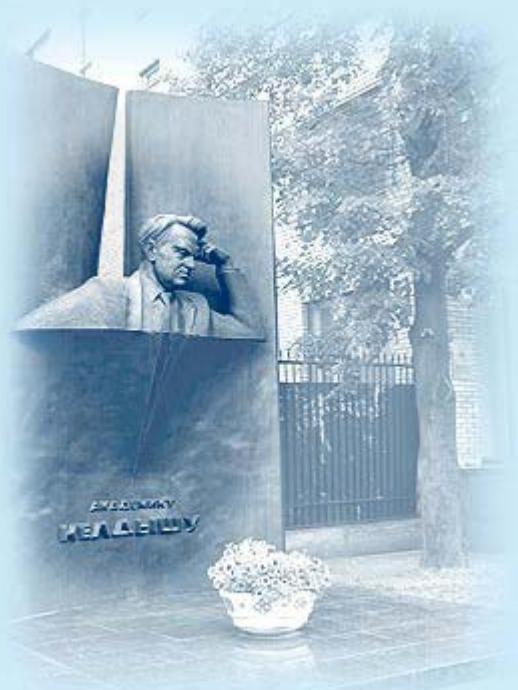




ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 86 за 2019 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

[Истомина М.А., Шильников Е.В.](#)

**Об аппроксимации
потоковых величин на
пространственных сетках
нерегулярной структуры**

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Истомина М.А., Шильников Е.В. Об аппроксимации потоковых величин на пространственных сетках нерегулярной структуры // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 86. 22 с. doi:[10.20948/prepr-2019-86](https://doi.org/10.20948/prepr-2019-86)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-86>

ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. КЕЛДЫША
Российской академии наук

М.А. Истомина, Е.В. Шильников

Об аппроксимации потоковых величин
на пространственных сетках нерегулярной
структурь

Москва — 2019

М.А. Истомина, Е.В. Шильников **Об аппроксимации потоковых величин на пространственных сетках нерегулярной структуры**

Выписаны пространственные аппроксимации производных для построения потоковых величин в методе конечного объема. Приведены формулы для конечных объемов с гранями, представляющими собой треугольники, четырехугольники, а также пяти- и шестиугольники. Аппроксимации построены для использования в открытом программном комплексе OpenFOAM.

Ключевые слова: метод конечного объема, неструктурированные сетки, пространственные аппроксимации, открытый программный комплекс OpenFOAM

M.A. Istomina, E.V. Shilnikov **About approximation of stream sizes on spatial grids of irregular structure**

Spatial approximations of derivatives for the construction of flux quantities in the finite volume method are presented. Formulas for finite volumes with faces representing triangles, quadrangles, as well as five - and hexagons are given. Approximations are constructed for use in open-source platform OpenFOAM.

Key words: finite volume method, unstructured grids, spatial approximations, open program complex OpenFOAM

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 19-01-00262, 18-01-00405 и 18-01-00587.

Содержание

1 Введение	3
2 Аппроксимация потоковых величин для двумерного конечного объема в виде четырехугольника	4
3 Аппроксимация потоковых величин для трехмерного конечного объема с четырехугольной гранью	8
4 Аппроксимация потоковых величин для контрольного объема с гранями в виде треугольников, пятиугольников и шестиугольников	11
5 Пример расчета и заключение	20

1 Введение

Использование пространственных сеток нерегулярной структуры для проведения численного моделирования задач газо- и гидродинамики сопряжено с выбором способа аппроксимации потоковых величин на границах соответствующих контрольных объемов. Способ аппроксимации потоковых величин в значительной мере определяет точность, устойчивость и вычислительную эффективность разностного алгоритма.

При задании искомых газодинамических величин в узлах расчетной сетки контрольный объем выбирается как область, окружающую узел сетки, например, с использованием ячеек Дирихле.

При задании газодинамических величин в центрах ячеек разностной сетки в качестве контрольного объема удобно использовать ячейки расчетной сетки. Такой выбор контрольного объема используется в целом ряде научных и коммерческих программ, например, в открытом программном комплексе OpenFOAM [1], [2], [3], работах [4], [5]. Однако используемые в [1], [2] способы вычисления потоков обладают рядом недостатков, которые ограничивают их общность и налагают жесткие ограничения на устойчивость результирующего алгоритма.

В данной работе приведены формулы для аппроксимации потоков через грани пространственных ячеек для варианта контрольного объема, совпадающего с ячейкой неструктурированной пространственной сетки выпуклой формы с плоскими гранями.

Рассматриваются грани в виде треугольников, четырехугольников, пятиугольников и шестиугольников. Такой выбор форм граней позволяет обсчитывать до 99 процентов реально используемых пространственных ячеек. Приведенные формулы представлены в виде, удобном для программирования в пакете OpenFOAM. OpenFOAM воспринимает все ячейки как многогранники, как замкнутый набор плоских граней с произвольным числом вершин. В двумерном случае грани, через которые вычисляются потоки, превращаются в отрезки, поэтому какими бы сложными не были контрольные объемы, выражения для потоков все равно остаются простыми. В трехмерных сетках грани, через которые вычисляются потоки могут быть трех-, четырех-, пятигранными и т.д., поэтому аппроксимирующие выражения должны быть выписаны для каждого конкретного случая. Метод основан на аппроксимациях, использованных для регулярных шестигранных пространственных сеток в [1], [2].

2 Аппроксимация потоковых величин для двумерного конечного объема в виде четырехугольника

КГД система уравнений ([6], [7], [8], [9], [10]) для 2D-течения идеально-го политропного вязкого теплопроводного газа, записанная в общепринятых обозначениях в консервативной форме, имеет следующий вид

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} - (\operatorname{div} \mathbf{W})^T = 0, \quad \mathbf{W} = \begin{pmatrix} -\mathbf{j}_m \\ \Pi - \mathbf{j}_m \otimes \mathbf{u} - pI \\ \Pi \mathbf{u} - \mathbf{q} - \mathbf{j}_m(E + p)/\rho \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $\mathbf{U} = (\rho, \rho \mathbf{u}, E)^T$ – вектор консервативных переменных, \mathbf{W} – матрица, столбцы которой являются потоками консервативных переменных, $E = \rho \left(u_\varepsilon + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right)$ – полная энергия, $\mathbf{q} = -\kappa \nabla T$, I – единичная матрица, $p = \rho u_\varepsilon (\gamma - 1)$, $T = \frac{p}{\rho R}$, u_ε – удельная внутренняя энергия, $\mu = \tau p Sc$, $\kappa = \frac{\mu \gamma R}{(\gamma - 1) Pr}$, $\tau = \frac{\mu}{p Sc}$, γ – показатель адиабаты, Pr и Sc – числа Прандтля и Шмидта.

