УДК 533.6

СПОСОБЫ ТРЁХМЕРНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ГИДРОМЕХАНИЧЕСКИХ ПЕРЕМЕННЫХ В МЕТОДЕ КОНЕЧНЫХ ОБЪЁМОВ

А.М. Липанов, А.Н. Семакин

Институт прикладной механики УрО РАН, Ижевск, Россия

Изложена методика интерполяции функций нескольких переменных. Приведены три способа трёхмерной интерполяции по произвольно расположенным точкам в пространстве, основанные соответственно на вычислении определителей, на разложении функции по формуле Тейлора, на представлении функции в виде отрезка ряда Фурье по ортогональным многочленам. Для каждого способа получены расчётные формулы, пригодные для непосредственного использования. Приведены примеры расчётов с применением каждого из способов. Указана одна из возможных областей их приложения (метод конечных объёмов).

Ключевые слова: метод конечных объёмов, гидромеханические переменные, интерполяция

3D INTERPOLATION TECHNIQUES FOR HYDROMECHANICAL CHARACTERISTICS IN THE FINITE VOLUME METHOD

A.M. Lipanov and A.N. Semakin

Institute of Applied Mechanics UB RAS, Izhevsk, Russia,

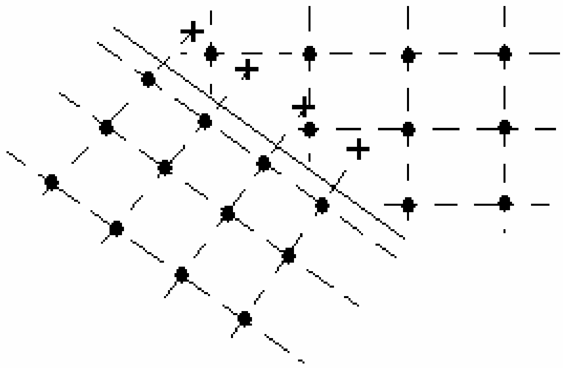
In this paper the interpolation technique of functions with several variables is describe. Three methods of interpolation over arbitrary located points in 3D space (the method based on the determinants, the method based on Taylor's formula with a remainder, the method based on the Fourier polynomials) are given. For each method the computational formulas are presented. . The examples of calculations for each method are given also. One possible field for application (the final volume method) is specified.

Keywords: finite volume method, hydromechanical parameters, interpolation

1. Постановка задачи

В работе [1] предложен достаточно простой метод расчёта гидромеханических переменных в различных многосвязных областях. Суть его сводится к тому, что сложная исходная область делится на несколько подобластей — конечных объёмов (КО), более простой структуры. В каждом КО вводится собственная система координат, в которой формулируется система уравнений гидромеханики. Далее эта система уравнений решается с помощью метода конечных разностей.

При нахождении частных производных по пространственным направлениям в узлах разностной сетки используется метод неопределённых коэффициентов, позволяющий рассчитывать эти производные с любым порядком точности. Согласно методу неопределённых коэффициентов для определения производной в данной точке необходимо знать значения искомой функции в нескольких соседних узлах. Поэтому при расчёте производных в точках, расположенных около границы данного КО, необходимо «заходить» в соседние объёмы. Однако разностные сетки в двух смежных КО обычно не согласованы, то есть при «заходе» в соседний объём нужные нам точки могут не совпадать с расчётными точками разностной сетки рассматриваемого КО (см. рисунок).



Область соприкосновения двух соседних конечных объёмов;
• – расчётная точка, + – интерполируемая точка

Поэтому для определения значений величин в нужных точках необходимо произвести интерполяцию по известным значениям величин в расчётных точках соседнего КО. При этом, поскольку в [1] изложение методики расчёта ведётся для вязкого газа, необходимо учитывать, что гидромеханические переменные представляют собой непрерывные во всей рассматриваемой области функции нескольких переменных, дифференцируемые необходимое число раз.

2. Способы интерполяции

Наиболее простым способом интерполяции является использование многочленов Лагранжа и Ньютона. Однако при интерполяции данными многочленами функций трёх переменных узлы интерполяции должны располагаться в виде параллелепипеда или тетраэдра [2, 3], что при реализации метода конечных объёмов гарантировать достаточно сложно. Поэтому необходимо использовать иные способы интерполяции, которые допускают произвольное расположение узлов.

