

О применении уравнений нелинейной термоупругости к генерации адаптивных сеток

Н. Г. Бураго,* С. А. Иваненко[†]

*Институт проблем механики РАН, burago@ipmnet.ru

[†]Вычислительный центр РАН

Аннотация

Уравнения нелинейной термоупругости использованы для генерации адаптивных сеток. Даны примеры построения подвижных адаптивных сеток при решении задач гидрогазодинамики.

Введение

Теория генерации сеток [1, 2, 3, 4, 5] имеет много общего с теорией упругости, поскольку обе теории изучают отображения одной области на другую, удовлетворяющие сходным наборам требований: помимо существования и единственности отображения требуется положительность якобиана отображения, гарантирующая отсутствие выворачивания элементарных объемов, инвариантность уравнений по отношению к смене системы координат и по отношению к ортогональным преобразованиям (поворотам) конфигураций образа и прообраза, обратимость и контроль деформаций. Требования инвариантности при генерации сеток часто ослаблены.

Наличие указанного сходства отмечалось во многих работах [4, 6, 7, 8, 9], однако для построения сеток уравнения теории упругости не применялись, так как казалось безумием решать сложную нелинейную краевую эллиптическую задачу термоупругости всего лишь для вспомогательной цели наведения сетки в области решения. В настоящее время уравнения для генерации сеток не уступают по сложности уравнениям теории упругости (см. например, [1, 2, 3, 4, 10, 11]). При этом

в теории генерации сеток накоплен опыт эффективного решения нелинейных краевых задач для сложных систем эллиптических уравнений, позволяющий применить уравнения термоупругости к задаче генерации сеток и посмотреть, что получится.

1 Постановка задачи

В работе [8] было предложено применять уравнения теории термоупругости к задаче генерации адаптивных сеток в следующем виде:

$$\delta \left(\int_{\tilde{V}} \tilde{\Psi} d\tilde{V} \right) = 0, \quad \tilde{\Psi} = \tilde{\Psi}(\tilde{\varepsilon}, \tilde{T}), \quad \tilde{\varepsilon} = (\tilde{\nabla} \mathbf{x}^T \cdot \tilde{\nabla} \mathbf{x} - \mathbf{I})/2$$

$$\tilde{\mathbf{x}} \in \partial \tilde{V}, \quad t \geq 0 : \quad \mathbf{x}(\tilde{\mathbf{x}}, t) = \mathbf{x}_*(\tilde{\mathbf{x}}, t)$$

где $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\tilde{\mathbf{x}}, t)$ - искомое отображение, t - время, $\mathbf{x} = \mathbf{x}_*(\tilde{\mathbf{x}}, t)$ - заданный или определяемый в ходе решения физической задачи закон движения границы, $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3) \in V$ - физические координаты, $\tilde{\mathbf{x}} = (\tilde{x}^1, \tilde{x}^2, \tilde{x}^3) \in \tilde{V}$ - параметрические координаты, $\tilde{\Psi}$ - энергия деформаций координатной среды, являющаяся инвариантной положительной функцией от деформаций координатной среды $\tilde{\varepsilon}$ и адаптационной функции \tilde{T} , $\tilde{\nabla}$ - оператор пространственного дифференцирования в параметрическом пространстве, Адаптационная функция является скалярной неотрицательной функцией, характеризующей ошибку аппроксимации решения физической задачи и зависящей от его производных и шагов сетки.

В настоящей работе приводятся результаты численных экспериментов для функционала энергии деформации, отвечающего случаю изотропной упругой среды:

$$\int_{\tilde{V}} \tilde{\Psi} d\tilde{V} = \int_{\tilde{V}} \left[\lambda(\tilde{\varepsilon} : \mathbf{I})^2/2 + K(\tilde{\varepsilon} : \mathbf{I})\tilde{T} + \mu \tilde{\varepsilon} : \tilde{\varepsilon} \right] J^{-\alpha} d\tilde{V}$$

