____ КОМПЬЮТЕРНАЯ ГРАФИКА _ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ

ОБОБЩЕННЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ И ЗАДАЧИ ВЕРИФИКАЦИИ

© 2021 г. А. К. Алексеев^{*a*,*}, А. Е. Бондарев^{*a*,**}, В. А. Галактионов^{*a*,***}, А. Е. Кувшинников^{*a*,****}

^a Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Миусская пл., 4, Москва, 125047, Россия

*E-mail: aleksey.k.alekseev@gmail.com

**E-mail: bond@keldysh.ru

***E-mail: vlgal@gin.keldysh.ru

***E-mail: kuvsh90@yandex.ru

Поступила в редакцию 25.12.2020 г.

После доработки 14.01.2021 г.

Принята к публикации 18.01.2021 г.

Данная работа рассматривает построение обобщенного вычислительного эксперимента для решения задач верификации. Проблема сравнительной оценки точности численных методов в настоящее время приобретает особую актуальность ввиду введения федеральных стандартов и распространению программных пакетов, включающих большое количество разнообразных солверов. Обобщенный вычислительный эксперимент позволяет получить численное решение для класса задач, определяемых диапазонами изменения определяющих параметров. Анализ результатов, представленных в виде многомерных массивов. где количество измерений определяется размерностью пространства определяющих параметров, требует применения инструментов научной визуализации и визуальной аналитики. Обсуждаются подходы к применению обобщенного вычислительного эксперимента при наличии эталонного решения и в его отсутствие. Приведен пример построения поверхностей ошибок при сравнении решателей программного пакета ОрепFOAM. В качестве основной используется классическая задача невязкой косой ударной волны. Рассмотрены вариации основных параметров задачи - числа Маха и угла атаки. Также рассматривается пример задачи обтекания конуса под углом атаки с изменяющимся числом Маха, углом конуса и углом атаки. Вводится понятие индекса ошибки как интегральная характеристика отклонений от точного решения для каждого решателя в рассматриваемом классе задач.

DOI: 10.31857/S013234742103002X

1. ВВЕДЕНИЕ

На протяжении всей истории развития вычислительной математики и математического моделирования проблемы верификации численных методов занимали особое место. При создании или модификации численного метода авторам необходимо было показать эффективность своих разработок и оценить их точность. Этим исследованиям посвящено огромное количество работ. В качестве примера можно указать на классические работы [1—19], рассматривающие различные аспекты оценки точности и верификации. Оценка точности численного метода была и по сей день является обязательной частью исследований в области математического моделирования физических процессов.

Как правило, сравнение численных результатов проводится с некоторым референтным (эталонным) решением, в роли которого используют

точное решение, если таковое имеется, или имеющиеся экспериментальные данные. Отдельной проблемой является оценка точности численных методов при отсутствии эталонного решения.

В практике физического эксперимента результаты, не имеющие полосы разброса ошибок, не считаются полными и, как правило, не публикуются. Напротив, в практике вычислительного эксперимента (особенно в задачах СFD) результаты, содержащие информацию о погрешности расчета, в настоящее время являются скорее исключением. Нельзя сказать, что методов оценки погрешности аппроксимации вообще нет, проблема заключается в другом. Довольно давно (1986 г.) в статье [1] было перечислено тринадцать способов оценки ошибки. Сейчас их точно существенно больше, но такое количество методов неявно намекает на отсутствие одного точного, надежного и экономичного метода.

Об актуальности проблем верификации численных методов и расчетов на их основе также свидетельствует наличие федеральных стандартов, как зарубежных [20, 21], так и недавно появившихся российских [22].

Следует отметить, что в настоящее время актуальность задач верификации неуклонно возрастает в связи с широким использованием открытых и коммерческих пакетов для решения различных задач математического моделирования. Как правило, такие пакеты предоставляют пользователю определенный набор численных методов, представленных в виде солверов, интегрированных в программный комплекс. В этом случае пользователь сталкивается с проблемой выбора солвера. И здесь обнаруживается ряд трудностей. Не все солверы проходят всестороннее тестирование перед внедрением в программный комплекс. Коммерческие пакеты не предоставляют полной открытой информации о реализованных численных методах и их свойствах. Различные группы разработчиков могут добавлять солверы в пакеты с открытым исходным кодом, но зачастую не могут обеспечить полное тестирование. Поэтому исследования в области верификации и сравнительной оценки точности численных метолов становятся все более необходимыми.

Исторически верификация в задачах вычислительной аэрогазодинамики состояла из двух основных этапов. На первом этапе предполагалось адекватное воспроизведение качественной картины течения, содержащей неоднородности, отрывные потоки, вихри и т.д. Второй этап предполагал обеспечение точности расчета количественных характеристик. Здесь необходимо было полагаться на некоторое эталонное решение — экспериментальное, точное или полученное в результате расчетов другими численными методами.

