УДК 519.172.1:.6/519.245/533.5

Т. Г. СМЕЛАЯ

НЕСТРУКТУРИРОВАННЫЕ СЕТКИ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ МЕТОДОМ ПРОБНЫХ ЧАСТИЦ

Одним из ключевых моментов при решении задач динамики разреженного газа является дискретизация расчетной области. Особенно остро проблема удачного выбора типа используемой сетки стоит для статистических методов, в частности для метода пробных частиц (МПЧ), поскольку их эффективность напрямую зависит от количества проведенных испытаний, а значит от затраченных ресурсов. Целью настоящей статьи является изучение возможных топологических отличий неструктурированных расчетных сеток (РС) с целью классификации и анализа их свойств и особенностей использования. На основании этого необходимо сделать выбор наиболее рациональной РС для решения уравнения Больцмана МПЧ. Приведены наиболее популярные критерии, используемые для контроля качества неструктурированной РС в процессе её генерации. Сделана классификация РС по форме используемых ячеек, степени совпадения узлов соседних ячеек, типу иерархической организации и равномерности геометрических параметров. Указаны преимущества и возможные области применения рассмотренных типов сеток. Сделан анализ разных типов сеток с точки зрения их применимости к задачам моделирования течений разреженного газа МПЧ. Сделан вывод, что для этих целей явным преимуществом обладают неструктурированные РС, поскольку они позволяют в соответствии с требованиями задачи легко варьировать размер ячеек в пределах расчетной области. Оптимальными среди рассмотренных РС будут иерархически организованные структуры с минимальным уровнем вложения, структурированные и равномерные на каждом из уровней. Кратность разбиения корневых ячеек может быть переменной и зависеть от параметров локального режима течения. Такие РС удачно сочетают основные преимущества структурированных и неструктурированных сеток: высокоэффективный доступ ко всем элементам сетки, возможность локального сгущения и, кроме того, векторизации алгоритма для многомерных задач. Результаты работы будут использованы при построении рабочих алгоритмов моделирования траекторий движения молекул МПЧ, что позволит более эффективно осуществлять экспертизу и сопровождение отдельных проектов Национальной космической программы Украины.

Одним із ключових моментів при розв'язанні задач динаміки розрідженого газу є дискретизація розрахункової області. Особливо гостро проблема вдалого вибору типу сітки, що використовується, постає для статистичних методів, зокрема для методу пробних часток (МПЧ), оскільки їх ефективність напряму залежить від кількості проведених випробувань, а отже від витрачених ресурсів. Метою цієї статті є вивчення можливих топологічних відмінностей неструктурованих розрахункових сіток (РС) з метою класифікації й аналізу їх властивостей і особливостей використання. На підставі цього необхідно зробити вибір найбільш раціональної РС для розв'язання рівняння Больцмана МПЧ. Наведено найбільш популярні критерії, що використовуються для контролю якості неструктурованої РС у процесі її генерації. Зроблено класифікацію РС за формою чарунок, що використовуються, ступенем збігу вузлів сусідніх чарунок, типом ієрархічної організації й рівномірності геометричних параметрів. Зазначено переваги й можливі області застосування розглянутих типів сіток. Зроблено аналіз різних типів сіток з погляду їх застосовності до задач моделювання течій розрідженого газу МПЧ. Зроблено висновок, що для розв'язання цих задач очевидні переваги мають неструктуровані РС, оскільки вони дозволяють відповідно до вимог задачі легко варіювати розмір чарунок у межах розрахункової області. Оптимальними серед розглянутих РС будуть ієрархічно організовані структури з мінімальним рівнем вкладення, структуровані й рівномірні на кожному з рівнів. Кратність розбивки кореневих чарунок може бути змінною й залежати від параметрів локального режиму течії. Такі РС вдало поєднують основні переваги структурованих і неструктурованих сіток: високоефективний доступ до всіх елементів сітки, можливість локального згущення й, крім того, векторизації алгоритму для багатомірних задач. Результати роботи будуть використані при побудові робочих алгоритмів моделювання траєкторій руху молекул МПЧ, що дозволить більш ефективно здійснювати експертизу й супровід окремих проектів Національної космічної програми України.

Discretization of the computational domain has an important impact on the solution of problems on the rarified gas dynamics. An appropriate selection of the type of the grid used is the pressing problem for statistical methods, in particular for the test particles method (TPM) because their effectiveness depends directly on the amount of tests conducted, namely, expended resources. The paper objective is to study possible topological variations in unstructured computational grids for the classification and analysis of their properties and special features of use. In order to solve the Bolzman equation using the test particles method, it is necessary to select the most rational computational grid. Most popular criteria for controlling the quality of the computational unstructured grid in the process of its generation are presented. Computational grids are classified in accordance with cells used, a level of coincidence of nodes of neighboring cells, the type of hierarchic organization and uniformity of geometric parameters. The advantages and possible applications of types of grids under consideration are reported. Various types of grids for their applications to problems of the TPM simulation of rarified gas flows are analyzed. It was found that computational unstructured grids are better for these purposes since they change easy grid sizes within the limits of the computational domain. Among computational grids used hierarchically organized structures with a minimal level of embedding, which are structured and uniform at each level, are optimal. The multiplicity of partitioning the root cells can be variable and dependent on parameters of local flow conditions. Such computational grids represent the basic advantages of structured and unstructured grids: a high-efficiency access for all of the grid elements, the possibility of local crowding, and the algorithm vectorization for multidimensional problems. Results will be used to build operational algorithms of the TPM simulation of molecular motion trajectories resulting in a more efficient examination and support for projects of the National Space Program of Ukraine.

Ключевые слова: *метод пробных частиц, неструктурированная расчетная сетка, иерархическая организация, кратность разбиения корневых ячеек.*

Необходимость использования расчетных сеток нередко возникает при решении широкого круга задач. При этом в процессе численного моделирования переходят от непрерывной по набору аргументов функции к равнозначной или близкой ей дискретной. Такая замена позволяет значительно облегчить и упростить решение многих практических задач, активно используя весь спектр существующих численных методов.