где $J = \max(\det(\tilde{\nabla} \mathbf{x}), \beta)$, $\beta > 0$ - малое положительное число, $\alpha \geq 0.5$ - показатель степени, множитель $J^{-\alpha}$ обеспечивает свойство барьерности (функционал имеет максимум - барьер на вывернутых ячейках с отрицательным значением якобиана $\det(\tilde{\nabla} \mathbf{x})$). Коэффициенты

$K = \lambda + 2/3\mu$, λ и μ играют роль коэффициентов упругости для координатной среды. Из теории упругости известно, что если отношение K/μ велико, то отображение выравнивает относительные объемы ячеек сетки, если же оно мало, то отображение стремится сохранить форму ячеек. Отношение $\tilde{T}/max(K, \mu)$ определяет интенсивность адаптации сетки к решению.

Адаптационная функция \tilde{T} является некоторой положительной функцией производных решения физической задачи и шагов сетки, связанной с ошибкой аппроксимации. Здесь она исполняет роль "антитемпературы": чем она больше, тем больше сжата координатная среда. В реальной сплошной среде рост температуры вызывает, как правило, не сжатие, а расширение и температурный член имеет соответственно обратный знак. Сжатие сетки уменьшает локальную ошибку аппроксимации, поскольку она пропорциональна некоторой положительной степени шага сетки.

Первый множитель в функционале энергии (выражение в квадратных скобках) является регуляризатором и придает оператору сеточных уравнений (уравнений Эйлера для данного функционала) свойство эллиптичности. В данном случае он соответствует простейшему варианту изотропной теории упругости. Отметим, что в большинстве сеточных алгоритмов такие регуляризаторы приводят к условиям минимума функционала энергии (уравнениям Эйлера) с оператором Лапласа или с обращенным оператором Лапласа.

Второй множитель в функционале энергии (множитель с якобианом J) обеспечивает свойство барьерности [10, 11] и позволяет при генерации сеток итерационным методом стартовать с плохих сеток, содержащих ячейки нулевого или отрицательного объема, и, тем не менее, быстро исправить такие сетки в процессе итераций.

Краевая задача для сеточных уравнений ставится путем задания границы образа, которая или известна заранее, или определяется в ходе решения физической задачи. Чтобы уменьшить деформации сдвига приграничных ячеек сетки на гладких участках границы разрешается свободное распределение граничных узлов по граничной поверхности, определяемое условиями минимума энергии деформации.

Условиями минимума для рассматриваемого сеточного функционала являются уравнения нелинейной термоупругости и соответствующие естественные граничные условия, которые здесь не выписываются, так как явно не используются. Применяемые итерационные алгоритмы решения используют непосредственно приводимую ниже вариационную формулировку условий минимума и на дискретном уровне реализуются

подобно явным схемам без формирования и хранения алгебраических уравнений. При этом основной операцией на каждой итерации является вычисление невязок (градиентов дискретного сеточного функционала).

2 Метод решения

Минимизация сеточного функционала осуществлялась 1) методом установления, реализующим явное интегрирование параболических уравнений, полученных дописыванием в сеточные уравнения нестационарного члена с производными от координат по фиктивному времени; и 2) итерационным методом, использующим внешние ньютоновские итерации по нелинейности и внутренние итерации по методу сопряженных градиентов для линейаризованных задач метода Ньютона.

Таким образом, оба метода используют следующую модифицированную галеркинскую вариационную формулировку задачи генерации сеток с дополнительным нестационарным членом, придающим задаче свойства параболичности:

$$\int_{\tilde{V}} M \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \tilde{t}} \cdot \delta \mathbf{x} d\tilde{V} + \int_{\tilde{V}} [(L(\tilde{\nabla} \mathbf{x}, J) : \tilde{\nabla} \mathbf{x}) : \tilde{\nabla} \delta \mathbf{x} + f(\tilde{\nabla} \mathbf{x}, J) \left(\sum_{i,j,k} e_{ijk} \delta((\tilde{\nabla}_i x_1)(\tilde{\nabla}_j x_2)(\tilde{\nabla}_k x_3)) \right)] d\tilde{V} = 0 \quad (1)$$