Применим следующий метод аппроксимации потоковых величин.

Пусть в 2D расчетной области задана разностная сетка, состоящая из произвольных выпуклых четырехугольников.

Применим метод конечных объемов. Проинтегрировав систему (1) по площади ячейки сетки S и используя формулу Грина, получим

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_S \mathbf{U} dS - \oint_L (\mathbf{W}^T, \mathbf{n}) dl = 0, \quad (2)$$

где \mathbf{n} – внешняя нормаль к контуру. Все грани считаем плоскими. Тогда на каждом ребре L нормаль \mathbf{n} определена однозначно. По теореме о среднем получаем

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} - \frac{1}{S} \sum \oint_L (\mathbf{W}^T, \mathbf{n}) dl = 0. \quad (3)$$

Здесь $\bar{\mathbf{U}} = \frac{1}{S} \int_S \mathbf{U} dS$, суммирование ведется по всем ребрам ячейки.

Пусть все величины в разностной схеме, которую мы строим, отнесены к центрам ячеек. Если все ячейки выпуклы, то таким центром можно счи-

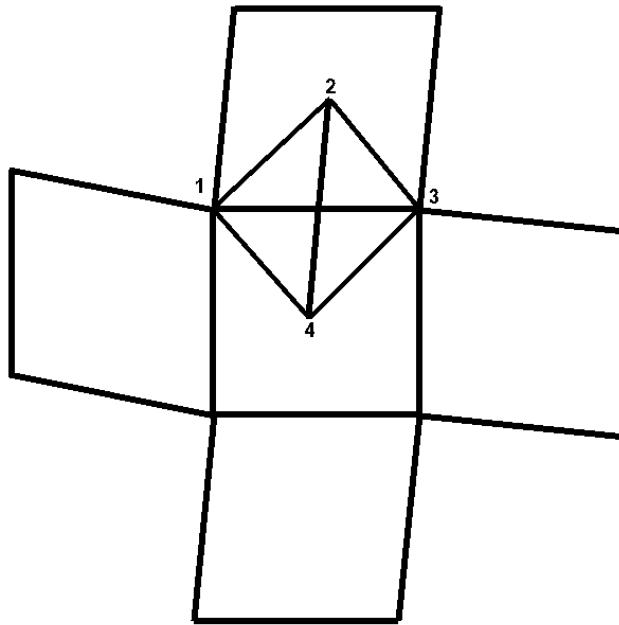


Рис. 1. Двумерная сетка. Двумерный четырехугольный конечной объем 1234

тать точку с координатами, равными средним арифметическим координат 4 вершин ячейки.

Усредненные выше по площади ячейки значения переменных \mathbf{U} будем считать искомыми значениями в центрах ячеек. Далее черту над переменными будем опускать.

Аппроксимируя производную по времени с первым порядком по явной схеме на шаге Δt , получаем соотношения для газодинамических величин на следующем временном слое

$$\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} + \frac{\Delta t}{S} \sum_{l=1}^4 (\mathbf{W}^T, \mathbf{n}_l) dl. \quad (4)$$

Для вычисления потоков консервативных переменных через ребра ячейки будем считать значения этих переменных и их производных постоянными на каждом ребре и отнесенными к их центрам. Значения самих переменных считаем равными полусумме соответствующих значений в соседних ячейках, прилежащих к данному ребру.

Внешняя нормаль к ребру 13 имеет координаты

$$\mathbf{n}(x_1, y_1, x_3, y_3) = \frac{(y_1 - y_3, x_3 - x_1)}{\sqrt{(x_3 - x_1)^2 + (y_1 - y_3)^2}}.$$

Площадь 1234 выражается через векторное произведение диагоналей 13

и 24

$$S_{1234} = \frac{1}{2} |\mathbf{13} \times \mathbf{24}| = \frac{1}{2} [(x_3 - x_1)(y_4 - y_2) - (x_4 - x_2)(y_3 - y_1)].$$

Приведем способ вычисления частных производных по x , y , z , которые входят в контурные интегралы от функции \mathbf{W}^T . Для этого рассмотрим вектор-функцию $\mathbf{A} = (f(x, y), 0)$, заданную в ячейке.

$$\int_S \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \right) dS = \int_{\partial L} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}) dl = \sum_{m=1}^4 n_{mx} \int_{\partial L_m} f dl. \quad (5)$$

Будем считать функцию $f(x, y)$ заданной в тт. 1234 и линейной на каждом ее ребре. Тогда последний интеграл легко вычисляется. Для каждого ребра m он равен произведению длины ребра l_m на среднее арифметическое значений функции в ее вершинах.

Применим к (5) теорему о среднем

$$\int_S \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \right) dS = \overline{\frac{\partial f}{\partial x}} \cdot S, \quad (6)$$

где $\overline{\frac{\partial f}{\partial x}}$ – некоторое среднее значение производной функции $f(x, y)$ внутри 1234.

Отнеся это значение к центру параллелограмма 1234, получим выражение для производной по x на ребре ячейки расчетной сетки, необходимое для вычисления потоков

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial x}} = \frac{1}{S} \sum_{m=1}^4 n_{mx} \cdot l_m \cdot f_m = \frac{1}{S} \sum_{n=1}^4 \alpha_n^x \cdot f_n, \quad (7)$$

где суммирование ведется по вершинам параллелограмма 1234.

$$S \frac{\partial f}{\partial x} = \int_{1234} f \cdot n_x \cdot dl = \sum_{i=1}^4 \frac{f_i + f_{i+1}}{2} (y_i - y_{i+1}), \quad (8)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{(f_4 - f_2)(y_3 - y_1) + (f_1 - f_3)(y_4 - y_2)}{2S}, \quad (9)$$

$$S \frac{\partial f}{\partial y} = \int_{1234} f \cdot n_y \cdot dl = \sum_{i=1}^4 \frac{f_i + f_{i+1}}{2} (x_{i+1} - x_i), \quad (10)$$

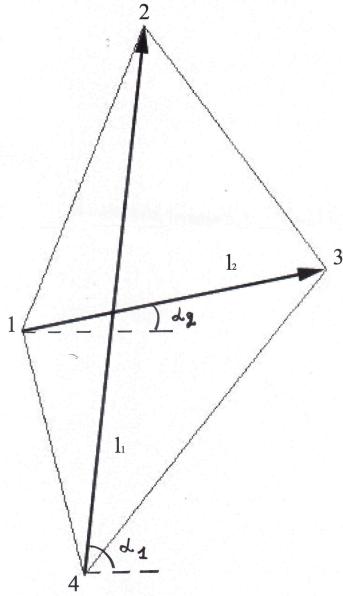


Рис. 2. Двумерный шаблон через диагонали

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{(f_4 - f_2)(x_1 - x_3) + (f_1 - f_3)(x_2 - x_4)}{2S}. \quad (11)$$

