на основе различных объективных функций: (а) – поиск барицентрических координат, (б) – тест на пересечение сегмента с гранью.

маршевые расстояния всех фронтальных точек были оценены в начале с помощью алгоритма 3.1 (часть A метода EJW). Если расстояние от p_0 до p меньше максимального маршевого расстояния, то выполняется двухшаговая схема для проверки безопасности следующего продвижения p. Как показано на фиг. 13, первый шаг от p_0 до p – это определение тетраэдра, в котором находится p, а второй шаг от p до q – это оценка того, пересекается ли путь ходьбы с MSM. Особенности изображены в алгоритме 4.2 (часть B метода EJW).

Algorithm 3. Часть B EJW

Require: DCDT и его топологическая структура данных со сложностью запроса $O(1)$; начальная точка $p_0 \in T$, фронтальная точка p; целевая точка q; функция цели: *тест на пересечение сегмента и грани*.

Ensure: Результат, является ли продвижение p безопасным.

Первое продвижение: $p_0 \to p$.

Инициализируем случайный тетраэдр $\sigma_0 \in$ DCDT с p_0 в качестве одной из вершин.

$\sigma \leftarrow \sigma_0$.

while do $n < n_{\max}$

Определите грань τ из σ с объективной функцией:

- Если не выбрано ни одной грани τ, то p находится внутри σ. Выход.
- Если $\tau \in$ MSM и включен безопасный режим (по умолчанию выключен), то продвижение опасно. Возврат.
- Если τ выбрано и σ_{neigh} может быть получена, продвижение продолжается.

Перейти через τ к σ_{neigh}.

$\sigma \leftarrow \sigma_{\text{neigh}}$.

$n = n + 1$.

end while

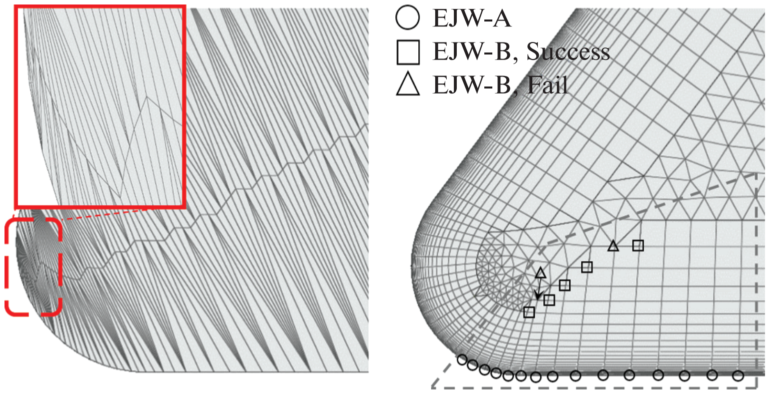
Второе продвижение: $p \to q$.

Выберите σ в качестве начального тетраэдра.

while do $n < n_{\max}$

Определите грань τ из σ с помощью объективной функции:

- Если не выбрано ни одной грани τ, то продвижение безопасно. Возврат.



Фиг. 14. DCDT и созданные на его основе сетки пограничного слоя.

• Если $\tau \in$ MSM или T, то продвижение опасно. Возврат.

• Если τ выбрано и σ_{neigh} может быть получена, то продвижение продолжается.

Перейти через τ к σ_{neigh}.

$\sigma \leftarrow \sigma_{\text{neigh}}$.

$n = n + 1$.

end while

В части В EJW поиск барицентрических координат не применим в качестве объективной функции, поскольку MSM как стенка имеет зубчатую форму. Как показано на фиг. 13а, d_1 приблизительно равен d_2, так что объем $(d_1 \times s_1)$ намного меньше объема $(d_2 \times s_2)$ и s_2 будет выбран в соответствии с правилом. Поэтому вместо этого используется точный тест на пересечение сегментов, как показано на фиг. 13б.

Если p прекратит маршировать, то точки на его соседях в следующем слое станут точками обрыва. Поэтому его соседи также будут проверяться, пока все точки не пройдут этот тест. Если p_0 является точкой особенности, то p не будет проверяться, так как MSM простирается до точки особенности. Как показано на фиг. 14, приемлемое количество граничных слоев генерируется даже вблизи изогнутой поверхности.

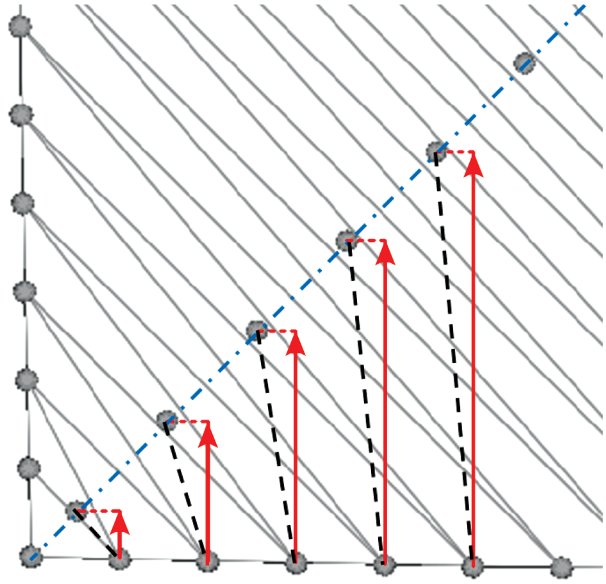
4.3. Затраты по времени

Пусть n – количество фронтальных точек на границе, EJW-A будет обрабатывать n точек, а EJW-B только εn точек; ε меньше 1, так как EJW-B может проверить только фронтальные точки верхнего слоя в узкой области. Как показано в пунктирной рамке на фиг. 14, мы отметили все проверенные точки. Всего операция обнаружения столкновений будет выполняться $(1 + \varepsilon)n$ раз. Поскольку метод JW требует ожидаемого времени $O(n^{1/4})$ для каждого запроса, сложность предлагаемого метода составляет $O(n^{5/4})$.

5. МЕТОД Advancing Divided-Layer (AdvDL)

Вычисление направления и расстояния марша, а также проверка правильности новых призм занимают много времени при продвижении пограничных слоев. Пусть число границ равно n_s и число слоев равно n, общее время вычислений составляет $n_s \times n$. Однако большая часть вязкой стенки является открытой и плоской, границы имеют достаточно пространства для перехода к n^{th}-слою напрямую, не беспокоясь о пересекающихся сетках или других вычислениях.

Ванг и соавт. (см. [12]) предложили стратегию разделения границы внешнего слоя (OLB) для разделения граничной поверхности на открытую поверхность и узкую поверхность в соответствии с тестом пересечения сеток, который ускоряется альтернативным цифровым деревом



Фиг. 15. Расстояния от граничных дискретных точек до MSP.

(см. [13]), которое по сути является k-м деревом со средней сложностью построения $O(n\log n)$ и сложностью запроса $O(\log n)$ для каждого объекта. Поэтому общее количество вычислений марша и проверки элементов может быть сокращено до $(n_s + \varepsilon(n_s \times n))$, где ε зависит от доли узкозонных границ и геометрической сложности.

В данной работе для замены цифрового дерева используется алгоритм прогнозирования пространства на основе MSP с временной сложностью $O(1)$. Хаббард и соавт. (см. [30]) представили аналогичную работу по аппроксимации многогранника максимальными сферами для обнаружения столкновений, критичных по времени. Одним из преимуществ является то, что генерация MSP и вычисление расстояния имеют линейную сложность, и наиболее трудоемкая часть, т.е. построение CDT, может быть опущена, поскольку CDT уже сгенерирован для EJW. Метод, описанный в этом разделе, называется Advancing Divided-Layer (AdvDL), который также был представлен Као и др. (см. [39]).

5.1. Мера пространства по MSP

Для дискретной точки p на границе существует несколько тетраэдров, соединенных с ней в CDT. Как показано на фиг. 15, мы вычисляем проективные расстояния между p и окружностями тетраэдров на нормаль к ее поверхности, и берем наименьшее значение $d_{\min}$ в качестве размера пространства в текущей позиции. Точность аппроксимации обратно пропорциональна размеру поверхностной сетки.

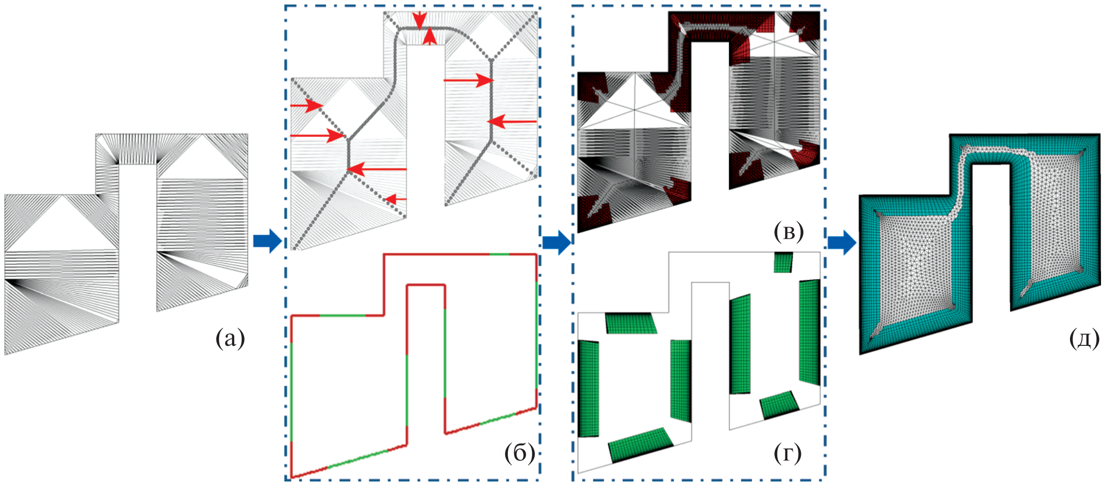
Если общая толщина слоя

$$d_{\text{all}} > d_{\min} r_{\text{gap}}, \tag{8}$$

p классифицируется как точка узкой области, где r_{gap} – коэффициент сжатия расстояния, который меньше 1. Больший r_{gap} может обеспечить более эффективный процесс продвижения. В данной работе r_{gap} составляет 0.4 для расширения узкой области и достижения лучшего сглаживания направлений и расстояний марша.

5.2. Продвижение фронтальных граней

Все фронтальные грани изначально классифицируются как грани с открытой областью. Если p является узкозональной точкой, то фронтальные грани, соединенные с p, будут рассматриваться как узкозональные грани. Как показано на фиг. 16, грани с открытой областью будут двигаться вдоль фиксированного направления и быстро создавать n слоев за один раз, в то время как



Фиг. 16. Создание сетки пограничного слоя с использованием AdvDL для разделения границ: (а) – построение CDT граничных точек, (б) – определение геометрического пространства и разбиение граничных фронтальных граней, (в) – построение сеток пограничного слоя на узких границах с помощью процедуры послойного продвижения, (г) – генерация сеток пограничного слоя на границах открытых областей с помощью процедуры быстрого продвижения, (д) – заполнение изотропных сеток в оставшейся области.

грани с узкой областью будут следовать обычной процедуре послойного продвижения. Проверка пересечения сетки выполняется, когда текущее общее расстояние марша превышает $d_{\min}r_{\text{gap}}$.

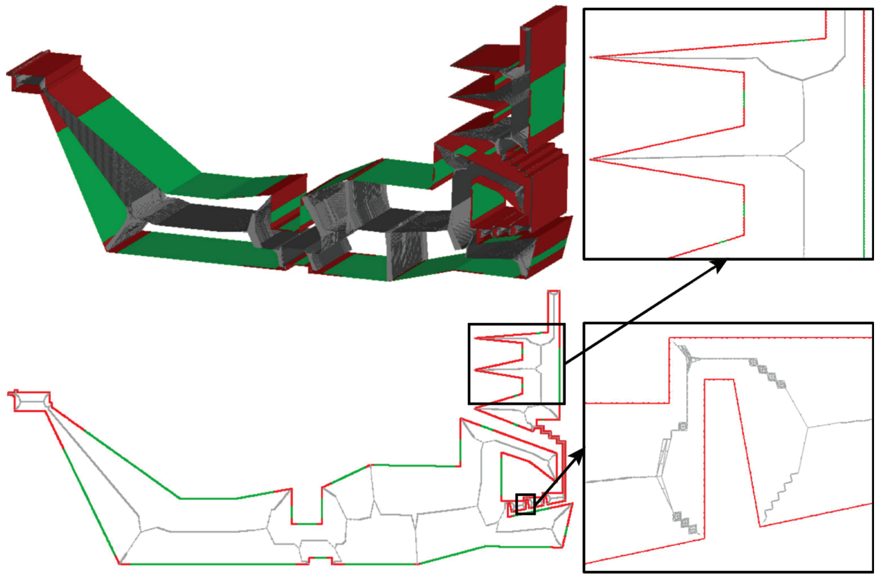
6. ПРИМЕРЫ РАБОТЫ И ПРОМЫШЛЕННОЕ ПРИМЕНЕНИЕ

Для оценки эффективности предложенного метода из нашей библиотеки моделей выбраны три образца моделей, а именно: 3D-полость (Cav), канал охлаждения при натекании (ICC) и самолет F16. 3D-Cavity построена путем модификации и выдавливания двумерной полости под камерой сгорания газотурбинного двигателя, которая имеет сложную форму, но без каких-либо криволинейных особенностей в качестве базового объекта для тестирования производительности; ICC – это обычная модель внутреннего потока, содержащая периодические поверхности и гладкие углы, а F16 – это сложная модель самолета с внешним потоком и множеством сложных геометрических особенностей. Все тесты для этих моделей проводились на одном ядре процессора Intel Core i7-8850H с 16 ГБ оперативной памяти.

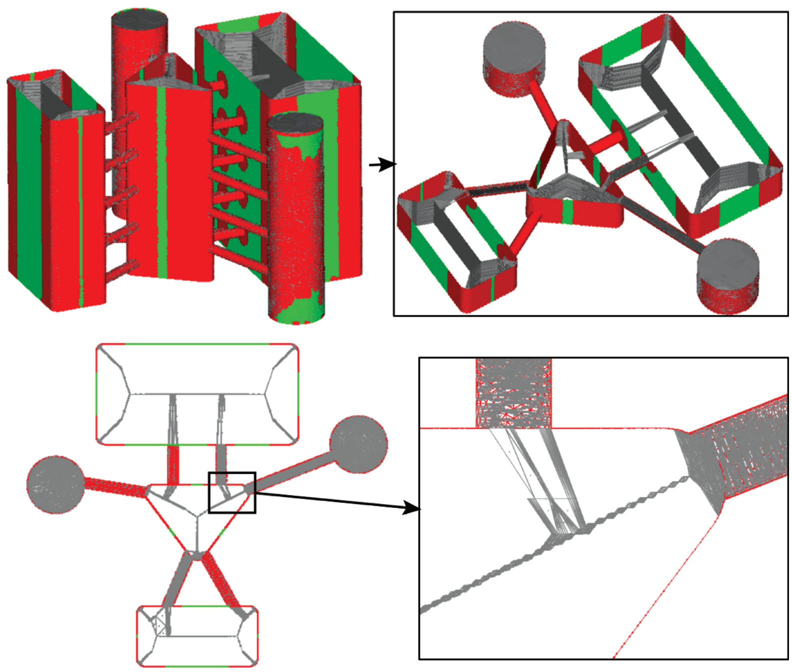
6.1. MSM

MSM извлекается из DCDT, чтобы проиллюстрировать, может ли предложенный метод приближенного представления эффективно захватывать геометрические особенности и разделять область потока. Для удобства изучения поверхностные сетки в открытых областях отмечены зеленым цветом, а остальные – красным, в соответствии с результатом, полученным методом AdvDL. Для модели Cav, показанной на фиг. 17, местоположение MSM соответствует реальной медиальной поверхности в целом, а геометрические особенности, включая маленькие углы и узкие зазоры, были идентифицированы. На фиг. 18 показан MSM в модели ICC и его вид в разрезе. Хотя MSM агломерирована вблизи периодических поверхностей и сглаженных углов, сетки пограничного слоя все еще могут быть построены с достаточным количеством слоев, потому что точки обрыва, как правило, находятся далеко от криволинейных поверхностей благодаря сглаживанию направлений маршей. На фиг. 19 показан разрез DCDT вне модели самолета. Локус MSM в DCDT виден на увеличенных изображениях.