Подобная верификация обычно проводилась для одной отдельной задачи. По умолчанию предполагалось, что при небольшом изменении определяющих параметров задачи (скорость, вязкость, масштабы времени, теплофизические характеристики среды, геометрические параметры) рассматриваемый численный метод будет применим и обеспечит аналогичную точность.

На современном этапе исследователям необходимы более полные оценки точности численных методов. Например, при оценке точности не для отдельной задачи, а для класса задач. Под классом задач понимается базовая задача, рассматриваемая в диапазонах изменения набора ключевых параметров. Такими параметрами в вычислительной аэродинамике могут служить характеристические числа, определяющие скорость потока, вязкость, теплофизические свойства среды, геометрические параметры и т.д. Возможность получения решения для класса задач обеспечивается путем построения

обобщенного вычислительного эксперимента. Кроме того, обобщенный вычислительный эксперимент может быть очень полезен при оценке точности при отсутствии эталонного решения. В этом случае можно оценить точность, используя ансамбль решений, полученных различными численными методами. Вариация солвера рассматривается как параметр, а параметрическая задача решается с помощью обобщенного вычислительного эксперимента.

При построении обобщенного вычислительного эксперимента его неотъемлемой составляющей являются инструменты научной визуализации и визуальной аналитики. Без этих инструментов невозможно провести полноценный анализ результатов, представляющих собой многомерные объемы данных. В тех случаях, когда размерность пространства определяющих параметров не превышает 3, достаточно разработанных инструментов научной визуализации. Когда размерность пространства определяющих параметров больше 3, необходимо применять комплекс инструментов визуальной аналитики. Анализ результатов обобщенного вычислительного эксперимента порождает ряд специфических задач визуализации. Классификация подобных задач, методы и инструменты их решения подробно описаны в работе [31].

Необходимо заметить, что визуальное представление результатов обобщенного вычислительного эксперимента в ряде практических случаев приводит к созданию емких и выразительных образов, позволяющих полноценный анализ физического явления в классе задач. Это в полной мере относится и к задачам сравнительной оценки точности численных методов. Ниже будет приведен пример построения поверхностей ошибок для класса задач о косом скачке уплотнения, позволяющий эффективно оценить и сравнить точность численных методов, реализованных в 4-х солверах открытого программного пакета ОрепFOAM.

Концепция, основные методы и подходы к построению обобщенного вычислительного эксперимента, а также ряд программных средств для его реализации разработаны в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. Основные аспекты построения обобщенного вычислительного эксперимента и примеры его реализации подробно описаны в [28—35, 37—45].

2. ОБОБЩЕННЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Возникновение концепции обобщенного вычислительного эксперимента связано с развитием высокопроизводительных вычислительных кластеров и параллельных технологий. В задачах вы-

числительной аэродинамики параллельные технологии обычно предоставляют возможность быстрого расчета на детальных сетках. Однако параллельные технологии предоставляют нам еще одну важную возможность. Это возможность одновременно рассчитывать на разных узлах одну и ту же задачу с разными входными данными. Как правило, такой расчет выполняется в режиме многозадачности.

Это открывает возможность проведения обобщенного вычислительного эксперимента. Ключевые параметры рассматриваемой задачи разбиваются на определенные диапазоны с определенным шагом, образуя сеточное разбиение многомерного бокса в многомерном пространстве ключевых параметров. Основная задача решается с использованием параллельных технологий в каждой точке раздела сетки. Полученные результаты представляют собой многомерные объемы данных. Обработка, анализ и визуальное представление этих данных осуществляется с помощью методов визуальной аналитики и научной визуализации. Эта вычислительная технология является наиболее общим описанием обобщенного вычислительного эксперимента.

Очевидно, что такую концепцию можно применить к широкому кругу задач. В этот диапазон входят параметрические исследования, задачи оптимизации. Обобщенный вычислительный эксперимент является эффективным инструментом для решения обратных задач.

Большое количество различных приложений обобщенного вычислительного эксперимента подробно описано в [28—35, 37—45]. Концепция обобщенного вычислительного эксперимента применялась к широкому кругу как модельных, так и практических задач.

Эти задачи включают анализ взаимодействия вязкого сверхзвукового потока со струйной преградой, течения в следе за телом, задачи взаимодействия струй, задачу обтекания конуса под углом атаки, задачу косых ударных волн и многие другие. Подход к построению обобщенного вычислительного эксперимента был применен к задаче поиска оптимальной с точки зрения силовых нагрузок трехмерной формы узла лопастей в силовой установке [44].