Можно выразить производные $\frac{\partial f}{\partial x}$ и $\frac{\partial f}{\partial y}$ через производные по диагоналям l_1 и l_2 , чтобы избежать определения нумерации расчетных точек для каждой точки грани.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial l_1} &= \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial l_1} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial l_1}, \\ \frac{\partial f}{\partial l_2} &= \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial l_2} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial l_2}. \end{aligned} \quad (12)$$

Для любых углов α_1 , α_2 (углы между осью x и направлениями диагоналей l_1 , l_2 соответственно) перепишем (12)

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial l_1} &= \frac{\partial f}{\partial x} \cos \alpha_1 + \frac{\partial f}{\partial y} \sin \alpha_1, \\ \frac{\partial f}{\partial l_2} &= \frac{\partial f}{\partial x} \cos \alpha_2 + \frac{\partial f}{\partial y} \sin \alpha_2, \end{aligned} \quad (13)$$

откуда

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\frac{\partial f}{\partial l_1} \sin \alpha_2 - \frac{\partial f}{\partial l_2} \sin \alpha_1}{\cos \alpha_1 \sin \alpha_2 - \sin \alpha_1 \cos \alpha_2}, \quad (14)$$

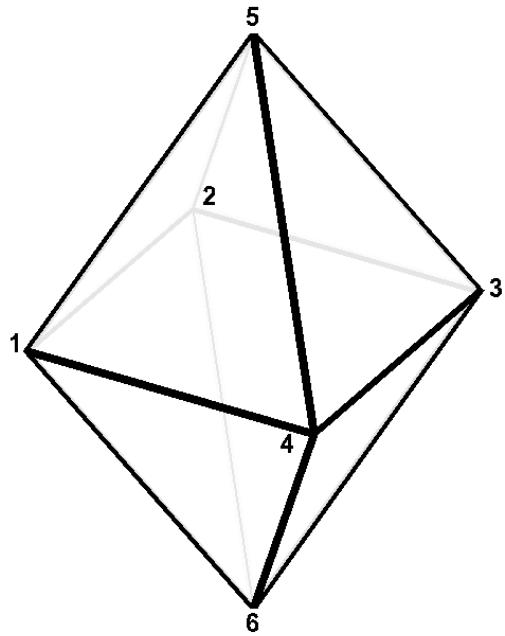


Рис. 3. Трехмерный конечный объем с четырехугольной гранью 1234

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\frac{\partial f}{\partial l_2} \cos \alpha_1 - \frac{\partial f}{\partial l_1} \cos \alpha_2}{\cos \alpha_1 \sin \alpha_2 - \sin \alpha_1 \cos \alpha_2},$$

3 Апроксимация потоковых величин для трехмерного конечного объема с четырехугольной гранью

Для 3D расчетной области задается разностная сетка, состоящая из произвольных выпуклых шестиугранников. На прямоугольной сетке (все шестиугранники являются прямоугольными параллелепипедами) новая схема должна переходить в стандартную аппроксимацию, используемую в стандартном КГД алгоритме.

Применим метод конечных объемов. Проинтегрировав систему (1) по объему ячейки сетки V и используя формулу Гаусса–Остроградского, получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \mathbf{U} dV - \int_S (\mathbf{W}^T, \mathbf{n}) dS = 0, \quad (15)$$

где S – граничная поверхность ячейки V , а \mathbf{n} – единичный вектор внеш-

ней нормали к этой поверхности. На каждой плоской грани S_l однозначно определена нормаль \mathbf{n}_l .

По теореме о среднем получаем

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} - \frac{1}{V} \sum_l \int_{S_l} (\mathbf{W}^T, \mathbf{n}_l). \quad (16)$$

Здесь $\bar{\mathbf{U}} = V^{-1} \int_V \mathbf{U} dV$, суммирование ведется по всем граням ячейки.

Все величины в разностной схеме относим к центрам ячеек. Усредненный по объему ячейки значения переменных $\bar{\mathbf{U}}$ будут искомыми значениями в центрах ячеек.

Используя явную схему с первым порядком аппроксимации по времени соотношения для газодинамических переменных на следующем временном слое записываются следующим образом

$$\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} + \frac{\Delta t}{V} \sum_{l=1}^6 \int_{S_l} (\mathbf{W}^T, \mathbf{n}_l) dS. \quad (17)$$

Для вычисления потоков консервативных переменных через грани ячейки будем считать значения этих переменных и их производных постоянными на каждой грани и отнесенными к их центрам. Значения самих переменных находим линейной интерполяцией соответствующих значений в соседних ячейках, прилежащих к этой грани. Для вычисления производных построим контрольный объем, связанный с гранью. В качестве контрольного объема возьмем октаэдр с вершинами в точках 123456 (Рис. 3).

Площадь грани и единичная нормаль к ней равны $S_{1234} = \frac{1}{2} |\mathbf{N}|$, $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{N}}{2S_{1234}}$, где $|\mathbf{N}|$ – модуль нормали к поверхности.

$$\int_S (\mathbf{W}^T, \mathbf{n}) dS = \frac{1}{2} ((\mathbf{W}^T, \mathbf{N})). \quad (18)$$

Объем октаэдра равен смешанному произведению диагоналей

$$V_8 = \frac{1}{6} ((\mathbf{13} \times \mathbf{24}) \cdot \mathbf{56}). \quad (19)$$

Площади боковых граней равны половинам модулей векторных произведений двух сторон. Единичные нормали – это отношение векторных произведений

двух сторон, деленных на удвоенную площадь.

Рассмотрим вектор-функцию $\mathbf{A} = (f(x, y, z), 0, 0)$, заданную в октаэдре. Применим к ней формулу Гаусса–Остроградского, получим

$$\int_{V_8} \operatorname{div} \mathbf{A} dV = \int_{\partial V_8} (\mathbf{A}, \mathbf{n}) dS = \sum_{m=1}^8 n_{mx} \int_{S_m} f dS. \quad (20)$$

Применив к объемному интегралу теорему о среднем, имеем

$$\int_{V_8} \operatorname{div} \mathbf{A} dV = \overline{\frac{\partial f}{\partial x}} = \frac{1}{V_8} \sum_{m=1}^8 n_{mx} S_m f_m. \quad (21)$$

В соответствии с ([10]), сложив выражения, соответствующие всем восьми граням октаэдра и проведя алгебраические преобразования, получаем значение производной функции $f(x, y, z)$ по переменной x в центре грани 1234

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial x}} = \frac{1}{V_8} \sum_{n=1}^6 \alpha_n^x f_n, \quad (22)$$