где первое слагаемое представляет дополнительный нестационарный член, второе слагаемое получено варьированием первого множителя в функционале энергии (регуляризатор), третье слагаемое получено варьированием второго множителя в функционале энергии (барьер). Для сокращения записи введены следующие обозначения: $L > 0$ - симметричный положительно определенный оператор, $f > 0$ - скалярная функция, e_{ijk} - адьтернирующий тензор (тензор Леви-Чивиты), \tilde{t} - фиктивное время, $M > 0$ - коэффициент при нестационарном члене. Выражение со знаком суммы представляет вариацию якобиана. Конкретные выражения для L и f определяются исходным функционалом энергии, их подробная запись для изложения алгоритма не требуется и, поэтому, не приводится.

Данное общее вариационное уравнение может выражать как условия минимума выписанного выше функционала теории упругости, так и

представлять галеркинскую вариационную форму большинства применяемых в настоящее время сеточных уравнений. Отличия будут лишь в выражениях для коэффициентов M , L и f .

Величины L и f являются функциями якобиана J и других тензорных инвариантов градиента деформации $\tilde{\nabla} \mathbf{x}$ (в нашем случае, инвариантов тензора деформации $\tilde{\varepsilon}$). Оператор $L > 0$ отвечает за регуляризацию (за эллиптичность пространственного оператора задачи), а скаляр $f > 0$ призван обеспечить свойство барьерности, гарантирующее положительность якобиана. Скалярный множитель $M > 0$ является атрибутом численного метода в алгоритме установления и отвечает за параболичность.

Опишем основные детали численной реализации. Сетка на прообразе полагается заданной. Для образа задаются координаты граничных узлов или, в случае задач с подвижными границами, указывается алгоритм их определения в соответствии с содержанием физической задачи. В последнем случае при решении физической задачи расчет каждого шага по времени расщепляется на два этапа: сначала на первом этапе из решения физической задачи определяется новое положение границы, а затем на втором этапе из решения сеточной вариационной задачи находятся новые положения внутренних узлов и распределение "скользящих" по границе граничных узлов.

Для треугольных (двумерный случай) или тетраэдральных (трехмерный случай) ячеек применяется линейная аппроксимация искомых функций по ячейкам. В случае сетки, состоящей из ячеек, имеющих большее число узлов, они разбиваются на вспомогательные треугольные или тетраэдральные ячейки, которые и используются при вычислении интегралов.

Для вычисления интегралов применяются формулы прямоугольников с точками численного интегрирования в узлах сетки для нестационарных членов и в центрах треугольных или тетраэдральных ячеек в остальных членах. С одной стороны это приводит к диагональной матрице "масс" при нестационарных членах, что позволяет применить явную схему интегрирования по фиктивному времени в методе установления, а с другой стороны это позволяет избежать неустойчивости "песочных часов", которая возникает из-за погрешностей интегрирования при использовании четырехугольных (двумерный случай) и шестигранных (трехмерный случай) ячеек [12].

Оба алгоритма реализованы без формирования матриц систем алгебраических уравнений, поскольку на каждом шаге интегрирования вспомогательной параболической задачи (первый алгоритм) или на ка-

ждой итерации метода сопряженных градиентов (второй алгоритм) векторы невязок уравнений вычислялись так же, как это делается обычно в явных схемах.

