

УДК 519.6

МЕТОД ДВИЖУЩИХСЯ ЧАСТИЦ ДЛЯ ЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ КОНВЕКТИВНОГО ПЕРЕНОСА¹

А. Смолянский², О. Шипилова³, Х. Хаарио⁴, Ж. Короткая⁵

PARTICLE TRANSPORT METHOD FOR LINEAR PROBLEM OF CONVECTIVE TRANSPORT

Smolyansky A., Shipilova O., Haario H., Korotkaya Zh.

The paper is devoted to a novel explicit technique, the Particle Transport Method (PTM), used to solve linear convection problems. While being a Lagrangian (characteristic based) method, PTM has the advantage of Eulerian methods to represent the solution on a fixed mesh. The proposed approach belongs to the class of monotone high-resolution numerical schemes, possesses the property of unconditional stability and can be equally applied with success on structured and unstructured meshes. It is also demonstrated that the method has the linear computational complexity.

The performance of the presented algorithm is tested using three classical problems. The first two problems are the wave-packet and step-function transport, the third problem is the rigid-body rotation of a slotted cylinder.

Введение

Конвективный перенос является одной из наиболее значимых проблем механики жидкости, теории массо- и теплопереноса. Математически данный процесс описывается гиперболическим уравнением, численное решение которого представляет собой значительную трудность с вычислительной точки зрения за счет возможных разрывов и резких скачков градиента функции точного решения. Хорошо известно, что необходимы специальные средства для того чтобы получить неосциллирующее достаточно точное численное решение. В течении последних тридцати лет были установлены и апробированы принципы, лежащие в основе разработки как эйлеровых, так и лагранжевых численных схем [1]. Тем не менее, создание метода, который бы одновременно удовлетворял всем необходимым требованиям (монотонность, высокая разрешаю-

щая способность/адаптивность, высокая точность, безусловная устойчивость, малые вычислительные затраты) по-прежнему остается открытым вопросом.

Условия устойчивости существующих стандартных методов для гиперболических задач обычно диктуются ограничениями на шаг по времени. В противоположность эйлеровым схемам, лагранжевы методы часто требуют менее строгих условий на временной шаг [1, 2]. С другой стороны, последние могут терять свойство консервативности при проекции решения на неструктурную сетку. В последнее время значительные усилия были предприняты для разработки консервативных полу- или свободно-лагранжевых методов [3, 4]. Такие схемы обычно основаны на концепциях конечных объемов или конечных элементов и состоят из двух главных шагов. Первый шаг представляет собой транспор-

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Национального Ведомства Технических и Прикладных Наук Финляндии (Tekes, National Technology Agency of Finland).

²Смолянский Антон, PhD, старший ассистент Математического института Цюрихского университета (Швейцария).

³Шипилова Ольга, аспирант кафедры прикладной математики Ростовского государственного университета.

⁴Хаарио Хейки, FT, профессор Технологического университета Лаппеенранты (Финляндия).

⁵Короткая Жанна, аспирант кафедры прикладной математики Ростовского государственного университета.

тировку решения подвижной сеткой, которая модифицируется в окрестности крутого фронта. Второй шаг заключается в переносе данных с измененной подвижной сетки на стационарную. Общим подходом для консервативного сдвига между двумя произвольными сетками является L_2 -проекция, но данный способ может потребовать больших вычислительных затрат.

В данной статье предлагается явный устойчивый полу-лагранжевый метод, метод движущихся частиц (МДЧ), для линейной задачи конвекции. Схема основана на классическом методе характеристик [1], который равносителен точному переносу решения на каждом шаге по времени. Вместо подвижной сетки используется множество частиц, которое может проектироваться на любую фиксированную сетку путем специальной монотонной техники. Перенос данных с множества частиц на стационарную сетку может выполняться либо на каждом временном шаге, либо через некоторое заданное число шагов. Важно заметить, что связность между частицами не принимается во внимание, что значительно упрощает численную схему.