где суммирование ведется по вершинам октаэдра, а коэффициенты α_n^x вычисляются по следующим формулам

$$\begin{aligned} \alpha_1^x &= \frac{1}{6} [(y_5 - y_6)(z_2 - z_4) + (z_6 - z_5)(y_2 - y_4)], \\ \alpha_2^x &= \frac{1}{6} [(y_5 - y_6)(z_3 - z_1) + (z_6 - z_5)(y_3 - y_1)], \\ \alpha_6^x &= \frac{1}{6} [(y_1 - y_3)(z_2 - z_4) + (z_3 - z_1)(y_2 - y_4)], \\ \alpha_3^x &= -\alpha_1^x, \alpha_4^x = -\alpha_2^x, \alpha_5^x = -\alpha_6^x. \end{aligned} \quad (23)$$

Коэффициенты α_n^y вычисляются следующим образом

$$\begin{aligned} \alpha_1^y &= \frac{1}{6} [(z_5 - z_6)(x_2 - x_4) + (x_6 - x_5)(z_2 - z_4)], \\ \alpha_2^y &= \frac{1}{6} [(z_5 - z_6)(x_3 - x_1) + (x_6 - x_5)(z_3 - z_1)], \\ \alpha_6^y &= \frac{1}{6} [(z_1 - z_3)(x_2 - x_4) + (x_3 - x_1)(z_2 - z_4)], \\ \alpha_3^y &= -\alpha_1^y, \alpha_4^y = -\alpha_2^y, \alpha_5^y = -\alpha_6^y. \end{aligned} \quad (24)$$

Далее выписаны коэффициенты α_n^z

$$\begin{aligned}\alpha_1^z &= \frac{1}{6} [(x_5 - x_6)(y_2 - y_4) + (y_6 - y_5)(x_2 - x_4)], \\ \alpha_2^z &= \frac{1}{6} [(x_5 - x_6)(y_3 - y_1) + (y_6 - y_5)(x_3 - x_1)], \\ \alpha_6^z &= \frac{1}{6} [(x_1 - x_3)(y_2 - y_4) + (y_3 - y_1)(x_2 - x_4)], \\ \alpha_3^z &= -\alpha_1^z, \alpha_4^z = -\alpha_2^z, \alpha_5^z = -\alpha_6^z.\end{aligned}\quad (25)$$

4 Аппроксимация потоковых величин для контрольного объема с гранями в виде треугольников, пятиугольников и шестиугольников

Рассмотрим последовательно вычисление потоков через грани ячеек в виде треугольников, пятиугольников и шестиугольников.

Построим контрольный объем для грани в виде треугольника 123 (Рис. 4). Значение производной функции $f(x, y, z)$ по переменной x в центре грани 123 вычисляется как сумма алгебраических выражений соответствующих шести граней аналогично (21)

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial x}} = \frac{1}{V_6} \sum_{m=1}^6 n_{mx} S_m f_m. \quad (26)$$

Площадь грани и объем соответствующего контрольного объема вычисляются через векторное и смешанное произведения соответственно

$$S_{123} = \frac{1}{2} |\mathbf{12} \times \mathbf{13}|, \quad V_6 = \frac{1}{6} ((\mathbf{12} \times \mathbf{13}) \cdot \mathbf{45}). \quad (27)$$

Далее приводятся площади и единичные нормали соответствующих граней

$$\begin{aligned}S_{124} &= \frac{1}{2} |\mathbf{14} \times \mathbf{12}|, \quad \mathbf{n}_{124} = \frac{\mathbf{14} \times \mathbf{12}}{2S_{124}}, \\ S_{234} &= \frac{1}{2} |\mathbf{24} \times \mathbf{23}|, \quad \mathbf{n}_{234} = \frac{\mathbf{24} \times \mathbf{23}}{2S_{234}}, \\ S_{314} &= \frac{1}{2} |\mathbf{34} \times \mathbf{31}|, \quad \mathbf{n}_{314} = \frac{\mathbf{34} \times \mathbf{31}}{2S_{314}},\end{aligned}\quad (28)$$

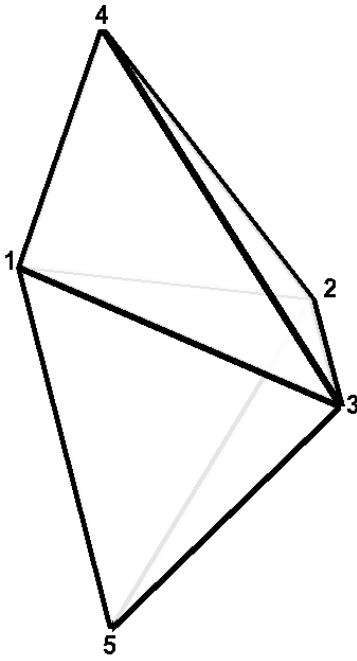


Рис. 4. Контрольный объем с гранями в виде треугольника

$$S_{152} = \frac{1}{2} |\mathbf{12} \times \mathbf{15}|, \mathbf{n}_{152} = \frac{\mathbf{12} \times \mathbf{15}}{2S_{152}},$$

$$S_{253} = \frac{1}{2} |\mathbf{23} \times \mathbf{25}|, \mathbf{n}_{253} = \frac{\mathbf{23} \times \mathbf{25}}{2S_{253}},$$

$$S_{351} = \frac{1}{2} |\mathbf{31} \times \mathbf{35}|, \mathbf{n}_{351} = \frac{\mathbf{31} \times \mathbf{35}}{2S_{351}}.$$

Далее представлены выражения для всех шести граней контрольного объема

$$124 : n_{124x} S_{124} f_{124} = \frac{f_1 + f_2 + f_4}{3} \frac{(y_4 - y_1)(z_2 - z_1) - (z_4 - z_1)(y_2 - y_1)}{2}, \quad (29)$$

$$234 : n_{234x} S_{234} f_{234} = \frac{f_2 + f_3 + f_4}{3} \frac{(y_4 - y_2)(z_3 - z_2) - (z_4 - z_2)(y_3 - y_2)}{2},$$

$$314 : n_{314x} S_{314} f_{314} = \frac{f_1 + f_3 + f_4}{3} \frac{(y_4 - y_3)(z_1 - z_3) - (z_4 - z_3)(y_1 - y_3)}{2},$$

$$152 : n_{152x} S_{152} f_{152} = \frac{f_1 + f_2 + f_5}{3} \frac{(y_2 - y_1)(z_5 - z_1) - (z_2 - z_1)(y_5 - y_1)}{2},$$

$$253 : n_{253x} S_{253} f_{253} = \frac{f_2 + f_3 + f_5}{3} \frac{(y_3 - y_2)(z_5 - z_2) - (z_3 - z_2)(y_5 - y_2)}{2},$$

$$351 : n_{351x} S_{351} f_{351} = \frac{f_1 + f_3 + f_5}{3} \frac{(y_1 - y_3)(z_5 - z_3) - (z_1 - z_3)(y_5 - y_3)}{2},$$

