

Технология расчета течений со свободной границей с использованием динамических гексаэдральных сеток.

К. Д. Никитин[©]

В статье рассмотрен алгоритм моделирования течения несжимаемой жидкости в области с подвижной границей. Используются динамически изменяющиеся сгущающиеся гексаэдральные сетки со структурой восьмидерева. Свободная поверхность реализуется путем использования функции уровня и частиц.

1. Введение

Течение несжимаемой жидкости описывается уравнениями Навье-Стокса. Одним из возможных подходов к приближенному решению системы уравнений Навье-Стокса является проекционный метод [1, 2, 3]. Однако, этот метод, как и многие другие, предполагает наличие полностью фиксированной границы расчетной области. При решении задачи со свободной границей предлагается динамически изменять расчетную область. Для задания свободной границы применяются несколько подходов. Во-первых, можно описывать положение свободной поверхности жидкости параметрической функцией. Во-вторых, параметрическую функцию можно заменить полем расстояний, называемым функцией уровня [4]. Недостатком такого подхода является то, что функция уровня не в состоянии описать всю полноту движений, совершаемых поверхностью жидкости. В-третьих, положение границы области можно задавать с помощью

[©]Институт вычислительной математики РАН

частиц. В-четвертых, существует гибридный подход, объединяющий использование частиц и функции уровня. В этом случае частицы компенсируют недостатки функции уровня, а функция уровня помогает равномерно распределять частицы вдоль границы.

В данной работе описывается метод решения уравнений Навье-Стокса в области со свободной границей [5], объединяющий в себе несколько эффективных подходов. В основе алгоритма лежит проекционный метод. Расчетная область динамически изменяется в соответствии с изменением функции уровня, описывающей свободную границу. Функция уровня дополняется частицами, способными отслеживать мелкие элементы поверхности [6]. При решении задачи используются сгущающиеся сетки, построенные по принципу восьмидеревя [7]. Сгущение сеток происходит к свободной границе и поддерживается благодаря динамическому перестроению. Технология, объединяющая описанные выше подходы, позволяет производить качественное моделирование при невысоких вычислительных затратах.

Во втором разделе данной статьи представлен класс сеток, на которых предлагается проводить расчеты, и объясняются причины выбора такого класса. В третьем разделе рассматриваются базовые уравнения и численные методы, используемые для их приближенного решения. В разделах 4-7 делается акцент на отдельных частях алгоритма, описываются возможные трудности, возникающие в процессе моделирования, и способы их преодоления. Наконец, в последнем разделе приводятся результаты численных экспериментов.

2. Класс расчетных сеток

Для дискретизации уравнений Навье-Стокса предлагается использовать разнесенные гексаэдральные сетки построенные по принципу восьмидеревя.

Искомые функциями в задаче являются скорость, давление и скалярная функция уровня, определяющая положение свободной границы. Идея разнесенных сеток заключается в том, что рассматриваемые величины хранятся в разных частях сетки: компоненты вектора скорости — в центрах тех граней, которые ортогональны со-

ответствующему направлению, давление — в центре ячейки, функция уровня — в вершинах сетки. Кроме того, каждой ячейке соответствует специальная метка, определяющая заполнение ячейки жидкостью. Разнесенные сетки с такими метками часто называют MAC (Marker-And-Cell) сетками.

Восьмидерево предполагает иерархическую структуру сетки, в основании которой лежит куб, а более мелкие ячейки получаются делением крупных на восемь частей. Поиск элемента по номеру или по координате выполняется не более чем за $\log_8 N$ шагов, поиск соседнего — не более чем за $2 \log_8 N$ [7].

Выбор разнесенных гексаэдральных сеток построенных по принципу восьмидерева обусловлен несколькими факторами.

Во-первых, в задаче фигурируют векторное поле скоростей и скалярное поле давлений. При использовании разнесенных гексаэдральных сеток на каждую ячейку приходится одна степень свободы для давления и примерно одна степень свободы для каждой компоненты скорости. Такое распределение степеней свободы представляется наиболее экономичным.

Во-вторых, использование сгущающихся сеток более эффективно по сравнению с равномерными. В равномерной сетке зависимость числа элементов от минимального шага сетки h_{\min} — обратная кубическая, в сгущающейся к поверхности — обратная квадратичная [7]. Допустим, что сетка содержит 1 000 000 ячеек. В случае, если используются равномерные сетки, шаг $h_{\min} \approx \sqrt[3]{\frac{1}{1\,000\,000}} = 0.01$, в случае же сгущающихся сеток $h_{\min} \approx \sqrt{\frac{1}{1\,000\,000}} = 0.001$. Уменьшение шага сетки вблизи свободной границы важно, поскольку это влияет на уменьшение численной вязкости.