Также этот подход был применен к задачам верификации численных методов. Подробный сравнительный анализ ряда солверов открытого программного пакета OpenFOAM [36] проведен в [32—35, 41, 42]. В качестве базовых задач использовались задачи, имеющие эталонное решение (точное решение или экспериментальные данные). К таким задачам относятся задача о сверхзвуковом невязком обтекании конуса под углом атаки и задача об образовании наклонной ударной волны. В обоих случаях рассматривался класс задач,

образованный вариациями основных параметров рассматриваемой задачи.

3. ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ НА АНСАМБЛЕ РЕШЕНИЙ

Отдельную сложную задачу представляет собой оценка точности численных методов при отсутствии эталонного решения.

Современные стандарты в области аэрогазодинамики [20-22] требуют верификацию программного обеспечения (ПО) и численных решений, что подразумевает оценку погрешности аппроксимации. Существует огромное количество методов, позволяющих тем или иным способом оценить погрешность аппроксимации [1–19, 23– 27]. Часть из них являются интрузивными [13–15, 19], то есть требуют модификации кода программы. Например, учитывают погрешности усечения (дифференциального приближения [14]) или перенос погрешности аппроксимации [15]. Другие методы являются неинтрузивными, но зачастую требуют расчета многосеточных асимптотик, что приводит к огромным требованиям по памяти и быстродействию [24, 25].

В соответствие с современными стандартами основными методиками верификации являются сравнение с эталонным по точности (или аналитическим) решением и анализ асимптотик решения, возникающих при последовательном измельчении расчетной сетки.

К сожалению, количество известных аналитических решений для задач аэрогазодинамики очень невелико, в связи с этим верификация конкретного решения возможна только в очень редких случаях и лишь частично, так как практические задачи содержат, как правило, много различных структур, которые между собой взаимодействуют в неравномерном поле течения. В связи с этим сравнение практических расчетов с имеющимися точными аналитическими решениями (такими, как скачки уплотнения, пограничные слои и т.д.) будет содержать большие погрешности, превышающие погрешность аппроксимации. Верификация ПО также не сводится к верификации элементарных решений (хотя и включает ее). Например, точный расчет уединенного скачка и пограничного слоя никак не гарантирует точного расчета взаимодействия скачков в тройной точке или взаимодействия скачка и пограничного слоя.

В отсутствие эталонного решения оценка погрешности аппроксимации конкретного решения представляет нетривиальную и интересную задачу, которую мы вкратце обсудим.

В качестве альтернативы использованию эталонного решения современными стандартами предполагается использовать сходимость решения на последовательности измельчающихся се-

ток. В части стандартов и большинстве практических приложений решение останавливают по "слипанию" (когда некоторые ценные функционалы не изменяются при измельчении сетки). Согласно [3] этот подход восходит к работам C. Runge. Фактически, при таком подходе решение на самой мелкой сетке воспринимается как точное, что дает оценку погрешности расчета. Экстраполяция Ричардсона [23-25] использует несколько последовательных решений и априорную информацию о порядке сходимости (предполагается, что он соответствует порядку аппроксимации). Для линейных задач и достаточно гладких решений (описываемых, например, эллиптическими уравнениями) этот подход вполне реализуем. К сожалению, для течений с разрывами порядок сходимости зависит от элемента течения (например, скачка уплотнения) и является локальными по пространству [11, 12]. Даже в конечно-элементных задачах для эллиптических уравнений сходимость на разрывах может отличаться от номинального порядка аппроксимации [11]. В такой ситуации рекомендуется использовать обобщенную экстраполяцию Ричардсона (generalized Richardson extrapolation) [24, 25], в которой определяются, как асимптотический диапазон сходимости, так и локальный порядок сходимости. Это подразумевает использование минимум четырех последовательных сеток (встречаются работы, где из-за медленного выхода на асимптотический режим использовалось семь последовательных сеток), что делает этот подход практически нереализуемым в связи с огромными требованиями к вычислительным ресурсам. Дополнительную трудность составляют неустойчивости, возникающие при оценке локального порядка сходимости.

Обобщенный вычислительный эксперимент предоставляет возможности для оценки погрешности аппроксимации за счет перехода от единственного решения к ансамблю численных решений, выполненных различными численными алгоритмами на одной сетке [37-39]. Не следует сводить данный подход к hp методу, используемому в конечно-элементном анализе, так как, например, порядок сходимости решения на скачке уплотнения практически одинаков для схем разного формального порядка аппроксимации. Анализ расстояний между численными решениями, принадлежащими анализируемому ансамблю, позволяет частично упорядочить решения по их точности (по крайней мере, разбить на подгруппы "точных" и "неточных" решений). Это позволяет определить норму погрешности аппроксимации и гиперсферу в пространстве сеточных функций, содержащую проекцию точного решения. Расширение способов апостериорной оценки погрешности потенциально способно дать и более существенную информацию о точном решении, в частности связанную с его существованием [26, 27].