Поскольку максимальное маршевое расстояние передней точки, вычисленное методом обнаружения столкновений на основе MSM, является грубой величиной, герметичность MSM между соседними подобластями более важна, чем точность аппроксимации. Поэтому не существует прямых фильтров для граней, составляющих MSM. К счастью, две косвенные меры могут улучшить результаты обнаружения столкновений. Во-первых, проверяемые фронтальные точки в основном распределяются в узкой области с помощью метода AdvDL, что означает, что только



Фиг. 17. MSM, извлеченная из DCDT Cav.

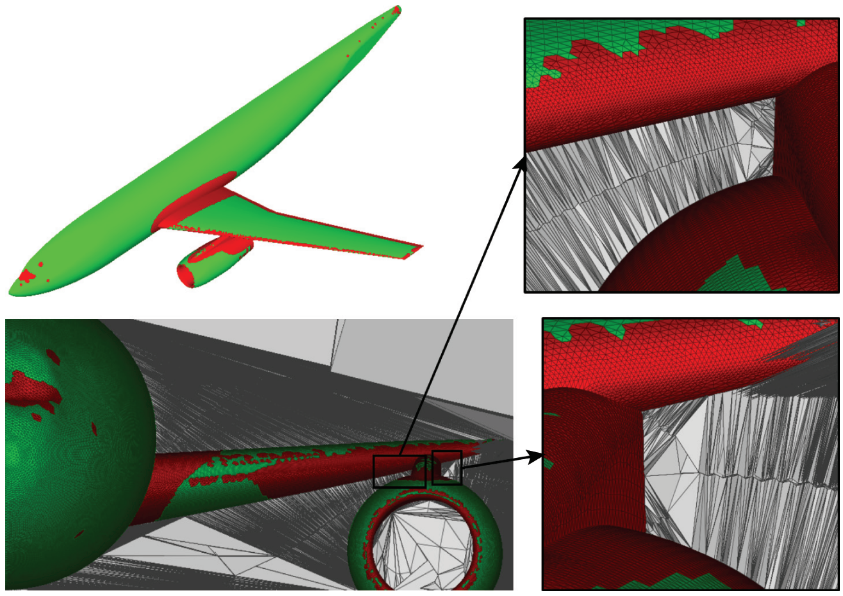


Фиг. 18. MSM, извлеченная из DCDT ICC.

часть MSM, расположенная в узкой области, играет роль в алгоритме. Во-вторых, метод обнаружения столкновений проверяет только родительскую точку точки обрыва, которая обычно находится далеко от поверхности кривой.

6.2. Гибридная сетка

Гибридные сетки были созданы с помощью предложенного метода для этих моделей, а статистика данных приведена в табл. 1. На фиг. 20а показан весь вид гибридной сетки в модели Cav. На фиг. 20б показана сетка пограничного слоя в непрерывных узких каналах на локально увеличенных снимках, где размер элемента на несколько порядков меньше, чем у всей модели. Сетки



Фиг. 19. MSM, извлеченная из DCDT самолета.

вокруг углов 10°, 20°, 40° и 90° также показаны на фиг. 20в. Видно, что алгоритм эффективно избегает как глобальных, так и локальных пересечений сетки.

В модели ICC имеется много тонких охлаждающих трубок, соединенных с основными каналами, и глобальная, и частичная гибридные сетки показаны на фиг. 21. На фиг. 21б, в показано, что вокруг периодической поверхности и изогнутого угла может быть создано достаточно слоев призматических сеток.

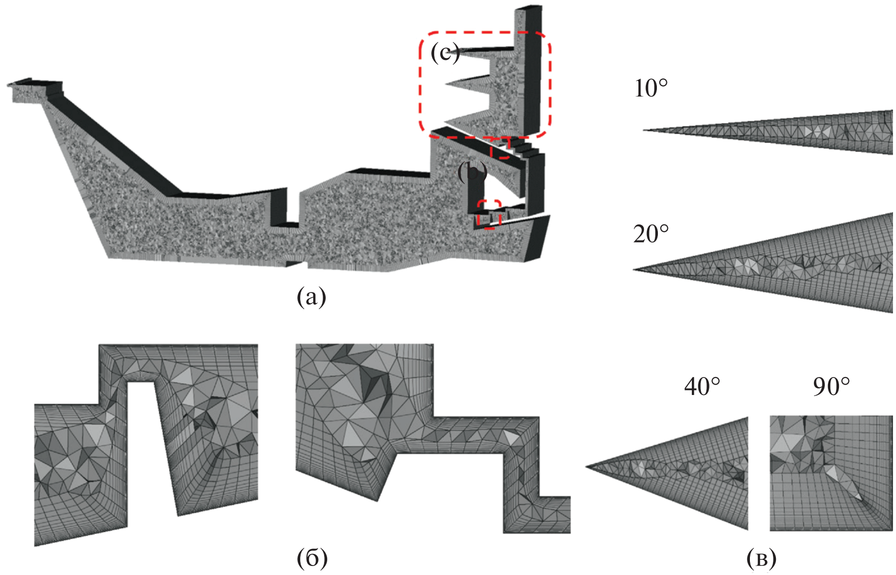
На фиг. 22а показан вид спереди гибридной сетки вне модели самолета. Видно, что форма самолета гладкая, непрерывная и нерегулярная, что значительно увеличивает сложность обнаружения столкновений сеток. На фиг. 22б, в показаны сетки в двух узких областях, где переход толщины пограничного слоя плавный, и всегда сохраняется четкое расстояние между призматическими сетками.

6.3. Эффективность построения сеток пограничного слоя

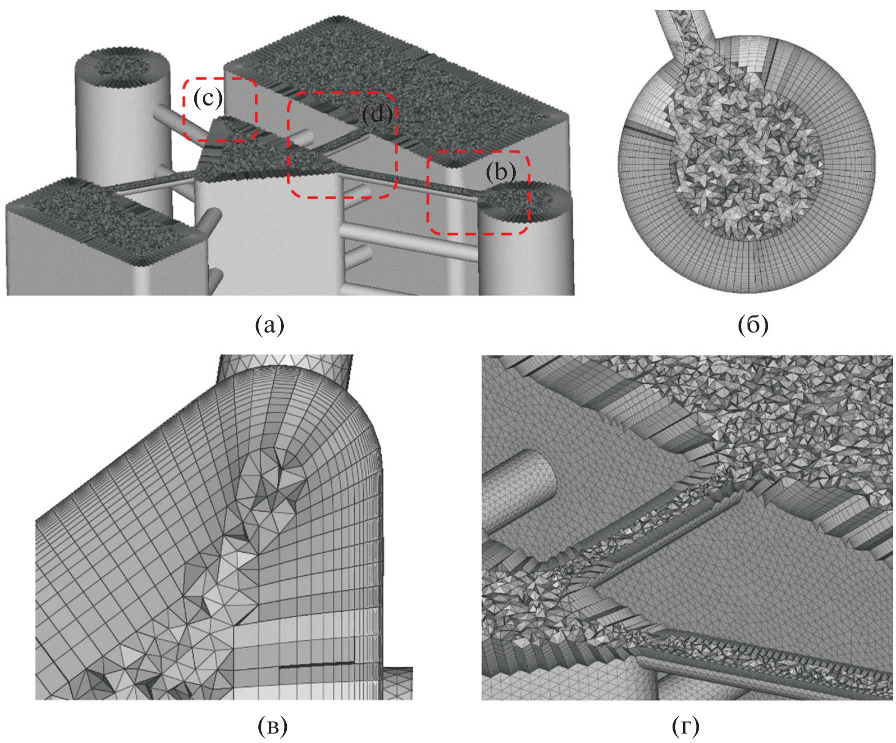
Чтобы продемонстрировать эффективность предложенного метода для обнаружения пересечений сетки и продвижения пограничного слоя, было проведено сравнение с популярной коммерческой программой Pointwise (PW) для вязкого построения гибридных сеток с одинаковой поверхностной сеткой и параметрами пользователя. В Pointwise используется метод T-Rex для послойного создания анизотропных тетраэдральных элементов и их послойного объединения в призматические сетки (см. [40], [41]), а остальная часть области заполняется изотропными элементами с помощью генератора сеток на основе сетки Делоне. В этой программе определение

Таблица 1. Статистика для гибридной сетки

Модели	Методы	NT	Prism	Pyramid	Tet.	Всего
Cav	Наш	762k	13.3M	59k	8.8M	22.2M
	PW	762k	13.8M	76k	9.4M	23.2M
ICC	Наш	304k	6.1M	34k	2.9M	9.1M
	PW	304k	6.3M	42k	2.8M	9.1M
Самолет	Наш	299k	8.8M	59k	2.1M	10.9M
	PW	299k	9.3M	49k	1.9M	11.3M



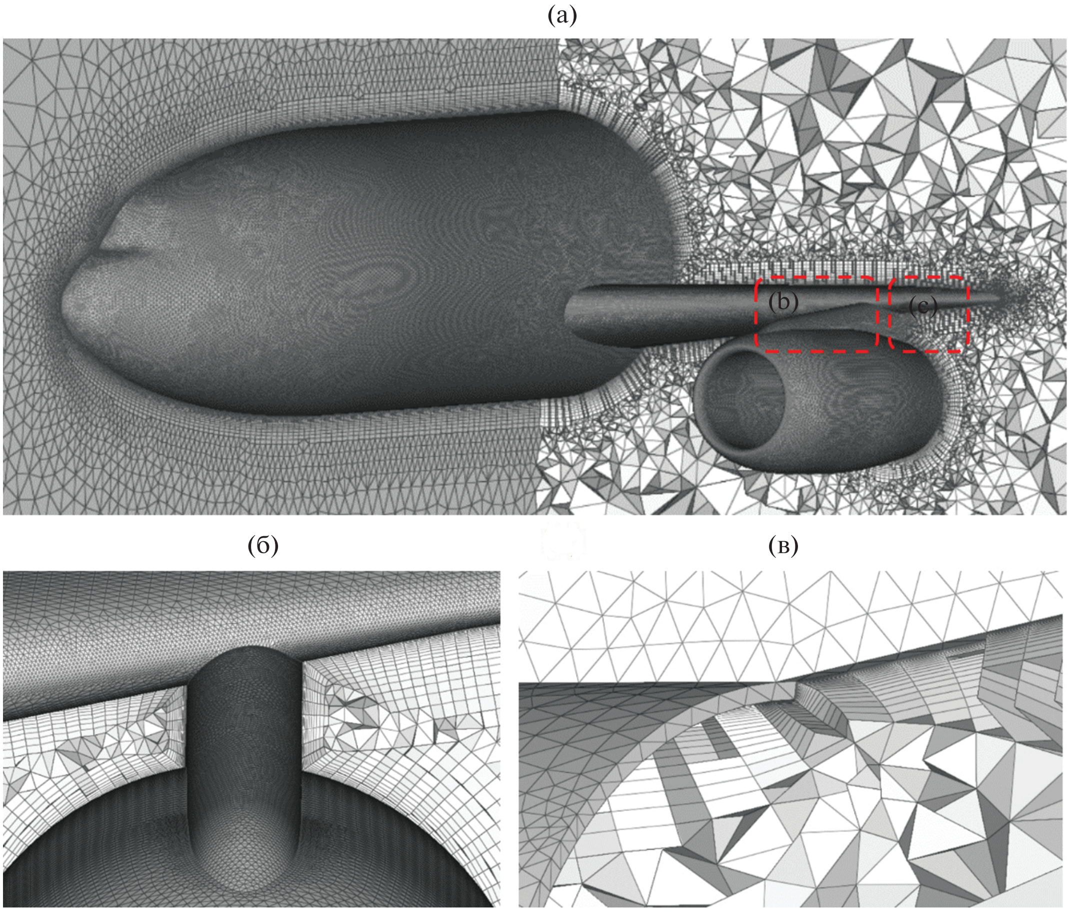
Фиг. 20. Гибридная сетка Cav в различных областях: (а) – вид в разрезе, (б) – непрерывные узкие каналы, (в) – углы 10°, 20°, 40° и 90°.



Фиг. 21. Гибридная сетка ICC в различных областях: (а) – вид в разрезе, (б) – периодическая поверхность, (в) – изогнутый угол, (г) – место соединения тонких охлаждающих трубок и основных каналов.

самопересечения в сетке передней поверхности во время непрерывной локальной модификации сетки ускоряется с помощью выровненного по оси дерева разбиения двоичного пространства.

В табл. 2 приведены статистика элементов сетки и время построения сеток для модели с различным количеством элементов поверхностной сетки (NT) или скоростью роста толщины слоя (r) и одинаковыми другими параметрами пользователя. Около 30% открытых граней внут-



Фиг. 22. Гибридная сетка самолета в различных областях: (а) – вид спереди на двигатель, (б) – вид двигателя сзади, (в) – увеличенный фрагмент возле кромки крыла.

ренних моделей быстро продвигаются методом AdvDL, а коэффициент (δ) аналога для модели F16 составляет около 70%. Более того, затраты метода AdvDL чрезвычайно малы за счет совместного использования CDT и метода EJW. Более желательная эффективность построения сетки наблюдается в результате, полученном нашим алгоритмом. Скорость построения сетки из призматических элементов с помощью предложенного алгоритма может поддерживать около 100k/c в различных случаях, что в $3 \sim 4$ раза быстрее, чем у Pointwise. Когда количество поверхностных сеток меньше 100k, повышение эффективности может быть необязательным, так как временные затраты на построение гибридной сетки Pointwise могут быть меньше 100с. Более того, точность аппроксимации MSM обратно пропорциональна размеру граничного элемента, что означает, что предложенный алгоритм может получить лучшие результаты для крупномасштабных задач.

6.4. Сравнение методов JW и EJW

Как показано в разделе о методе EJW, как EJW-A, так и EJW-B состоят из двух частей: построение фоновой сетки (т.е. CDT/DCDT) и расчет максимального маршевого расстояния (MMD). В табл. 3 приведено распределение времени, затрачиваемого на использование метода EJW для коррекции пересечений сетки в различных случаях. Затраты времени на CDT соотносятся с геометрической сложностью, размером поверхностной сетки и производительностью генератора тетраэдральной сетки. Скорость триангуляции граничных точек составляет около 60k/c и 40k/c для моделей внутреннего и внешнего потока соответственно. Это немного быстрее, чем шаг декомпозиции CDT, где определение типов элементов и обновление топологии занимают больше всего времени, но много времени можно сэкономить, используя информацию о топологии CDT. Фильтр передних точек для вычисления MMD может быть построен методом AdvDL за несколько секунд. Пусть количество фронтальных точек на границе равно n_0, а доля граней с открытой

Таблица 2. Сравнение эффективности построения сеток

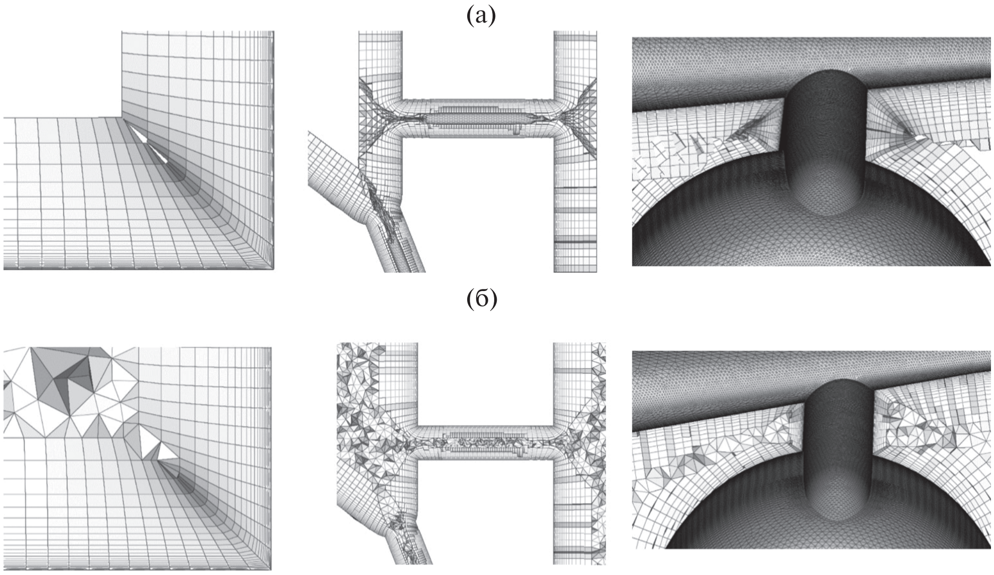
Модели	Методы	NT	r	Partitioning		Prism		Всего	
				δ	Время, с	Количество	Время, с	Количество	Время, с
Cav	Наш	183k	1.2	35%	0.2	3.2M	27.2	5.0M	35.5
		351k	1.2	37%	0.3	6.0M	55.8	9.8M	72.2
		762k	1.2	40%	0.7	13.3M	137.1	22.2M	178.9
		1125k	1.2	41%	1.1	19.7M	217.6	37.4M	330.3
	PW	183k	1.2	–	–	3.4M	140.5	5.1M	156
		351k	1.2	–	–	6.3M	227.3	9.9M	260
		762k	1.2	–	–	13.8M	564.3	23.2M	649
		1125k	1.2	–	–	19.9M	681.7	39.1M	872
ICC	Наш	304k	1.3	31%	0.5	4.4M	62.0	7.7M	77.3
		304k	1.2	24%	0.5	6.1M	77.0	9.1M	91.8
		304k	1.08	22%	0.5	11.3M	116.7	14.4M	130.7
		304k	1.03	21%	0.5	19.0M	180.8	22.5M	203.0
	PW	304k	1.3	–	–	4.5M	147.4	7.4M	203
		304k	1.2	–	–	6.3M	199.2	9.1M	253
		304k	1.08	–	–	11.7M	344.6	14.5M	399
		304k	1.03	–	–	22.0M	670.7	25.1M	726
Самолет	Наш	299k	1.2	65%	0.4	8.8M	65.5	10.9M	81.0
		1016k	1.2	72%	1.4	29.7M	304.7	36.2M	325.7
	PW	299k	1.2	–	–	9.3M	239.9	11.3M	288
		1016k	1.2	–	–	29.3M	1185.0	35.7M	1341