Покажем на примере следующей таблицы, как соотносятся числа ячеек в равномерной и сгущающейся сетке при равном минимальном шаге:

Из таблицы видно, что для сетки с миллионом ячеек, в равномерном случае $h_{\min} = 128^{-1}$, а в случае сгущающейся к поверхности сетки $h_{\min} = 512^{-1}$.

При моделировании жидкости со свободной границей наиболь-

h_{\min}	32^{-1}	64^{-1}	128^{-1}	256^{-1}	512^{-1}
Равномерная сетка	15 208	84 720	505 768	—	—
Сгущающаяся сетка	5 180	14 268	55 924	205 740	742 836

Таблица 1. Соотношение чисел ячеек в равномерной и сгущающейся сетках для задачи с падающей каплей (см. раздел 8).

ший интерес вызывает положение свободной поверхности, к которой и следует сгущать расчетную сетку. Однако, положение свободной границы изменяется на каждом шаге, а значит сетку необходимо уметь быстро перестраивать.

Среди динамически перестраиваемых сеток восьмидеревья имеют как ряд преимуществ, так и ряд недостатков. К преимуществам стоит отнести быстрый поиск элемента по номеру, по координате, поиск соседнего элемента в любом направлении, а также крайне легкое перестроение: за несколько операций можно сгустить или разгустить любую часть сетки. С другой стороны, сетки, построенные на основе восьмидерева не являются конформными, что нужно учитывать при дискретизации дифференциальных операторов. Наложение условия, что стороны соседних ячеек различаются не более, чем в 2 раза, облегчает построение дискретизации.

3. Базовые уравнения и численный метод

Рассматривается система уравнений Навье-Стокса, описывающая движение несжимаемой жидкости. Она состоит из уравнений момента и несжимаемости:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nu \Delta \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{f}, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2)$$

где ν - кинематическая вязкость, t — время, $\mathbf{u} = (u, v, w)$ — поле скоростей, p — давление, а \mathbf{f} — объемные силы, действующие на жидкость (например, сила тяжести).

Стоит отметить, что граница области состоит из двух частей: неподвижной границы (стенок сосуда) и перемещающейся по инерции свободной поверхности. На неподвижной границе реализуется условие прилипания, а для свободной поверхности может быть задано соотношение между давлением жидкости и силами поверхностного натяжения.

Для описания положения свободной границы вводятся функция уровня и частицы. Поверхность определяется множеством точек, где функция уровня $\phi = 0$, а для области, заполненной жидкостью верно $\phi < 0$. Продвижение свободной поверхности описывается уравнением переноса функции уровня:

$$\phi_t + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0. \quad (3)$$

В ряде приложений требуется инициализировать функцию уровня как расстояние до поверхности со знаком и поддерживать это свойство на протяжении расчета. Помимо определения положения поверхности, функция уровня также несет в себе информацию о ее геометрии: единичная нормаль к поверхности определяется по формуле $\mathbf{N} = \nabla \phi / |\nabla \phi|$, а локальная кривизна есть $k = \nabla \cdot \mathbf{N}$.

Для того, чтобы отслеживать мелкие элементы, которые не могут быть описаны функцией уровня, используются специальные невесомые частицы, переносимые полем скоростей. Частицы перемещаются по закону $dx_p/dt = u(x_p)$ и корректируют функцию уровня в случаях, когда это необходимо.

Для приближенного решения уравнений Навье-Стокса (1), (2) с подвижной границей (3) предложен ряд подходов разной степени сложности: от метода дробных шагов [5] до полностью неявных схем [8]. В данной работе будет использоваться метод дробных шагов, как наименее трудоемкий. Метод состоит из следующих шагов:

1. Обновление поля скоростей

- (a) Решение уравнения моментов (конвективный перенос, действие диффузии и объемных сил),
- (b) Проекция на подпространство бездивергентных скоростей;

2. Обновление положения свободной поверхности
 - (а) Продвижение функции уровня,
 - (б) Продвижение частиц,
 - (с) Взаимная корректировка частиц и функции уровня;
3. Продвижение области;
4. Перестроение сетки.