В работах [37-39] приведено большое количество вычислительных экспериментов, подтверждающих возможности апостериорной оценки погрешности аппроксимации на ансамбле численных решений, полученных методами различной внутренней структуры. Нельзя исключить, что переход от последовательности решений, полученных на измельчающихся сетках единственным алгоритмом, к ансамблю решений, полученных на одной сетке разными алгоритмами, соответствует некоторому альтернативному пониманию численного решения. В рамках этого понимания вместо последовательности численных решений, сходящихся к точному, мы имеем дело со сферами, построенными вокруг некоторого приближенного решения и содержащими проекцию точного. В некоторой мере этот подход напоминает подход Synge [6]. Однако в целом данная тематика далеко выходит за рамки данной статьи и нуждается в существенной дополнительной проработке.

Потребность в наборе солверов, реализующих различные алгоритмы, является той платой, которая требуется за использование данного подхода. К счастью, в последнее время достаточно большое число алгоритмов находится в распоряжении вычислителей, например открытый программный комплекс OpenFOAM [36], что заметно облегчает указанное затруднение. В качестве дополнительного бонуса можно указать на естественные параллельные свойства подхода, основанного на ансамбле решений.

4. СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭТАЛОННОГО РЕШЕНИЯ

В этом разделе представлены два примера построения обобщенного вычислительного эксперимента для сравнительной оценки точности численных методов. В качестве примеров мы используем численные результаты, подробно описанные в работах авторов [32, 35, 41, 42]. В этих работах были рассмотрены два класса задач вычислительной газовой динамики.

Первый класс задач описывает обтекание конуса под углом атаки. Второй класс описывает падение невязкого сверхзвукового потока газа на плоскую пластину под углом атаки. Обе эти проблемы достаточно хорошо известны. Первая задача имеет табличное решение [51], используемое в качестве эталонного. Вторая проблема имеет точное решение.

Рассмотрим первый класс задач. Решается задача об обтекании конуса сверхзвуковым потоком газа под углом атаки. Переменными параметрами являются угол атаки $\alpha = 0^{\circ}$, 5° , 10° , число Маха M = 3, 5 и угол полураствора конуса $\beta = 10^{\circ}$, 15° , 20° . Схема потока представлена на рис. 1.

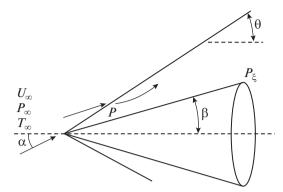


Рис. 1. Схема потока.

Условия входящего потока на входе обозначаются индексом " ∞ ", а на выходе — индексом ξ , так как решение является автомодельным и зависит от безразмерной переменной.

Для расчета используется система уравнений Эйлера, дополненная уравнением состояния идеального газа.

Из программного пакета OpenFOAM были выбраны три солвера: rhoCentralFoam (rCF), sonic-Foam (sF) и pisoCentralFoam (pCF). Солвер rhoCentralFoam основан центрально-противопотоковой схеме, которая является комбинацией центральноразностной и противопотоковой схем [46, 47]. Солвер sonicFoam основан на алгоритме PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operator) [48]. Здесь для расчета давления используются два разностных уравнения для поправки поля давления, полученных из дискретных аналогов уравнений моментов и неразрывности. Такой подход связан с тем, что скорректированные первой поправкой скорости, могут не удовлетворять уравнению неразрывности, поэтому вводится второй корректор, который позволяет вычислить скорости и давления, удовлетворяющие линеаризованным уравнениям количества движения и неразрывности. Солвер pisoCentralFoam представляет собой комбинацию центрально-противопотоковой схемы с алгоритмом PISO [49]. Этот солвер не входит в стандартный набор солверов программного пакета OpenFOAM. Он создан независимой командой разработчиков Института системного программирования им. В.П. Иванникова РАН. Все расчеты проводились с использованием Ореп-FOAM версии 2.3.0.

Мы решали задачу с помощью каждого из солверов для всего набора варьируемых параметров. Таким образом был получен набор численных решений. Точное решение было получено путем интерполяции табличного решения из [36]. Затем для каждого солвера была найдена погрешность решения в нормах L1 и L2. Поскольку различные солверы реализуют разные численные методы, ошибки заметно отличались друг от друга. На-

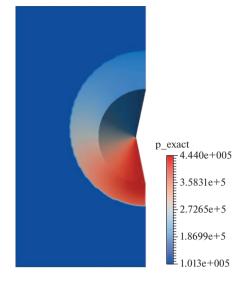


Рис. 2. Поле давления для стационарного течения.