Процесс построения сетки фактически является дискретизацией (триангуляцией) некоторого пространства аргументов функции. Чаще всего в качестве аргументов выступают геометрические координаты, и поэтому сетки строятся в двух- или трехмерном пространстве.

Поскольку сетки являются геометрической структурой, им свойственны чисто геометрические характеристики, такие как размер, форма ячеек, степень равномерности сеточной структуры в целом или её отдельных параметров. Геометрические особенности применяемой дискретизации могут существенно влиять на качество ожидаемых результатов, поэтому подбор оптимальной сеточной структуры, а также метода её построения является достаточно ответственным этапом решения задачи. При этом предпочтение должно отдаваться сеткам, наиболее полно учитывающим особенности решаемой задачи и максимально удовлетворяющим требованиям, предъявляемым к ожидаемым результатам.

По типу организационной структуры сетки можно разбить на два больших класса: структурированные и не структурированные. Каждый из них имеет определенные достоинства и недостатки, а также соответствующий спектр методов построения [1].

Для структурированных (или регулярных) сеток характерно наличие упорядоченной по определенным правилам структуры и возможность выделения сеточных направлений. Наиболее важными геометрическими характеристиками таких сеток являются форма и размер ячеек.

Основной особенностью неструктурированных сеток, отличающих их от регулярных, является произвольное расположение узлов в физической области и, как следствие, невозможность выделить сеточные направления или упорядочить узлы сетки, привязав её к какой-либо системе координат (в том числе криволинейной).

Топология неструктурированных сеток чаще всего формируется в процессе построения, поэтому она может сильно изменяться в пределах дискретизируемой области. Однородность или равномерность построенной сетки не может возникнуть случайно. Она достигается благодаря наложению неких ограничений на определенные геометрические характеристики сеточной структуры: площадь ячейки, максимальную (минимальную) её стороны, минимальный угол и т. д.

1 Критерии выбора расчетной сетки. Разные задачи могут предъявлять различные требования к качеству генерируемой сетки. Введение, например, критерия равномерности площади достраиваемых треугольников для фронтальных алгоритмов обеспечивает устойчивость процедуры триангуляции за счет уменьшения степени неравномерности новых элементов по мере сокращения неразбитой области.

Используемые критерии нередко являются локальными и чаще всего не накладывают ограничения на все характеристики. Использование мер качества является необходимым этапом как в построении, так и в перестроении расчетной сетки.

Как правило, меры качества сеток основываются на геометрических свойствах ее ячеек [2]. Аппроксимационные свойства сетки можно оценивать с помощью различных альтернативных количественных критериев. При этом для работы со смешанной сеткой применяются меры качества как для треугольной, так и для четырехугольной ячеек. Некоторые наиболее популярные критерии приведены в таблице 1 [3 – 5].

Таблица 1

Критерий	Формула	Интервал возможных значений	Оптимальное значение
1	2	3	4
1. Меры линейных характеристик			
Аспектные соотношения			
Отношение длин наибольшего и наименьшего ребер	$\tau = \frac{L_{\max}}{L_{\min}}$	$[1,+\infty)$	1,00
Отношение длины наибольшего ребра к радиусу вписанной окружности	$\sigma = \frac{L_{\max}}{R_i}$	$[1,+\infty)$	4,90
Отношение радиуса описанной окружности к длине наибольшего ребра	$\omega = \frac{R_c}{L_{\max}}$	$\left[1/2,+\infty\right)$	0,61
Отношение радиуса описанной сферы к радиусу вписанной	$\beta = \frac{R_c}{R_i}$	$[1,+\infty)$	3,00
Меры гладкости			
Максимальное из отношений площади ячейки S к площадям всех m соседних ячеек S_j	$q_e = \max_{i=1}^{m} \frac{S}{S_i}$	$[0,+\infty)$	$\leq 20-30$
Отношение ориентированной площади треугольника к сумме квадратов сторон	$q = C\frac{0{,}5\cdot a\cdot b\cdot c}{a^2+b^2+c^2}$	$(-\infty,1]$	$(0,1]$
Отношение объема тетраэдра к наибольшему из произведений длин тройки ребер	$\mu = \frac{V}{abc}$	$\left[\sqrt{2}/12,+\infty\right)$	$\sqrt{2}/12$
Отношение 4-й степени объема тетраэдра к кубу суммы квадратов площадей граней	$k = \frac{V^4}{(\sum_{i=0}^{3} S_i^2)^3}$	$(0,1]$	$4{,}57\cdot 10^{-4}$

1	2	3	4
Отношение куба среднего арифметического длин ребер $\overline{L}$ к объему тетраэдра	$\alpha = \frac{\overline{L}^3}{V}$	$[1, +\infty)$	8,49
Отношение куба среднего геометрического длин ребер $\widetilde{L}$ к объему тетраэдра	$\gamma = \frac{\widetilde{L}^3}{V}$	$[1, +\infty)$	8,49
2. Меры угловых характеристик			
Наибольший двугранный угол	δ	$[\arccos(1/3), \pi)$	$\arccos(1/3)$
1	2	3	4
Минимальный телесный угол	θ	$(0, \pi/2]$	$\pi/2$
Гарантированное обеспечение диапазона значений углов ячеек ($\Theta_{\min}$, $\Theta_{\max}$) после операций перестроения	$\Theta_{\min}^{(s)} \geq \Theta_{\min}$, $\Theta_{\max}^{(s)} \leq \Theta_{\min}$	–	–
Мера скошенности: максимум отклонений от идеального угла α_n ячейки (60° для треугольных ячеек; 90° для четырехугольных) в большую ($\alpha_{\max}$) и меньшую ($\alpha_{\min}$) стороны	$\max\left[\begin{array}{l}(\alpha_{\max} - \alpha_n)/\alpha_n; \\ (\alpha_n - \alpha_{\min})/\alpha_n.\end{array}\right.$	$[0,2)$ (треуг.); $[0,3)$ (четырехуг.)	0,25 – 0,5
3. Мера качества узлов			
Валентность: число ребер, сходящихся во внутреннем узле (косвенно влияет на форму и размер ячеек)	n	$[1, +\infty)$	3, 4

Величина критерия для сетки в целом определяется как максимум (минимум) из критериев для каждой её ячейки.