В первом алгоритме шаг по "времени" выбирался из обычного для параболических задач условия устойчивости явной схемы процесса установления. Величины регуляризирующего оператора (коэффициенты L) и оператора, ответственного за выпуклость ячеек (коэффициенты f), уравнивались локально в каждой ячейке из требования равенства норм соответствующих двух групп членов путем домножения скаляра f на определяемый этим равенством поправочный коэффициент. Это означает, что первоначальные значения коэффициента f масштабировались в процессе установления так, чтобы регуляризатор (L), обеспечивая корректность задачи, имел бы минимальное влияние на решение. Поскольку коэффициенты сеточного функционала задаются по желанию расчетчика, то такой алгоритмический способ поправки значений f с вполне ясной целью оправдан. Поясним, что если член с коэффициентом f опустить, то пропадет свойство барьерности и для невыпуклых областей рассчитанная сетка будет содержать ячейки с отрицательными объемами. Напротив, если члены с f будут слишком велики, то пространственный оператор задачи потеряет свойство эллиптичности. С ростом величины членов с f обусловленность задачи ухудшается (число обусловленности матрицы линеаризованной дискретной задачи возрастает). Упомянутое масштабирование оптимизирует выбор f .

Во втором алгоритме для сходимости метода Ньютона поправка координат ограничивалась на каждой итерации малой долей размера средней ячейки. Для устойчивости итераций метода сопряженных градиентов применялось предобуславливание системы уравнений путем умножения вычисленных невязок на приближенную обратную матрицу. Приближенная обратная матрица принималась диагональной и составленной из обратных диагональных элементов матрицы системы решаемых алгебраических уравнений, определить и сохранить которые не составляет большого труда.

Против ожиданий, в расчетах оказалось, что первый алгоритм (вариант метода нефизического установления, разработанного для задач генерации сеток в [2]) является значительно более экономичным и надежным, нежели второй алгоритм (метод Ньютона плюс сопряженные градиенты, традиционно применяемый для нелинейных задач теории упругости [13]).

3 Примеры расчета

Сначала были выполнены численные эксперименты по построению сеток в невыпуклых областях. Качество сеток оценивалось по отсутствию вывернутых и невыпуклых ячеек, а также по отношению объемов самой маленькой и самой большой ячеек. Отметим, что на стандартных тестах (квадрат без одной четверти, квадрат с вырезанным острым клином) отношение объемов достигало 0.25-0.3. Это означает неплохое качество рассчитанных сеток, поскольку все их ячейки выпуклы, а сами сетки близки к равномерным.

Эксперименты с различными функциями L и f , показали, что имеется бесконечное множество вариантов, обеспечивающих удовлетворительное качество сеток и не требующих корректности начальной сетки для реализации итерационного процесса решения. Были проведены также численные эксперименты с неголономными вариационными уравнениями, в которых модифицированное вариационное сеточное уравнение не выражало минимальность какого-либо сеточного функционала энергии, а постулировалось, то есть коэффициенты оператора $L > 0$ и функция f задавались вне связи с каким-либо функционалом энергии деформаций генерируемой сетки. Расчеты показали, что итерации сходятся к невырожденным сеткам, например, при задании $f = 1.0$ или $f = J$. Хорошие сетки получаются при $f = (J^4 + J^{-4}) * (L : \tilde{\nabla} \mathbf{x}) : \tilde{\nabla} \mathbf{x}$. Оператор L при этом задавался так, чтобы в соответствующих данному вариационному уравнению условиях Эйлера фигурировали бы либо оператор Лапласа, либо оператор изотропной упругости.

Отметим еще раз, что алгоритм установления работает значительно быстрее, нежели ньютоновские итерации по нелинейности плюс метод сопряженных градиентов.

Теперь приведем результаты применения уравнений нелинейной теории термоупругости к задаче управления адаптивной сеткой. Это удобно сделать на примере нестационарного сверхзвукового течения идеального газа в канале со ступенчатым сужением, поскольку эта задача является одним из наиболее распространенных тестов для численных методов и ее решение хорошо известно. Результаты, полученные по нашей программе АСТРА [14], показаны на Рис. 1-2. Положение ударных волн и параметры течения хорошо согласуются и с известными данными [15] и недавно уточненными решениями [16], [17].