Таблица 3. Время выполнения метода EJW

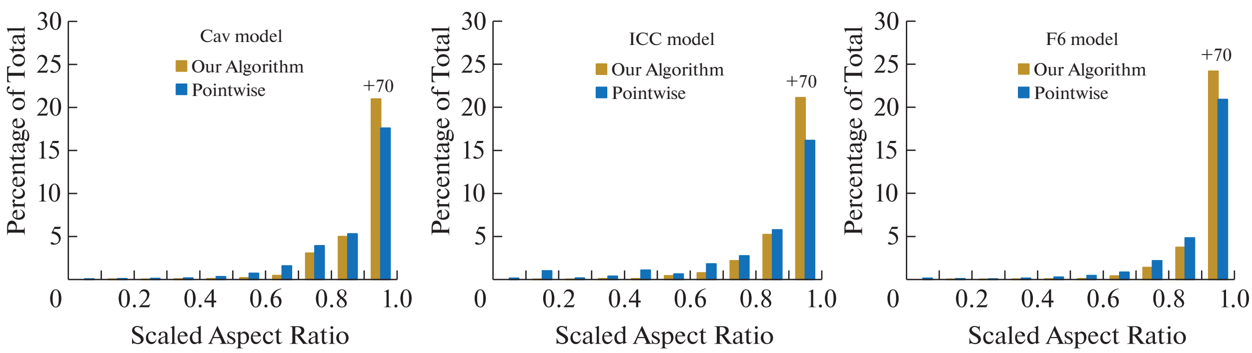
Модели	NT	r	Часть A, с		Часть B, с		Без B (T/F)	С B (T/F)
			CDT	MMD	DCDT	MMD		
Cav	183k	1.2	3.2	2.3	4.2	0.5	T	T
	351k	1.2	6.5	9.2	8.3	1.5	T	T
	762k	1.2	13.7	16.3	23.8	4.0	F	T
	1125k	1.2	23.3	34.7	41.7	5.4	F	T
ICC	304k	1.03	9.6	7.8	13.4	4.4	T	T
	304k	1.08	9.2	7.6	12.8	2.0	T	T
	304k	1.2	9.1	7.9	13.0	1.9	F	T
	304k	1.3	8.9	7.5	12.7	1.2	F	T
Самолет	299k	1.2	11.7	6.3	12.9	2.6	F	T
	1016k	1.2	91.8	34.8	43.9	4.7	F	T

областью равна δ, количество точек, проверяемых EJW-A, составляет около $(1-\delta)n_0$ и εn_0 ($\varepsilon < 1-\delta$) точки проверяются EJW-B. Таким образом, время вычисления MMD для EJW-A больше, чем для EJW-B, но их временные сложности составляют $O(n^{1/4})$ для каждого запроса, где n – количество точек в фоновой сетке, и нечувствительны к количеству слоев, относящихся к данным для модели ICC.

Если в алгоритме не выполняется часть B метода EJW, то он эквивалентен методу JW. Полный список результатов тестирования пересечения сетки без части B и с частью B можно посмотреть



Фиг. 23. Сравнение двух методов удаления пересечений: (а) – JW, (б) – EJW.

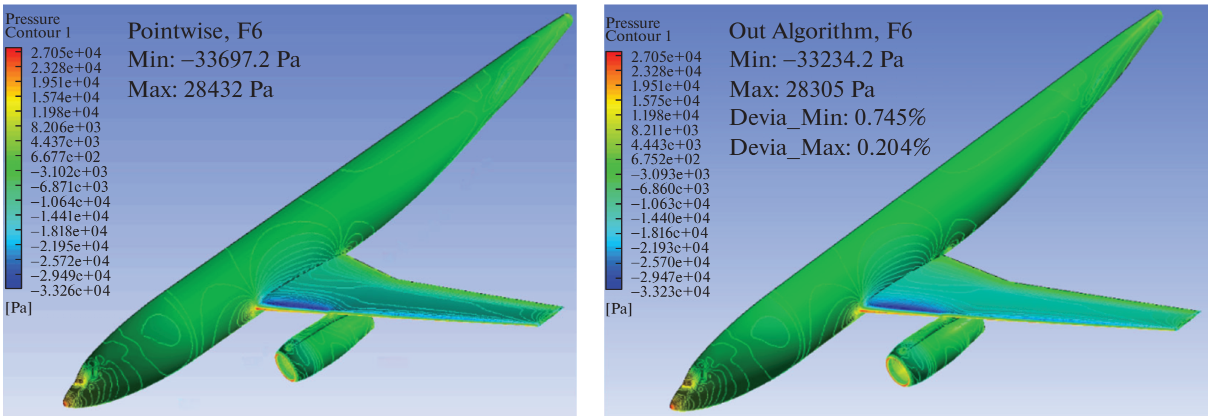


Фиг. 24. Распределение качества призматических элементов.

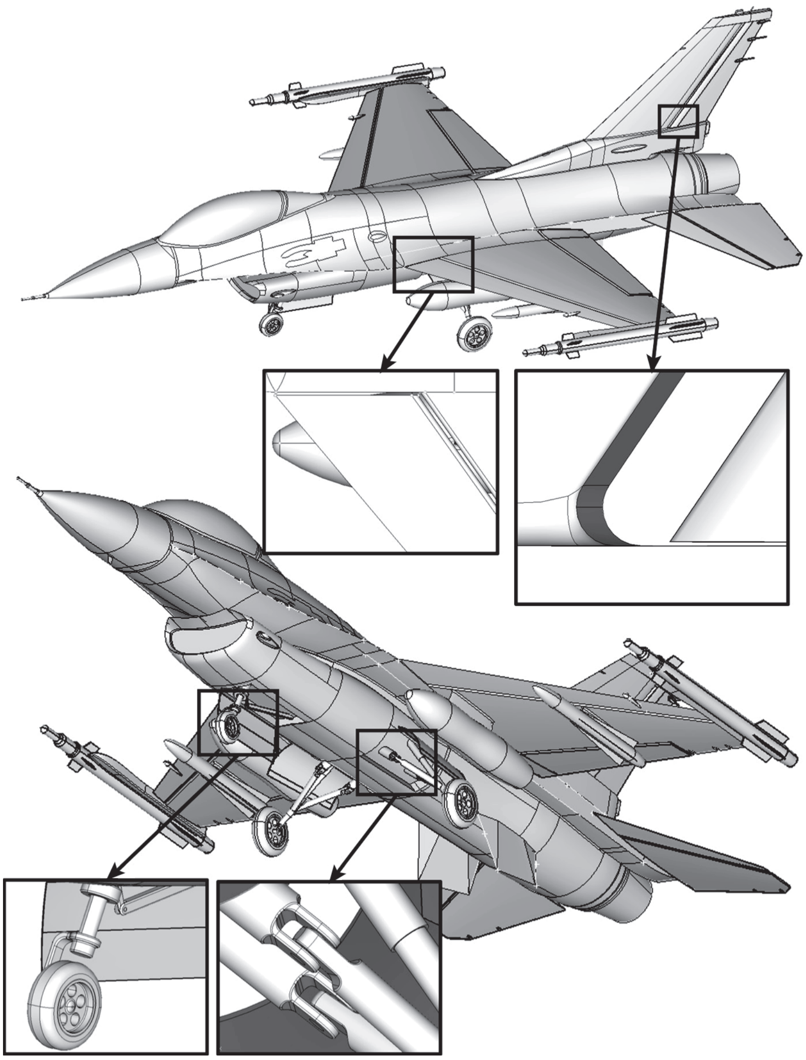
в последних двух колонках табл. 3. Видно, что JW не прошел тест на пересечение, когда количество элементов поверхности или скорость роста увеличивается. На фиг. 23 показаны некоторые виды сетки пограничного слоя с удалением пересечений с помощью JW и EJW в тех же позициях. В результатах JW, пересекающиеся или почти пересекающиеся сетки все еще существуют и в основном появляются в местах, показанных на фиг. 7, что указывает на то, что улучшенный метод является более надежным и может дать достоверный результат при различных условиях.

6.5. Качество

Для оценки качества сеток пограничного слоя, построенных предложенным методом, в данном исследовании использовалась мера качества масштабированного отношения сторон, упомянутая в разделе проверки правильности сеток, и было проведено сравнение с коммерческим программным обеспечением Pointwise. Статистика призматических элементов, полученных предложенным методом и Pointwise, приведена в табл. 1, а распределения качества построены на фиг. 24, где коэффициенты в диапазоне 0.9–1.0 были сокращены на 0.7 для удобства исследования. Призматические элементы с $\rho < 0$ являются инвертированными элементами, которые не допускаются в данном исследовании, и мы называем элементы с $\rho < 0.3$ низкокачественными элементами. Отношение низкокачественных элементов, сгенерированных Pointwise, составляет 0.292, 1.351 и 0.324% соответственно, в то время как отношение аналогов, сгенерированных предложенным методом, составляет всего 0.083, 0.002 и 0.023%. Более того, коэффициенты

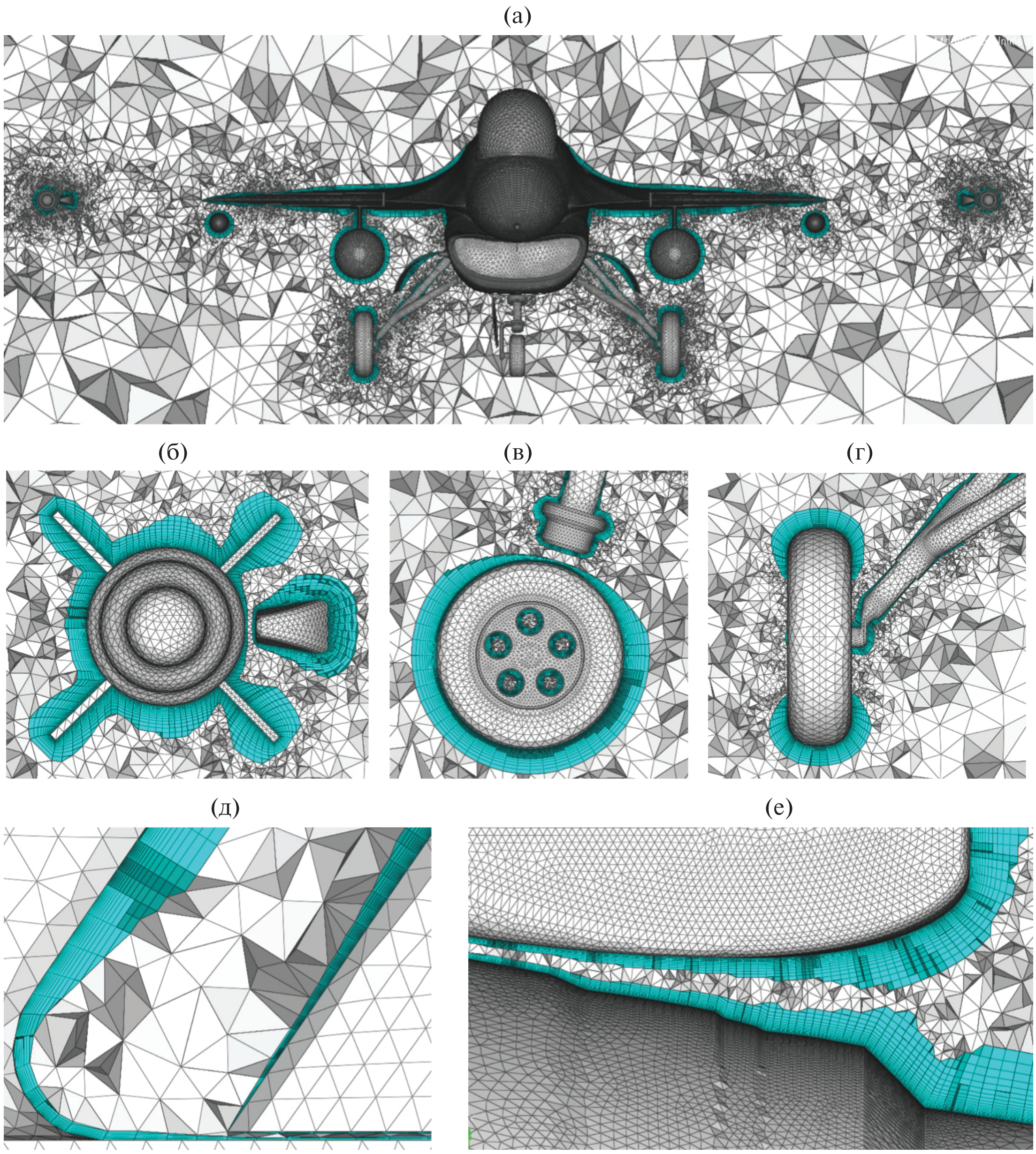


Фиг. 25. Сравнение вычисленных распределений давления.



Фиг. 26. Конфигурация самолета с большим количеством узких щелей и сложных конструкций.

призматических элементов с $\rho > 0.9$, полученных методом Pointwise, были ниже, чем предложенный метод. Это показывает, что в целом элементы, созданные нашим алгоритмом, имеют более желательное распределение, чем элементы, созданные методом Pointwise.



Фиг. 27. Гибридная сетка самолета в различных областях: (а) – вид гибридной сетки спереди в разрезе, (б) – комбинация пилона и ракеты, (в) – переднее шасси, (г) – заднее шасси, (д) – между вертикальным оперением и рулем высоты, (е) – верхняя сторона сопла самолета.

Для проверки достоверности и точности вычислений сгенерированной гибридной сетки было проведено моделирование вязкого течения в модели самолета с помощью коммерческого программного обеспечения Fluent. Вычислительная модель была задана как *SST k-omega*, $Mach = 0.6$, и *угол атаки* $\alpha = 0$. Для сравнения, мы также провели эксперимент по моделированию с теми же параметрами пользователя, используя сетки, сгенерированные Pointwise. На фиг. 25 представлены контурные графики вычисленного распределения давления на основе сеток Pointwise и предложенного алгоритма. Видно, что контур давления в нашем результате очень хорошо согласуется с контуром Pointwise. Отклонения минимального и максимального давления на поверхности самолета составляют 0.745 и 0.204% соответственно.

6.6. Надежность

Истребитель в состоянии посадки с полной загрузкой ракет был использован в качестве экстремального теста для демонстрации надежности предложенного метода. Как показано на фиг. 26, эта модель содержит десятки частей и почти охватывает все общие геометрические структуры самолетов, такие как комбинация крыло—корпус, трехэлементное аэродинамическое крыло, комбинация пилон—стойка, шасси и т.д., что является огромной проблемой для предложенного алгоритма. На фиг. 27а показан вид гибридной сетки в разрезе спереди. С 1147k поверхностных элементов в качестве входных данных, 22.2M призмы, 324k пирамиды и 8.7M тетраэдры были сгенерированы с процессорным временем 523.5с. На фиг. 27б показаны сетки в узком зазоре бокового пилона-ракеты, который имеет довольно жесткие требования к алгоритму определения расстояния, так как находится вблизи сложных передних и задних шасси, показанных на фиг. 27в, г. Гибридные сетки в областях с большим переходом размеров показаны на фиг. 27д, е, где количество пограничных слоев постепенно увеличивается, а пересечения сетки эффективно удаляются.

7. ВЫВОДЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В данной работе был разработан метод JW, опирающийся только на CDT без дополнительных сложных структур данных. Он применяется для обнаружения столкновений призматических сеток с акцентом на приложениях для внутренних потоков. Благодаря введению медиальной поверхностной стенки в фоновую сетку, сетки хорошего качества последовательно создаются для сложных моделей внешнего потока. Кроме того, для ускорения работы алгоритма при небольших затратах предлагается метод AdvDL. Для демонстрации эффективности предложенного метода было обработано несколько сложных геометрий с большим количеством особенностей.

В случаях, когда одна единственная нормаль не может обеспечить достоверность конуса видимости, в алгоритм без особых трудностей может быть введена многонормальная стратегия. Предложенный алгоритм принимает треугольную сетку в качестве входных данных и строит призматическую/тетраэдральную гибридную сетку. Четырехугольные сетки также могут быть обработаны путем разбиения каждого элемента на два треугольных элемента. После генерации сетки исходная четырехугольная сетка может быть получена путем слияния каждой пары треугольных элементов и соответствующих призм.

Кроме того, был разработан метод выделения поверхности среды с помощью CDT. Однако, несмотря на его эффективность, дальнейшие исследования все еще заслуживают улучшения точности аппроксимации поверхности среды для сложных геометрий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kallinderis Y., Khawaja A., McMorris H.* Hybrid prismatic/tetrahedral grid generation for viscous flows around complex geometries // AIAA J. 1996. V. 34. № 2. P. 291—298.
2. *Kallinderis Y., Ward S.* Prismatic grid generation for three-dimensional complex geometries // AIAA J. 1993. V. 31. № 10. P. 1850—1856.
3. *Zheng Y., Xiao Z., Chen J., Zhang J.* Novel methodology for viscous-layer meshing by the boundary element method // AIAA J. 2018. V. 56. № 1. P. 209—221.
4. *Liu Y., Lo S.H., Guan Z.Q., Zhang H.W.* Boundary recovery for 3d delaunay triangulation // Finite Element. Analys. Design. 2014. V. 84. P. 32—43.
5. *Lo S.H.* 3d delaunay triangulation of non-uniform point distributions // Finite Element. Analys. Design. 2014. V. 90. P. 113—130.
6. *Loehner R.* Matching semi-structured and unstructured grids for navier-stokes calculations // 11th Comput. Fluid Dynam. Conf. AIAA. 1993. P. 555—564.
7. *Si H.* Tetgen, a delaunay-based quality tetrahedral mesh generator // ACM Trans. Math. Softw. 2015. V. 41. № 2. Article 11.
8. *Yu F., Zeng Y., Guan Z.Q., Lo S.H.* A robust delaunay-aft based parallel method for the generation of large-scale fully constrained meshes // Comput. Structur. 2020. V. 228. P. 106170.
9. *Pirzadeh S.* Unstructured viscous grid generation by the advancing-layers method // AIAA J. 1994. V. 32. № 8. P. 1735—1737.
10. *Garimella R.V., Shephard M.S.* Boundary layer mesh generation for viscous flow simulations // Inter. J. Numer. Meth. Engineer. 2000. V. 49. № 1. P. 193—218.
11. *Tomac M., Eller D.* Towards automated hybrid-prismatic mesh generation // Procedia Engineer. 2014. V. 82. P. 377—389.
12. *Wang Z., Quintanal J., Corral R.* Accelerating advancing layer viscous mesh generation for 3d complex configurations // Computer-Aided Design. 2019. V. 112. P. 35—46.

13. *Bonet J., Peraire J.* An alternating digital tree (adt) algorithm for 3d geometric searching and intersection problems // Inter. J. Numerical Meth. Engineer. 1991. V. 31. № 1. P. 1–17.
14. *Alauzet F., Marcum D.* A closed advancing-layer method with changing topology mesh movement for viscous mesh generation // Proceed. of the 22th Inter. Mesh. Roundtable. Springer. 2014. P. 241–261.
15. *Bottasso C.L., Detomi D.* A procedure for tetrahedral boundary layer mesh generation // Engineer. Comput. 2002. V. 18. № 1. P. 66–79.
16. *Dyedov V., Einstein D.R., Jiao X., Kuprat A.P., Carson J.P.* Variational generation of prismatic boundary-layer meshes for biomedical computing // Inter. J. Numer. Meth. Engineer. 2009. V. 79. № 8. P. 907–945.
17. *Ito Y., Nakahashi K.* Improvements in the reliability and quality of unstructured hybrid mesh generation // Inter. J. Numer. Meth. Fluid. 2004. V. 45. № 1. P. 79–108.
18. *Wang F., Mare L.D.* Hybrid meshing using constrained delaunay triangulation for viscous flow simulations // Inter. J. Numer. Meth. Engineer. 2016. V. 108. № 13. P. 1667–1685.
19. *Ye H., Liu Y., Chen B., Liu Z., Zheng J., Pang Y., Chen J.* Hybrid grid generation for viscous flow simulations in complex geometries // Adv. Aerodynamic. 2020. V. 2. № 1. P. 1–18.
20. *Lo S.H.* A new mesh generation scheme for arbitrary planar domains // Inter. J. Numer. Meth. Engineer. 1985. V. 21. № 8. P. 1403–1426.
21. *Cai S., Tautges T.J.* Surface mesh generation based on imprinting of s-t edge patches // Procedia Engineer. 2014. V. 82. P. 325–337.
22. *Arya S., Mount D.* Approximate nearest neighbor queries in fixed dimensions // Proceed. 4th Ann. ACM-SIAM Symp. Discrete Algorithm. Soc. Industr. Appl. Math. 1993. P. 271–280.
23. *Murphy M., Skiena S.* Ranger: a tool for nearest neighbor search in high dimensions // Proceed. 9th Ann. Symp. Comput. Geometry. ACM. 1993. P. 403–404.
24. *Borouchaki H., Lo S.H.* Fast delaunay triangulation in three dimensions // Comput. Meth. Appl. Mech. Engineer. 1995. V. 128. P. 153–167.
25. *Guibas L.J., Stolfi J.* Primitives for the manipulation of general subdivisions and the computation of voronoi diagrams // Proceed. 15th Ann. ACM Symp. Theory of Comput. 1983. P. 74–123. Boston, Massachusetts, USA.
26. *Mücke E.P., Saias I., Zhu B.* Fast randomized point location without preprocessing in two- and three-dimensional delaunay triangulations // Comput. Geometry. 1999. V. 12. № 1. P. 63–83.
27. *Shan J.L., Li Y.M., Guo Y.Q., Guan Z.Q.* A robust backward search method based on walk-through for point location on a 3d surface mesh // Inter. J. Numer. Meth. Engineer. 2008. V. 73. № 8. P. 1061–1076.
28. *Sundareswara R., Schrater P.* Extensible point location algorithm // Inter. Conf. Geometric Model. Graphic. IEEE. 2003.
29. *Devroye L., Mücke E.P., Zhu B.* A note on point location in delaunay triangulations of random points // Algorithmica. 1998. V. 22. № 4. P. 477–482.
30. *Hubbard P.M.* Approximating polyhedra with spheres for time-critical collision detection // ACM Transact. Graphic. 1996. V. 15. № 3. P. 179–210.
31. *Quadros W.R., Shimada K., Owen S.J.* Skeleton-based computational method for the generation of a 3d finite element mesh sizing function // Engineer. Comput. 2004. V. 20. № 3. P. 249–264.
32. *Fogg H.J., Armstrong C.G., Robinson T.T.* New techniques for enhanced medial axis based decompositions in 2-d // Procedia Engineer. 2014. V. 82. P. 162–174.
33. *Linardakis L., Chrisochoides N.* Algorithm 870: A static geometric medial axis domain decomposition in 2d euclidean space // ACM Transact. Math. Software. 2008. V. 34. № 1. P. 1–28.
34. *Price M.A., Armstrong C.G.* Hexahedral mesh generation by medial surface subdivision : Part 2. solids and flat convex edges // Inter. J. Numer. Meth. Engineer. 1997. V. 40. № 1. P. 111–136.
35. *Price M.A., Armstrong C.G., Sabin M.A.* Hexahedral mesh generation by medial surface subdivision: Part 1. solids with convex edges // Inter. J. Numer. Meth. Engineer. 1995. V. 38. № 19. P. 3335–3359.
36. *Yu X., Goldak J.A., Dong L.* Constructing 3-d discrete medial axis // Proceed first ACM Symp. Solid Model. Foundat. and CAD/CAM Appl. ACM. P. 481–489.
37. *Sheehy D.J., Armstrong C.G.* Shape description by medial surface construction // Visualizat. Comput. Graph. IEEE Transact. 1996. V. 2. № 1. P. 62–72.
38. *Reddy J.M., Turkiyyah G.M.* Computation of 3d skeletons using a generalized delaunay triangulation technique // Computer-Aided Design. 1995. V. 27. № 9. P. 677–694.
39. *Cao J., Zhao M., Yu F., Chang J., Guan Z.* Efficient and reliable advancing divided-layer method for boundary layer mesh // J. Comput. Aided Design and Comput. Graphic. 2020. V. 32. № 8. P. 1199–1207.
40. *Steinbrenner J.P.* Construction of prism and hex layers from anisotropic tetrahedra // 22nd AIAA Comput. Fluid Dynamic. Conf. AIAA. 2015. P. 2296. Dallas, TX, USA.
41. *Steinbrenner J.P., Abelanet J.P.* Anisotropic tetrahedral meshing based on surface deformation techniques // 45th AIAA Aerospace Sci. Meet. and Exhibit. AIAA. 2007. P. 554. Reno, Nevada, USA.

EDN: BRYNKK
ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2022, том 62, № 8, с. 1428–1444

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.63

ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫЕ МНОГОСЕТОЧНЫЕ МЕТОДЫ СКВОЗНОГО СЧЕТА ДЛЯ СТАЦИОНАРНЫХ СЖИМАЕМЫХ ПОТОКОВ С УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ[1)]

 Шу-Джи Ли

Пекинский исследовательский центр вычислительных наук, Пекин, Китай

e-mail: shujie@csrc.ac.cn

Поступила в редакцию 10.10.2021 г.
Переработанный вариант 21.01.2022 г.
Принята к публикации 11.04.2022 г.

Предлагается надежная и эффективная экспоненциальная многосеточная схема для численного моделирования стационарных сжимаемых течений. В алгоритме, основанном на экспоненциальной схеме интегрирования по времени с глобальной связью, обеспечивается подавление ошибки для ускорения сходимости к устойчивому состоянию, а пространственные моды ошибок высокой частоты и высокого порядка сглаживаются с помощью s-ступенчатого предобусловленного метода Рунге–Кутты. Показано, что полученная экспоненциальная многосеточная схема эффективна для гладких течений и может стабилизировать сквозной счет для ударных волн средней амплитуды без лимитеров и без добавления искусственной диссипации. Библ. 21. Фиг. 16.

Ключевые слова: многосеточный метод, экспоненциальная схема интегрирования по времени, ударная волна, сжимаемый поток, предобусловленный метод Рунге–Кутты.

DOI: 10.31857/S0044466922080087

1. ВВЕДЕНИЕ

Важным требованием вычислительной гидродинамики является возможность точного моделирования устойчивых течений, например, при обтекании тела, чтобы можно было оценить основные рабочие параметры, например, коэффициенты подъемной силы и сопротивления. По сравнению с традиционными методами второго порядка, методы высокого порядка, такие как разрывные методы Галеркина, могут предложить преимущества в точности, но недостаток производительности и проблемы с устойчивостью. Для снижения вычислительных затрат разрывные методы Галеркина могут быть успешно ускорены с помощью p-многосеточных методов, однако ранее такой подход применялся только для задач с гладкими течениями (см. [1]–[5]). Еще не проводилось исследование p-многосеточных методов в задачах сквозного счета ударной волны. В настоящей работе рассматриваются задачи, включающие как гладкие течения, так и ударные волны, и исследуется возможность применения p-многосеточной методологии к сквозному счету ударной волны. Учитывая вопросы надежности и эффективности методов интегрирования по времени многосеточных сглаживающих методов, выбрана схема экспоненциального временного интегратора с предиктором-корректором (PCEXP) (см. [6]–[10]), которая демонстрирует некоторые преимущества в плане точности и эффективности как для установившихся, так и для нестационарных потоков. Схема PCEXP используется в рамках p-многосеточного метода, который включает в себя, в частности, метод экспоненциального интегрирования по времени и s-ступенчатый предобусловленный метод Рунге–Кутты. Полученный алгоритм тестируется как эффективный способ повышения реализуемости разрывных методов Галеркина высокого порядка для моделирования стационарных сжимаемых течений.

Работа организована следующим образом. В разд. 2 представлен вариант многосеточного алгоритма, который объединяет два отдельных метода в V-цикле p-многосеточного метода. В разд. 3 представлена пространственная дискретизация с помощью модального разрывного метода Га-

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке Национального фонда естественных наук Китая (NSFC) по гранту U1930402. Пекинский исследовательский центр вычислительной науки предоставил вычислительные ресурсы.

леркина высокого порядка. В разд. 4 обсуждается вычисление шагов по времени в p-многосеточном методе. В разд. 5 представлены численные результаты для гладких и разрывных течений. Наконец, в разд. 6 сделаны выводы по данной работе.

2. ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫЙ МНОГОСЕТОЧНЫЙ МЕТОД

В этом разделе представлен многосеточный метод произвольного порядка (p-го порядка). Метод объединяет два отдельных алгоритма: алгоритм *экспоненциального интегрирования по времени* и s-стадийный *предобусловленный метод Рунге—Кутты*. Эти два алгоритма представлены по отдельности, а затем интегрированы в целостный многосеточный метод с использованием V-цикла.

2.1. Экспоненциальное интегрирование по времени

Начнем со следующей полудискретной системы обыкновенных дифференциальных уравнений, полученной после применения дискретизации по пространству:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{R}(\mathbf{u}), \tag{1}$$

где $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^K$ — вектор переменных решений и $\mathbf{R}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^K$ — член правой части, вычисленный с помощью произвольной дискретизации в пространстве. Без потери общности мы рассматриваем $\mathbf{u}(t)$ в одном шаге по времени, т.е. $t \in [t_n, t_{n+1}]$.

Разделение правой части приводит к другому выражению:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{J}_n\mathbf{u} + \mathbf{N}(\mathbf{u}), \tag{2}$$

где индекс n указывает на значение, вычисленное при $t = t_n$; $\mathbf{J}_n$ — матрица Якоби, образованная глобальной дискретизированной системой, размерность матрицы Якоби для глобальной невязки при этом равна суммарному числу степеней свободы глобальной системы, а именно, $\mathbf{J}_n = \partial\mathbf{R}(\mathbf{u})/\partial\mathbf{u}\big|_{t=t_n} = \partial\mathbf{R}(\mathbf{u}_n)/\partial\mathbf{u}$; $\mathbf{N}(\mathbf{u}) = \mathbf{R}(\mathbf{u}) - \mathbf{J}_n\mathbf{u}$ обозначает невязку, которая в общем случае является нелинейной. Уравнение (2) допускает следующее формальное решение:

$$\mathbf{u}_{n+1} = \exp(\Delta t\mathbf{J}_n)\mathbf{u}_n + \int_0^{\Delta t} \exp\big((\Delta t - \tau)\mathbf{J}_n\big)\mathbf{N}(\mathbf{u}(t_n + \tau))\mathrm{d}\tau, \tag{3}$$

где матричная экспонента определяется как

$$\exp(-t\mathbf{J}_n) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-t\mathbf{J}_n)^m}{m!}. \tag{4}$$

В формуле (3) жесткий линейный компонент и нелинейный интегральный компонент могут быть оценены отдельно. В результате линейный компонент может быть выражен аналитически для некоторых специализированных уравнений, но нелинейный компонент обычно аппроксимируется численно. Недавно была разработана двухступенчатая экспоненциальная схема PCEXP (см. [10]) для эффективного вычисления различных областей течения как для установившихся, так и для нестационарных течений. Но для установившихся течений схема экспоненциального интегрирования по времени первого порядка (EXP1), полученная путем аппроксимации первого порядка интеграла по времени нелинейного члена (см. [6], [8], [11]), оказывается более эффективной, несмотря на ее неспособность разрешать нестационарные течения. Схема EXP1 имеет две эквивалентных формы:

$$\mathbf{u}_{n+1} = \exp(\Delta t\mathbf{J}_n)\mathbf{u}_n + \Delta t\boldsymbol{\Phi}_1(\Delta t\mathbf{J}_n)\mathbf{N}_n, \tag{5}$$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t\boldsymbol{\Phi}_1(\Delta t\mathbf{J}_n)\mathbf{R}_n, \tag{6}$$

где

$$\boldsymbol{\Phi}_1(\Delta t\mathbf{J}) := \frac{\mathbf{J}^{-1}}{\Delta t}\big[\exp(\Delta t\mathbf{J}) - \mathbf{I}\big], \tag{7}$$

а $\mathbf{I}$ есть $K \times K$-единичная матрица. Далее используется формула (6).