чальные и граничные условия, а также настройки решателей задавались аналогично [38, 40].

На рис. 2 показано стационарное решение для поля давления, полученное интерполяцией табличного решения из [51], угол полураствора конуса $\beta = 20^{\circ}$, угол атаки $\alpha = 10^{\circ}$, число Maxa M = 3.

На рис. 3 показана поверхность ошибки (отклонения от точного решения) в норме L2 для этой задачи при вариации выбора солвера и угла полураствора для фиксированного числа Маха 3 и фиксированного угла атаки 5°. Видно, что отклонение от точного решения увеличивается с ростом угла полурастовора. Также видно, что солверы rhoCentralFoam и pisoCentralFoam примерно одинаковы по точности, тогда как точность солвера sonicFoam намного ниже.

На рис. 4 показана поверхность ошибки для этой же задачи с вариацией солвера и угла атаки при числе Маха 5 и угле полураствора конуса 15°.

Таким образом, анализируя рис. 3 и 4, можно увидеть, что для всех солверов ошибка увеличивается с увеличением угла атаки и угла полураствора конуса.

Итак, в результате у нас есть оценка точности для всех трех солверов, участвующих в этом исследовании. Это результат построенного обобщенного численного эксперимента для рассматриваемого класса задач.

Рассмотрим другой класс задач. В данном случае мы рассматриваем известную задачу о формировании наклонной ударной волны.

Постановка задачи описывается следующим образом. Сверхзвуковой поток газа падает на пластину под углом. Отражаясь от пластины, поток образует наклонную ударную волну. Эта задача имеет точное решение. В задаче варьировались в

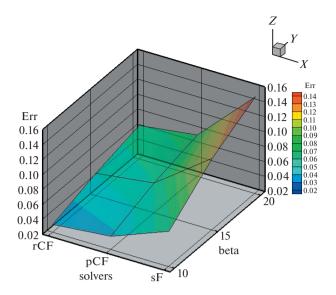


Рис. 3. Изображение поверхности отклонения от точного решения для числа Маха 3 и угла атаки 5° с вариацией солвера и угла полураствора конуса.

определенных диапазонах число Маха М и угол падения сверхзвукового потока β, аналогично [41, 42]. На рис. 5 показаны поверхности ошибок для этой задачи, построенные для 4 солверов: rhoCentralFoam (rCF), sonicFoam (sF), pisoCentralFoam (pCF), QGDFoam (QGDF). Здесь мы включаем в рассмотрение новый солвер QGDFoam (QGDF). Этот солвер основан на системе квазигидродинамических уравнений и также создан независимыми разработчиками [50].

Проведение аналогичных расчетов для нескольких численных методов, реализованных в солверах открытого программного пакета ОрепFOAM, позволяет построить несколько таких поверхностей на одном рисунке. Это открывает возможность для глубокого и четкого сравнительного анализа точности исследуемых численных методов. Построение обобщенного вычислительного эксперимента предполагает создание вычислительной техники от решения прямой задачи до визуального анализа результатов. Это пример построения яркого и выразительного образа для решения в классе задач. Подобный визуальный образ позволяет получить мгновенное и полноценное представление о точности сравниваемых численных методов не для одной, отдельно взятой задачи, а для целого класса задач, определяемого диапазонами вариации определяющих параметров, в данном случае — числа Маха и угла атаки.

Эта методика позволяет провести подробное визуальное сравнение отклонений от точного решения. Видно, что в нашем случае все поверхности ошибок меняются одинаково. Погрешность увеличивается с ростом основных параметров. Наилучшую точность в этом классе задач обеспе-

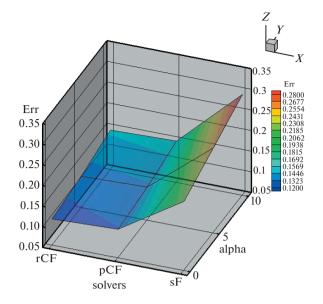


Рис. 4. Изображение поверхности отклонения от точного решения для числа Маха 5 и полуугла конуса 15° при вариации солвера и угла атаки.

чивают решатели rCF и pCF, для которых поверхности ошибок практически идентичны. Таким образом, построение обобщенного вычислительного эксперимента позволяет провести полноценную сравнительную оценку точности четырех солверов программного комплекса OpenFOAM в классе задач. Класс задач в данном конкретном случае определяется основной задачей (косая ударная волна) и диапазонами изменения ключевых параметров задачи — числа Маха и угла атаки.