Начальная равномерная сетка и конфигурация области решения показаны на Рис. 1. Газ течет слева направо. На верхней и нижней

границах заданы условия непротекания. На левой границе заданы параметры невозмущенного потока ($\rho = 1$, $v_x = 1$, $v_y = 0$, $U = 0.44$). Показатель адиабаты γ и число Маха M равны: $\gamma = 1.4$, $M = 3$. На выходной границе поток сверхзвуковой и граничных условий не требуется. Высота области решения 1.0, длина - 3.0, высота ступеньчатого препятствия 0.2, расстояние от входа до препятствия - 0.6. В начальный момент времени $t = 0$ поток невозмущен, стационарная структура потока развивается к значению времени $t = 4.0$ и окончательно устанавливается к $t = 12$. Расчет проводился на сетках: 30x10, 60x20, 120x40, 240x80.

Применена простейшая двухслойная центрально-разностная явная схема, регуляризованная экстраполяцией давления на новый временной слой и монотонизирующим нелинейным сглаживанием основных искомым функций. Для устранения немонотонностей по координатам выявлялись ребра сетки, в узлах которых вторые производные от сглаживаемой функции меняют знак (признак немонотонности) и в таких узлах включалось обычное неконсервативное лагранжево сглаживание по соответствующей координате (старое значение функции заменялось средним от ее значений в точках пересечения границы окрестности узла с данной координатной линией с весом 0.5).

Необходимые для такого способа монотонизации вторые производные ϕ_{xx} , ϕ_{yy} и ϕ_{zz} от сглаживаемой функции $\phi(\mathbf{x})$ при использовании кусочно-линейной аппроксимации и нерегулярной сетки вычислялись как обобщенное решение вспомогательных вариационных задач следующего вида (на примере координаты x):

$$\int_V (\phi_{xx} \delta \phi_{xx} + \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \delta \phi_{xx}}{\partial x}) dV = 0$$

на границе вторая производная ϕ_{xx} полагалась равной нулю.

Расчет перемещения узлов адаптивной сетки и учет дополнительной конвекции из-за разности скоростей сетки и среды производились в конце каждого шага по времени как отдельный этап расчета, который и обеспечивает адаптацию сетки к решению. Для повышения точности таким алгоритмом адаптации можно снабдить любую уже применяемую эйлерову или лагранжеву схему, работающую на неравномерной сетке. Алгоритм адаптации сетки к решению реализуется как дополнительная подпрограмма к основному алгоритму решения.