1. Постановка задачи и определения

Рассмотрим линейную задачу конвекции

$$u_t + (\mathbf{v}\nabla)u = 0 \text{ на } \Omega \times (0, T), \quad (1.1)$$

где $u = u(\mathbf{x}, t)$, пространственная переменная $\mathbf{x}$ принадлежит области $\Omega \subset \mathbb{R}^N$. Предполагается, что поле скорости $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ задано на $\Omega \times (0, T)$.

Начальные и граничные условия задачи

$$u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}) \text{ в } \Omega, \quad (1.2)$$

$$u(\mathbf{x}, t) = u_{in}(\mathbf{x}, t) \text{ на } \Sigma_{in} \times (0, T), \quad (1.3)$$

где Σ_{in} — входное сечение границы рассматриваемой области $\Sigma = \partial\Omega$.

Решение начально-краевой задачи (1.1)–(1.3) сохраняет значение вдоль характеристических линий (траекторий), которые определяются обыкновенным дифференциальным уравнением

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t). \quad (1.4)$$

Уравнение (1.4) составляет одну из главных частей вычислительного алгоритма.

В качестве отправной точки алгоритма используется стационарная сетка в области Ω ,

которая далее именуется *сетка*. Сетка не используется для решения задачи, она необходима только для визуализации решения, что особенно важно при комбинировании предлагаемой схемы с эйлеровыми методами, например, в рамках метода расщепления оператора [5]. Узлы сетки определяют начальное распределение *частиц*; частицы не обязательно должны располагаться во всех узлах, а, например, в каждом n -ом узле, где число n может быть достаточно большим. В действительности, изначально необходим только небольшой объем частиц, поскольку процедура адаптации, обсуждаемая ниже, автоматически добавляет частицы в окрестности большого градиента начальной функции $u_0(\mathbf{x})$. Поскольку нас интересуют только узлы сетки, топология последней может быть произвольной. Введем следующие обозначения: пусть $\mathbf{X} := \mathbf{X}(\mathbf{X}_0, t)$ определяет множество координат частиц в момент времени t , где $\mathbf{X}_0$ — начальное распределение частиц.

2. Метод движущихся частиц

Коротко опишем главные шаги предлагаемого метода. Схема состоит из трех ключевых компонентов: (i) адаптивного начального распределения частиц, (ii) движения частиц и (iii) проекции решения с множества частиц на сетку.

2.1. Адаптивное распределение частиц

Множество узлов сетки является основой для построения множества частиц. Для того чтобы сбалансировать между собой требования хорошего качества аппроксимации и малых вычислительных затрат, необходима процедура адаптации. Ее главная задача состоит в том, чтобы сделать множество частиц более плотным в окрестности большого градиента начальной функции $u_0(\mathbf{x})$. Следующий простой алгоритм, последовательно применяемый к каждому элементу сетки, позволяет сгенерировать целесообразное распределение частиц во всей области. Описание алгоритма приводится на примере двумерной области, где элемент сетки есть треугольник.

Алгоритм для начальной адаптации.

Пусть G_i — значение градиента функции решения на i -ом элементе сетки и G_{mean} и G_{max} — соответственно, среднее и максимальное значение градиента на всей сетке. Добавим N_{add} новых точек в систему частиц на i -

ом элементе по правилу

$$N_{add} = \begin{cases} 0, & \text{если } G_i \leq G_{mean}, \\ N_{max}, & \text{если } G_i \equiv G_{max}, \\ \varphi(G_i), & \text{иначе.} \end{cases}$$

Здесь N_{max} — число между, например, 5 и 10; $\varphi(G_i)$ — непрерывная функция, монотонно возрастающая в интервале $[G_{mean}, G_{max}]$. В численных тестах используется линейная функция φ .

Таким образом, после шага инициализации система частиц включает (некоторые) узлы сетки и множество точек, полученных в ходе адаптивной процедуры. Следует заметить, что адаптация делает МДЧ схемой высокой разрешающей способности, что подтверждается численными результатами.