Физическая природа таких типов экспоненциальных схем опирается на свойство глобальной связи через глобальную матрицу Якоби $\mathbf{J}$, так что информация о переносе в течении может транслироваться на всю вычислительную область без ограничения на глобальное число Куранта—Фридрихса—Леви (CFL). Поэтому экспоненциальные схемы ведут себя как полностью неявные методы, но зависят только от текущего решения, т.е. подобны явному методу, как показано в уравнении (6). Поэтому схема EXP1 с такой вычислительной особенностью используется в рамках p-многосеточного метода для расчетов установившегося потока.

2.2. Реализация EXP1 с помощью метода Крылова

Реализация схем экспоненциального интегрирования по времени требует вычислений матрично-векторных произведений, в частности, произведения экспоненциальных функций матрицы Якоби на вектор, например, $\mathbf{\Phi}_1(\Delta t\mathbf{J}_n)\mathbf{N}$ в (6). Для их эффективного вычисления может быть использован метод Крылова (см. [12], [13]). Рассмотрим m-мерное подпространство Крылова

$$\mathbb{K}_m(\mathbf{J},\mathbf{N}) = \operatorname{span}\left\{\mathbf{N}, \mathbf{J}\mathbf{N}, \mathbf{J}^2\mathbf{N}, \ldots, \mathbf{J}^{m-1}\mathbf{N}\right\}. \tag{8}$$

Ортогональная базисная матрица $\mathbf{V}_m := (\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_m) \in \mathbb{R}^{K\times m}$ удовлетворяет так называемому разложению Арнольди (см. [13]):

$$\mathbf{J}\mathbf{V}_m = \mathbf{V}_{m+1}\tilde{\mathbf{H}}_m, \tag{9}$$

где $\mathbf{V}_{m+1} := (\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_m, \mathbf{v}_{m+1}) = (\mathbf{V}_m, \mathbf{v}_{m+1}) \in \mathbb{R}^{K\times(m+1)}$. Матрица $\tilde{\mathbf{H}}_m$ является $(m+1)\times m$ верхней матрицей Гессенберга. Тогда уравнение (9) становится

$$\mathbf{J}\mathbf{V}_m = \mathbf{V}_m\mathbf{H}_m + h_{m+1,m}\mathbf{v}_{m+1}\mathbf{e}_m^{\mathrm{T}}. \tag{10}$$

Поскольку $\mathbf{V}_m^{\mathrm{T}}\mathbf{V}_m = \mathbf{I}$,

$$\mathbf{H}_m = \mathbf{V}_m^{\mathrm{T}}\mathbf{J}\mathbf{V}_m. \tag{11}$$

Таким образом, $\mathbf{H}_m$ является проекцией линейного преобразования $\mathbf{J}$ на подпространство $\mathbb{K}_m$ с базисом $\mathbb{V}_m$. Поскольку $\mathbf{V}_m\mathbf{V}_m^{\mathrm{T}} \neq \mathbf{I}$, уравнение (11) приводит к приближению

$$\mathbf{J} \approx \mathbf{V}_m\mathbf{V}_m^{\mathrm{T}}\mathbf{J}\mathbf{V}_m\mathbf{V}_m^{\mathrm{T}} = \mathbf{V}_m\mathbf{H}_m\mathbf{V}_m^{\mathrm{T}}, \tag{12}$$

и $\exp(\mathbf{J})$ можно аппроксимировать с помощью $\exp(\mathbf{V}_m\mathbf{H}_m\mathbf{V}_m^{\mathrm{T}})$ следующим образом:

$$\exp(\mathbf{J})\mathbf{N} \approx \exp\left(\mathbf{V}_m\mathbf{H}_m\mathbf{V}_m^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{N} = \mathbf{V}_m\exp(\mathbf{H}_m)\mathbf{V}_m^{\mathrm{T}}\mathbf{N}. \tag{13}$$

Первый вектор-столбец $\mathbf{V}_m$ равен $\mathbf{v}_1 = \mathbf{N}/\|\mathbf{N}\|_2$ и $\mathbf{V}_m^{\mathrm{T}}\mathbf{N} = \|\mathbf{N}\|_2\,\mathbf{e}_1$, таким образом, (13) становится

$$\exp(\mathbf{J})\mathbf{N} \approx \|\mathbf{N}\|_2\,\mathbf{V}_m\exp(\mathbf{H}_m)\mathbf{e}_1. \tag{14}$$

Следовательно, $\mathbf{\Phi}_1$ можно аппроксимировать как

$$\mathbf{\Phi}_1(\Delta t\mathbf{J})\mathbf{N} = \frac{1}{\Delta t}\int_0^{\Delta t}\exp((\Delta t-\tau)\mathbf{J})\mathbf{N}\,d\tau \approx \frac{1}{\Delta t}\int_0^{\Delta t}\|\mathbf{N}\|_2\mathbf{V}_m\exp\left((\Delta t-\tau)\mathbf{H}_m\right)\mathbf{e}_1\,d\tau. \tag{15}$$

В общем случае размерность подпространства Крылова m выбирается намного меньше размерности $\mathbf{J}$, поэтому $\mathbf{H}_m \in \mathbb{R}^{m\times m}$ легко оценить. Таким образом, Φ_1 вычисляется как

$$\mathbf{\Phi}_1(\Delta t\mathbf{J})\mathbf{N} \approx \frac{1}{\Delta t}\|\mathbf{N}\|_2\,\mathbf{V}_m\int_0^{\Delta t}\exp\left((\Delta t-\tau)\mathbf{H}_m\right)\mathbf{e}_1\,d\tau = \frac{1}{\Delta t}\|\mathbf{N}\|_2\,\mathbf{V}_m\mathbf{H}_m^{-1}\left[\exp(\Delta t\mathbf{H}_m)-\mathbf{I}\right]\mathbf{e}_1, \tag{16}$$

где экспонента матрицы $\exp(\Delta t\mathbf{H}_m)$ может быть эффективно вычислена рациональным приближением Чебышёва (ср. [12], [13]).

2.3. Предобусловленный метод Рунге–Кутты

Рассмотрим s-стадийный предобусловленный метод Рунге–Кутты (PRK) в следующей форме:

$$\mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{u}^n,$$
$$\mathbf{u}^{(k)} = \mathbf{u}^n + \beta_k \mathbf{P}^{-1}\left(\mathbf{u}^n\right)\mathbf{R}\left(\mathbf{u}^{(k-1)}\right), \quad k = 1, 2, \ldots, s, \tag{17}$$
$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^{(s)},$$

где $\beta_k = 1/(s-k+1)$, $\mathbf{P}$ берется как диагональная часть матрицы Якоби невязки $\mathbf{J} = \partial\mathbf{R}/\partial\mathbf{u}$, которая распределяет информацию о распространении волны по элементам сетки. В данной работе для всех тестовых случаев используется $s = 4$.

Физическая природа метода PRK может быть интерпретирована с двух различных точек зрения. Во-первых, мы рассматриваем пространственную дискретизацию первого порядка методом конечных объемов или, во-вторых, разрывным методом Галеркина для i-го элемента, окруженного смежными ячейками j $(1 \le j \le N)$ с площадью разделяющей поверхности, равной S_{ij}. Понятие матричного шага по времени можно раскрыть, рассмотрев пространственную невязку, полученную с помощью какой-то схемы на основе распада разрыва Римана. Без потери общности мы выбрали схему Рое (см. [15]) в качестве примера для лучшего представления связи между скалярным и матричным временными шагами. Отметим, что в практических расчетах конвективный поток вычисляется римановым решателем SLAU2 (см. [16]) из соображений надежности:

$$V_i\frac{\Delta\mathbf{u}_i}{\Delta t} = \mathbf{R}_i = \sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\left[\mathbf{F}(\mathbf{u}_i) + \mathbf{F}(\mathbf{u}_j)\right]\mathbf{n}_{ij}\mathrm{S}_{ij} + \frac{1}{2}\left|\mathbf{A}_{ij}^n\right|\left(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j\right)\mathrm{S}_{ij}. \tag{18}$$

Диагональная часть матрицы Якоби $\mathbf{P}$ глобальной невязки определяется как

$$\mathbf{P}_i = \frac{\partial\mathbf{R}_i}{\partial\mathbf{u}_i} \approx \sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\left|\mathbf{A}_{ij}^n\right|\mathbf{S}_{ij}. \tag{19}$$

Определяя матрицу $\Delta\mathbf{t}$ как

$$\Delta\mathbf{t} = V_i\mathbf{P}^{-1} = \frac{V_i}{\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\left|\mathbf{A}_{ij}^n\right|\mathrm{S}_{ij}}, \tag{20}$$

можно раскрыть связь между матрицей $\Delta\mathbf{t}$ и традиционным скалярным определением временного шага, рассмотрев постоянную в ячейках скалярную аппроксимацию спектрального радиуса $\lambda_{ij}^{\max}$ к $\left|\mathbf{A}_{ij}^n\right|$, т.е.

$$\Delta t = \frac{2V_i}{\sum_{j=1}^{N}\lambda_{ij}^{\max}\mathrm{S}_{ij}} \xrightarrow{1D} \frac{\Delta x_i}{\lambda_i^{\max}}. \tag{21}$$

Поэтому $\mathbf{P}^{-1}$ эквивалентно матричному шагу по времени, что согласуется с обычным определением шага по времени в скалярном случае. Как было продемонстрировано в [17], эта матрица является предобусловливателем, который может обеспечить эффективную кластеризацию конвективных собственных значений и существенное улучшение сходимости временного шага метода Рунге–Кутты. В данной работе, в отличие от [17], используется точный способ оценки временных шагов матрицы с точной матрицей Якоби (ср. (8)), так что все эффекты жесткости пространственной дискретизации и граничных условий могут быть точно учтены. Поскольку традиционного скалярного физического шага по времени не существует, схема PRK не имеет временного порядка точности. С другой точки зрения, схему PRK можно рассматривать как упрощенную полностью неявную схему или как неявно-явные методы Рунге–Кутты, игнорируя недиагональные члены матрицы Якоби. Таким образом, это локализованный метод с малым объемом памяти. Для повышения надежности мы рекомендуем увеличить диагональное доминирование до $\mathbf{P}$, а именно, $\mathbf{P} = \partial\mathbf{R}/\partial\mathbf{u} + \mathbf{I}/\delta\tau$, где $\delta\tau$ можно рассматривать как псевдо-временной шаг, вычисляемый в (33).

2.4. V-цикл pp-многосеточного метода

В этой многосеточной схеме p-многосеточный метод применяется к пространственной дискретизации с порядком аппроксимации p. Таким образом, количество уровней многосеточного метода равно пространственному порядку аппроксимации p. Временной шаг применяется к каждому уровню многосеточного V-цикла, где решение сглаживается в течение одного шага по времени. Весь V-цикл состоит из операторов ограничения и продолжения, которые также применяются к одному шагу по времени. Для сглаживания решения можно использовать либо явные методы Рунге–Кутты, либо PRK. Однако они оказываются неэффективными для устранения низкочастотных мод ошибок при низких порядках точности. В данной работе рассматривается схема EXP1 с учетом ее численных особенностей. В отличие от явного сглаживателя Рунге–Кутты, который дает слабый эффект затухания только локально (точечно), схема EXP1 относится к методам глобальной связи, что позволяет использовать большие шаги по времени с сильным эффектом затухания для всех частотных мод (см. [8]).

В экспоненциальном p-многосеточном методе (eMG) схема EXP1 используется на уровне точности $p = 0$, а метод PRK – на уровне точности $p > 0$. При многосеточном сглаживании используется V-цикл p-многосеточного процесса, где рекурсивно используется двухуровневый алгоритм. Для иллюстрации алгоритма рассмотрим нелинейную задачу $\mathbf{A}\left(\mathbf{u}^p\right) = \mathbf{f}^p$, где $\mathbf{u}^p$ – вектор решения, $\mathbf{A}\left(\mathbf{u}^p\right)$ – нелинейный оператор, $\mathbf{f}^p$ – член правой части, а p обозначает уровень точности разрывного метода Галеркина. Пусть $\mathbf{v}^p$ – приближение к вектору решения. Тогда $\mathbf{A}\left(\mathbf{u}^p\right)$ и $\mathbf{f}^p$ получены пространственной дискретизацией разрывного метода Галеркина в сочетании со схемами EXP1 или PRK. Мы используем схему EXP1 в качестве сглаживающей при $p = 0$ и PRK при $p > 0$. Невязка $\mathbf{r}\left(\mathbf{v}^p\right)$ определяется как

$$\mathbf{r}\left(\mathbf{v}^p\right) = \mathbf{f}^p - \mathbf{A}^p\left(\mathbf{v}^p\right).$$

В рамках eMG решение на уровне $p-1$ используется для корректировки решения на уровне p следующим образом.

1. Проводится шаг по времени со схемой PRK на самом высоком уровне точности $p_{\max}$.

2. Решение и остаток p ограничиваются уровнем $p-1$ ($1 \le p \le p_{\max}$):

$$\mathbf{v}_0^{p-1} = \mathbb{R}_p^{p-1}\mathbf{v}^p, \quad \mathbf{r}^{p-1} = \mathbb{R}_p^{p-1}\mathbf{r}^p(\mathbf{v}^p), \tag{22}$$

где $\mathbb{R}_p^{p-1}$ – оператор ограничения с уровня p на уровень $p-1$.

3. Вычисляется форсирующий член для уровня $p-1$:

$$\mathbf{s}^{p-1} = \mathbf{A}^{p-1}\left(\mathbf{v}_0^{p-1}\right) - \mathbf{r}^{p-1}. \tag{23}$$

4. Решение сглаживается с помощью схемы PRK на уровне $p-1$, но переключается на использование схемы EXP1 на самом низком уровне точности $p = 0$:

$$\mathbf{A}^{p-1}\left(\mathbf{v}^{p-1}\right) = \mathbb{R}_p^{p-1}\mathbf{f}^p + \mathbf{s}^{p-1}. \tag{24}$$

5. Оценивается ошибка уровня $p-1$:

$$\mathbf{e}^{p-1} = \mathbf{v}^{p-1} - \mathbf{v}_0^{p-1}. \tag{25}$$

6. Продолжается ошибка $p-1$ и корректируется аппроксимация уровня p:

$$\mathbf{v}^p = \mathbf{v}^p + \mathbb{P}_{p-1}^p\mathbf{e}^{p-1}, \tag{26}$$

где $\mathbb{P}_{p-1}^p$ – оператор продолжения.

V-Цикл p-многосеточного метода проводит попеременное глобальное и локальное сглаживание, которое оказывается эффективным как для гладких, так и разрывных полей потока.

2.5. Сквозной счет

Установлено, что eMG обладает естественным механизмом стабилизации вычислений, связанных с разрешением ударной волны, так что возможно применение методов, не использующих лимитеры на разрывах. В eMG два источника численного демпфирования обеспечиваются EXP1 и p-многосеточными схемами. Обе схемы могут проводить большую численную диссипацию вдали от устойчивого состоянии, повышая устойчивость сквозного счета. Диссипация постепенно исчезает при приближении к стационарному состоянию решения, так что сходящиеся решения могут сохранять очень острые профили ударной волны. Такое поведение численного метода исследуется в разд. 5 для трансзвуковых и сверхзвуковых областей течения, в которых могут быть получены очень резкие профили разрывов.

3. ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ДИСКРЕТИЗАЦИЯ

В данной работе eMG применяется для решения трехмерных сжимаемых уравнений Эйлера, дискретизированных модальным разрывным методом Галеркина (см. [6]–[10]).

Рассмотрим трехмерные сжимаемые уравнения Эйлера

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = 0. \tag{27}$$

Здесь $\mathbf{U}$ – вектор консервативных переменных, а $\mathbf{F}$ – конвективный поток

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} \begin{pmatrix} \rho \mathbf{v} \\ \rho v \otimes \mathbf{v} + p\mathbf{I} \\ \rho H \mathbf{v} \end{pmatrix}, \tag{28}$$

где $v = (u, \mathbf{v}, w)^{\mathbf{T}}$ – вектор абсолютной скорости; ρ, p и e – плотность потока, давление и удельную внутреннюю энергию; $E = e + \frac{1}{2}\|\mathbf{v}\|^2$ и $H = E + p/\rho$ – полная энергия и полная энтальпия соответственно; $\mathbf{I}$ – тождественный тензор; а давление p задается уравнением состояния идеального газа

$$p = \rho(\gamma - 1)e, \tag{29}$$

где $\gamma = 7/5$ – отношение удельных теплоемкостей для идеального газа.