В случае произвольного расположения точек можно выделить три способа трёхмерной интерполяции, в основе которых лежат: вычисление определителей; разложение функции по формуле Тейлора; представление функции в виде отрезка ряда Фурье по ортогональным многочленам. Рассмотрим каждый из них подробнее.

3. Способ, основанный на вычислении определителей

Функцию $f(\mathbf{x})$, где $\mathbf{x}=(x,y,z)$, в окрестности с центром в точке $\mathbf{x}_0$ аппроксимируем полиномом степени n:

$$f(\mathbf{x}) \approx \sum_{i+j+k=0}^{n} a_{ijk} x^i y^j z^k \ . \tag{1}$$

Пусть известны значения функции $f(\mathbf{x})$ в точках $\mathbf{x}_m=(x_m,y_m,z_m)$ ($m=\overline{1,N}$, N — число слагаемых в сумме (1)). При этом предполагаем, что точки $\mathbf{x}_m$ ($m=\overline{1,N}$) располагаются относительно $\mathbf{x}_0$ произвольно. Тогда коэффициенты a_{ijk} определяются из условий:

$$f(\mathbf{x}_m) = \sum_{i+j+k=0}^{n} a_{ijk} x_m^i y_m^j z_m^k \,, \qquad m=\overline{1,\ N} \ . \tag{2}$$

Составим определитель, у которого в первом столбце располагаются значения функции $f\left(\mathbf{x}_m\right)$, а в последующих — значения $x_m^i y_m^j z_m^k$ при коэффициентах a_{ijk}, то есть во втором столбце размещается величина, стоящая при a_{000}, в третьем столбце — величина, стоящая при a_{100} и так далее:

$$\Delta = \begin{vmatrix} f\left(\mathbf{x}_1\right) & 1 & x_1 & \ldots & z_1^n \\ f\left(\mathbf{x}_2\right) & 1 & x_2 & \ldots & z_2^n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ f\left(\mathbf{x}_N\right) & 1 & x_N & \ldots & z_N^n \\ f\left(\mathbf{x}_0\right) & 1 & x_0 & \ldots & z_0^n \end{vmatrix}. \quad (3)$$

Из (1) и (2) следует, что первый столбец определителя является линейной комбинацией остальных его столбцов [4]. Следовательно:

$$\Delta = 0. \quad (4)$$

Разложим данный определитель по элементам первого столбца:

$$\sum_{m=0}^{N} f\left(\mathbf{x}_m\right) A_m = 0, \quad (5)$$

где A_m — алгебраическое дополнение элемента $f\left(\mathbf{x}_m\right)$.

Из (5) можно получить:

$$f\left(\mathbf{x}_0\right) = -\sum_{m=1}^{N} f\left(\mathbf{x}_m\right) A_m / A_0. \quad (6)$$

Формула (6) — формула способа интерполирования, основанного на вычислении определителей. Из (6) видно, что точки $\mathbf{x}_m$ должны выбираться для интерполирования таким образом, чтобы $A_0 \neq 0$.

С точки зрения реализации этот способ является самым простым. Основная проблема здесь заключается в трудоёмкости вычисления алгебраических дополнений A_m при интерполировании полиномами высокой степени. В таблице 1 показано, как количество слагаемых $a_{ijk} x_m^i y_m^j z_m^k$ в (1) зависит от степени полинома.

Таблица 1. Зависимость числа слагаемых N в полиноме от его степени n

n	2	4	6	8	10
N	10	35	84	165	286

Приведём пример интерполирования данным способом при $n = 2$, $N = 10$, $\mathbf{x}_0 = \left(0,0,0\right)$ для точек:

$\left(\ 0,00189;\ -0,03293;\ \ 0,03293\right)$, $\left(\ 0,00189;\ -0,03293;\ -0,07818\right)$,

$\left(\ 0,00189;\ \ 0,07818;\ \ 0,03293\right)$, $\left(-0,04240;\ -0,03293;\ \ 0,03293\right)$,

$$\begin{array}{ll} (\ 0,00189;\ -0,03293;\ \ 0,14404), & (\ 0,00189;\ \ 0,07818;\ -0,07818), \\ (\ 0,00189;\ -0,14404;\ \ 0,03293), & (-0,04240;\ -0,03293;\ -0,07818), \\ (-0,04240;\ \ 0,07818;\ \ 0,03293), & (\ 0,04619;\ -0,03293;\ \ 0,03293). \end{array}$$