2.2. Движение частиц

На шаге инициализации все частицы получают значение функции $u_0(\mathbf{x})$. Частицы должны сохранять эти значения при движении вдоль характеристик. Для того чтобы найти новое распределение частиц в Ω , необходимо решить (1.4) на временном интервале $[t_{n-1}, t_n]$, с начальным условием в момент времени t_{n-1}

$$\mathbf{X}(\mathbf{X}_0, t_{n-1}) = \mathbf{X}^{(n-1)}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.1)$$

где $\mathbf{X}^{(n-1)}$ — координатный вектор частиц, вычисленный на предыдущем шаге по времени ($\mathbf{X}^{(0)} \equiv \mathbf{X}_0$).

Задача Коши (1.4), (2.1) может быть решена, например, с помощью метода Рунге-Кутты. Порядок схемы, как правило, определяется требованиями к точности решения. В целом, движение каждой частицы может проследиваться с его собственной точностью, поскольку частицы совершенно независимы друг от друга. Например, расчет перемещений в районах высокого градиента может требовать более высокой точности, чем в остальных частях области; последнее свойство МДЧ дает возможность для адаптации по времени.

2.3. Проекция на сетку

В рамках алгоритма МДЧ проекция базируется на линейной интерполяции и выполняется последовательно для каждого узла сетки p . Для двумерной области данная процедура реализуется путем нахождения треугольника,

содержащего p и состоящего из трех ближайших к узлу частиц («минимальный треугольник» для узла p); затем значение в p линейно интерполируется на найденном треугольнике. Следует заметить, что в одномерном и трехмерном случаях для интерполяции значения в узле p необходим соответственно «минимальный отрезок» и «минимальный тетраэдр». Для того чтобы алгоритм был эффективным, необходимо оптимизировать процедуру поиска минимального треугольника. Вследствие этого требования, для организации множества частиц используется динамический список, упорядоченный по возрастанию одной из пространственных координат частиц; данный порядок сохраняется в течение всего процесса вычислений. Таким образом, для любого узла сетки p , все частицы, лежащие в его ε -окружении ($\varepsilon \sim mh$, где h — шаг сетки и m — число между 1 и 3), могут быть найдены довольно быстро; поиск частиц, образующих минимальный треугольник, ограничивается только частицами из ε -окрестности.

Данный способ хранения частиц позволяет добиться линейной зависимости времени выполнения МДЧ относительно числа частиц, что демонстрируется для задачи вращения цилиндра с целью.

Вследствие линейной интерполяции получаем 2-й порядок точности по пространству для гладкого решения в максимальной норме. Более того, поскольку узел сетки p расположен всегда внутри найденного минимального треугольника, аппроксимированное значение функции в p представляет собой выпуклую комбинацию точных значений в вершинах треугольника. Это предотвращает возрастание локальных максимумов и убывание локальных минимумов и означает выполнение критерия ограничения локальных экстремумов (LED, [6]) для монотонных схем высокой разрешающей способности.

3. Численные результаты

3.1. Эксперимент 1

Рассмотрим задачу конвективного переноса волнового пакета на $\Omega = [0, 1]$ при начальном условии

$$u_0(x) = \exp(-200(x - 0.23)^2) \sin(150x) \\ \text{в } \Omega \text{ при } t = 0.$$

Моделируем движение на временном интервале $[0; 5]$ с шагом по времени $\Delta t = 0,01$

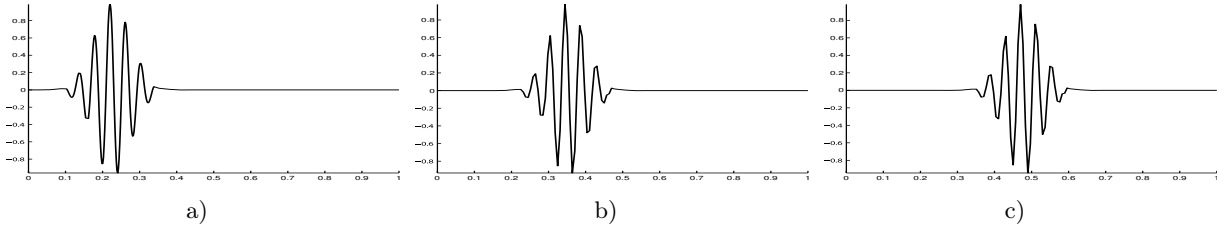


Рис. 1. Перенос волнового пакета, $\Delta t = 0,01$: *a* – начальный волновой пакет, 152 частицы; *b* – решение после 25 шагов; *c* – решение после 50 шагов