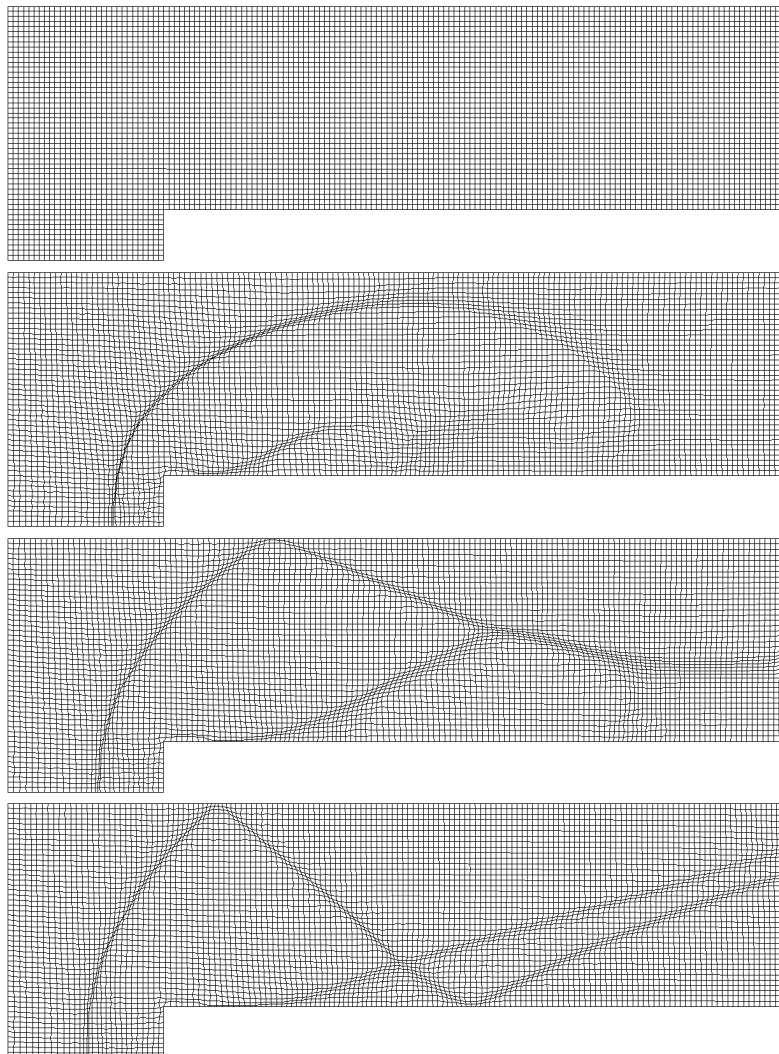


Рис. 1. Применение уравнений нелинейной термоупругости для управления адаптивной сеткой в задаче о сверхзвуковом течении в канале со ступенчатым сужением для числа Маха $M=3$. Картинки соответствуют моментам времени 0.0, 0.5, 1.0, 2.0. Результат получен с помощью программы АСТРА.

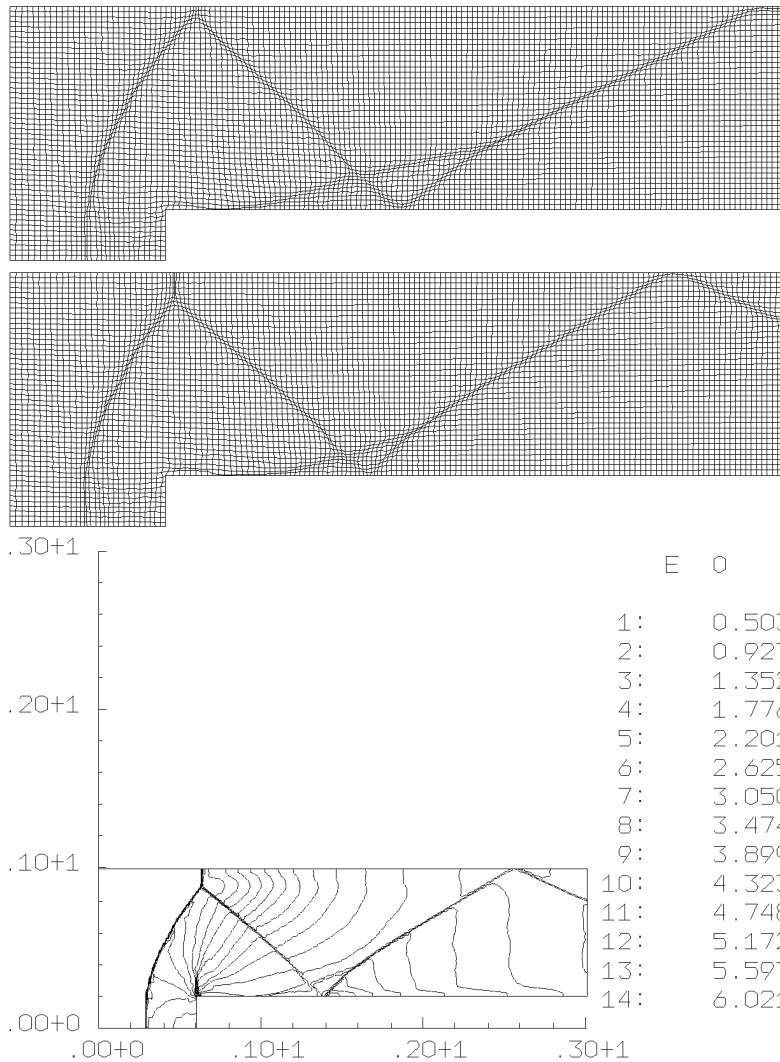


Рис. 2. Применение уравнений нелинейной термоупругости для управления адаптивной сеткой в задаче о сверхзвуковом течении в канале со ступенчатым сужением для числа Маха $M=3$. Адаптивная сетка показана для моментов времени 3.0, 4.0. Распределение плотности отвечает моменту времени 4.0. Результат получен с помощью программы АСТРА.