Определители вычисляются методом Гаусса и имеют следующие значения:

$A_0 = 3.91108 \cdot 10^{-16}$,
$A_1 / A_0 = -0,93563$, $A_2 / A_0 = -0,09162$, $A_3 / A_0 = -0,09162$, $A_4 / A_0 = 0,00304$,
$A_5 / A_0 = 0,10427$, $A_6 / A_0 = -0,08784$, $A_7 / A_0 = 0,10427$, $A_8 / A_0 = -0,01265$,
$A_9 / A_0 = -0,01265$, $A_{10} / A_0 = 0,02042$.

4. Способ, основанный на разложении функции по формуле Тейлора

Определим значение величины f в точке $\mathbf{x}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ через её значения в точках $\mathbf{x}_m = (x_m, y_m, z_m)$ следующим образом:

$$f(\mathbf{x}_0) = \sum_m \omega_m f(\mathbf{x}_m). \tag{7}$$

Разложим функцию $f(\mathbf{x})$ по формуле Тейлора в окрестности точки $\mathbf{x}_0$ [5]:

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + df(\mathbf{x}_0) + d^2 f(\mathbf{x}_0)/2! + \ldots + d^n f(\mathbf{x}_0)/n! + r_n, \tag{8}$$

где

$$d^p f(\mathbf{x}_0) = \sum_{i+j+k=p} A_{ijk}^p \frac{\partial^p f(\mathbf{x}_0)}{\partial x^i \partial y^j \partial z^k} \Delta x^i \Delta y^j \Delta z^k, \tag{9}$$

$$r_n = \frac{1}{(n+1)!} \sum_{i+j+k=n+1} A_{ijk}^{n+1} \frac{\partial^{n+1} f(\mathbf{y})}{\partial x^i \partial y^j \partial z^k} \Delta x^i \Delta y^j \Delta z^k, \tag{10}$$

$$A_{ijk}^p = p!/(i!\,j!\,k!). \tag{11}$$

Тогда

$$\sum_m \omega_m f(\mathbf{x}_m) = \sum_m \omega_m f(\mathbf{x}_0) + \sum_{p=1}^{n} \frac{1}{p!} \sum_{i+j+k=p} A_{ijk}^p \frac{\partial^p f(\mathbf{x}_0)}{\partial x^i \partial y^j \partial z^k} b_{ijk} + R_n, \tag{12}$$

где

$$b_{ijk} = \sum_m \omega_m (\Delta x_m)^i (\Delta y_m)^j (\Delta z_m)^k, \tag{13}$$

$$R_n = \frac{1}{(n+1)!} \sum_{i+j+k=n+1} A_{ijk}^{n+1} \sum_m \omega_m \frac{\partial^{n+1} f(\mathbf{y}_m)}{\partial x^i \partial y^j \partial z^k} (\Delta x_m)^i (\Delta y_m)^j (\Delta z_m)^k. \tag{14}$$

Коэффициенты ω_m находятся из системы уравнений:

$$\begin{cases} \sum\limits_m \omega_m = 1, \\ \sum\limits_m \omega_m \left(\Delta x_m\right)^i \left(\Delta y_m\right)^j \left(\Delta z_m\right)^k = 0, \quad \forall i, j, k : i + j + k = p, \;\; p = \overline{1, n}. \end{cases} \tag{15}$$

Эта система уравнений симметризуется путём умножения её левой и правой частей на транспонированную матрицу системы и решается методом сопряжённых градиентов [6].

При таком способе определения коэффициентов ω_m получим:

$$\sum_m \omega_m f\left(\mathbf{x}_m\right) = f\left(\mathbf{x}_0\right) + R_n . \tag{16}$$

Если положить $\Delta = \max\limits_m \left(\left|\Delta x_m\right|, \left|\Delta y_m\right|, \left|\Delta z_m\right|\right)$, то $\left|R_n\right| \le C \cdot \Delta^{n+1}$, где

$$C = \frac{1}{\left(n+1\right)!} \sum_{i+j+k=n+1} A_{ijk}^{n+1} \sum_m \left| \omega_m \frac{\partial^{n+1} f\left(\mathbf{y}_m\right)}{\partial x^i \partial y^j \partial z^k} \right|, \tag{17}$$

то есть можно написать, что $R_n = \mathrm{O}\left(\Delta^{n+1}\right)$. Здесь n — порядок точности, с которым находится решение рассматриваемой задачи.