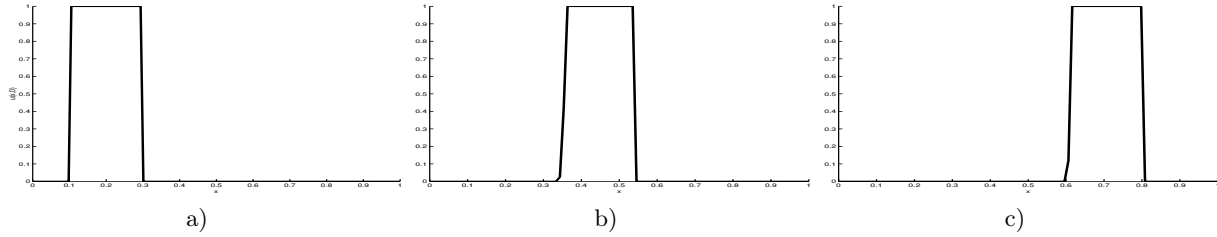


Рис. 2. Перенос ступенчатой функции: *a* – начальная функция; *b* – решение после 50 шагов; *c* – решение после 100 шагов

и скоростью $v = 0,5$. Нулевое краевое условие на входе устанавливается на левом конце области ($x = 0$).

Начальная волна и решение после 25 и 50 шагов по времени изображены на рис. 1 (а–с). Из неоднородной сетки с 35 узлами генерируется адаптированное множество из 152 частиц. В основе проекции на 200-узловую сетку здесь лежит линейная интерполяция, использующая для каждого узла сетки две ближайшие частицы.

В данном случае шаг движения частиц (решение задачи Коши для ОДУ) при условии постоянной скорости переноса является очевидным. Хорошие результаты МДЧ объясняются адаптивным добавлением частиц в области высокого градиента, что позволяет сохранить точность на шаге линейной интерполяции.

3.2. Эксперимент 2

Далее рассмотрим решение уравнения (1.1) в области $\Omega = [0; 1]$ для ступенчатой функции. Положим, что скорость $v = 0,5$, а начальное условие задано функцией

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0, 1; 0, 3], \\ 0, & x \notin [0, 1; 0, 3]. \end{cases}$$

Сетка представляет собой набор 40 точек, произвольно расположенных в области Ω . После адаптивной инициализации множество частиц насчитывает 56 точек.

Как и в предыдущем примере, на входном сечении задается нулевое краевое условие и проекция на сетку базируется на линейной интерполяции по двум частицам.

На рис. 2 изображены начальная функция и решение после 50 и 100 шагов $\Delta t = 0,01$; 200-узловая сетка.

3.3. Эксперимент 3

Рассмотрим вращение цилиндра с щелью. В этом случае $\Omega = [0, 3] \times [0, 4] \subset \mathbb{R}^2$ и начальное условие

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in D, \\ 0, & \mathbf{x} \notin D, \end{cases}$$

где $D \subset \Omega$ — диск с щелью радиуса $r = 0,5$ с центром в точке $(1, 5; 2, 0)$, ширина щели $2r/3$, длина — $3r/2$. Цилиндр вращается в стационарном поле скорости $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = (x_2 - 2, 0; -x_1 + 1, 5)$, $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$.

Произвольная триангуляция Делоне выполняется с помощью пакета Triangle⁶: для первого теста сетка имеет 407 узлов, для второго — 1937 узлов. После адаптивной инициализации система частиц насчитывает 2001 и 5593 точек соответственно. Неструктурная сетка для проекции состоит из 9454 узлов.