Отметим, что первый шаг представляет собой вариант проекционного метода для задачи Навье-Стокса с фиксированной границей [1, 2, 3]. В следующих разделах остановимся подробнее на некоторых шагах алгоритма.

4. Решение уравнения моментов

Уравнение моментов решается за два шага: сначала учитывается конвективный перенос ($\mathbf{u}_t = -(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$), а затем учитывается действие диффузии и объемных сил ($\mathbf{u}_t = \nu\Delta\mathbf{u} - \nabla p + \mathbf{f}$).

В случае диффузии и объемных сил применяется стандартная явная схема, а в случае конвективного переноса используется полулагранжев метод.

Суть полулагранжева метода заключается в следующем: для того, чтобы вычислить значение некоторой функции (скорости или функции уровня) в некоторой точке, необходимо отступить по траектории этой точки на шаг назад, тем самым найдя точку, которая переносится в рассматриваемую, и взять значение скорости в ней (рис. 1).

Полулагранжев метод выгодно отличается от явной схемы тем, что вносит меньшую численную диффузию. Этот метод позволяет использовать более крупные шаги по времени без потери устойчивости. Однако ограничение на шаг по времени все же возникает из-за других составляющих алгоритма, использующих явные схемы.

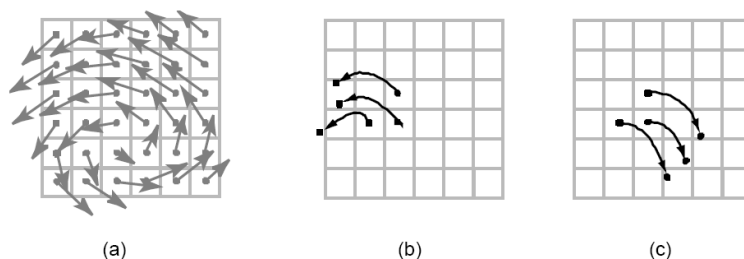


Рис. 1. Поле скоростей (а). Полулагранжев метод: вместо продвижения вперед по траектории движения в поле скоростей (b), отступаем на шаг назад (с).

5. Проекция на пространство бездивергентных скоростей

Поле скоростей, полученное при решении уравнения момента, не является бездивергентным, т.е. не удовлетворяет условию несжимаемости. Для того, чтобы спроектировать поле скоростей на бездивергентное подпространство, вносится специальная поправка к давлению (δp). Подставляя поправку к давлению в уравнение (2) и учитывая ее вклад в поле скоростей,

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \mathbf{u}^* - \Delta t \nabla(\delta p), \\ p &= p^* + \delta p, \end{aligned}$$

приходим к следующей системе уравнений:

$$-\nabla \cdot (\nabla \delta p) = -\frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \mathbf{u}^*). \quad (4)$$

Краевые условия не накладываются, поскольку задача рассматривается на сеточном уровне и оператор задачи (4) есть произведение сеточных операторов дивергенции и градиента. В случае равномерной сетки можно использовать стандартные разностные аппроксимации операторов дивергенции и градиента, в случае же сгущающихся сеток рекомендуется использовать другие, более подходящие схемы.

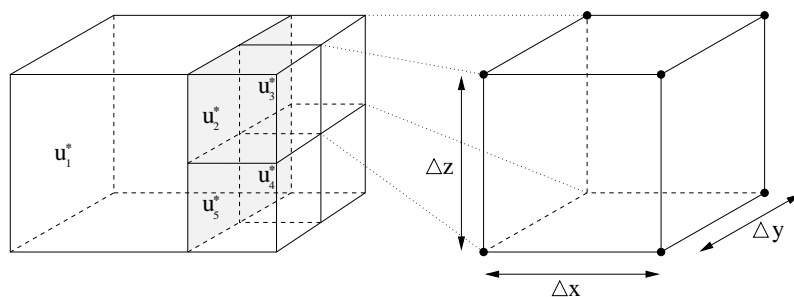


Рис. 2. Грубая ячейка, граничащая с четырьмя мелкими ячейками по одной грани.

Для примера рассмотрим оператор дивергенции. Пусть имеет место следующая локальная структура сетки (рис. 2).