Значение функции $f(x, y, z)$ по переменной x в центре грани 123 с суммированием по 5 вершинам соответствующего контрольного объема вычисляется как

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial x}} = \frac{1}{V_6} \sum_{n=1}^5 \alpha_n^x f_n, \quad (30)$$

где коэффициенты α_n^x вычисляются по следующим формулам

$$\begin{aligned} \alpha_1^x &= \frac{1}{6} [(z_5 - z_4)(y_2 - y_3) + (y_4 - y_5)(z_2 - z_3)], \\ \alpha_2^x &= \frac{1}{6} [(y_4 - y_5)(z_3 - z_1) + (z_5 - z_4)(y_3 - y_1)], \\ \alpha_3^x &= \frac{1}{6} [(y_4 - y_5)(z_1 - z_2) + (z_5 - z_4)(y_1 - y_2)], \\ \alpha_4^x &= \frac{1}{6} [z_1(y_2 - y_3) + z_2(y_3 - y_1) + z_3(y_1 - y_2)], \\ \alpha_5^x &= \frac{1}{6} [z_1(y_3 - y_2) + z_2(y_1 - y_3) + z_3(y_2 - y_1)], \\ &\qquad\qquad\qquad \alpha_5^x = -\alpha_4^x. \end{aligned} \quad (31)$$

Аналогично вычисляются значения функции $f(x, y, z)$ по переменным y и z . Коэффициенты α_n^y вычисляются по следующим формулам

$$\begin{aligned} \alpha_1^y &= \frac{1}{6} [(x_5 - x_4)(z_2 - z_3) + (z_4 - z_5)(x_2 - x_3)], \\ \alpha_2^y &= \frac{1}{6} [(z_4 - z_5)(x_3 - x_1) + (x_5 - x_4)(z_3 - z_1)], \\ \alpha_3^y &= \frac{1}{6} [(z_4 - z_5)(x_1 - x_2) + (x_5 - x_4)(z_1 - z_2)], \\ \alpha_4^y &= \frac{1}{6} [x_1(z_2 - z_3) + x_2(z_3 - z_1) + x_3(z_1 - z_2)], \\ &\qquad\qquad\qquad \alpha_5^y = -\alpha_4^y. \end{aligned} \quad (32)$$

Коэффициенты α_n^z вычисляются по следующим формулам

$$\alpha_1^z = \frac{1}{6} [(y_5 - y_4)(x_2 - x_3) + (x_4 - x_5)(y_2 - y_3)], \quad (33)$$

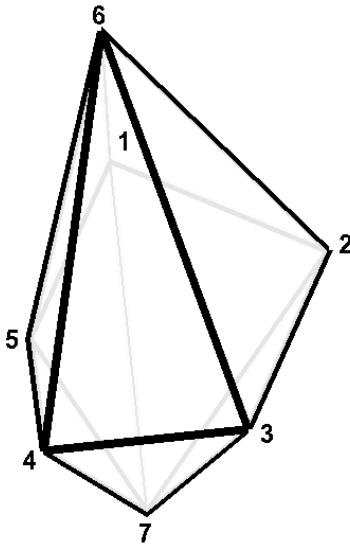


Рис. 5. Контрольный объем с гранями в виде пятиугольника

$$\begin{aligned}\alpha_2^z &= \frac{1}{6} [(x_4 - x_5)(y_3 - y_1) + (y_5 - y_4)(x_3 - x_1)], \\ \alpha_3^z &= \frac{1}{6} [(x_4 - x_5)(y_1 - y_2) + (y_5 - y_4)(x_1 - x_2)], \\ \alpha_4^z &= \frac{1}{6} [y_1(x_2 - x_3) + y_2(x_3 - x_1) + y_3(x_1 - x_2)], \\ \alpha_5^z &= -\alpha_4^z.\end{aligned}$$

Построим контрольный объем для грани в виде пятиугольника 12345 (Рис. 5). Значение производной функции $f(x, y, z)$ по переменной x в центре грани 12345 вычисляется как сумма алгебраических выражений соответствующих десяти граней аналогично (21)

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial x}} = \frac{1}{V_7} \sum_{m=1}^{10} n_{mx} S_m f_m. \quad (34)$$

Площадь грани и объем соответствующего контрольного объема вычисляются через векторное и смешанное произведения соответственно

$$S_{12345} = \frac{1}{2} |\mathbf{12} \times \mathbf{13} + \mathbf{13} \times \mathbf{14} + \mathbf{14} \times \mathbf{15}|, \quad (35)$$

$$V_7 = \frac{1}{6} ((\mathbf{12} \times \mathbf{13} + \mathbf{13} \times \mathbf{14} + \mathbf{14} \times \mathbf{15}) \cdot \mathbf{67}).$$

Далее приводятся площади и единичные нормали соответствующих граней

$$\begin{aligned} S_{126} &= \frac{1}{2} |\mathbf{16} \times \mathbf{12}|, \mathbf{n}_{126} = \frac{\mathbf{16} \times \mathbf{12}}{2S_{126}}, \\ S_{236} &= \frac{1}{2} |\mathbf{26} \times \mathbf{23}|, \mathbf{n}_{236} = \frac{\mathbf{26} \times \mathbf{23}}{2S_{236}}, \\ S_{346} &= \frac{1}{2} |\mathbf{36} \times \mathbf{34}|, \mathbf{n}_{346} = \frac{\mathbf{36} \times \mathbf{34}}{2S_{346}}, \\ S_{456} &= \frac{1}{2} |\mathbf{46} \times \mathbf{45}|, \mathbf{n}_{456} = \frac{\mathbf{46} \times \mathbf{45}}{2S_{456}}, \\ S_{516} &= \frac{1}{2} |\mathbf{56} \times \mathbf{51}|, \mathbf{n}_{516} = \frac{\mathbf{56} \times \mathbf{51}}{2S_{516}}, \\ S_{127} &= \frac{1}{2} |\mathbf{12} \times \mathbf{17}|, \mathbf{n}_{127} = \frac{\mathbf{12} \times \mathbf{17}}{2S_{127}}, \\ S_{237} &= \frac{1}{2} |\mathbf{23} \times \mathbf{27}|, \mathbf{n}_{237} = \frac{\mathbf{23} \times \mathbf{27}}{2S_{237}}, \\ S_{347} &= \frac{1}{2} |\mathbf{34} \times \mathbf{37}|, \mathbf{n}_{347} = \frac{\mathbf{34} \times \mathbf{37}}{2S_{347}}, \\ S_{457} &= \frac{1}{2} |\mathbf{45} \times \mathbf{47}|, \mathbf{n}_{457} = \frac{\mathbf{45} \times \mathbf{47}}{2S_{457}}, \\ S_{157} &= \frac{1}{2} |\mathbf{51} \times \mathbf{57}|, \mathbf{n}_{157} = \frac{\mathbf{51} \times \mathbf{57}}{2S_{157}}. \end{aligned} \quad (36)$$