Для качественного анализа сетки наибольшую важность имеют экстремальное и среднее значения аппроксимационных характеристик: первое участвует в оценках качества аппроксимации, второе свидетельствует об общем качестве сетки.

2 Классификация по форме ячеек. Классифицировать сетки, в том числе и неструктурированные, можно по различным признакам. Самый очевидный способ классификации – по форме (типу) используемых в дискретизации ячеек, тем более что согласно [3] аппроксимационные свойства сеток сильно зависят от этой характеристики. В двумерном случае могут использоваться выпуклые многоугольники произвольной конфигурации (рис. 1, а), например сетки, получающиеся из ячеек Дирихле или получающиеся из регулярных сеток при их геометрической локальной адаптации к сложной границе. Если организовать узлы полученных сеток, объединив их в элементарные фигуры – симплексы, то получим многоугольники определенной формы. Чаще всего используют треугольные (рис. 1, б) и четырехугольные (рис, 1, в) [6 – 9] симплексы. Иногда применяют смешанные (гибридные) сетки, состоящие, например, из треугольных и четырехугольных элементов (рис. 1, г).

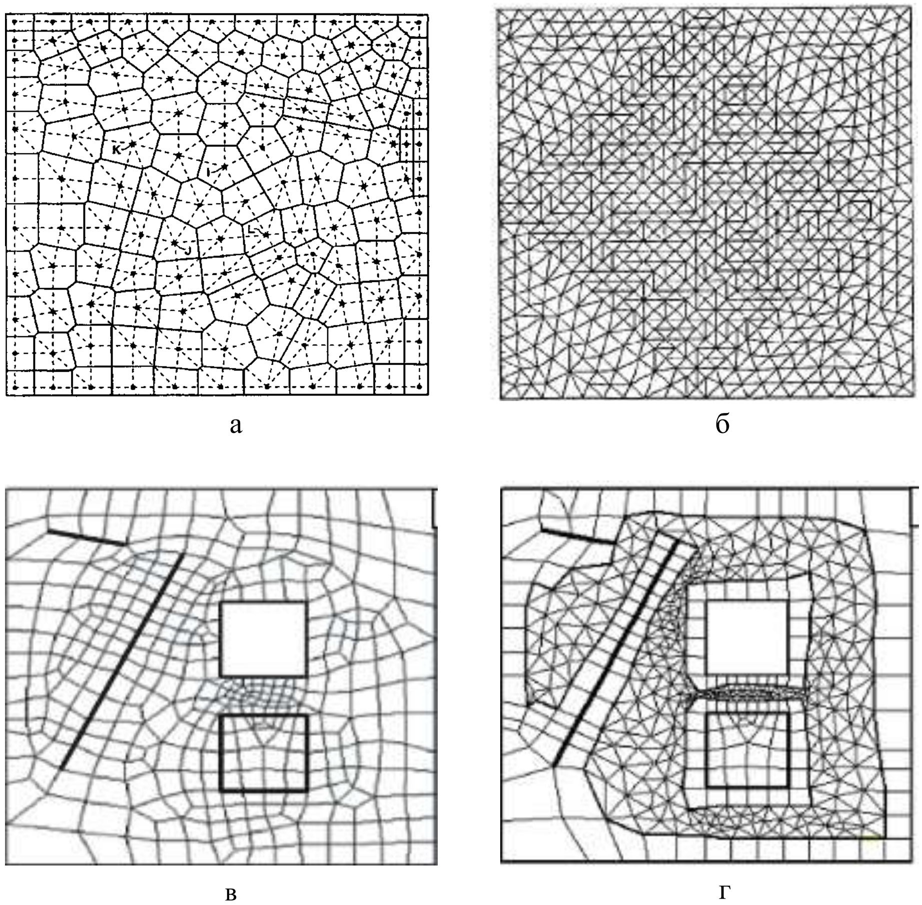


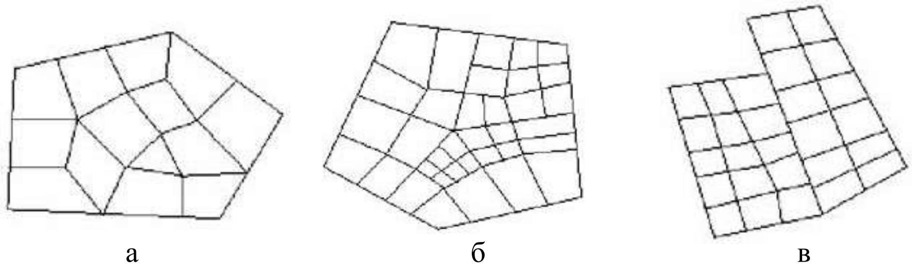
Рис. 1

В качестве пространственных симплексов используют различные формы ячеек: четырехгранники (тетраэдры), пирамиды, трехгранные призмы, шестигранники (гексаэдры), а также ячейки с 7 и 8 внешними гранями. Для трехмерного случая общим будет случай применения в качестве ячеек сетки многогранников произвольной конфигурации. Используют также РС, состоящие только из гексаэдров, тетраэдров, а также из призм. Трехмерные смешанные сетки могут состоять из тетраэдров, пирамид, призм и параллелепипедов. Наиболее распространенными в трехмерном случае являются тетраэдральные и смешанные сетки.