Начальное условие и решение после одного полного вращения приводятся на рис. 3 (а–с) для первого тестового случая и на рис. 3

⁶Генератор сеток Triangle, <http://www-2.cs.cmu.edu/~quake/triangle.html>

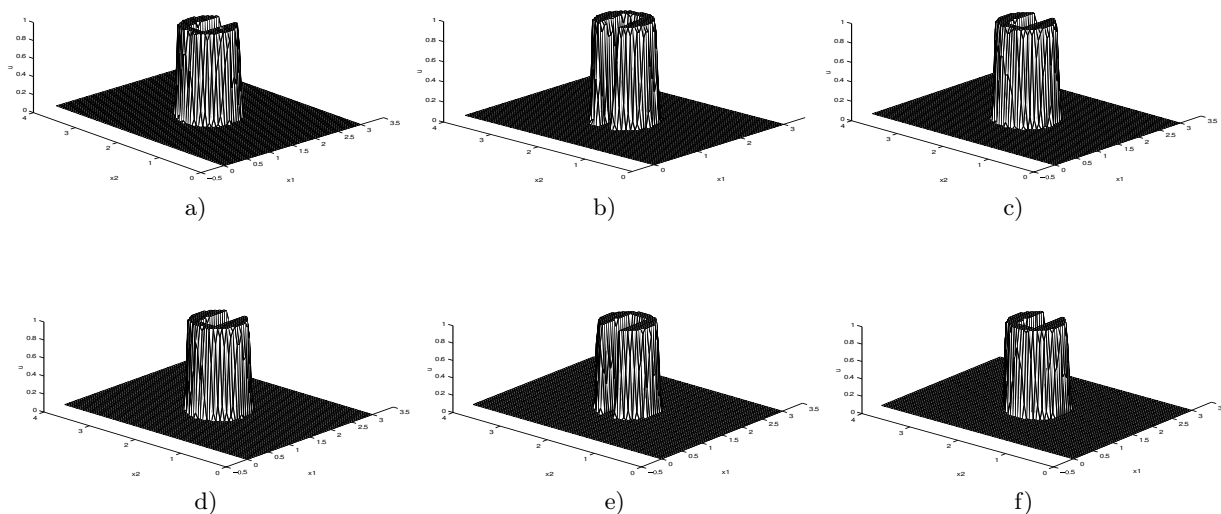


Рис. 3. Вращение цилиндра с щелью: *a* — начальное состояние, 2001 частиц; *b* — решение после поворота на π радиан, 2001 частиц; *c* — решение после одного полного вращения, 2001 частиц; *d* — начальное состояние, 5593 частиц; *e* — решение после поворота на π радиан, 5593 частиц; *f* — решение после одного полного вращения, 5593 частиц

Т а б л и ц а

Время вычисления, сек, и эквивалентное число Куранта, Co . Одно полное вращение цилиндра с щелью, метод Рунге-Кутты третьего порядка, 57 шагов, $\Delta t = 0,11$

#узлы	#частицы	проекция	МДЧ	Co
1398	4505	58,2	108,1	3,7
1937	5593	86,1	146,8	4,1
3190	7925	133,4	255,2	4,9
4785	10749	198,5	375,0	5,7
9454	17572	394,4	756,4	7,3

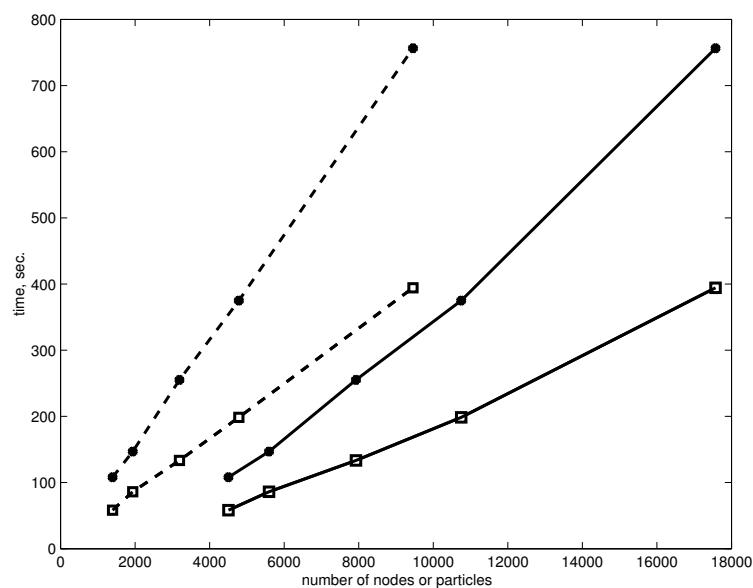


Рис. 4. Время вычисления для задачи вращения цилиндра с щелью: время проекции ($\square$) относительно узлов (пунктирная линия) и частиц (сплошная линия); время МДЧ ($\bullet$) относительно узлов (пунктирная линия) и частиц (сплошная линия)