Запишем теорему Грина в векторной форме для большой ячейки:

$$V_{\text{cell}} \nabla \cdot \mathbf{u}^* = \sum_i (\mathbf{u}_i^* \cdot \mathbf{n}) A_i,$$

где \mathbf{n} — вектор внешней единичной нормали к границе большой ячейки, а A_i — площадь соответствующей грани ячейки.

Для x -компоненты дивергенции имеет место представление:

$$\Delta x \Delta y \Delta z \delta u / \delta x = \mathbf{u}_2^* A_2 + \mathbf{u}_3^* A_3 + \mathbf{u}_4^* A_4 + \mathbf{u}_5^* A_5 - \mathbf{u}_1^* A_1.$$

Следовательно,

$$\delta \mathbf{u}^* / \delta x = ((\mathbf{u}_2^* + \mathbf{u}_3^* + \mathbf{u}_4^* + \mathbf{u}_5^*) / 4 - \mathbf{u}_1^*) / \Delta x.$$

Выражение для y - и z -компонент получается аналогичным способом.

Уравнение (4) представляет из себя сеточную дискретизацию уравнения Пуассона. Рассмотрим оператор $L = \nabla \cdot (\nabla)$. Число обусловленности матрицы оператора L имеет квадратичную зависимость от минимального шага сетки, который в свою очередь может достигать $h = \frac{1}{1000}$, т.е. число обусловленности может быть очень

Шаг сетки	64^{-1}	128^{-1}	256^{-1}
Ячеек	14,268	55,924	205,740
Итераций	6	7	8
Время (сек.)	0.12	0.76	2.98

Таблица 2. Среднее число итераций и время работы метода би-сопряженных градиентов для задачи с падающей каплей. Параметры предобуславливателя $\tau_1 = 0.01$, $\tau_2 = 0.001$. Критерий остановки — уменьшение невязки в 10^8 раз.

большим. В зависимости от способа построения сеточного оператора градиента, матрица оператора L может получаться симметричной или несимметричной. Для решения уравнения (4) используются итерационные методы с предобуславливателем, основанным на неполной факторизации второго порядка точности [9]: в симметричном случае — метод сопряженных градиентов, в несимметричном — метод би-сопряженных градиентов [10].

В качестве иллюстрации поведения метода в таблице 2 представлены среднее число итераций и время работы метода би-сопряженных градиентов для задачи с падающей каплей (см. раздел 8).

Если минимальный шаг сетки h_{\min} уменьшится в 2 раза, то число обусловленности матрицы оператора L вырастет в 4 раза. Из таблицы видно, что число итераций при этом растет незначительно, а время решения системы примерно пропорционально числу элементов. Эти результаты показывают эффективность использования данного метода.

6. Продвижение функции уровня

По аналогии с решением уравнения конвекции, для уравнения (3), которое продвигает функцию уровня, тоже используется полулагранжев метод.

Как было отмечено, метод функции уровня не всегда эффективен при отображении мелких деталей (капли, брызги, пики волн).

Один из предлагаемых способов повышения детализации поверхности заключается в использовании частиц.

Частицы наносятся вдоль свободной поверхности и разделяются на два типа: положительные и отрицательные. Положительные частицы изначально располагаются в области, где $\phi > 0$, т.е. в слое воздушных ячеек. Отрицательные попадают в область $\phi < 0$, т.е. располагаются в жидкости. Для переноса частиц в поле скоростей используются трилинейная интерполяция для скоростей и метод Рунге-Кутты 2-го порядка:

$$\begin{aligned}k_1 &= hf(x_n, y_n), \\k_2 &= hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1), \\y_{n+1} &= y_n + k_2 + O(h^2).\end{aligned}$$

Для продвижения частиц в приграничных ячейках, не принадлежащих расчетной области, поле скоростей экстраполируется с поверхности.

При возникновении на поверхности жидкости мелких деталей, которые не могут быть отслежены функцией уровня, частицы позволяют восстановить действительное положение свободной границы. Для этого каждой частице приписываются сферическая функция уровня ϕ_p и динамически изменяющийся параметр — радиус r_p :

$$\begin{aligned}\phi_p(\mathbf{x}) &= s_p(r_p - |\mathbf{x} - \mathbf{x}_p|), \\r_p &= \begin{cases} r_{\max}, & \text{если } s_p\phi(\mathbf{x}_p) > r_{\max}, \\ s_p\phi(\mathbf{x}_p), & \text{если } r_{\min} \leq s_p\phi(\mathbf{x}_p) \leq r_{\max}, \\ r_{\min}, & \text{если } s_p\phi(\mathbf{x}_p) < r_{\min}, \end{cases}\end{aligned}$$

где s_p — знак частицы (+1, если частица первоначально располагалась в воздухе, и -1, если частица появилась в жидкости).