Сетки в виде многоугольников и многогранников произвольной конфигурации позволяют снять ряд трудностей при построении начальной сетки, которые присущи регулярным сеткам, намного упрощая способы построения начальных сеток с заданными свойствами в областях сложной формы. Для неструктурированных сеток применимы различные методики локальной перестройки сетки, изменяющие не только количество узлов, но и число соседних узлов. Это расширяет возможности проведения расчётов с большими сдвиговыми деформациями вещества в лагранжевых переменных.

Преимуществом использования в конечно-элементных расчётах сеток с четырехугольными и шестигранными ячейками является более высокая точность и меньшая чувствительность к эффектам сдвигового и объёмного «запирания» [10, 11]. Основные сдерживающие факторы более широкого применения такого вида ячеек связаны со слабым развитием автоматических алгоритмов построения таких сеток для многосвязных областей и несовершенством программного обеспечения для их реализации.

3 Классификация по степени совпадения узлов соседних ячеек. Классифицировать неструктурированные сетки можно также и **по степени совпадения (сопряжения) узлов соседних ячеек.** Полное совпадение узлов характерно для конформных сеток (рис. 2, а). Этот класс сеток позволяет достаточно эффективно дискретизировать области со сложной геометрией и в случае необходимости одновременно локально измельчать её отдельные участки.



а б в

Рис. 2

На рис. 2, б продемонстрирован пример другого класса сеток, когда могут совпадать не все узлы соседних ячеек. Их можно получить, дополнительно разбив некоторые ячейки уже построенных сеток. Данная методика дает неплохие результаты при необходимости геометрической адаптации сетки к границам расчетной области или адаптации к физическим свойствам искомого решения на определенной подобласти.

На рис. 2, в приведен пример третьего класса сеток, характеризуемых произвольным сопряжением соседних ячеек вдоль некоторой границы. В этом случае узлы граничных ячеек могут не совпадать вовсе. Такие сетки бывают удобны в случае, когда вдоль такой линии проходит граница между двумя областями, имеющими разные физические свойства, что влечет за собой разрыв расчетного параметра, или, иначе говоря, нарушение непрерывности его свойств. Сетки такого рода могут быть единственным верным решением при расчетах для некоторых нестационарных физических процессов, когда отдельные подобласти подвижны относительно границы своего соприкосновения. Также структуры такого рода могут быть достаточно эффективны в случае областей со сложной геометрией, когда возникает необходимость разбиения расчетной области на подобласти, на границе которых топология сетки будет терпеть разрыв какого-либо параметра.

4 Классификация по степени иерархической организации. Всё множество сеток можно также разделять на группы по количеству вложенных уровней организации структуры. Каждый новый подуровень создается на соответсвующем этапе построения за счет дополнительного разбиения отдельных ячеек предыдущего.

Если рассортировать все виды сеток по возрастанию степени вложенности их ячеек, то к первой группе можно отнести сетки с нулевым показателем иерархического подчинения. Они имеют самую простую организацию, когда все ячейки составляют однородную структуру. Примером могут служить сетки, приведенные на рис. 2, а и в.

Следующая группа включает сетки, имеющие только один уровень вложения, иначе говоря, два иерархических уровня (рис. 2, б). Такая организация имеет неоспоримые преимущества, поскольку одновременно позволяет рассматривать раздробленные корневые ячейки как отдельные блочные структуры, создаваемые в тех же границах. Это снимает какие-либо ограничения на способы дробления корневых ячеек. Возможно использование любых разновидностей сеток как по структурированности, по типам используемых симплексов, так и по степени сопряженности между ячейками и по равномерности дискретизации. Для дробления могут использоваться всевозможные известные шаблоны или задаваться новые, причем не обязательно использовать одинаковые шаблоны для дробления всех корневых ячеек расчетной области.

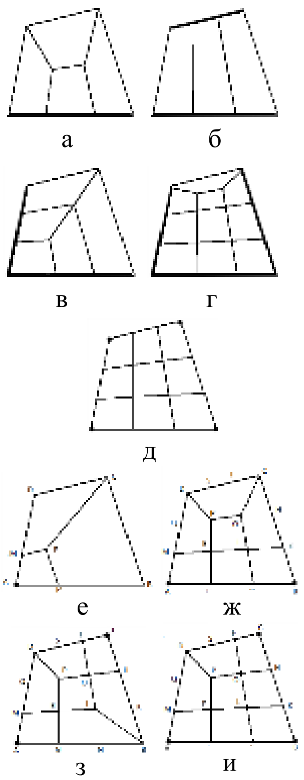


Рис. 3

Например, для дробления корневых ячеек изначально конформной сетки, приведенной на рис. 2, а, используются структурированные согласованные равномерные сетки с переменной кратностью дробления. При этом новая структура глобально теряет свойство конформности, но этот недостаток компенсируется компактностью хранения геометрических и физических данных задачи, простотой и высокой скоростью построения сеток такого вида, а также быстрой работой алгоритмов на их основе.

На рис. 3 приведены примеры шаблонов разбиения, сохраняющих тип ячейки; на рис. 4, а – г – изменяющих тип используемого симплекса, а на рис. 4, д, е – позволяющих перейти к смешанным сеткам. Эти шаблоны значительно проигрывают типу дискретизации, приведенному на рис. 2, б, по простоте создания и эффективности применения ориентированных на них алгоритмов. Главным их достоинством является возможность сохранения после дробления качества сетки, например конформности, выпуклости ячеек, ограничения максимальных и минимальных величин углов элементов сетки.