3.1. Модальный разрывный метод Галеркина

Рассматривая вычислительную область Ω, разделенную на множество непересекающихся элементов произвольной формы, модальный разрывный метод Галеркина (см. [8]) ищет аппроксимацию $\mathbf{U}_h$ в каждом элементе $E \in \Omega$ с помощью конечномерного пространства полиномов P^p порядка p в пространстве разрывных конечных элементов:

$$\mathbb{V}_h := \left\{\psi_i \in L^2(\Omega) : \psi_i\big|_E \in P^p(\Omega),\ \forall E \in \Omega\right\}. \tag{30}$$

Численное решение $\mathbf{U}_h$ может быть аппроксимировано в пространстве конечных элементов $\mathbb{V}_h$:

$$\mathbf{U}_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{n} \mathbf{u}_j(t)\psi_j(\mathbf{x}). \tag{31}$$

В слабой формулировке уравнения Эйлера (27) на элементе E можно выписать следующие соотношения:

$$\int_E \psi_i \psi_j d\mathbf{x} \frac{d\mathbf{u}_j}{dt} = -\int_{\partial E} \psi_i \tilde{\mathbf{F}} \cdot \hat{\mathbf{n}} d\sigma + \int_E \mathbf{F} \cdot \nabla \psi_i d\mathbf{x} := \mathbf{R}_i, \tag{32}$$

где $\hat{\mathbf{n}}$ – внешний единичный вектор элемента поверхности σ ячейки сетки E, $\tilde{\mathbf{F}}$ оценивается решателем Римана (см. [18]), и в данной формуле используется суммирование Эйнштейна. Для ортонормального базисного набора $\{\psi_i\}$ член в левой части уравнения (32) становится диагональным, поэтому система не отличается от стандартной формы обыкновенных дифференциальных уравнений (1), что позволяет избежать решения линейной системы, требуемой неортогональным базисом. Еще более важно, что использование ортогонального базиса дает более точные решения, особенно для методов высокого порядка, например, $p = 6$.

4. СТРАТЕГИЯ ВЫБОРА ШАГА ВО ВРЕМЕНИ

В этом разделе обсуждается стратегия выбора шага по времени в рамках метода eMG. Необходимо вычислить два различных временных шага. Один для временного шага PRK $\delta\tau$, а другой — для сглаживания EXP1, последний эмпирически выбран как $(p_{\max} + 1)\delta\tau$. Таким образом, необходимо определить только $\delta\tau$:

$$\delta\tau = \frac{\mathrm{CFL}\, h_{3D}}{(2p+1)(\|\mathbf{v}\| + c)}, \quad h_{3D} := 2d\frac{|E|}{|\partial E|}, \tag{33}$$

где p — уровень точности, $\mathbf{v}$ — вектор скорости в центре ячейки, c — скорость звука, d — пространственная размерность, $|E|$ и $|\partial E|$ — объем ячейки и площадь поверхности границы E соответственно; h_{3D} — характерная длина ячейки в трехмерном пространстве, которая определяется отношением объема клетки и площади поверхности. В решателе HA3D квазидвумерные вычисления реализуются путем экструзии двумерной сетки в трехмерную с помощью одного слоя ячеек. Мы используем h_{2D} вместо h_{3d}, чтобы устранить влияние измерения z на получение истинно двумерного временного шага. Учитывая размер ячейки Δz в направлении z, h_{2D} определяется как

$$\frac{2}{h_{\mathrm{2D}}} = \frac{3}{h_{\mathrm{3D}}} - \frac{1}{\Delta z}. \tag{34}$$

С целью повышения эффективности вычислений для устойчивых задач число CFL динамически определяется по формуле

$$\mathrm{CFL}_n = \min\left\{\mathrm{CFL}_{\max}, \max\left[\|R(\rho_n)\|_2^{-1}, 1 + \frac{(n-1)}{(2p+1)}\right]\right\}, \tag{35a}$$

$$\|R(\rho_n)\|_2 := \frac{1}{|\Omega|}\left[\int_\Omega R(\rho_n)^2 d\mathbf{x}\right]^{1/2}, \tag{35b}$$

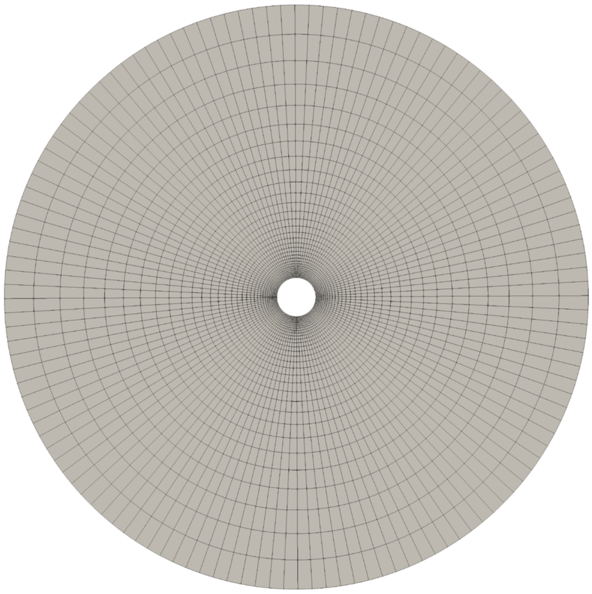
где $R(\rho_n)$ — невязка уравнения для плотности, $\mathrm{CFL}_{\max}$ — определяемое пользователем максимальное число CFL, n — число итераций для неявного метода или многосеточных циклов (MG-циклов) для схемы eMG, p — пространственный порядок точности. Такая переменная стратегия эволюции CFL обеспечивает надежный запуск кода и хорошую общую вычислительную эффективность на практике. Во всех рассмотренных тестовых случаях верхнее граничное число $\mathrm{CFL}_{\max}$ принимается равным 10^3 для неявного метода Эйлера и 10^2 для метода eMG.

5. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Численные результаты представлены для расчетов как гладких, так и разрывных течений. Производительность и сходимость системы eMG исследуются для двух случаев гладкого потока: дозвукового обтекания кругового цилиндра и сферы. Метод eMG сравнивается с методом GMRES с быстрым полностью неявным ILU-предобусловливателем относительно процессорного времени и использования памяти. Оба метода используют одну и ту же размерность подпространства Крылова 30 и критерий останова 10^{-5} (подробнее см. [13], [19]). Для неявного интегрирования по времени используется неявный метод Эйлера первого порядка. Для сквозного счета рассматриваются сверхзвуковое сопло Лаваля при числе Маха 3 и трансзвуковое крыло M6 при числе Маха 0.8395. Исследуются надежность и устойчивость сходимости метода eMG.

5.1. Гладкое обтекание кругового цилиндра

Представим результаты, полученные для обтекания кругового цилиндра при числе Маха 0.3. Цилиндр имеет радиус 1 и окружен круговой расчетной областью радиуса 15, как показано на фиг. 1. Квази-2D сетка с $128 \times 32 = 4096$ квадратичными изогнутыми гексаэдральными элемен-



Фиг. 1. Обтекание кругового цилиндра в квази-2D: $128 \times 32 = 4.096$ квадратичных криволинейных элементов.

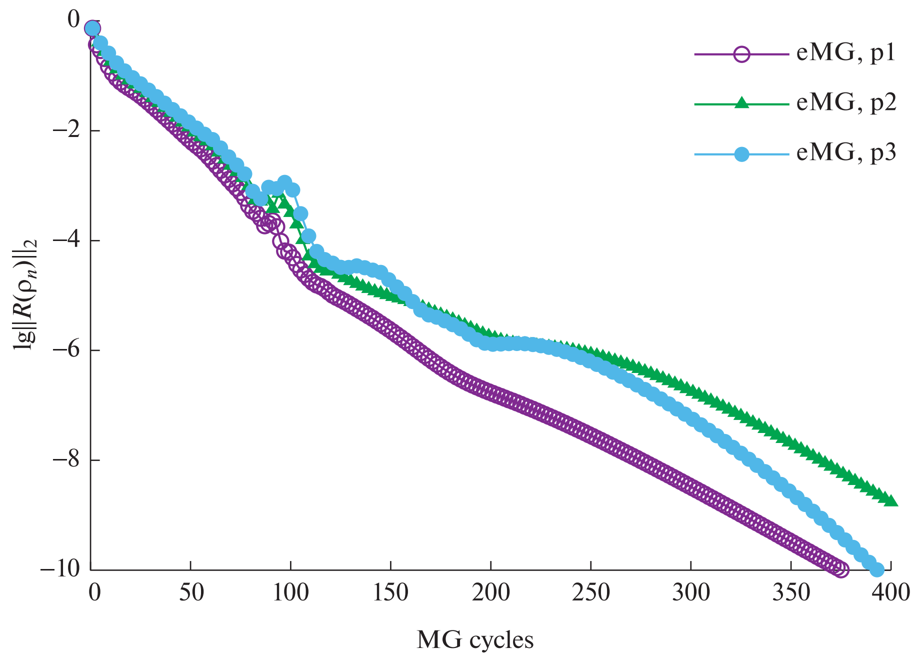
тами создается путем экструзии 2D сетки на один слой сеток. Окончательная 3D сетка используется решателем потока HA3D разрывного метода Галеркина произвольного высокого порядка (см. [6]–[10]). Общее число степеней свободы достигает 81 920 при $p = 3$.

На фиг. 2 L_2-норма невязки по плотности $R(\rho_n)$ построена в зависимости от количества циклов многосеточного метода (MG-циклов) с использованием схемы eMG. Показано, что скорость сходимости не зависит от пространственного порядка точности p, т.е. p-независима. Результаты вычислены с помощью быстрого неявного метода GMRES с предобусловливателем ILU и приведены на фиг. 3, где показаны истории сходимости неявного метода с различной пространственной точностью. Видна быстрая квадратичная ньютоновская сходимость, однако скорость сходимости зависит от пространственного порядка точности p. Схема eMG сравнивается с полностью неявным методом относительно процессорного времени на фиг. 4, где процессорное время нормировано на время схемы eMG. Видно, что неявный метод (IMP) быстрее для случаев $p = 1, 2$, но медленнее, чем схема eMG для случая $p = 3$. Метод eMG, по крайней мере, сравним с неявным методом по общей производительности.

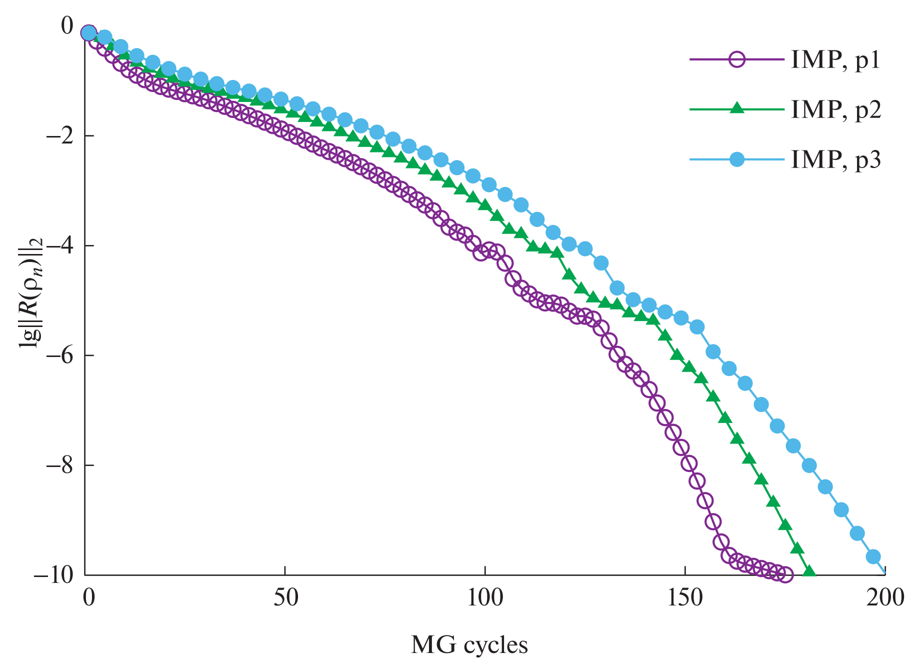
5.2. Гладкое обтекание сферы

Вычислительная эффективность схемы eMG исследуется для трехмерного потока, обтекающего сферу с числом Маха 0.3, радиусом сферы 1 и радиусом внешней границы 5. На поверхности сферы задано граничное условие стенки скольжения, а на внешней границе используется характерное граничное условие дальнего поля с инвариантами Римана. Сетка соблюдает симметрии потока в горизонтальной и вертикальной плоскостях, на которые накладывается граничное условие симметрии. Созданная криволинейная сетка состоит из 9778 тетраэдров и 4248 призм, всего 14 026 ячеек. На фиг. 5 показан крупный план сетки сферы и контура скорости, рассчитанного по схеме eMG при $p = 3$.

На фиг. 6 приведены истории сходимости метода eMG для пространственного порядка точности p до 3. Вновь наблюдается p-независимая сходимость, что аналогично двумерному случаю. На фиг. 7 показаны истории сходимости IMP с отсчетами многосеточных циклов, которые зависят от p. На фиг. 8 сравниваются оба метода, измеренные в процессорном времени. Видно, что хотя IMP является быстрым по количеству итераций, вычислительные затраты на каждую итерацию относительно высоки, поэтому общее время процессора ухудшается. При использовании пространственных схем высокого порядка вместе с неявным методом глобальная матрица



Фиг. 2. p-Независимые сходимости в методе eMG.

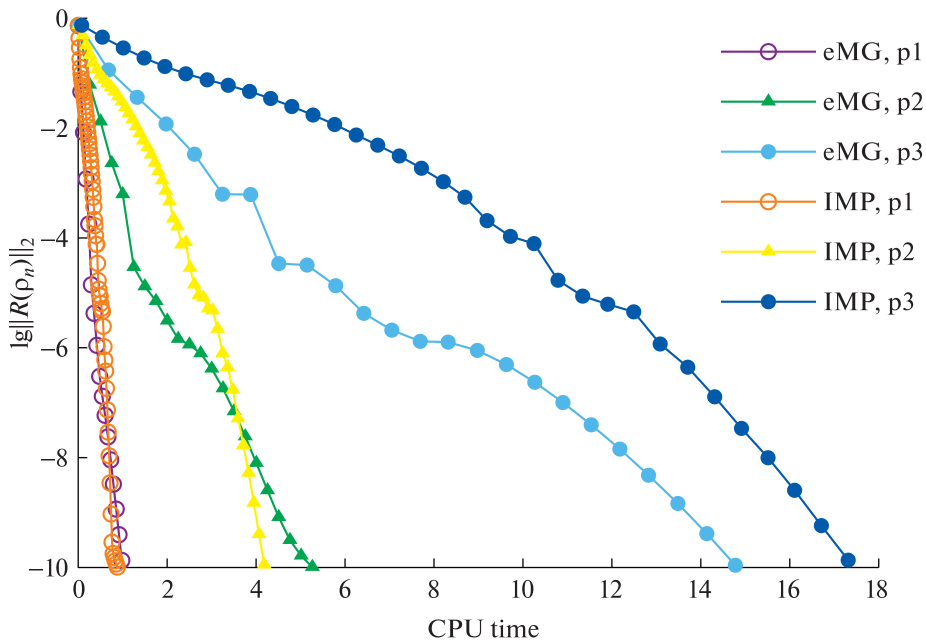


Фиг. 3. Истории сходимости неявного метода с различной пространственной точностью.