Далее представлены выражения для всех десяти граней контрольного объема

$$\begin{aligned} 126 : n_{126x} S_{126} f_{126} &= \frac{f_1 + f_2 + f_6}{3} \frac{(y_6 - y_1)(z_2 - z_1) - (z_6 - z_1)(y_2 - y_1)}{2}, \\ 236 : n_{236x} S_{236} f_{236} &= \frac{f_2 + f_3 + f_6}{3} \frac{(y_6 - y_2)(z_3 - z_2) - (z_6 - z_2)(y_3 - y_2)}{2}, \\ 346 : n_{346x} S_{346} f_{346} &= \frac{f_3 + f_4 + f_6}{3} \frac{(y_6 - y_3)(z_4 - z_3) - (y_4 - y_3)(z_6 - z_3)}{2}, \\ 456 : n_{456x} S_{456} f_{456} &= \frac{f_4 + f_5 + f_6}{3} \frac{(y_6 - y_4)(z_5 - z_4) - (y_5 - y_4)(z_6 - z_4)}{2}, \\ 516 : n_{516x} S_{516} f_{516} &= \frac{f_5 + f_1 + f_6}{3} \frac{(y_6 - y_5)(z_1 - z_5) - (z_6 - z_5)(y_1 - y_5)}{2}, \\ 127 : n_{127x} S_{127} f_{127} &= \frac{f_1 + f_2 + f_7}{3} \frac{(y_2 - y_1)(z_7 - z_1) - (z_2 - z_1)(y_7 - y_1)}{2}, \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned}
 237 : n_{237x} S_{237} f_{237} &= \frac{f_2 + f_3 + f_7}{3} \frac{(y_3 - y_2)(z_7 - z_2) - (z_3 - z_2)(y_7 - y_2)}{2}, \\
 347 : n_{347x} S_{347} f_{347} &= \frac{f_3 + f_4 + f_7}{3} \frac{(y_4 - y_3)(z_7 - z_3) - (z_4 - z_3)(y_7 - y_3)}{2}, \\
 457 : n_{457x} S_{457} f_{457} &= \frac{f_4 + f_5 + f_7}{3} \frac{(y_5 - y_4)(z_7 - z_4) - (z_5 - z_4)(y_7 - y_4)}{2}, \\
 157 : n_{157x} S_{157} f_{157} &= \frac{f_1 + f_5 + f_7}{3} \frac{(y_1 - y_5)(z_7 - z_5) - (z_1 - z_5)(y_7 - y_5)}{2}.
 \end{aligned}$$

Значение функции $f(x, y, z)$ по переменной x в центре грани 12345 с суммированием по 7 вершинам соответствующего контрольного объема вычисляется как

$$\frac{\overline{\partial f}}{\partial x} = \frac{1}{V_7} \sum_{n=1}^7 \alpha_n^x f_n, \quad (38)$$

где коэффициенты α_n^x вычисляются по следующим формулам

$$\begin{aligned}
 \alpha_1^x &= \frac{1}{6} [(z_7 - z_6)(y_2 - y_5) + (y_6 - y_7)(z_2 - z_5)], \\
 \alpha_2^x &= \frac{1}{6} [(y_6 - y_7)(z_3 - z_1) + (z_7 - z_6)(y_3 - y_1)], \\
 \alpha_3^x &= \frac{1}{6} [(y_6 - y_7)(z_4 - z_2) + (z_7 - z_6)(y_4 - y_2)], \\
 \alpha_4^x &= \frac{1}{6} [(y_6 - y_7)(z_5 - z_3) + (z_7 - z_6)(y_5 - y_3)], \\
 \alpha_5^x &= \frac{1}{6} [(z_7 - z_6)(y_1 - y_4) + (y_6 - y_7)(z_1 - z_4)], \\
 \alpha_6^x &= \frac{1}{6} [z_1(y_2 - y_5) + z_2(y_3 - y_1) + z_3(y_4 - y_2) + z_4(y_5 - y_3) + z_5(y_1 - y_4)], \\
 \alpha_7^x &= -\alpha_6^x.
 \end{aligned} \quad (39)$$

Аналогично вычисляются значения функции $f(x, y, z)$ по переменным y и z . Коэффициенты α_n^y вычисляются по следующим формулам

$$\begin{aligned}
 \alpha_1^y &= \frac{1}{6} [(x_7 - x_6)(z_2 - z_5) + (z_6 - z_7)(x_2 - x_5)], \\
 \alpha_2^y &= \frac{1}{6} [(z_6 - z_7)(x_3 - x_1) + (x_7 - x_6)(z_3 - z_1)], \\
 \alpha_3^y &= \frac{1}{6} [(z_6 - z_7)(x_4 - x_2) + (x_7 - x_6)(z_4 - z_2)],
 \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned}\alpha_4^y &= \frac{1}{6} [(z_6 - z_7)(x_5 - x_3) + (x_7 - x_6)(z_5 - z_3)], \\ \alpha_5^y &= \frac{1}{6} [(x_7 - x_6)(z_1 - z_4) + (z_6 - z_7)(x_1 - x_4)], \\ \alpha_6^y &= \frac{1}{6} [x_1(z_2 - z_5) + x_2(z_3 - z_1) + x_3(z_4 - z_2) + x_4(z_5 - z_3) + x_5(z_1 - z_4)], \\ \alpha_7^y &= -\alpha_6^y.\end{aligned}$$

Коэффициенты α_n^z вычисляются по следующим формулам

$$\begin{aligned}\alpha_1^z &= \frac{1}{6} [(y_7 - y_6)(x_2 - x_5) + (x_6 - x_7)(y_2 - y_5)], \\ \alpha_2^z &= \frac{1}{6} [(x_6 - x_7)(y_3 - y_1) + (y_7 - y_6)(x_3 - x_1)], \\ \alpha_3^z &= \frac{1}{6} [(x_6 - x_7)(y_4 - y_2) + (y_7 - y_6)(x_4 - x_2)], \\ \alpha_4^z &= \frac{1}{6} [(x_6 - x_7)(y_5 - y_3) + (y_7 - y_6)(x_5 - x_3)], \\ \alpha_5^z &= \frac{1}{6} [(y_7 - y_6)(x_1 - x_4) + (x_6 - x_7)(y_1 - y_4)], \\ \alpha_6^z &= \frac{1}{6} [y_1(x_2 - x_5) + y_2(x_3 - x_1) + y_3(x_4 - x_2) + y_4(x_5 - x_3) + y_5(x_1 - x_4)], \\ \alpha_7^z &= -\alpha_6^z.\end{aligned}\quad (41)$$