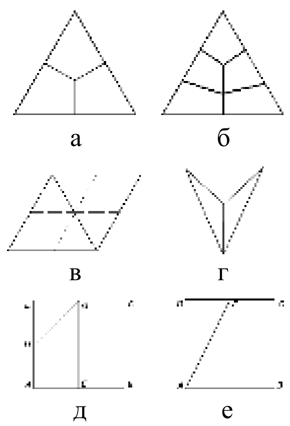
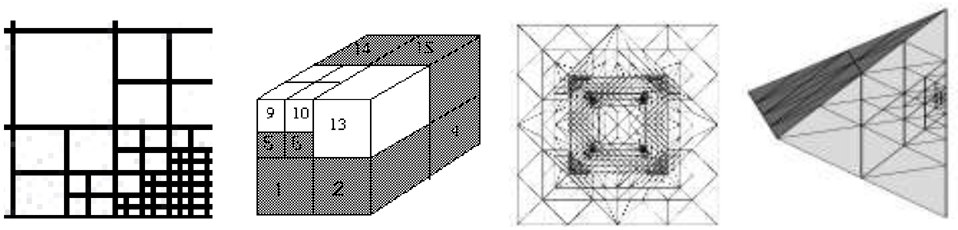


Рис. 4

Сохранение качества треугольных сеток обеспечивается двумя основными шаблонами: бисекцией (по большой стороне или новому узлу) и регулярным разбиением (на четыре треугольника) [12 – 15]. В отношении четырехугольных сеток известны разные схемы дробления. Большинство из них ориентированы на структурированные сетки, когда узлы и ячейки сетки строго упорядочены, размер и форма четырехугольников близки к идеальным показателям.

Среди способов дробления неструктурированной четырехугольной сетки, сохраняющих основные критерии качества, можно отметить наборы шаблонов для дробления на четыре (рис. 3, а – г) и девять ячеек (рис. 3, д – и), предложенные соответственно Гаримелла [16] и Шнейдером [17]. Главную сложность при этом представляет не собственно дробление, а сохранение при этом основных показателей качества новой сеточной структурой, в частности её конформности. Для этого дробление осуществляется фактически в два этапа: на первом осуществляется измельчение выбранных ячеек (рис. 3, а и д), а на втором – согласующее дробление приграничных ячеек при помощи вспомогательных шаблонов (рис. 3, б – г и е – и), которые призваны решать непростую задачу сохранения качества полученной сетки.

Третья группа сеток, согласно выбранной классификации, содержит все многоуровневые сетки. Как правило, такие сетки имеют древовидные структуры, а степень детализации определяется количеством уровней вложения с привлечением для упрощения алгоритма рекурсии. Эта особенность методики построения существенно ограничивает возможность разнообразить используемые для разбиения шаблоны. Для древовидной организации сеток стараются выбирать шаблоны, имеющие структурированную организацию ячеек на каждом



а б в г

Рис. 5

уровне детализации. Обычно предпочтение отдается самому примитивному способу дробления бисекции – по одному или нескольким геометрическим параметрам сетки. Яркимпредставителем этого класса сеток являются так называемые квадро- и октодеревья (рис. 5, а и б соответственно) [18 – 26], образующиеся при делении пополам каждой линейной характеристики ячейки. На рис. 5, в и г приведены примеры сочетания бисекции по линейным и угловым параметрам ячеек для двухмерного и трехмерного случаев.

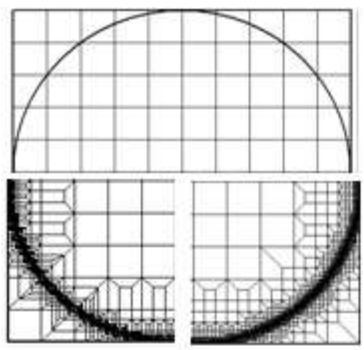


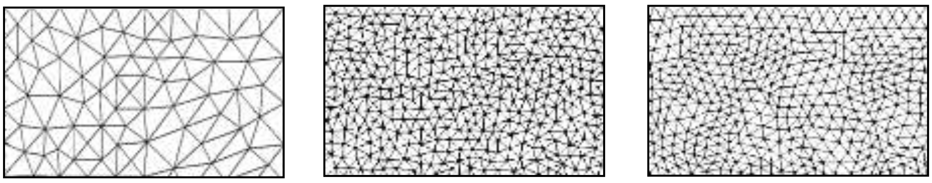
Рис. 6

Для многократного дробления корневых ячеек существуют также более сложные шаблоны, позволяющие сохранять необходимое качество сеток (в частности, их конформность). На рис. 6 приведен пример четырехуровневой детализации в окрестности окружности на основе шаблонов Шнейдера и Гаримелла. Верхняя половина рисунка – исходная равномерная сетка, слева внизу – дробление по шаблонам Шнейдера, справа внизу – по шаблонам Гаримелла.

5 Классификация по критерию равномерности геометрических параметров. Еще одной достаточно важной характеристикой РС несомненно является её равномерность. Равномерность даже по одной из геометрических характеристик РС может быть неоспоримым преимуществом. В частности, она может позволить не только существенно сократить количество расчетных данных, но и оптимизировать численные расчеты на этой сетке. Иногда наряду с этим упрощается и ускоряется процесс построения РС. Кроме того, таким сеточным структурам присуща простота описания расчетных областей.

Следует отметить, что РС могут быть равномерными не только по линейным, но и по угловым характеристикам. В первом случае задается степень пространственной равномерности при дискретизации области, а во втором – качество получаемой сетки, что является необходимым условием применения многих численных методов.

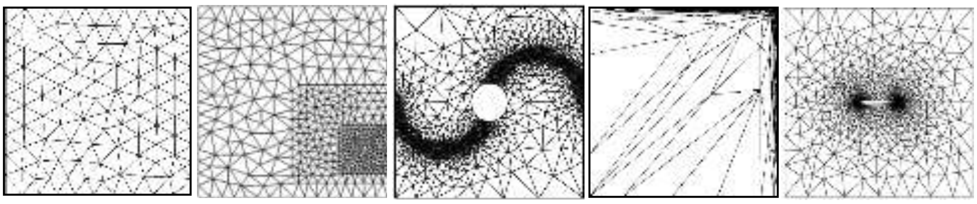
В то же время, использование равномерных сеток имеет некоторые ограничения. Во-первых, такие сетки предпочтительно применять к задачам с равномерным пространственным распределением входных данных. Во-вторых, геометрически сложные расчетные области, в т. ч. имеющие криволинейные границы, а также содержащие локальные участки с большими градиентами физических параметров, проще и экономнее описывать другими сеточными моделями.