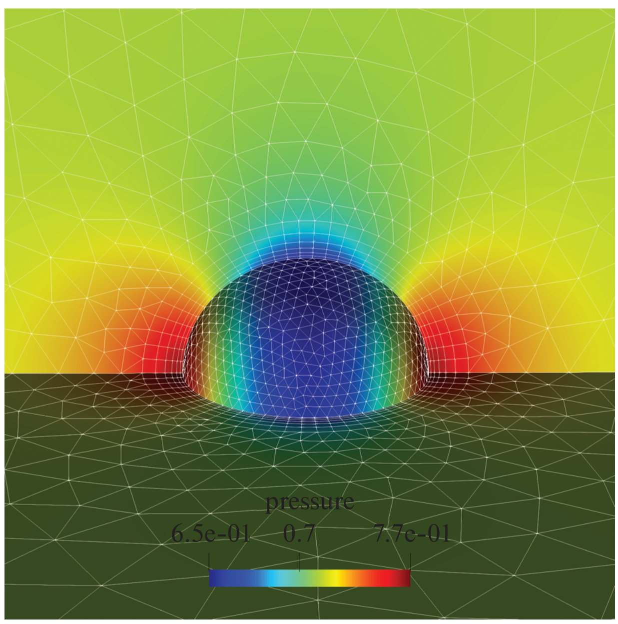
Якоби высокого порядка занимает большой объем памяти. Наиболее значительная часть использования памяти методами eMG и IMP оценивается следующим образом:

$$M_{emg} = NE\left[\frac{5}{3}(p+1)(p+2)(p+3)+150\right],$$

$$M_{imp} = 6NE\left[\frac{5}{6}(p+1)(p+2)(p+3)\right]^2.$$

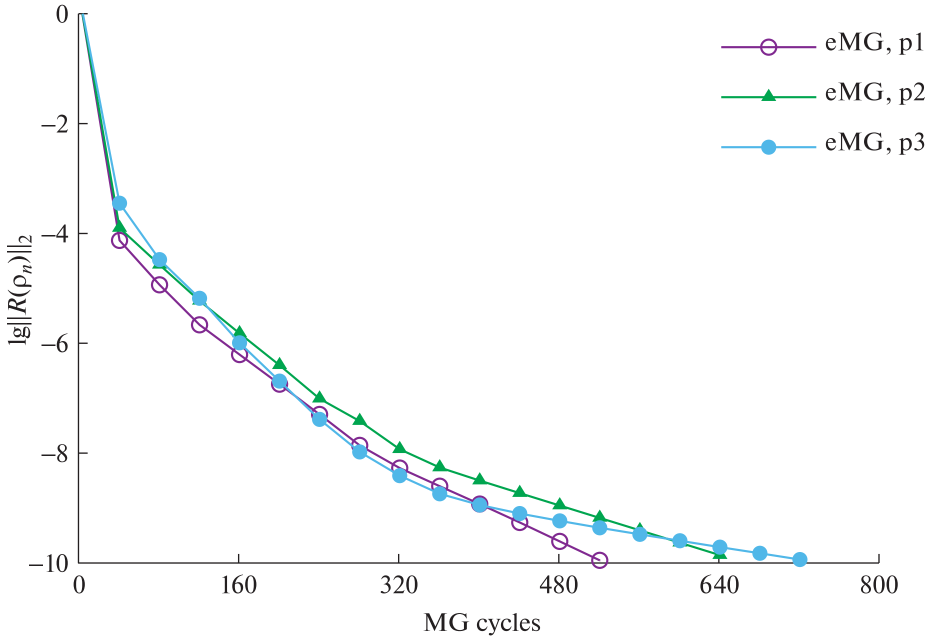


Фиг. 4. Сравнение производительности между методом eMG и неявным методом.

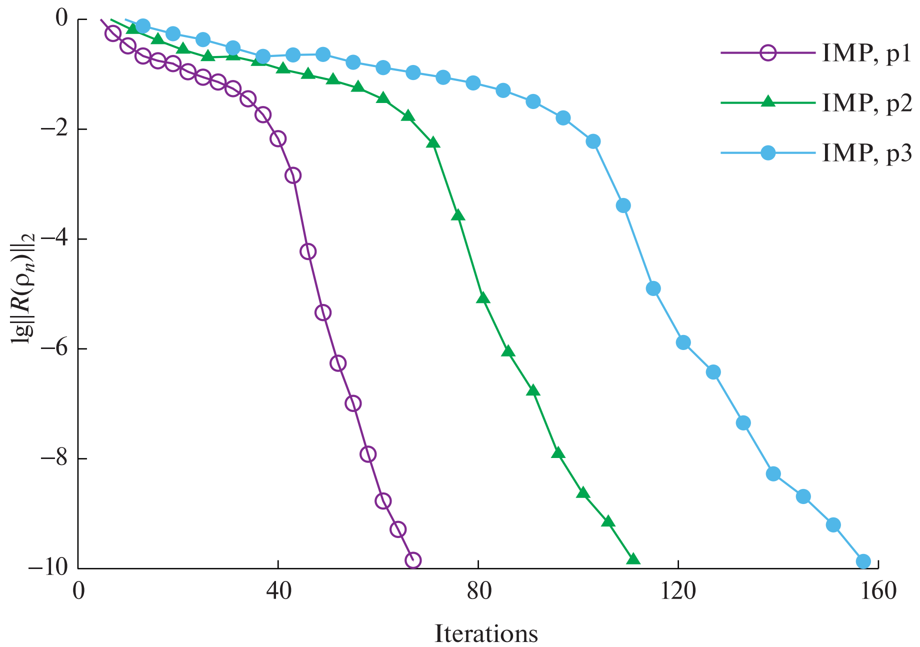


Фиг. 5. Контуры течения, рассчитанного для обтекания сферы при Ma $= 0.3$, $p = 3$ с помощью метода eMG.

Для задач размером до NE $= 10^5$ элементов с пространственной точностью четвертого порядка полностью неявный метод требует 45 Гб памяти только для хранения матрицы Якоби. Для сравнения eMG требует только 0.03 Гб памяти для хранения векторов решений плюс матрицу якобиана первого порядка при том же размере задачи. Таким образом, метод eMG является более экономичным, чем полностью неявный метод для моделирования высокого порядка с ограниченными вычислительными ресурсами.



Фиг. 6. p-Независимая сходимость метода eMG.

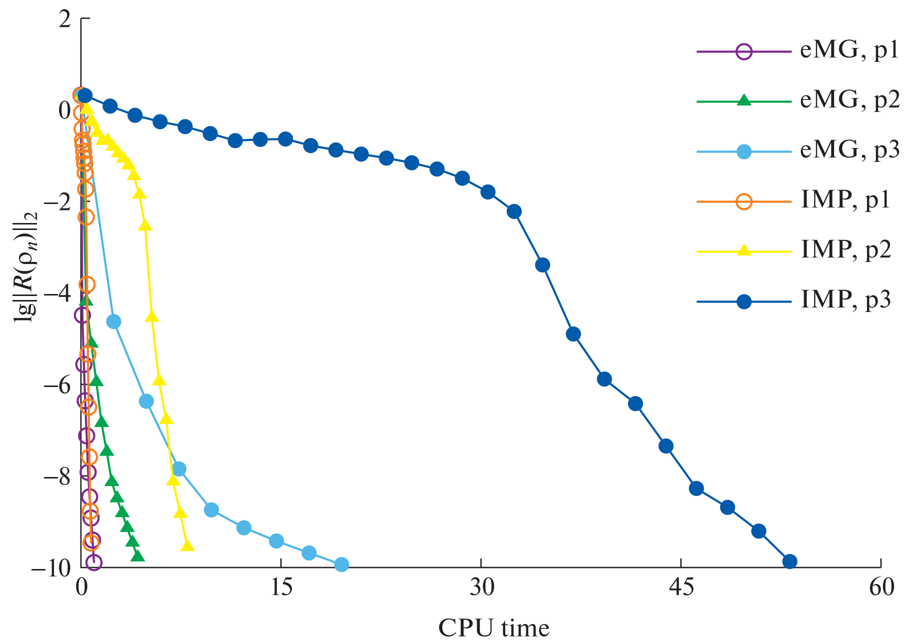


Фиг. 7. История сходимости неявного метода с различной пространственной точностью.

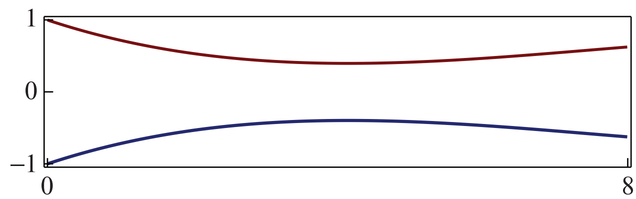
5.3. Сверхзвуковое сопло Лаваля

Для того чтобы проверить надежность метода eMG для сквозного счета ударной волны, было рассчитано сверхзвуковое сопло Лаваля при скорости 3 Маха. Геометрия сопла симметрична относительно оси y, как показано на фиг. 9. Верхний и нижний профили даны аналитически:

$$y = \pm\left(-\frac{x^3}{405} + \frac{x^2}{18} - \frac{x}{3} + 1\right), \quad x \in [0, 8]. \tag{36}$$



Фиг. 8. Сравнение производительности метода eMG и неявного метода.

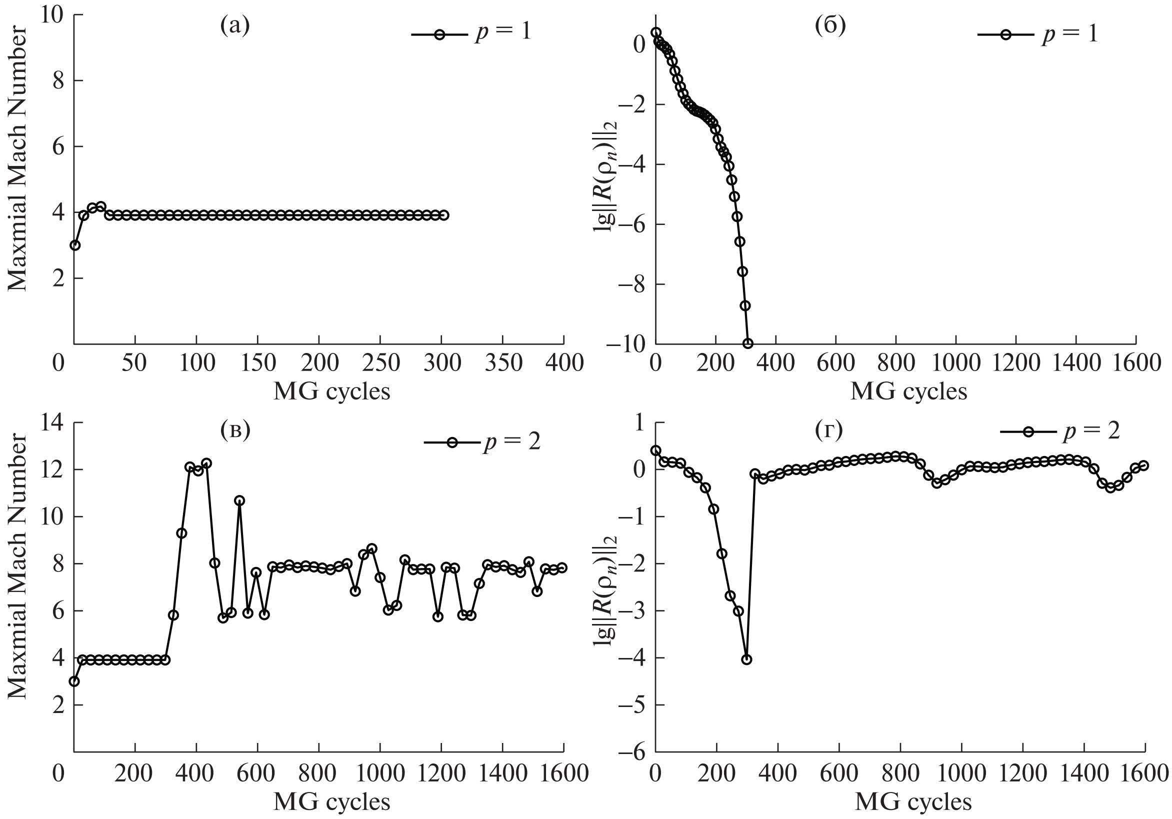


Фиг. 9. Сверхзвуковое сопло Лаваля: конфигурация сопла.

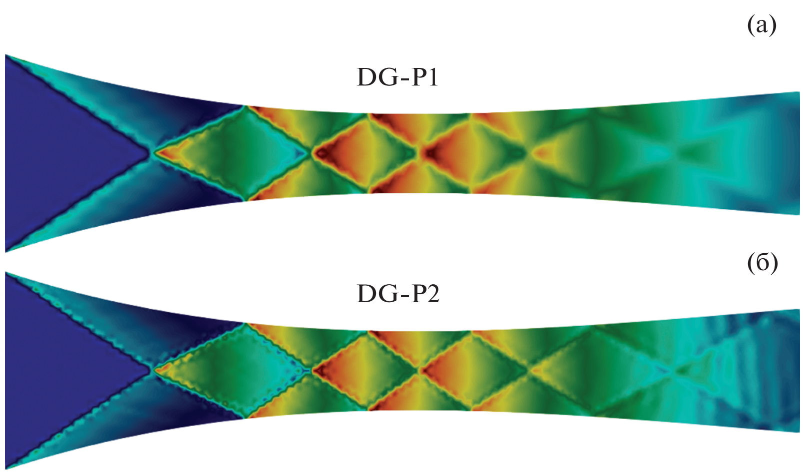
Мы намеренно используем крупную неструктурированную сетку, чтобы исследовать возможности сквозного счета с подсеточным разрешением с помощью предложенного подхода. Квази-2D сетка, содержащая 1982 ячейки одинакового размера, создается путем экструзии двумерных квадратичных треугольников в трехмерные квадратичные призмы.

Для этого случая нас интересуют поведение сходимости в стационарном режиме и устойчивость решателя. Мы обнаружили, что схема eMG может повысить устойчивость решателя при расчете ударных волн средней силы, т.е. дозвуковых и сверхзвуковых полей потока. Для контроля устойчивости вычислений в качестве переменной для отслеживания выбрано глобальное максимальное значение числа Маха, исходя из того факта, что решатель HA3D обычно не разваливается, если максимальное число Маха не претерпевает значительных резких изменений. В частности, история сходимости на фиг. 10а,в показывает, что eMG с разрывным методом Галеркина с $p = 1$ столкнулся с низким риском неустойчивости (небольшое повышение числа Маха) только на начальном этапе вычислений, где итерационное решение, стартовавшее из начального однородного потока, подверглось сильному нелинейному перестроению за счет взаимодействия с границами. После этого невязка устойчиво сходится к устойчивому состоянию, как показано на фиг. 10б, г. Контуры давления для решений второго и третьего порядка показаны на фиг. 11, где хорошо видны неограниченные ударные волны с резкими профилями. Однако на фиг. 10а, в показано, что решение $p = 2$ страдает от сильной неустойчивости, так что максимальное число Маха достигало совершенно нефизического значения 12. К счастью, eMG все еще поддерживает стабильность решателя без развала счета.

Для решения $p = 2$ сходимость по невязке демонстрирует периодические осцилляции, следовательно, поле течения переходит в нестационарное периодическое состояние. Нестационар-

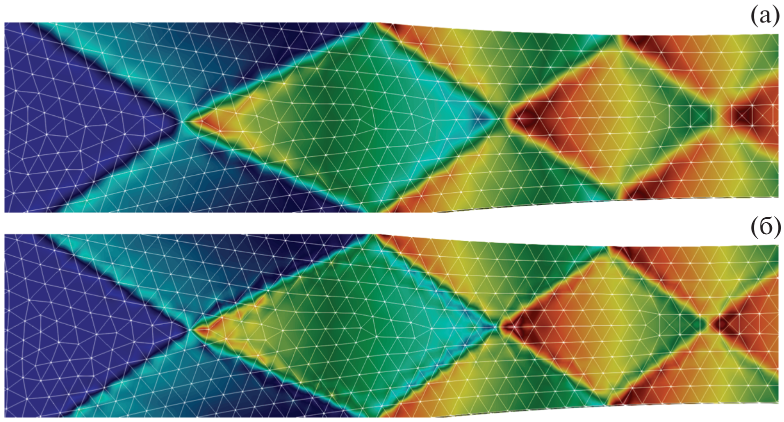


Фиг. 10. История сходимости для сверхзвукового сопла Лаваля при числе Маха 3: глобальный максимум числа Маха (а), (в), невязка по плотности (б), (г); $p = 1$ (а), (б), $p = 2$ (в), (г).