Построим контрольный объем для грани в виде шестиугольника 123456 (Рис. 6). Значение производной функции $f(x, y, z)$ по переменной x в центре грани 123456 вычисляется как сумма алгебраических выражений соответствующих двенадцати граней аналогично (21)

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial x}} = \frac{1}{V_8} \sum_{m=1}^{12} n_{mx} S_m f_m. \quad (42)$$

Площадь грани и объем соответствующего контрольного объема вычисляются через векторное и смешанное произведения соответственно

$$\begin{aligned}S_{12345678} &= \frac{1}{2} |\mathbf{12} \times \mathbf{13} + \mathbf{13} \times \mathbf{14} + \mathbf{14} \times \mathbf{15} + \mathbf{15} \times \mathbf{16}|, \\ V_8 &= \frac{1}{6} ((\mathbf{12} \times \mathbf{13} + \mathbf{13} \times \mathbf{14} + \mathbf{14} \times \mathbf{15} + \mathbf{15} \times \mathbf{16}) \cdot \mathbf{78}).\end{aligned}\quad (43)$$

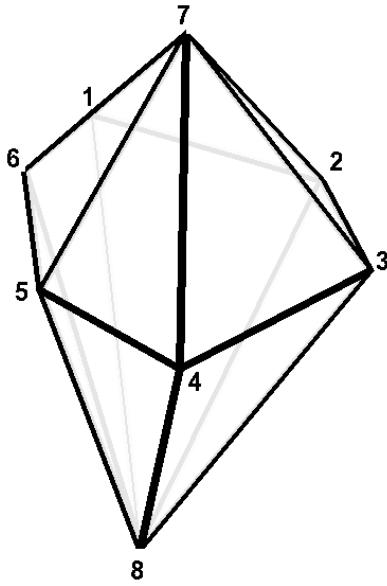


Рис. 6. Контрольный объем с гранями в виде шестиугольника

Далее приводятся площади и единичные нормали соответствующих граней

$$\begin{aligned}
 S_{176} &= \frac{1}{2} |\mathbf{67} \times \mathbf{61}|, \mathbf{n}_{176} = \frac{\mathbf{67} \times \mathbf{61}}{2S_{176}}, \\
 S_{172} &= \frac{1}{2} |\mathbf{17} \times \mathbf{12}|, \mathbf{n}_{172} = \frac{\mathbf{17} \times \mathbf{12}}{2S_{172}}, \\
 S_{273} &= \frac{1}{2} |\mathbf{27} \times \mathbf{23}|, \mathbf{n}_{273} = \frac{\mathbf{27} \times \mathbf{23}}{2S_{273}}, \\
 S_{374} &= \frac{1}{2} |\mathbf{37} \times \mathbf{34}|, \mathbf{n}_{374} = \frac{\mathbf{37} \times \mathbf{34}}{2S_{374}}, \\
 S_{475} &= \frac{1}{2} |\mathbf{47} \times \mathbf{45}|, \mathbf{n}_{475} = \frac{\mathbf{47} \times \mathbf{45}}{2S_{475}}, \\
 S_{576} &= \frac{1}{2} |\mathbf{57} \times \mathbf{56}|, \mathbf{n}_{576} = \frac{\mathbf{57} \times \mathbf{56}}{2S_{576}}, \\
 S_{186} &= \frac{1}{2} |\mathbf{61} \times \mathbf{68}|, \mathbf{n}_{186} = \frac{\mathbf{61} \times \mathbf{68}}{2S_{186}}, \\
 S_{182} &= \frac{1}{2} |\mathbf{12} \times \mathbf{18}|, \mathbf{n}_{182} = \frac{\mathbf{12} \times \mathbf{18}}{2S_{182}},
 \end{aligned} \tag{44}$$

$$\begin{aligned} S_{283} &= \frac{1}{2} |\mathbf{23} \times \mathbf{28}|, \mathbf{n}_{283} = \frac{\mathbf{23} \times \mathbf{28}}{2S_{283}}, \\ S_{384} &= \frac{1}{2} |\mathbf{34} \times \mathbf{38}|, \mathbf{n}_{384} = \frac{\mathbf{34} \times \mathbf{38}}{2S_{384}}, \\ S_{485} &= \frac{1}{2} |\mathbf{45} \times \mathbf{48}|, \mathbf{n}_{485} = \frac{\mathbf{45} \times \mathbf{48}}{2S_{485}}, \\ S_{586} &= \frac{1}{2} |\mathbf{56} \times \mathbf{58}|, \mathbf{n}_{586} = \frac{\mathbf{56} \times \mathbf{58}}{2S_{586}}. \end{aligned}$$

Далее представлены выражения для всех двенадцати граней контрольного объема

$$\begin{aligned} 176 : n_{176x}S_{176}f_{176} &= \frac{f_1 + f_7 + f_6}{3} \frac{(y_7 - y_6)(z_1 - z_6) - (z_7 - z_6)(y_1 - y_6)}{2}, \quad (45) \\ 172 : n_{172x}S_{172}f_{172} &= \frac{f_1 + f_7 + f_2}{3} \frac{(y_7 - y_1)(z_2 - z_1) - (z_7 - z_1)(y_2 - y_1)}{2}, \\ 273 : n_{273x}S_{273}f_{273} &= \frac{f_2 + f_7 + f_3}{3} \frac{(y_7 - y_2)(z_3 - z_2) - (z_7 - z_2)(y_3 - y_2)}{2}, \\ 374 : n_{374x}S_{374}f_{374} &= \frac{f_3 + f_7 + f_4}{3} \frac{(y_7 - y_3)(z_4 - z_3) - (z_7 - z_3)(y_4 - y_3)}{2}, \\ 475 : n_{475x}S_{475}f_{475} &= \frac{f_4 + f_7 + f_5}{3} \frac{(y_7 - y_4)(z_5 - z_4) - (z_7 - z_4)(y_5 - y_4)}{2}, \\ 576 : n_{576x}S_{576}f_{576} &= \frac{f_5 + f_7 + f_6}{3} \frac{(y_7 - y_5)(z_6 - z_5) - (z_7 - z_5)(y_6 - y_5)}{2}, \\ 186 : n_{186x}S_{186}f_{186} &= \frac{f_1 + f_8 + f_6}{3} \frac{(y_1 - y_6)(z_8 - z_6) - (z_1 - z_6)(y_8 - y_6)}{2}, \\ 182 : n_{182x}S_{182}f_{182} &= \frac{f_1 + f_8 + f_2}{3} \frac{(y_2 - y_1)(z_8 - z_1) - (z_2 - z_1)(y_8 - y_1)}{2}, \\ 283 : n_{283x}S_{283}f_{283} &= \frac{f_2 + f_8 + f_3}{3} \frac{(y_3 - y_2)(z_8 - z_2) - (y_8 - y_2)(z_3 - z_2)}{2}, \\ 384 : n_{384x}S_{384}f_{384} &= \frac{f_3 + f_8 + f_4}{3} \frac{(y_4 - y_3)(z_8 - z_3) - (y_8 - y_3)(z_4 - z_3)}{2}, \\ 485 : n_{485x}S_{485}f_{485} &= \frac{f_4 + f_8 + f_5}{3} \frac{(y_5 - y_4)(z_8 - z_4) - (z_5 - z_4)(y_8 - y_4)}{2}, \\ 586 : n_{586x}S_{586}f_{586} &= \frac{f_5 + f_8 + f_6}{3} \frac{(y_6 - y_5)(z_8 - z_5) - (z_6 - z_5)(y_8 - y_5)}{2}. \end{aligned}$$