Коррекция функции уровня ϕ осуществляется для всех положительных частиц, оказавшихся в области $\phi < 0$ дальше чем на свой радиус и для всех отрицательных частиц, попавших в область $\phi > 0$:

$$\phi^+ = \max(\phi_p, \phi^+),$$

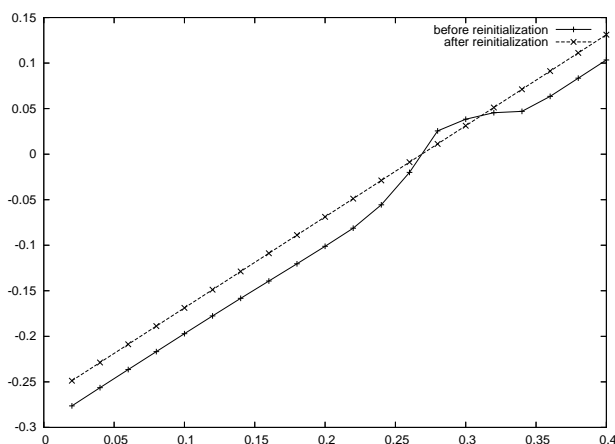


Рис. 3. Функция уровня до и после реинициализации.

$$\phi^- = \min(\phi_p, \phi^-),$$

$$\phi = \begin{cases} \phi^+, & \text{если } |\phi^+| \leq |\phi^-|, \\ \phi^-, & \text{если } |\phi^+| \geq |\phi^-|. \end{cases}$$

Поскольку в данной задаче в качестве функции уровня используется расстояние до поверхности со знаком, это свойство необходимо сохранять на протяжении всего расчета. К сожалению, после операций продвижения и коррекции функция уровня не всегда определяет расстояние, т.е. $|\nabla\phi| \neq 1$. На рис. 3 можно видеть, как отклоняется функция уровня в одном из тестовых примеров после 150 шагов.

Для поддержания свойства $|\nabla\phi| = 1$ после шагов продвижения и коррекции функции уровня проводится шаг реинициализации функции ϕ_0 , на котором решается следующее уравнение:

$$\phi_\tau + \text{sgn}(\phi_0)(|\nabla\phi| - 1) = 0,$$

где sgn — сглаженная функция знака: $\text{sgn}(\phi_0) = \frac{\phi_0}{\sqrt{\phi_0^2 + (\Delta x)^2}}$.

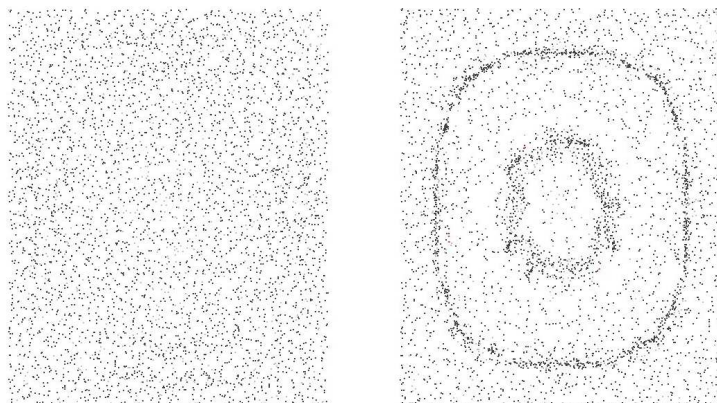


Рис. 4. Положение частиц на первом шаге алгоритма и через 150 шагов без перераспределения.

Изначально частицы наносятся в приграничные ячейки равномерно по всей свободной поверхности, но с течением времени равномерность их распределения может нарушаться. На рис. 4 показано, что происходит с равномерно распыленным вдоль поверхности множеством частиц через некоторое время работы алгоритма. Одни частицы уходят из поверхностных ячеек в глубину, другие перераспределяются, сосредотачиваясь на некоторых участках поверхности. Такое множество частиц становится непригодным для точного отображения мелких деталей поверхности. В связи с этим следует периодически восстанавливать равномерное распределение частиц на поверхности.