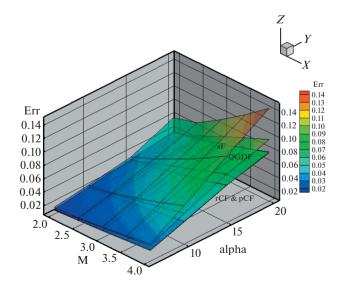


Рис. 5. Поверхности погрешности при вариации числа Маха и угла атаки для задачи о наклонной ударной волне [41].

Таблица 1. Значения индекса погрешности для задачи обтекания конуса под углом атаки

Solver	rCF	pCF	sF
Error Index	0.089811	0.095587	0.182798

Таблица 2. Значения индекса погрешности для задачи образования косого скачка уплотнения

Solver	rCF	pCF	QGDF	sF
Error Index	0.037734	0.038751	0.0453406	0.058216

Изображение поверхностей ошибок, представленное на рис. 5, дает достаточное представление о сравнительной точности солверов OpenFOAM в классе задач. Однако для более полной оценки мы вводим интегральную характеристику для каждой поверхности. Мы будем называть эту характеристику индексом погрешности (EI — Error Index). Индекс погрешности определяется следующим образом. Пусть i=1, M и j=1, N — точки сеточного разбиения по ключевым параметрам, а Aij — отклонение от точного решения в каждой точке сеточного разбиения области пространства параметров. Тогда индекс погрешности определяется как:

$$EI = \sum_{ij} A_{ij} / (M \times N)$$

Сначала мы вычисляем индекс погрешности для задачи обтекания конуса при угле атаки.

Далее рассчитываем значения индекса погрешности для задачи образования косого скачка уплотнения.

Таблицы 1 и 2 показывают, что значения индекса погрешности ЕІ полностью соответствуют взаимному расположению численных результатов, представленных на рис. 3—5. Следовательно, рассчитанный индекс погрешности может служить характеристикой точности численных методов в выбранный класс задач.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрено применение обобщенного вычислительного эксперимента к задачам сравнительной оценки точности численных методов. Обобщенный вычислительный эксперимент позволяет одновременно рассчитывать одну и ту же задачу с разными входными данными на основе параллельных технологий в режиме многозадачности. Полученные многомерные результаты исследуются с помощью инструментов визуального анализа. Обобщенный вычислительный эксперимент является вычислительной технологией, основанной на синтезе решения задач математического моделирования, параллельных вычислений и анализа

многомерных данных с помощью методов научной визуализации и визуальной аналитики.

Приведены два примера построения обобщенного вычислительного эксперимента для следующих классов задач — обтекание конуса под углом атаки и формирование косой ударной волны. Для обоих случаев класс задач формируется на основе базовой задачи и вариаций определяющих параметров задачи в определенных диапазонах. Для обоих классов задач проведена сравнительная оценка точности решателей программного пакета Open FOAM. Приведен пример построения поверхностей ошибок. Вводится понятие индекса погрешности численного метода для класса задач. Построение обобщенного вычислительного эксперимента позволило реализовать визуальное представление для класса задач, обеспечивающее эффективное проведение сравнительной оценки точности численных методов.

Построение обобщенного вычислительного эксперимента может служить эффективным инструментом для решения задач верификации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Skeel R. Thirteen ways to estimate global error // Numerische Mathematik. 1986. V. 48. P. 1–20.
- 2. Roy C.J., Oberkampf W.L. A comprehensive framework for verification, validation, and uncertainty quantification in scientific computing // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2011. V. 200. № 25–28. P. 2131–2144.
- 3. *Repin S.* A posteriori estimates for partial differential equations. Walter de Gruyter., 2008. V. 4.
- 4. Repin S. A unified approach to a posteriori error estimation based on duality error majorants // Mathematics and Computers in Simulation. 1999. V. 50. № 1–4. P. 305–321.
- 5. Repin S., Frolov M. A posteriori error estimates for approximate solutions of elliptic boundary value problems // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2002. V. 42. № 12. P. 1704–1716.
- 6. *Synge J.L.* The Hypercircle in Mathematical Physics. London: CUP., 1957.
- 7. *Oden J., Prudhomme S.* Goal-oriented error estimation and adaptivity for the finite element method // Computers and Mathematics with Appl. 2001. V. 41. P. 735–756.
- 8. *Prudhomme S., Oden J.* On goal-oriented error estimation for elliptic problems: Application to the control of pointwise errors // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1999. V. 176. P. 313—331.
- Ainsworth M., Oden J. A posteriori error estimation in finite element analysis. N.Y.: Wiley—Interscience, 2000.
- Carpenter M., Casper J. Accuracy of shock capturing in two spatial dimensions // AIAA Journal. 1999. V. 37.
 № 9. P. 1072–1079. https://doi.org/10.2514/2.835