а б в

Рис. 7

Степень неравномерности параметров сетки может быть разной. На рис. 7 приведено несколько примеров неравномерных по линейному параметру РС: а – обычная неравномерная (нерегулярная), б и в – сетки, имеющие нерегулярность первого и второго порядка соответственно.



а б в г д

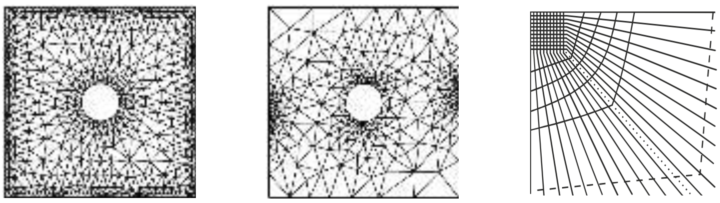
Рис. 8

Для равномерных сеток варьирование выбранного параметра или критерия на его основе может осуществляться на некотором промежутке. Если промежуток достаточно мал (например, соизмерим с точностью определения параметра), то контролируемый параметр можно считать постоянной величиной, а сетку – глобально равномерной (рис. 8, а). Если параметр изменяется дискретно (скачкообразно), сетка – локально равномерная (рис. 8, б). Параметр может также изменяться непрерывно в соответствии с некоторой закономерностью. Такой пример, когда размер треугольников задается с помощью скалярной функции, отображен на рис. 8, в [27]. В этом случае должно существовать отображение, при котором образ исходной сетки будет равномерным по заданному параметру.

Одним из частных случаев такого подхода являются анизотропные РС (рисунок 8, г). Они широко применяются для проведения расчетов в средах, обладающих анизотропными свойствами. Например, анизотропия сплошной среды описывается тензорными величинами, которые в общем случае зависят от геометрических координат.

Непрерывно изменяемый параметр можно получить и без использования функции контроля в процессе построения. Например, можно монотонно повышать качество некоторой первоначальной сетки посредством последовательных локальных модификаций. Таким образом строят так называемые $\mathfrak{M}$-квазиравномерные сетки (рис. 8, д) [28].

Различные виды краевых условий также могут существенно влиять на равномерность дискретизации. РС, изображенные на рис. 9, а и б [27], построены при автоматическом выборе шага триангуляции. Для обоих рисунков параметр, задающий скорость увеличения критерия, совпадает и равен 1,25, а вот шаг граничной дискретизации для первого рисунка равен константе, а для второго – плавно меняется. На рис. 9, в приведен другой, не менее яркий пример большого влияния граничных условий – так называемая квазиравномерная сетка [29]. Точное условие в этом случае ставится на бесконечной границе и определяет вид функции, задающей сеточное разбиение. Полученная РС сильно неравномерна, поскольку покрывает конечным числом узлов бесконечную область. При этом на небольшом участке расчетной области локально присутствует равномерная сетка.



а б в

Рис. 9

6 Выбор оптимальной расчетной сетки для численного моделирования течений разреженного газа методом пробных частиц. Численные методики для расчёта двумерных течений жидких и газообразных сред в основном используют регулярные четырёхугольные сетки, а для трёхмерных течений – регулярные шестигранные сетки. Более широкое использование регулярных сеток связано с достаточно высокой экономичностью и простотой алгоритмов счёта.

Одними из наиболее востребованных в динамике разреженных газов являются методы статистического моделирования. При их реализации время и точность расчетов неразрывно связаны с количеством проведенных испытаний, следовательно, достижение высокой точности результатов требует увеличения временных затрат. Это обстоятельство оказывает решающее влияние при выборе наилучшего типа дискретизации расчетной области. Исходя из этого, предпочтение отдаётся равномерным и регулярным структурам. Сетки, имеющие постоянный шаг хотя бы по одному из аргументов, обладают таким важным преимуществом, как возможность быстрого определения границ ячеек по этому направлению с помощью использования интерполяционных формул и позволяют отказаться от хранения лишних данных на физических носителях.

Наряду с экономией машинного времени вторым важным требованием является возможность регулировать степень измельчения ячеек в областях с большими градиентами расчетных параметров. Структурированные равномерные прямоугольные РС не позволяют использовать в расчетной области ячейки разного размера, и поэтому уменьшение размера хотя бы одной ячейки неизбежно приводит к уменьшению размера всех остальных. При решении некоторых задач это приводит к острому дефициту машинной памяти и влияет на качество результатов. Таким образом, проблема поиска более эффективной РС, позволяющей локально измельчать ячейки, стоит достаточно остро. Переход от расчетов на равномерных регулярных РС к легко адаптируемым, мобильным по структуре сеткам является одним из приоритетных путей повышения производительности статистических методов и открывает перспективу дальнейшего совершенствования метода пробных частиц (МПЧ).

Сравним отличающиеся способом организации, а также доступом к своим элементам типы РС с точки зрения применимости для МПЧ [1]: одноуровневые – равномерные прямоугольные и криволинейные структурированные; неструктурированные [30] (см. рис. 1, 2, 7 – 9), а также их разновидность – иерархические РС (см. рис. 5, 6), в т. ч. организованные с помощью блоков (см. рис. 2, б).

Благодаря специфике организации ячеек и возможности ввода системы индексов, соответствующих сеточным направлениям, регулярные сетки позволяют минимизировать время нахождения адреса соседней ячейки в заданном направлении. Кроме того, такие сетки дают возможность использовать любые одномерные алгоритмы вдоль каждой из координатных осей независимо друг от друга, то есть в случае необходимости допускают распараллеливание по сеточным направлениям.