Значение функции $f(x, y, z)$ по переменной x в центре грани 123456 с суммированием по 8 вершинам соответствующего контрольного объема вычис-

ляется как

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial x}} = \frac{1}{V_8} \sum_{n=1}^8 \alpha_n^x f_n, \quad (46)$$

где коэффициенты α_n^x вычисляются по следующим формулам

$$\begin{aligned} \alpha_1^x &= \frac{1}{6} [(y_7 - y_8)(z_2 - z_6) + (z_8 - z_7)(y_2 - y_6)], \\ \alpha_2^x &= \frac{1}{6} [(y_7 - y_8)(z_3 - z_1) + (z_8 - z_7)(y_3 - y_1)], \\ \alpha_3^x &= \frac{1}{6} [(y_7 - y_8)(z_4 - z_2) + (z_8 - z_7)(y_4 - y_2)], \\ \alpha_4^x &= \frac{1}{6} [(y_7 - y_8)(z_5 - z_3) + (z_8 - z_7)(y_5 - y_3)], \\ \alpha_5^x &= \frac{1}{6} [(y_7 - y_8)(z_6 - z_4) + (z_8 - z_7)(y_6 - y_4)], \\ \alpha_6^x &= \frac{1}{6} [(y_7 - y_8)(z_1 - z_5) + (z_8 - z_7)(y_1 - y_5)], \\ \alpha_7^x &= \frac{1}{6} [z_1(y_2 - y_6) + z_2(y_3 - y_1) + z_3(y_4 - y_2) + z_4(y_5 - y_3) + \\ &\quad + z_5(y_6 - y_4) + z_6(y_1 - y_5)], \\ \alpha_8^x &= -\alpha_7^x. \end{aligned} \quad (47)$$

Для вычисления α_n^y в формулах (47) необходимо z заменить на x , а y заменить на z . Для вычисления α_n^z в формулах (47) необходимо y заменить на x , а z заменить на y .

5 Пример расчета и заключение

В качестве примера представлен результат расчета невязкого обтекания плоского уступа в канале для числа Маха равного 3 на момент безразмерного времени 4.

На Рис. 7 представлен расчет при аппроксимации производных, полученный при использовании формул для двумерных течений (31) – (33). Использованы двумерные пространственные сетки tri, состоящие из треугольных контрольных объемов (triangular). В первых расчетах для аппроксимации пространственных производных в выражениях для потоков применялся метод наименьших квадратов (МНК), который встроен в структуру OpenFOAM.

Для анализа эффективности новых аппроксимаций проводились расче-



Рис. 7. Пример расчета с использованием построенной аппроксимации

ты на сетках quad (quadrilateral)(двумерная сетка, состоящая из четырехугольных контрольных объемов, вершины которых не выравнены вдоль осей координат), hex (hexagonal)(двумерная сетка, состоящая из прямоугольных контрольных объемов), poly (polygonal) (двумерная сетка, состоящая из шестиугольных контрольных объемов).

Расчеты, выполненные для обоих алгоритмов на сетках quad, hex и poly показывают, что для двумерного течения отличия в двух алгоритмах малы, времена расчетов отличаются мало.

По точности расчета оба варианта аппроксимации (МНК и новая аппроксимация) также дают очень близкие результаты, поэтому приведен только один рисунок.

Практика расчетов показывает, что для существенно неравномерных сеток и сеток с "искаженными" ячейками использование новой аппроксимации позволяет повысить устойчивость численного алгоритма. Ожидается, что новая аппроксимация позволит увеличить эффективность распараллеливания алгоритма.

Авторы выражают благодарность Т.Г. Елизаровой за привлечение внимания к данной тематике и М.В. Крапошину за проведение верификационных расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Matvey V. Kraposhin, Daniil A. Ryazanov, Elena V. Smirnova, Tatiana G. Elizarova, Maria A. Istomina*. Development of OpenFOAM solver for compressible viscous flows simulation using quasi-gas dynamic equations // IEEE eXplore, 2017, pp. 117-124.
2. *Matvey V. Kraposhin, Elena V. Smirnova, Tatiana G. Elizarova, Maria A. Istomina*. Development of a new OpenFOAM solver using regularized gas dynamic equations // Computer and Fluids, 166(2018), pp. 163-175.
3. *М.А. Истомина*. О реализации одномерного квазигазодинамического алгоритма в открытом программном комплексе OpenFOAM // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2018, № 1, 19 с.
4. *G. Puigt, V. Auffray, J.-D. Muller*. Discretisation of diffusive fluxes on hybrid grids // Journal of Computational Physics 229 (2010), pp. 1425–1447.
5. *М.Н. Петров, В.А. Титарев, С.В. Утюжников, А.В. Чикиткин*. Много-поточная OpenMP–реализация метода LU–SGS с использованием многоуровневой декомпозиции неструктурированной расчетной сетки // ЖВ-МиМФ, 2017, т. 57, № 11, с. 1895–1905.
6. *Б.Н. Четверушкин*. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. М.: МАКС Пресс, 2004 г.
7. *Т.Г. Елизарова*. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007 г.
8. *Ю.В. Шеретов*. Динамика сплошных сред при пространственно–временном осреднении. Москва–Ижевск: РХД, 2009 г.
9. *Е.В. Шильников*. Моделирование течений вязкого газа на основе КГД системы уравнений на неортогональных индексных сетках // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, 2014, № 33, 20 с.
10. *Eugeny Shilnikov, Tatiana Elizarova*. Hypersonic flows using qgd-based parallel program complex "Express-3D"// High Temperature Material Processes: An International Quarterly of High-Technology Plasma Processes, 2018, V. 22, Issue 3. DOI: 10.1615/HighTempMatProc.2018024713 (ISSN Print: 1093-3611, ISSN Online: 1940-4360) (Scopus)