Точки $\mathbf{x}_m$ необходимо выбирать таким образом, чтобы система (15) имела единственное решение. Недостатком этого способа является то, что из него не следует простой критерий отбора точек для проведения интерполирования.

Применение данного способа к указанному в п. 3 набору точек приводит к следующим результатам:

$\omega_1 = 0,93562$, $\omega_2 = 0,09162$, $\omega_3 = 0,09162$, $\omega_4 = -0,00303$, $\omega_5 = -0,10427$,
$\omega_6 = 0,08783$, $\omega_7 = -0,10427$, $\omega_8 = 0,01266$, $\omega_9 = 0,01266$, $\omega_{10} = -0,02040$.

5. Способ, основанный на представлении функции в виде отрезка ряда Фурье по ортогональным многочленам

Для случая функции одной переменной её аппроксимация с помощью отрезка ряда Фурье по ортогональным многочленам в общих чертах изложена в работах [7, 8]; в [9] приведено несколько систем ортогональных многочленов, построенных на дискретном множестве точек, а в [10] описан простой способ их получения. В этих книгах изложение метода проведено только для функции одной переменной. В данной работе этот метод распространяется на случай функций трёх переменных с использованием подхода [10].

Неизвестное значение величины f в точке $\mathbf{x}_0 = \left(x_0, y_0, z_0\right)$ определяется через её известные значения в точках $\mathbf{x}_m = \left(x_m, y_m, z_m\right)$, $m = \overline{1, N}$ с помощью отрезка ряда Фурье, построенного на основе системы ортогональных многочленов:

$$f\left(\mathbf{x}_0\right) = \sum_{i+j+k=0}^{n} c_{ijk} \psi_{ijk}\left(\mathbf{x}_0\right), \tag{18}$$

где

$$c_{ijk} = \left(\psi_{ijk}\left(\mathbf{x}\right), f\left(\mathbf{x}\right)\right). \tag{19}$$

Система ортогональных многочленов $\psi_{ijk}\left(\mathbf{x}\right)$ строится последовательно по формулам:

$$\psi_{ijk}\left(\mathbf{x}\right) = \frac{\varphi_{ijk}\left(\mathbf{x}\right)}{\left\|\varphi_{ijk}\left(\mathbf{x}\right)\right\|}, \tag{20}$$

$$\varphi_{000} = 1, \tag{21}$$

$$\varphi_{ijk}\left(\mathbf{x}\right) = x\psi_{i-1jk}\left(\mathbf{x}\right) + y\psi_{ij-1k}\left(\mathbf{x}\right) + z\psi_{ijk-1}\left(\mathbf{x}\right) + \sum_{M}\alpha_{mnl}\psi_{mnl}\left(\mathbf{x}\right), \tag{22}$$

Созданные многочлены образуют множество M .

Коэффициенты α_{mnl} определяются из условия:

$$\left(\varphi_{ijk}\left(\mathbf{x}\right), \psi_{mnl}\left(\mathbf{x}\right)\right) = 0. \tag{23}$$

Учитывая, что

$$\left(\psi_{mnl}\left(\mathbf{x}\right), \psi_{mnl}\left(\mathbf{x}\right)\right) = 1,\ \left(\psi_{mnl}\left(\mathbf{x}\right), \psi_{pql}\left(\mathbf{x}\right)\right) = 0, \tag{24}$$

где $\psi_{mnl}\left(\mathbf{x}\right)$, $\psi_{pql}\left(\mathbf{x}\right) \in M$, получим

$$\alpha_{mnl} = -\left(x\psi_{i-1jk}\left(\mathbf{x}\right) + y\psi_{ij-1k}\left(\mathbf{x}\right) + z\psi_{ijk-1}\left(\mathbf{x}\right), \psi_{mnl}\left(\mathbf{x}\right)\right). \tag{25}$$