- 11. *Babuska I., Osborn J.* Can a finite element method perform arbitrarily badly? // Mathematics of Computation of the American Mathematical Society. 2000. V. 69. № 230. P. 443–462.
- Godunov S.K., Manuzina Yu.D., Nazareva M.A. Experimental analysis of convergence of the numerical solution to a generalized solution in fluid dynamics // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2011. V. 51. P. 88–95.
- 13. *Linss T., Kopteva N.* A Posteriori Error Estimation for a Defect-Correction Method Applied to Convection-Diffusion Problems // Int. J. of Numerical Analysis and Modeling. 2009. V. 1. № 1. P. 1–16.
- 14. Shokin Yu.I. Method of differential approximation. Springer-Verlag, 1983.
- 15. *Banks J., Hittinger J., Woodward C.* Numerical error estimation for nonlinear hyperbolic PDEs via nonlinear error transport // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 2012. V. 213. P. 1–15. https://doi.org/10.1016/j.cma.2011.11.021
- 16. *Rauser F., Marotzke J., Korn P.* Ensemble-type numerical uncertainty quantification from single model integrations // Journal Comp. Physics. 2015. V. 292. P. 30–42. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.02.043
- Johnson C. On computability and error control in CFD // International J. for Numerical Methods in Fluids. 1995.
 V. 20. P. 777–788. https://doi.org/10.1002/fld.1650200806
- 18. *Babuska I., Rheinboldt W.* A posteriori error estimates for the finite element method // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 1978. V. 12. P. 1597–1615. https://doi.org/10.1002/nme.1620121010
- 19. *Roy Ch.*, *Raju A*. Estimation of discretization errors using the method of nearby problems // AIAA Journal. 2007. V. 45. № 6. P. 1232–1243. https://doi.org/10.2514/1.24282
- Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations, American Institute of Aeronautics and Astronautics, AIAA-G-077-1998, Reston, VA, 1998.
- Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer, ASME V&V 20-2009, 2009.
- Federal standard P 57700.12–2018. Numerical simulation of supersonic flows for an inviscid gas. Software verification. National standard of the Russian Federation for numerical modeling of physical processes, 2018.
- Richardson L.F. The Approximate Arithmetical Solution by Finite Differences of Physical Problems Involving Differential Equations with an Application to the Stresses in a Masonry Dam // Transactions of the Royal Society of London, Series A. 2010. V. 1908. P. 307–357.
- 24. *Roy Ch.J.* Grid Convergence Error Analysis for Mixed Order Numerical Schemes // AIAA Journal. 2003. V. 41. № 4. P. 595–604.
- 25. Phillips Tyrone S., Roy Christopher J. Richardson Extrapolation-based Discretization Uncertainty Estimation for Computational Fluid Dynamics // ASME

- Journal of Fluids Engineering. 2014. V. 136. № 12. 121401.
- 26. *Ortner C*. A Posteriori Existence in Numerical Computations // SIAM Journal on Numerical Analysis. 2009. V. 47. № 4. P. 2550–2577.
- 27. Chernyshenko S.I., Constantin P., Robinson J.C., Titi E.S. A posteriori regularity of the three-dimensional Navier-Stokes equations from numerical computations // J. of Mathematical Physics. 2007. V. 48. 065204.
- 28. *Bondarev A*. Analysis of space-time flow structures by optimization and visualization methods // Transactions on Computational Science XIX, Lecture Notes in Computer Science. 2013. V. 7870. P. 158–168.
- 29. Bondarev A., Galaktionov V. Parametric optimizing analysis of unsteady structures and visualization of multidimensional data // International Journal of Modeling, Simulation and Scientific Computing 04 (Supp. 01). 2013.
- 30. *Bondarev A*. On the construction of the generalized numerical experiment in fluid dynamics // Mathematica Montisnigri XLII. 2018. P. 52–64.
- 31. *Bondarev A*. On visualization problems in a generalized computational experiment // Scientific Visualization. 2019. V. 11. № 2. P. 156–162. https://doi.org/10.26583/sv.11.2.12
- 32. Bondarev A., Kuvshinnikov A. Analysis of the accuracy of OpenFOAM solvers for the problem of supersonic flow around a cone // Lecture Notes in Computer Science. 2018. V. 10862. P. 221–230. https://doi.org/10.1007/978-3-319-93713-7 18
- Bondarev A. On the estimation of the accuracy of numerical solutions in CFD problems // LNCS. 2019.
 V. 11540. P. 325–333. https://doi.org/10.1007/978-3-030-22750-0_26
- 34. *Bondarev A., Galaktionov V.* Generalized computational experiment and visual analysis of multidimensional data // Scientific Visualization. 2019. V. 11. № 4. P. 102–114. https://doi.org/10.26583/sv.11.4.09
- 35. Alekseev A., Bondarev A., Galaktionov V., Kuvshinnikov A. On the construction of a generalized computational experiment in verification problems // Matematica Montisnigri XLVIII. 2020. P. 19–31. https://doi.org/10.20948/mathmontis-2020-48-3
- OpenFOAM Foundation. http://www.openfoam.org. last accessed 2021/01/08.
- 37. *Alekseev A., Bondarev A.* On exact solution enclosure on ensemble of numerical simulations // Mathematica Montisnigri XXXVIII. 2017. P. 63–77.
- 38. Alekseev A., Bondarev A., Kuvshinnikov A. Verification on the ensemble of independent numerical solutions // LNCS. 2019. V. 11540. P. 315—324. https://doi.org/10.1007/978-3-030-22750-0_26
- 39. *Alekseev A., Bondarev A.* Estimation of the distance between true and numerical solutions // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2019. V. 59. № 6. P. 857–863. https://doi.org/10.1134/S0965542519060034
- 40. Alekseev A., Bondarev A., Kuvshinnikov A. On uncertainty quantification via the ensemble of independent numerical solutions // Journal of Computational Sci-