7. Продвижение области и перестроение сетки

Несмотря на то, что свободная граница определяется поверхностью $\phi = 0$, граница расчетной области проходит по граням ячеек, через которые эта поверхность проходит. Поскольку функция уровня постоянно меняется, то меняется и расчетная область, т.е.

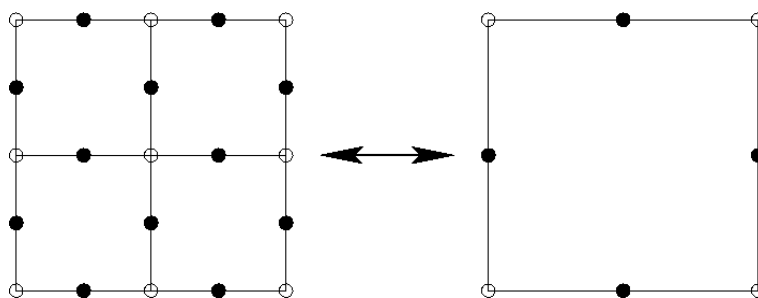


Рис. 5. Операции разгрубления и сгущения.

на каждом шаге необходимо определять, какие ячейки принадлежат области (заполнены жидкостью), а какие нет. Для этого используются частицы и функция уровня: после продвижения частиц для каждой поверхностной ячейки проверяется значение функции уровня и факт наличия в ней частиц. Если ячейка была заполнена жидкостью, но значение функции уровня во всех ее вершинах стало положительным, и в то же время в ней не осталось отрицательных частиц, такая ячейка помечается как пустая. Если же в воздушную ячейку попали отрицательные частицы, а значение функции уровня хотя бы в одной вершине неположительно, такая ячейка считается заполненной жидкостью.

Поскольку расчетная сетка сгущается к поверхности, то на каждом шаге по времени сетки необходимо перестраивать, сгущая в одних местах, разгрубая в других. При перестроении сетки каждый раз происходит переинтерполяция с грубых ячеек на мелкие и наоборот. Осуществляется это посредством операций разгрубления и сгущения (рис. 5).

Разгрубление переводит мелкие ячейки в крупные. Значения функции уровня, попавшие в узлы большой ячейки, сохраняются, остальные отбрасываются. Для скоростей берется среднее по четырем граням, выходящим на соответствующую грань большой ячейки, а для давлений — среднее по восьми центрам мелких ячеек.

Сгущение делит грубую ячейку на восемь мелких. Значения в

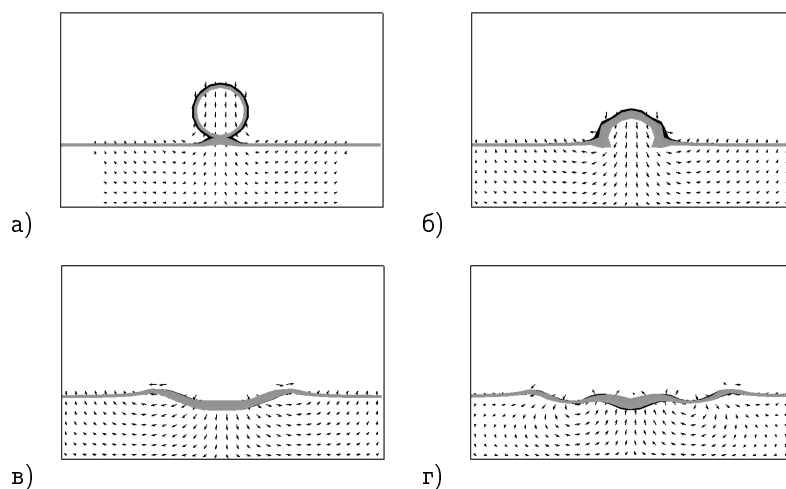


Рис. 6. Сечение изообъема функции уровня $-0.01 \leq \phi(\mathbf{x}) \leq 0$ и поле скоростей в момент времени а) $t = 5$, б) $t = 100$, в) $t = 260$ и г) $t = 425$.

новых узлах, образованных на серединах ребер, получаются вычислением средних арифметических для значений на концах ребра, для центров граней — средних арифметических по четырем вершинам грани. Для скоростей и давления сначала вычисляются значения в узлах, для чего используются данные с соседних ячеек, после чего узловые скорости интерполируются в центры граней мелких ячеек, а давления — в центры самих ячеек.