Скалярное произведение и норма находятся следующим образом:

$$\left(f\left(\mathbf{x}\right), g\left(\mathbf{x}\right)\right) = \sum_{m=1}^{N} f\left(\mathbf{x}_m\right) g\left(\mathbf{x}_m\right), \tag{26}$$

$$\left\|f\left(\mathbf{x}\right)\right\| = \sqrt{\left(f\left(\mathbf{x}\right), f\left(\mathbf{x}\right)\right)}. \tag{27}$$

Формулу (18) можно переписать в более удобном для использования виде:

$$f\left(\mathbf{x}_0\right) = \left(\sum_{i+j+k=0}^{n} \psi_{ijk}\left(\mathbf{x}_0\right)\cdot\psi_{ijk}\left(\mathbf{x}\right), f\left(\mathbf{x}\right)\right), \tag{28}$$

или

$$f\left(\mathbf{x}_0\right) = \sum_{m=1}^{N} \omega_m f\left(\mathbf{x}_m\right), \tag{29}$$

где

$$\omega_m = \sum_{i+j+k=0}^{n} \psi_{ijk}\left(\mathbf{x}_0\right)\cdot\psi_{ijk}\left(\mathbf{x}_m\right). \tag{30}$$

Точки $\mathbf{x}_m$ выбираются таким образом, чтобы выполнялось неравенство $\left\|\varphi_{ijk}\left(\mathbf{x}\right)\right\| \ge 10^{-4}$ для всех $\varphi_{ijk}\left(\mathbf{x}\right)$.

Данный способ является наиболее громоздким с точки зрения реализации, но, в отличие от первых двух способов, здесь можно указать критерий выбора точек для проведения интерполяции.

Приведём пример построения системы ортогональных многочленов степени не выше 2, то есть $n=2$, $N=10$, по набору точек из п. 3.

В таблице 2 указаны параметры $\left\|\varphi_{ijk}\right\|$ и α_{mnl}, необходимые для построения ортогональных многочленов. Подставляя их в (20), (22), получим:

$$\psi_{000} = 0,31623,$$
$$\psi_{001} = 4,74321 \cdot z - 0,05085, \qquad (31)$$
$$\psi_{010} = 4,81105 \cdot y + 0,80176 \cdot z + 0,04305$$

и так далее.

Интерполяционные коэффициенты ω_m в выражении (29) для точки $\mathbf{x}_0 = \left(0;0;0\right)$ равны:

$\omega_1 = 0,93568$, $\omega_2 = 0,09159$, $\omega_3 = 0,09159$, $\omega_4 = -0,00305$, $\omega_5 = -0,10427$,
$\omega_6 = 0,08785$, $\omega_7 = -0,10427$, $\omega_8 = 0,01268$, $\omega_9 = 0,01268$, $\omega_{10} = -0,02047$.

Таблица 2. Параметры ортогональных многочленов φ_{ijk}

φ_{ijk}	$\left\|\varphi_{ijk}\right\|$	α_{mnl}
φ_{000}	3,16228	-
φ_{001}	0,06667	$\alpha_{000} = -0,01071$
φ_{010}	0,06573	$\alpha_{000} = 0,01071$, $\alpha_{001} = 0,01111$
φ_{100}	0,02594	$\alpha_{000} = 0,00696$, $\alpha_{001} = -0,00443$, $\alpha_{010} = 0,00374$
φ_{002}	0,08282	$\alpha_{000} = -0,06667$, $\alpha_{001} = -0,01812$, $\alpha_{010} = 0$, $\alpha_{100} = 0$
φ_{011}	0,08224	$\alpha_{000} = 0,01111$, $\alpha_{001} = 0,01195$, $\alpha_{010} = -0,01281$, $\alpha_{100} = 0,02730$, $\alpha_{002} = 0,01380$
φ_{020}	0,06955	$\alpha_{000} = -0,06573$, $\alpha_{001} = -0,00104$, $\alpha_{010} = 0,01794$, $\alpha_{100} = 0,00229$, $\alpha_{002} = 0,03033$, $\alpha_{011} = 0,03096$
φ_{101}	0,05380	$\alpha_{000} = -0,00443$, $\alpha_{001} = 0,00647$, $\alpha_{010} = 0,01915$, $\alpha_{100} = -0,00744$, $\alpha_{002} = -0,00550$, $\alpha_{011} = -0,02756$, $\alpha_{020} = 0,00407$
φ_{110}	0,05293	$\alpha_{000} = 0,00374$, $\alpha_{001} = 0,01896$, $\alpha_{010} = 0,01059$, $\alpha_{100} = 0,00750$, $\alpha_{002} = -0,01863$, $\alpha_{011} = 0,01875$, $\alpha_{020} = 0,01057$, $\alpha_{101} = -0,01335$
φ_{200}	0,01953	$\alpha_{000} = -0,02594$, $\alpha_{001} = 0,00036$, $\alpha_{010} = -0,00030$, $\alpha_{100} = 0,00391$, $\alpha_{002} = 0,01128$, $\alpha_{011} = -0,00640$, $\alpha_{020} = 0,01468$, $\alpha_{101} = -0,01059$, $\alpha_{110} = 0,01297$