- ence. 2020. V. 42. 101114. https://doi.org/10.1016/j.jocs.2020.101114
- 41. *Alekseev A., Bondarev A., Kuvshinnikov A.* Comparative analysis of the accuracy of OpenFOAM solvers for the oblique shock wave problem // Mathematica Montisnigri XLV. 2019. P. 95–105. https://doi.org/10.20948/mathmontis-2019-45-8
- 42. Bondarev A., Kuvshinnikov A. Parametric study of the accuracy of OpenFOAM solvers for the oblique shock wave problem // IEEE Proceedings of the 2019 Ivannikov ISPRAS Open Conference 2019. P. 108–112. https://doi.org/10.1109/ISPRAS47671.2019.00023
- 43. *Bondarev A.E., Galaktionov V.A.* Multidimensional data analysis and visualization for time-dependent CFD problems // Programming and Computer Software. 2015. V. 41. № 5. P. 247–252. https://doi.org/10.1134/S0361768815050023
- 44. Andreev S.V., Bondarev A.E., Bondarenko A.V., Vizilter Yu.V., Galaktionov V.A., Gudkov A.V., Zheltov S.Yu., Zhukov V.T., Ilovaiskaya E.B., Knyaz V.A., Manukovskii K.V., Novikova N.D., Ososkov M.V., Silaev N.Zh., Feodoritova O.B. A Computational Technology for Constructing the Optimal Shape of a Power Plant Blade Assembly Taking into Account Structural Constraints // Programming and Computer Software. 2017. V. 43. № 6. P. 345—352. https://doi.org/10.1134/S0361768817060020
- 45. Bondarev A.E., Galaktionov V.A., Kuvshinnikov A.E. Parallel Solutions of Parametric Problems in Gas Dynamics Using DVM/DVMH Technology // Programming and Computer Software. 2020. V. 46. № 3. P. 176–182. https://doi.org/10.1134/S0361768820030032

- 46. *Kurganov A., Tadmor E.* New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection-diffusion equations // Journal of Computational Physics. 2000. V. 1. P. 241–282. https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6459
- 47. *Greenshields C., Wellerr H., Gasparini L., Reese J.* Implementation of semi-discrete, non-staggered central schemes in a colocated, polyhedral, finite volume framework, for high-speed viscous flows // International Journal for Numerical Methods in Fluids. 2010. V. 63. № 1. P. 1–21. https://doi.org/10.1002/fld.2069
- 48. *Issa R*. Solution of the implicit discretized fluid flow equations by operator splitting // Journal of Computational Physics. 1986. V. 66. № 1. P. 40–65. https://doi.org/10.1016/0021-9991(86)90099-9
- 49. *Kraposhin M., Bovtrikova A., Strijhak S.* Adaptation of Kurganov-Tadmor numerical scheme for applying in combination with the PISO method in numerical simulation of flows in a wide range of Mach numbers // Procedia Computer Science. 2015. V. 66. P. 43–52. https://doi.org/10.1016/j.procs.2015.11.007
- Kraposhin M., Smirnova E., Elizarova T., Istomina M. Development of a new OpenFOAM solver using regularized gas dynamic equations // Computers & Fluids. 2018. V. 166. P. 163–175. https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.02.010
- 51. Бабенко К.И., Воскресенский Г.П., Любимов А.Н., Русанов В.В. Пространственное обтекание гладких тел идеальным газом. М.: Havka. 1964, 505 с.