(d–f) для второго. Сдвиг частиц вычисляется с помощью метода Рунге-Кутты третьего порядка с шагом по времени $\Delta t = 0,05$. Интересно заметить, что при заданных параметрах задачи эквивалентное число Куранта $Co = \Delta t \|v\| \sqrt{N}$, где N — общее число частиц, равное 2, 5 для первого теста и 4, 1 для второго (т.е. при рассмотрении данной задачи стандартными методами с тем же шагом Δt на неоднородной сетке с N узлами получили бы такое число Куранта).

Был проведен ряд вычислительных экспериментов для различных начальных сеток, при сохранении остальных параметров задачи. В ходе тестов контролировалось время выполнения процедуры проекции и МДЧ в целом. Таблица демонстрирует результаты пяти экспериментов, выполненных на LINUX PC (Intel Pentium 4 2,57 GHz, 1 GB RAM). Зависимость времени ЦП от числа узлов сетки и частиц изображена на рис. 4. Из графика следует, что время выполнения МДЧ является линейной функцией относительно как числа узлов так и числа частиц.

Заключение

В данной статье представлена явная безусловно устойчивая схема (метод движущихся частиц) для линейной задачи конвекции. Алгоритм представляет собой комбинацию лагранжевого метода характеристик и проекции, основанной на линейной интерполяции. Такая комбинация позволяет получить монотонный метод, время выполнения которого линейно зависит от числа узлов вычислительной сетки. МДЧ является методом высокой разрешающей способности благодаря пространственной адаптации на шаге инициализации множества подвижных частиц. Движение частиц вдоль характеристик осуществляется путем решения задачи Коши первого по-

рядка с помощью метода Рунге-Кутты. Порядок последнего может быть произвольным в зависимости от предписанного шага по времени и требуемой точности; более того, каждая частица может быть прослежена с ее собственной точностью.

Дальнейшие исследования будут посвящены расширению рассматриваемой схемы до задач конвекции–реакции и конвекции–диффузии. Последняя подразумевает объединение МДЧ с методом конечных элементов для задачи диффузии в рамках подхода расщепления оператора.

Авторы статьи выражают особую благодарность профессору Надолину К.А. за проявленный интерес к работе и полезные комментарии.

Литература

1. Donea J., Huerta A. Finite Element Methods For Flow Problems. Wiley: Chichester, cop. 2003. 352 p.
2. Löhner R. Applied CFD Techniques: An Introduction Based on FEM. John Wiley and Sons, 2002. 376 p.
3. Hansbo P. A Free-Lagrangian Finite Element Method Using Space-Time Elements // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 2000. Vol. 188. P. 347–361.
4. Iske A., Käser M. Conservative Semi-Lagrangian Advection on Adaptive Unstructured Meshes // Num. Methods Partial Differential Eq. 2004. Vol. 20. P. 388–411.
5. Марчук Г.И. Метод «расщепления» для решения задач математической физики // Численные методы решения задач механики сплошных сред. М., 1969. С. 66–84.
6. Jameson A. Analysis and Design of Numerical Schemes for Gas Dynamics 1. Artificial Diffusion, Upwind biasing, Limiters and Their Effect On Accuracy and Multigrid Convergence // Int. J. of Computational Fluid Dynamics. 1995. Vol. 4. P. 171–218.

Статья поступила 5 сентября 2004 г.

Институт Математики Цюрихского университета (Швейцария)

Технологический университет Лаппеенранты (Финляндия)

Ростовский государственный университет

© Смолянский А., Шипилова О., Хаарио Х., Короткая Ж., 2004