6. Заключение

В статье рассмотрены три способа интерполяции гидромеханических переменных, каждый из которых можно использовать в методе конечных объёмов [1]. Все способы исходят из полиномиального представления аппроксимирующей функции, которое для заданного набора точек единственно [2]. Примеры расчётов также показывают, что с точки зрения результатов интерполяции способы эквивалентны и различаются только приёмами определения интерполяционных коэффициентов. Поэтому для оценки абсолютной погрешности интерполирования можно использовать выражение для R_n, полученное в п. 4.

Поскольку в первом способе, основанном на вычислении определителей, невозможно проверить точность вычислений коэффициентов (во втором случае решается система линейных уравнений, в третьем — строится система ортогональных многочленов, и точность результатов легко проверяется), то использовать его имеет смысл лишь при небольших n. Второй способ является прямым (решается система уравнений), третий — итерационным (функции $\psi_{ijk}(\mathbf{x})$ строятся итеративно на основе уже построенных) и, следовательно, имеется возможность коррекции ошибок вычислений в процессе работы.

В [11] приведено решение гидромеханической задачи методом конечных объёмов с использованием третьего способа интерполяции гидромеханических переменных.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 09-01-00118).

Литература:

1. *Липанов А.М.* Метод численного решения уравнений гидромеханики в многосвязных областях (первое сообщение) // Математическое моделирование. – 2006. – Т. 18, № 12. – С. 3-18.
2. *Березин И.С., Жидков Н.П.* Методы вычислений. – М.: Физматлит, 1962. – Т. 1. – 464 с.
3. *Бахвалов Н.С. и др.* Численные методы / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. – М.: Наука, 1987. – 600 с.
4. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. – М.: Наука, 1978. – 512 с.
5. *Кудрявцев Л.Д.* Курс математического анализа (в двух томах): Учебник для студентов университетов и втузов. – М.: Высшая школа, 1981. – Т. 1. – 687 с; Т. 2. – 584 с.
6. *Самарский А.А*. Введение в численные методы.– М.: Наука, 1987. – 271 с.
7. *Демидович Б.П. и др*. Численные методы анализа / Б.П. Демидович, И.А. Марон, Э.З. Шувалова. – М.: Наука, 1967. – 368 с.
8. *Бердышев В.И., Петрак Л.В.* Аппроксимация функций, сжатие численной информации, приложения. – Екатеринбург: УрО РАН, 1999. – 297 с.
9. *Носач В.В.* Решение задач аппроксимации с помощью персональных компьютеров. – М.: МИКАП, 1994. – 382 с.
10. *Вержбицкий В.М.* Основы численных методов. – М.: Высшая школа, 2002. – 840 с.
11. *Липанов А.М., Семакин А.Н.* Применение метода конечных объёмов к задаче обтекания сферы // Материали за 4-а международна научна практична конференция «Динамика изследования – 2008» (София, Болгария, 16-31 июля 2008 г.). – София: «Бял ГРАД-БГ» ООД, 2008. – Т. 27. Математика. Съвременни технологии на информации. Здание и архитектура. – С. 31-35.

Поступила в редакцию 20.08.09

Сведения об авторах

Липанов Алексей Матвеевич, акад. РАН, дир., Институт прикладной механики УрО РАН (ИПМ УрО РАН), 426067, Россия, Удмуртская республика, Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34; E-mail: lam@udm.ru

Семакин Артём Николаевич, асп., ИПМ УрО РАН; E-mail: arte-semaki@yandex.ru