Отметим, что для предложенных операций переинтерполяции выполняются необходимые законы сохранения: сохранение среднего давления в ячейке и средней скорости на грани.

8. Численный эксперимент

В качестве примера работы алгоритма рассматривается задача моделирования падения капли на поверхность жидкости. В этом

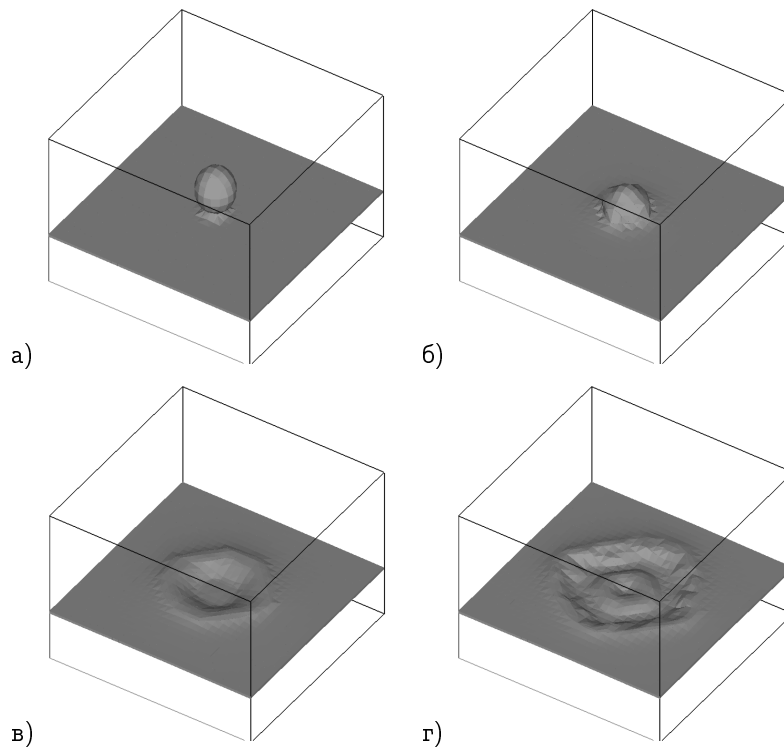


Рис. 7. Изообъем функции уровня $-0.01 \leq \phi(\mathbf{x}) \leq 0$ в момент времени а) $t = 5$, б) $t = 100$, в) $t = 260$ и г) $t = 425$.

случае единственная сила, действующая на жидкость — сила тяжести: в уравнении (1) $\mathbf{f} = (0, 0, -1)$. Коэффициент вязкости $\nu = 0.0001$. Минимальный шаг сетки $h_{\min} = 32^{-1}$, шаг времени $\Delta t = 0.005$.

На рис. 6 представлено сечение объема жидкости в моменты времени $t = 5$, $t = 100$, $t = 260$ и $t = 425$. Стрелками показано поле скоростей.

На рис. 7 показан изообъем функции уровня $-0.01 \leq \phi(\mathbf{x}) \leq 0$,

показывающий положение свободной поверхности жидкости.

Список литературы

- [1] Chorin A. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. // *Math. Comp.* 1968, V.22, p.745-762.
- [2] Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. — Новосибирск: Наука, 1967.
- [3] Temam R. Sur l'approximation des équations de Navier-Stokes. // *C.R.Acad.Sci. Paris, Série A*, 1966, V.262, 219-221.
- [4] Kass M., Miller, G., Rapid, Stable Fluid Dynamics for References Computer Graphics. // *ACM SIGGRAPH 90*, 1990, 49-57.
- [5] Osher S., Fedkiw R. Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces. — Springer-Verlag, 2002.
- [6] Enright D., Fwdkiw R., Ferziger J., Mitchell I. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. // *J. Comp. Phys.*, 2002, V.183, p.83-116.
- [7] Samet H. The Design and Analysis of Spatial Data Structures. — New York, Addison-Wesley, 1989.
- [8] Grob S., Reichelt V., Reusken A. A Finite Element Based Level Set Method for Two-Phase Incompressible Flows. // *Computing and Visualization in Science*, 2006.
- [9] Kaporin I. High quality preconditioning of a general symmetric positive definite matrix based on its $U^T U + U^T R + R^T U$ -decomposition. // *Numer.Linear Algebra Appl.*, 1998, V.5, p.483-509.
- [10] Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems, Second Edition. — Philadelphia, PA: SIAM, 2003.