Расчеты также проводились и с использованием ряда других конечно-элементных интерпретаций распространенных конечно-разностных и конечно-объемных схем.

Отличие результатов по различным схемам заметно на грубых сетках и быстро исчезают при их измельчении. Благодаря адаптивности даже на самой грубой сетке (30x10) основные скачки и отражения рассчитываются правильно, в то время как решение на грубых неадаптивных сетках является явно неудовлетворительным. Адаптация сетки позволяет получать неплохие решения с помощью самых простых схем.

На рис. 3 показано поведение адаптивной сетки, управляемой уравнениями нелинейной термоупругости, в задаче о термогравитационной конвекции. Эта задача служит стандартным тестом для алгоритмов расчета несжимаемых вязких течений (см. подробное описание в [18, 19, 20]).

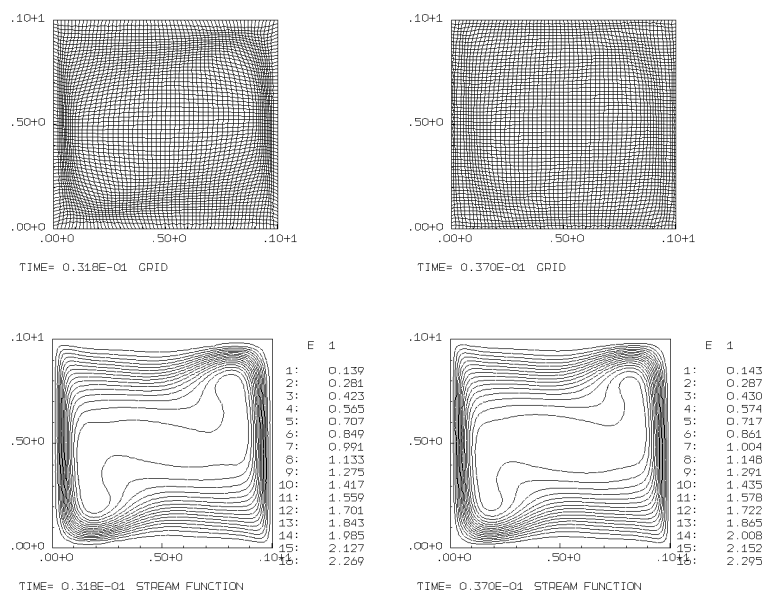


Рис. 3. Поведение адаптивной сетки, управляемой уравнениями нелинейной термоупругости, и функции тока в задаче о термогравитационной конвекции вязкой несжимаемой жидкости при числе Грасгофа $Gr =_{10} 7$ для двух случаев выбора адаптационной функции: функция тока (левая колонка) и завихренность (правая колонка). Результат получен с помощью программы АСТРА.

По уравнениям Навье-Стокса-Буссинеска рассчитано движение тяжелой вязкой жидкости в каверне под действием сил плавучести, обусловленных неравномерным распределением температуры в поле сил тяжести (правая стенка горячая ($T=1$), левая стенка холодная ($T=0$)), горизонтальные стенки теплоизолированы. На стенках заданы условия прилипания. Параметры подобия равны: $Gr=10^7$, $Pr=1.4$.

В случае выбора нормы градиента функции тока в качестве адаптационной функции (левая колонка Рис. 3) сетка сгущается в зоне максимальных скоростей, так как градиенты функции тока при этом максимальны по модулю. Около стенок и в центральной части области решения скорости малы и там сетка разрежена. В правой колонке на Рис. 3 приведено решение для случая, когда роль адаптационной функции отведена норме градиента завихренности. Сетка при этом сгущается у стенок. Отсюда видно, что поведение адаптивных сеток существенно зависит от выбора адаптационной функции и могут возникать противоречия в требованиях наилучшего описания компонентов решения. Хорошая сетка для одних компонентов может быть неудачной для других.