Регулярные РС строятся преимущественно при помощи шаблонов с последующим применением при необходимости методов отображения [31, 32]. Сгенерированные при помощи шаблонов сетки являются равномерными, поскольку состоят из одинаковых ячеек. Их локальное измельчение невозможно. Применение методов отображения приводит в общем случае к криволинейным РС, позволяющим одновременно решить сразу две основные проблемы: хорошую адаптацию сетки к внешней и внутренней границам области, а также её локальное сгущение. В то же время, криволинейные сетки значительно усложняют алгоритм вычисления параметров траектории частиц, а также увеличивают временные затраты и погрешности счета при преобразованиях систем координат, что может свести к нулю (или даже к обратному результату) экономию машинных ресурсов, достигаемую благодаря структурированности. Кроме того, возможно также искажение сеток и возникновение особенностей, вплоть до появления вырожденных ячеек при отображении.

Главным преимуществом неструктурированных сеток в нашем случае является гибкость их структуры, высокая степень адаптивности и благодаря этому возможность существенного сокращения общего числа расчетных ячеек, в также хорошей аппроксимации границы области любой степени сложности. Однако особенности организации геометрической информации о каждой ячейке замедляют доступ к ней и приводят к существенному усложнению и торможению работы алгоритма [33].

Отдельная разновидность нерегулярных РС – структуры с иерархической организацией (см. рис. 5, 6), в том числе состоящие частично или полностью из блоков [34]. Такие сетки позволяют использовать существенные для данной задачи достоинства регулярной организации, не сохраняя структурированность на глобальном уровне. Выбрав для каждого из уровней организации РС регулярные структуры, можно одновременно получать ячейки разного размера в пределах расчетной области и сохранять при этом высокоэффективный доступ к данным, а также их быструю обработку [1]. Такой подход позволяет дополнительно сократить расчетное время, используя наиболее эффективные с точки зрения вычислений РС (например, построенные по прямоугольным шаблонам).

Иерархические РС по сравнению с регулярными имеют определенный недостаток – многоуровневая организация РС вынуждает усложнять и тем самым замедлять расчетный алгоритм. Максимально снизить влияние этого фактора удается для иерархических структур с минимальным числом вложений. Размеры расчетных ячеек для таких РС регулируют кратностью разбиения корневых (см. рис. 2, б).

Необходимость сохранения регулярной организации на всех уровнях РС ставит перед нами ту же задачу адаптации РС к внешним и внутренним границам расчетной области, что и для регулярных равномерных сеток. Решается она погружением внутренних или внешних преград, рассматриваемых в задаче, в расчетную область. При этом структура сетки полностью сохраняется, а часть ячеек становятся нерабочими, поскольку попадают за границы преграды. Обеспечить отражение движущихся частиц газа от поверхности преграды можно, введя условие её непроницаемости [1].

Такой подход предоставляет полную свободу при выборе формы и размера расчетной области. Форма должна обеспечивать максимальные удобство при расчетах и упрощение построения сетки, а размер должен быть достаточен для того, чтобы полностью включить преграду и зоны возмущения расчетных параметров задачи. С помощью подходящего шаблона сначала строится начальная регулярная сетка, степень последующего разбиения базовых ячеек которой определяется в соответствии с местными длинами свободного пробега.

Таким образом, анализ основных преимуществ и недостатков рассмотренных основных типов РС позволяет сделать вывод, что для решения задач газовой динамики статистическим МПЧ наиболее перспективным как с точки зрения простоты алгоритма, так и по затратам машинных ресурсов является использование сеток, сочетающих высокоэффективный доступ к рабочим ячейкам структурированных РС с гибкостью и адаптивностью неструктурированных. Соединить наиболее ценные для МПЧ свойства дискретизации расчетной области могут иерархические сетки, использующие на каждом из уровней регулярные равномерные структуры, поскольку одновременно глобально такие сетки всё равно остаются нерегулярными. При этом количество уровней организации РС желательно максимально сократить.