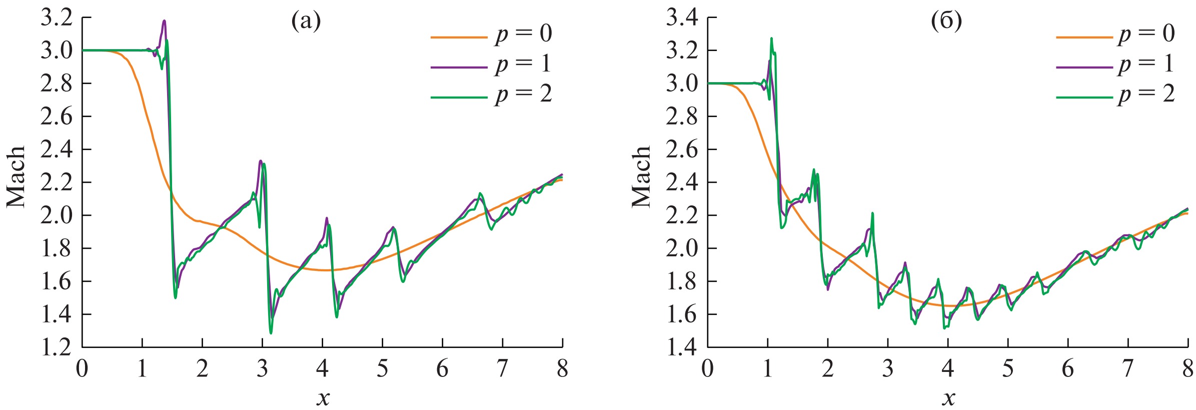


Фиг. 11. Контуры давления для сверхзвукового сопла Лаваля при числе Маха 3: $p = 1$ (а), $p = 2$ (б).

ность, вероятно, вызвана переносом возмущений, которые происходят от колебаний разрывов. Затем колебания переносятся вниз по течению и проходят весь путь до выхода из сопла, как показано на фиг. 11б. При ближайшем рассмотрении фиг. 12 видно, что основная ударная структура была хорошо разрешена, и ее ширина находится в пределах одного элемента. Решения довольно резкие, без эффектов сглаживания разрывов. Более того, ударные волны решения $p = 2$ почти в два раза уже, чем у решения $p = 1$.



Фиг. 12. Крупный план контуров давления и разрешение сетки: $p = 1$ (а), $p = 2$ (б). Наблюдается подсеточное разрешение для нескольких отражающихся скачков.

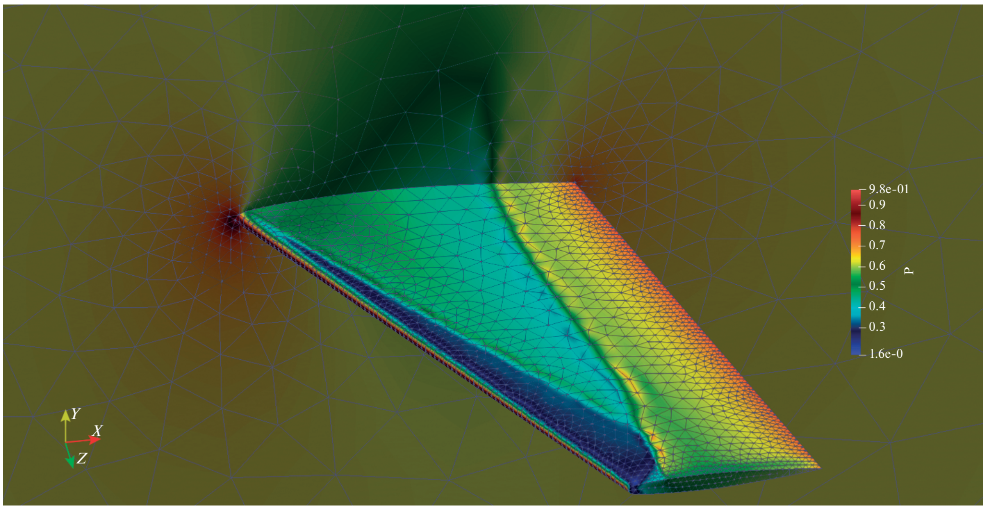


Фиг. 13. Распределения числа Маха, полученные вдоль оси x сопла Лаваля: $y = 0$ (а), $y = 1/5$ (б).

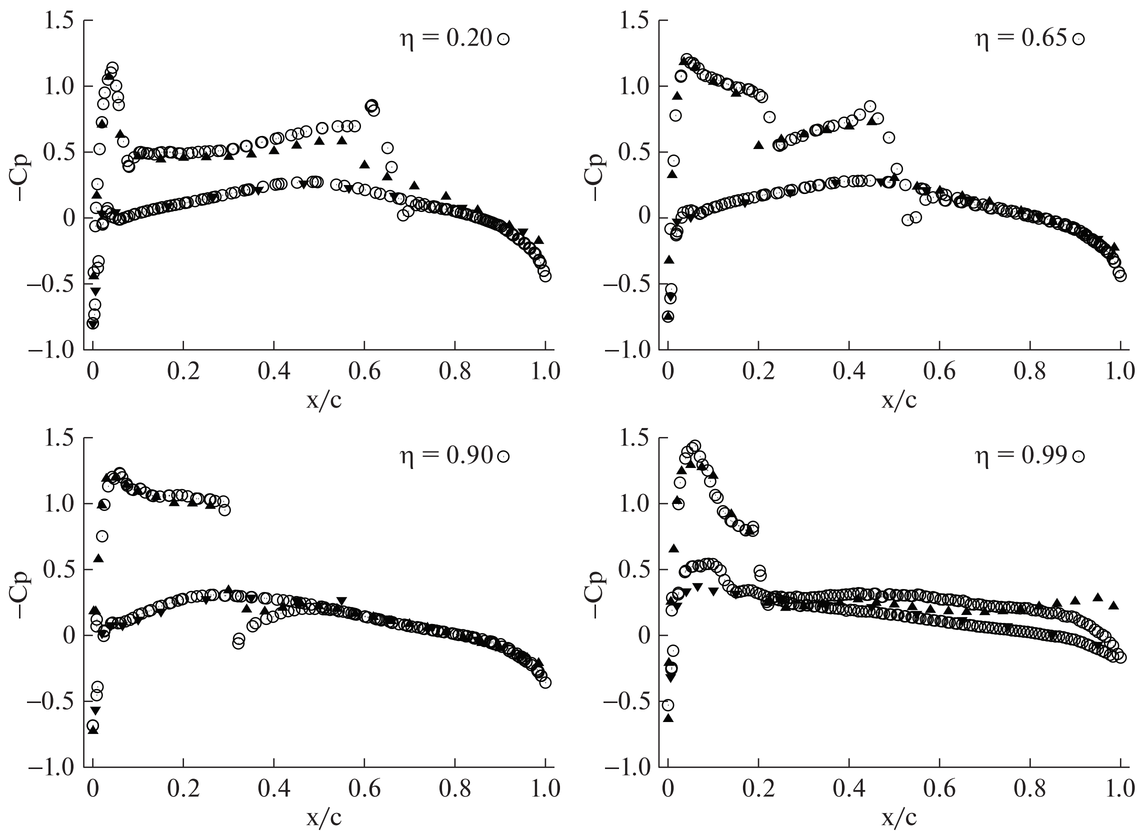
Эти результаты показывают, что схема eMG действительно может стабилизировать сквозной счет, в то время как использование традиционных методов без ограничения разрывов обычно приводит к расходящимся решениям (см., например, [20]). Из результатов, показанных на фиг. 13, следует, что профили ударной волны высокого порядка, выделенные вдоль оси x, находятся в пределах ширины одной ячейки, в то время как решение первого порядка ($p = 0$) не захватывает никаких разрывов при таком разрешении сетки. Отметим, что такая аппроксимация разрывов высокого порядка не противоречит теореме Годунова. Эта теорема лишь утверждает, что *линейные* численные схемы решения дифференциальных уравнений, обладающие свойством не порождать новых экстремумов, могут быть не более чем первого порядка точности. Поэтому нелинейные схемы могут создавать профили скачков высокого порядка, как, например, схема WENO. Хотя профили скачков высокого порядка являются резкими, решения демонстрируют колебания вблизи разрывов, испытывая так называемый феномен Гиббса. Использование ограничения или добавление искусственной диссипации для подавления осцилляций также заслуживает будущего исследования, несмотря на то что они все еще являются открытыми проблемами для специалистов по сквозному счету высокого порядка.

5.4. Трансзвуковое крыло ONREA M6

Крыло ONERA M6 рассматривается для оценки надежности сквозного счета в 3D. Эта конфигурация была использована в качестве эталонного случая (см. [21]). Решения по дозвуковому обтеканию были рассчитаны при числе Маха 0.8394 и угле атаки $\alpha = 3.06°$. Стационарные реше-



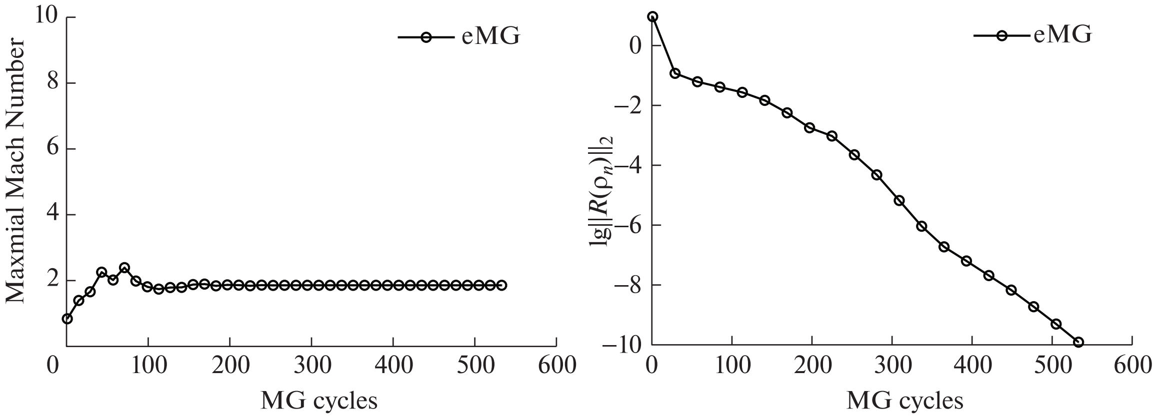
Фиг. 14. Контур давления и разрешение сетки: можно наблюдать подсеточное разрешение λ ударной волны.



Фиг. 15. Крыло ONREA M6: сравнение с экспериментальными данными в четырех точках пролета.

ния получены с использованием схемы по времени eMG и пространственной дискретизации разрывным методом Галеркина с $p = 1$.

На фиг. 14 показано установившееся течение, полученное на неструктурированной криволинейной сетке. В решении четко видна ударная волна λ, образованная двумя внутренними ударными волнами, которые сливаются вместе, образуя одну сильную ударную волну в области законцовки крыла. Подсеточное разрешение ударной волны можно наблюдать в центральной об-



Фиг. 16. История сходимости для крыла ONREA M6: глобальное максимальное число Маха (а), невязка плотности (б).

ласти верхней поверхности, где ячейки на поверхности очень крупные. Коэффициенты давления на поверхности крыла сравниваются с экспериментальными результатами в четырех различных пролетных точках вдоль крыла, а именно, $\eta = 0.44, 0.65, 0.90, 0.99$ (фиг. 15). Видно, что при всех расположениях крыла по пролету согласие вычисленного решения с экспериментальными данными достаточно хорошее. История сходимости полученного решения, которая монотонно сходится к устойчивому состоянию, показана на фиг. 16б. Максимальное число Маха также не подвержено резким изменениям, как показано на фиг. 16а. Таким образом, 3D-расчет, полученный с помощью схемы eMG, является эффективным и надежным.

6. ВЫВОДЫ

Схема экспоненциального интегрирования по времени первого порядка EXP1 была использована для повышения реализуемости решателя на основе разрывных конечных элементов Галеркина высокого порядка HA3D для расчета стационарных сжимаемых потоков. Метод eMG был разработан для сбалансированного рассмотрения эффективности, устойчивости и использования памяти. Обсуждены алгоритмы и физическая природа методов. Представлены результаты численных расчетов как гладких, так и разрывных течений. Для вычислений гладких течений метод eMG показывает p-независимую скорость сходимости для порядка аппроксимации $p = 1$–3, и он в 20 раз быстрее, чем ILU-GMRES при расчете трехмерного течения около сферы. По сравнению с полностью неявным методом, метод eMG использует меньше памяти и достигает значительной вычислительной эффективности.

При сквозном расчете ударной волны метод eMG обладает высокой диссипативностью, что может повысить устойчивость сходимости к устойчивому состоянию. Однако текущий метод менее устойчив для гиперзвуковых потоков, и иногда не работает для сверхзвуковых потоков. Таким образом, метод eMG может использоваться для сквозного счета только для ударных волн средней силы. Однако, как только он срабатывает, можно одновременно получить очень резкие разрывы и полностью сходящиеся решения. Хотя полученные результаты весьма обнадеживают, необходимы дальнейшие исследования для создания лучшего высокочастотного сглаживателя для сглаживания высокочастотных колебаний как для гладких, так и для разрывных течений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Helenbrook B., Mavriplis D., Atkins H.* Analysis of p-multigrid for continuous and discontinuous finite element discretizations. 16th AIAA Comput. Fluid Dynam. Conf. AIAA-2003-3989, 2003.
2. *Helenbrook B.T., Atkins H.L.* Application of p-multigrid to discontinuous Galerkin formulations of the Poisson equation // AIAA J. 2006. V. 44. № 3. P. 566–575.
3. *Fidkowski K.J., Oliver T.A., Lu J., et al.* p-Multigrid solution of high-order discontinuous Galerkin discretizations of the compressible Navier-Stokes equations // J. Comput. Phys. 2005. V. 207. № 1. P. 92–113.
4. *Atkins H., Helenbrook B.* Numerical evaluation of p-multigrid method for the solution of discontinuous Galerkin discretizations of diffusive equations. 17th AIAA Comput. Fluid Dynam. Conf. AIAA-2005-5110, 2005.

5. *Bassi F., Franchina N., Ghidoni A., et al.* Spectral p-multigrid discontinuous Galerkin solution of the Navier–Stokes equations // Inter. J. Numer. Meth. Fluid. 2011. V. 67. № 11. P. 1540–1558.
6. *Li S.-J., Wang Z.J., Ju L., Luo L.-S.* Explicit large time stepping with a second-order exponential time integrator scheme for unsteady and steady flows. 55th AIAA Aerospace Sci. Meet. AIAA-2017-0753, 2017.
7. *Li S.-J., Wang Z.J., Ju L., Luo L.-S.* Fast time integration of Navier–Stokes equations with an exponential-integrator scheme. 2018 AIAA Aerospace Sci. Meet. AIAA-2018-0369, 2018.
8. *Li S.-J., Luo L.-S., Wang Z.J., Ju L.* An exponential time-integrator scheme for steady and unsteady inviscid flows // J. Comput. Phys. 2018. V. 365. P. 206–225.
9. *Li S.-J.* Mesh curving and refinement based on cubic Bézier surface for high-order discontinuous Galerkin methods // Comput. Math. and Math. Phys. 2019. V. 59. №. P. 2080–2092.
10. *Li S.-J., Ju L., Hang S.* Adaptive exponential time integration of the Navier–Stokes equations. AIAA-2020-2033, 2020.
11. *Caliari M., Ostermann A.* Implementation of exponential Rosenbrock-type integrators // Appl. Numer. Math. 2009. V. 59. № 3. P. 568–582.
12. *Tokman M., Loffeld J.* Efficient design of exponential-Krylov integrators for large scale computing // Procedia Comput. Sci. 2010. V. 1. № 1. P. 229–237.
13. *Saad Y.* GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems // SIAM J. Sci. Stat. Comput. 1986. V. 7. № 3. P. 856–869.
14. *Saad Y.* Analysis of some Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator // SIAM J. Numer. Anal. 1992. V. 29. № 1. P. 209–228.
15. *Moler C.* Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years later // SIAM J. Numer. Anal. 2003. V. 45. № 1. P. 3–49.
16. *Roe P.* Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes // J. Comput. Phys. 1981. V. 43. № 2. P. 357–372.
17. *Kitamura K., Shima E.* Towards shock-stable and accurate hypersonic heating computations: A new pressure flux for AUSM-family schemes // J. Comput. Phys. 2013. V. 245. P. 62–83.
18. *Pierce N., Giles M.* Preconditioning compressible flow calculations on stretched meshes. 34th Aerospace Sci. Meet. and Exhibit. AIAA-1996-889, 1996.
19. *Toro E.* Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. Springer, 1999.
20. *Persson P.-O., Peraire J.* Sub-cell shock capturing for discontinuous Galerkin methods. 44th AIAA Aerospace Sci. Meet. and Exhibit. AIAA-2006-112, 2006.
21. *Schmitt V., Charpin F.* Pressure distributions on the ONERA-M6-Wing at transonic mach numbers. Experimental data base for computer program assessment. Rep. Fluid Dynam. Panel Work. Group 04, AGARD-AR 138, May 1979.