Расчеты серии тестовых задач [18, 19, 20] для термогравитационных конвективных течений вязкой жидкости, выполненные в настоящей работе, показали существенное уменьшение погрешности численных решений при использовании адаптивных сеток: точность результатов на адаптивной сетке 20×20 и на равномерной сетке 80×80 примерно одинакова (сопоставима).

Заключение

В настоящей работе показано, что уравнения нелинейной термоупругости можно использовать в целях построения сеток и управления их адаптацией к решению. С другой стороны показано, что методы решения, разработанные для сеточных уравнений, можно эффективно применить к задачам теории упругости.

Список литературы

- [1] Численное решение многомерных задач газовой динамики. Под редакцией С.К.Годунова. М.: Наука, 1976, 400 с.
- [2] Иваненко С.А. Адаптивно-гармонические сетки // М.: ВЦ РАН, 1997, 181 с.
- [3] Liseikin V.D. Grid Generation Methods. New York: Springer-Verlag, 1999.
- [4] Tompson J.F., Soni B.K., Weatherill N.P. (Eds.) Handbook of grid generation, CRC Press, Boca Raton, FL, 1999.
- [5] Гильманов А.Н. Методы адаптивных сеток в задачах газовой динамики. М.: Физматгиз, 2000, 248 с.
- [6] Лисейкин В.Д., Яненко Н.Н. О выборе оптимальных разностных сеток. Численные методы механики сплошной среды, Новосибирск, 1977, т.8, N7, с.100-104.
- [7] Ковеня В.М., Яненко Н.Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики. Новосибирск:Наука, 1981, 304 с.
- [8] Бурого Н.Г. Формулировка уравнений механики сплошной среды в подвижных адаптивных координатах // Числ. методы в меха тв. деф. тела, М., ВЦ АН СССР, 1984, С. 32-49.
- [9] Ball J.M. Convexity conditions and existence theorems in nonlinear elasticity // Arch. Rat. Mech. Anal. 1977. V. 63. P. 337-403.
- [10] Иваненко С.А. Барьерный метод построения квазигармонических сеток. ЖВМиМФ, 2000. Том 40. N. 11. С. 1600-1616.
- [11] Гаранжа В.А. Вариационный барьерный метод построения квази-зометрических сеток. ЖВМиМФ, 2000. Том 40. N. 11. С. 1617-1637.
- [12] Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. М.: Мир, 1977. 349 с.
- [13] Бурого Н.Г., Кукуджанов В.Н. Решение упругопластических задач методом конечных элементов // Вычислительная механика деформируемого твердого тела. М.: Наука, 1991. Вып. 2. С. 78-122.

- [14] Bourago N.G. Computer code ASTRA for nonlinear problems in continuum mechanics // Seventh Nordic Seminar on Computational Mechanics, Trondheim, Norway, October 14-15, 1994. P. 48-49;
- [15] Colella P., Woodward P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks // J. Comp. Phys., 1984. V. 54, P. 155-173.
- [16] Azarenok B.N. Variational barrier method of adaptive grid generation in hyperbolic problems of gas dynamics // SIAM J. Numer. Anal. 2001. Available at <http://www.math.ntnu.no/conservation/2001/042.html>
- [17] Azarenok B.N., Ivanenko S.A., Tang T. Godunov's scheme and moving adaptive grids. Report on Applied Mathematics. 2002. Available at <http://www.math.ntnu.no/conservation/2002/016.html>
- [18] de Vahl Davis G. and I. P. Jones. Natural convection in square cavity: A comparison exercise. Intern. J. Numer. Meth. Fluids. 1983. V. 3. P. 227.
- [19] Wheeler A. A. Four test problems for the numerical simulation of flow in Chochralski crystal growth, J. Crystal Growth, 1990. V. 99. P. 910.
- [20] Buckle U. and Schafer M. Benchmark results for the numerical simulation of flow in Czochralski crystal growth. J. of Crystal Growth, 126, 1993, p. 682-694.