1. *Смелая Т. Г.* Выбор расчетной сетки при моделировании течений разреженного газа методом пробных частиц / *Т. Г. Смелая* // Техническая механика. – 2013. – № 1. – С. 45 – 60.
2. *Knupp P.* Algebraimesh quality metris / *P. Knupp* // SIAM J. Si. Comput. – 2001. – Vol. 23, N 1. – P. 193 – 218.
3. *Шайдуров В. В.* Многосеточные методы конечных элементов / *В. В. Шайдуров*. – М. : Наука, 1989. – 288 с.
4. *Parthasarathy V. N.* Comparison of Tetrahedron Quality Measures / *V. N. Parthasarathy, C. M.Graichen, A. F. Hathaway* // Finite Elements in Analysis and Design. – Elsevier, 1993. – N. 15. – P. 255 – 261.
5. *Lopez E.* Simultaneous untangling and smoothing of moving and fixed grids / *E. Lopez, N. Nigro, M. Storti* // Int. J. Numer : Meth. Engrg. – 2000. – N 10. – P. 1 – 6.
6. *Thopmson J. F.* Boundary-fitted coordinate systems for numerical solution of partial differential equations – a review / *J. F. Thopmson, Z. U. A. Warsi, C. W. Mastin* // J. Comput. Phys. – 1982. – Vol. 47. – P. 1 – 108.
7. *Jones M. E.* Electromagnetic PIC codes with body-fitted coordinates / *M. E. Jones* // Proc. 12th Int. Conf. on the Numerical Simulation of Plasmas. – 1984. – P. 27 – 28.
8. *Westermann T.* Numerical modelling of the stationary Maxwell–Lorentz system in technical devices / *T. Westermann* // International Journal of Numerical Modelling : Electronic Network, Devices and Fields. – 1994. – Vol. 7. – P. 43 – 67.
9. *Halter E.* A concept for numerical solution of the Maxwell–Vlasov system / *E. Halter, M. Krauss, C.-D. Munz* // Forschungszentrum karlsruhe - umwelt und technik umwelt und technik. – 1995. – 87 p.
10. *Prathap G.* Finite elements as computation / *G. Prathap*. – Bangalore : CMMMACS, 2001. – 116 p.
11. *Олейников А. И.* Влияние типа конечно-элементного представления при моделировании формообразования панелей из упругопластического материала / *А. И. Олейников, С. Н. Коробейников, К. С. Бормотин* // Вычисл. мех. сплош. сред. – 2008. – Т. 1, № 2. – С. 63 – 73.
12. *Kopysov S. P.* Domain decomposition for parallel adaptive unite element algorithm / *S. P. Kopysov, A. K. Novikov* // Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mekh. Komp'yut. Nauki. – 2010. – N 3. – P. 141 – 154.
13. *Kopysov S. P.* Parallel algorithms of adaptive refinement and partitioning of unstructured grids / *S. P. Kopysov, A. K. Novikov* // Matematiheskoe Modelirovanie. – 2002. – Vol. 14, N. 9. – P. 91 – 96.
14. *Копысов С. П.* Анализ способов перестроения треугольных конечно-элементных сеток / *С. П. Копысов, А. К. Новиков* // Труды Матем. центра им. Н. И. Лобачевского. – Казань : Изд-во Казан. мат. об-ва, 2003. – Т. 20. – С. 170 – 180.
15. *Караваев А. С.* Перестроение неструктурированных четырехугольных и смешанных сеток / *А. С. Караваев, С. П. Копысов* // Вестник Удмурдского университета. Математика, механика, компьютерные науки. – 2013. – Вып. 4. – С. 62 – 78.
16. *Garimella R.* Conformal refinement of unstructured quadrilateral meshes / *R. Garimella* // 18th International Meshing Roundtable. – Springer-Verlag, 2009. – P. 31 – 44.
17. *Shneiders R.* Rening quadrilateral and hexahedral element meshes / *R. Shneiders* // 5th International Conference on Grid Generation in Computational Field Simulations. – 1996. – P. 679 – 688.
18. *Benek J. A.* Extended chimera grid embedding scheme with application to viscous – flows / *J. A. Benek, T. L. Donegan* // Computational Fluid Dynamics : 8th AIAA Conference : materials (9-11 June, 1987, Honolulu). – New York : AIAA, 1987. – P. 272 – 282.
19. *Samet H.* Implementing Ray Tracing with Octrees and Neighbor Finding / *H. Samet* // Computer and Graphics. – 1989. – Vol. 13, N 4. – P. 445 – 460.
20. *Samet H.* The Quadtree and Related Hierarhical Data Structures / *H. Samet* // ACM Comput. Surveys. – 1984. – Vol. 16, N 2. – P. 187 – 260.
21. *Samet H.* Computing Geometric Properties of Images Represented by Linear Quadtrees / *H. Samet, M. Tamminen* // IEEE Transaction on Patter Analysis and Machine Intelligenc. – 1985. – Vol. 7, N 2. – P. 229 – 240.
22. *Samet H.* Neighbor Finding Techniques for Images Represented Quadtrees / *H. Samet* // Computer Graphics and Image processing. – 1982. – Vol. 17, N 1. – P. 37 – 57.
23. *Burroughs P. A.* Principles of Geographical Information Systems for Land Resources Assessment / *P. A. Burroughs*. – Oxford : Clarendon Press, 1994. – 193 p.
24. *Samet H.* The Design and Analysis of Spatial Data Structures / *H. Samet*. – 1990. – 499 p.
25. Математика – Октодерево. – 2011. – [Электронный ресурс]. – Режим доступа к документу : http://49l.ru/a/oktoderevo.
26. *Carlbom I. A* Hierarchical Data Structure for Representing the Spatial Decomposition of 3D Objects / *I. Carlbom, I. Chakravarty and D. Vanderschel* // Frontiers in Computer Graphics. – New York : Springer-Verlag, 1985. – P. 2 – 12.
27. *Данилов А. А.* Технология построения неструктурированных сеток и монотонная дискретизация уравнения диффузии : дис. … канд. физ.-мат. наук : 05.13.18. / *Данилов Александр Анатольевич*. – М., 2002. – 215 с.
28. Автоматизированные технологии построения неструктурированных расчетных сеток / *Ю. В. Василевский, А. А. Данилов, К. Н. Липников, В. Н. Чугунов*. – М : Физматлит, 2013. – 133 с.
29. Разностные схемы на нерегулярных сетках / *А. А. Самарский, А. В. Колдоба, Ю. А Повещенко, В. Ф. Тишкин , А. П. Фаворский*. – Минск, 1996. – 276 с.
30. *Печерица Л. Л.* Построение оптимальных алгоритмов реализации метода пробных частиц в динамике разреженных газов / *Л. Л. Печерица, Т. Г. Смелая, Н. В. Петрушенко* // Современные проблемы динами-

ки разреженных газов : IV-ая Всероссийская конференция : материалы (26 – 29 июля 2013 г.). – Новосибирск, 2013. – С. 164 – 166.
31. *Галанин М. П.* Разработка и реализация алгоритмов трехмерной триангуляции сложных пространственных областей : прямые методы / *М. П. Галанин, И. А. Щеглов*. – М., 2006. – 32 с. (Препринт / ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, № 10)
32. *Флетчер К.* Вычислительные методы в динамике жидкостей : в 2 т. / *К. Флетчер*. – М. : «Мир», 1991. – 1056 с.
33. *Галанин М. П.* Разработка и реализация алгоритмов трехмерной триангуляции сложных пространственных областей : итерационные методы / *М. П. Галанин, И. А. Щеглов*. – М., 2006. – 32 с. (Препринт / ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, № 9)
34. *Rubbert P.* Patched coordinate systems / *P. E. Rubbert, K. D. Lee* // Numerical Grid Generation / ed. by J.F. Thompson. – 1982. – P. 235 – 252.

Институт технической механики Национальной академии наук Украины и Государственного космического агентства Украины, Днепропетровск

Получено 19.10.2015,
в окончательном варианте 28.10.2015