Модификация метода SPH для решения первой краевой задачи уравнения Пуассона

Л. В. Петрова
Кемеровский государственный университет, Кемерово, Россия
luci@kemsu.ru

6 октября 2010 г.

Работа посвящена решению задачи Дирихле для уравнения Пуассона в единичном квадрате модифицированным методом SPH, который применяется для решения задач механики жидкости со свободными границами. Модификация метода состоит в том, что для вычисления интеграла, входящего в основное определение метода SPH применяются квадратурные формулы интегрирования по квадратурам на круге, в которых интеграл заменяется суммой произведений веса квадратурной точки на функцию, определенную в этой точке. Значение функции в квадратурных точках определяется с помощью интерполирования полиномами Лагранжа по известным значениям функции в узлах метода SPH. Приводится описание метода, а также результаты численных расчетов вышеозначенной задачи.

В настоящее время для приближенного решения вычислительных задач применяется множество разнообразных численных методов, различных по назначению. Как сами методы, так и в целом технология вычисления постоянно находятся в процессе совершенствования. Известные и широко используемые методы подвергаются модификации. Создание эффективных реализаций численных алгоритмов представляет несомненный интерес и большое практическое значение [2].

Для решения задач механики жидкости вводятся методы из других областей науки. К таким относится метод сглаженных частиц (Smoothed Particle Hydrodynamics [4]), изначально применявшийся в задачах астрофизики. В данном методе допускается произвольная связность частиц, что позволяет им менять свое положение относительно друг друга (перехлесты и т.п.). При его реализации не требуется информация о связях между узлами и наличия постоянной сетки, следовательно, метод SPH является бессеточным и позволяет моделировать явления недоступные классическим сеточным методам. Для более детального ознакомления с классификацией бессеточных методов можно обратиться к обзору [5].

1. Основы метода SPH

В основе метода лежит дискретизация области Ω конечным набором лагранжевых частиц, которые можно представлять как элементарные объемы среды. Каждый такой объем или частица SPH обладает стандартными характеристиками среды: плотность, масса, скорость, энергия, давление и др. Величина такого объема вычисляется как отношение массы частицы к ее плотности $V = \dfrac{m}{\rho}$ (m – масса, ρ – плотность). Моделируемый объем разбивается на большое количество маленьких объемов, каждый из которых движется самостоятельно, согласно заданным условиям, что позволяет им менять свое положение относительно друг друга.

1.1 Аппроксимация функции в методе SPH.

В методе SPH значение искомой функции в точке представляется в виде интеграла по области от этой функции с весовой функцией Дирака:

$$A(r) = \int_{\Omega} A(r')\delta(r - r')dr' \tag{1}$$

где $\delta(r-r')$ - дельта-функция Дирака, A - это искомая функция, r - радиус-вектор, dr' - малый элемент объема в рассматриваемом пространстве.

Для получения интегральной формулы аппроксимации функции по ограниченной области Ω функцию Дирака заменяют некоторой гладкой классической функцией с компактным носителем, называемой весовой функцией ядра W [4]:

$$A(r) = \int_{\Omega} A(r')W(r - r', h)dr' \tag{2}$$

где h - сглаживающая длина функции ядра $W(r - r', h)$.

Область Ω - область из R^n, такая, что $\|r - r_i\| < h$ (r_i - i-тая точка SPH), также Ω называют еще носителем функции (support domain).

Для расчета задач методом SPH применяется множество различных функций ядра, чаще всего используются сплайны различных порядков или функция ядра Гаусса.

Для задачи, рассматриваемой в данной работе, применяется степенная функция ядра:

$$W(h, r\,) = \frac{3}{\pi h^6}(h^2 - r^2)^2 \tag{3}$$

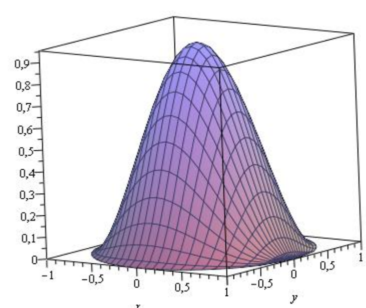

Рис. 1. Вид степенной функции ядра (3)

В качестве весовой функции ядра W можно выбрать любую (в зависимости от поставленной задачи), удовлетворяющую следующим свойствам:

1. Функция ядра должна обладать компактным носителем, не равна нулю лишь на некотором ограниченном множестве Ω

$$W(r - r', h) = 0, \quad \|r - r'\| > h \tag{4}$$

2. Условие нормировки

$$\int_{\Omega} W(r - r', h)dr' = 1 \tag{5}$$

3. Стремление к дельта-функции Дирака при уменьшении носителя функции Ω

$$W(r-r',h) \underset{h\to 0}{\to} \delta(r-r') \tag{6}$$

Область интегрирования представляется ограниченным набором лагранжевых частиц, обладающих всеми характеристиками среды, поэтому интеграл (2) можно заменить конечной суммой по соседним частицам к данной аппроксимируемой частице:

$$A(r) = \sum_{j=1}^{n} A(r_j) W\left(r-r_j, h\right) V_j \tag{7}$$

где n - это количество соседних j-тых частиц для i-той точки, $A(r_j)$ - значение функции в точке j, V_j - объём, занимаемый частицей j.

На рис.2 изображен общий вид функции ядра. Из графика видно, что в аппроксимации функции в i-той точке при суммировании участвуют лишь те j-тые частицы SPH, которые попали в носитель Ω. Причем влияние j-той частицы на i-тую тем больше, чем ближе она к ней расположена, так как значение функции ядра возрастает по мере приближения к центру носителя. Частицы SPH, которые находятся за пределами носителя функции Ω, в суммировании не участвуют.

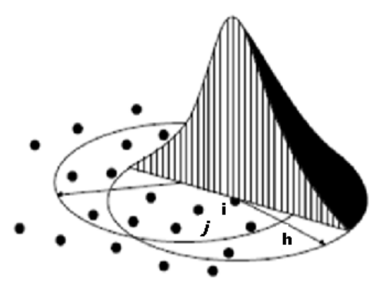

Рис. 2. Общий вид функции ядра. Влияние на i-тую точку её j-тых соседей

Особенностью метода SPH является то, что при аппроксимации интеграл от функции ядра по области тождественно равен единице. Когда интеграл от функции ядра аппроксимируется римановыми суммами, то результат не восстанавливается к единице точно, потому что при вычислении интеграла возникает неудовлетворительная погрешность. Следовательно, целесообразно искать решение интеграла от функции ядра, в котором условие нормировки (5) выполнялось бы точнее при использовании квадратурных сумм.

В качестве носителя функции ядра Ω работе берется круг радиуса h, поэтому при вычислении интеграла (2), входящего в основное определение метода SPH, рассматривались формулы интегрирования по квадратурам на круге с 7 и 21 квадратурными узлами, в которых интеграл заменяется суммой произведений веса квадратурной точки на функцию, определенную в этой точке.

Для интеграла функции по круговой области справедлива следующая формула [1]:

$$\frac{1}{\pi h^2} \iint\limits_{x^2+y^2\le h^2} u\left(x,y\right) dxdy = \sum_{j=1}^{k} u\left(x_j, y_j\right) B_j + R \tag{8}$$

где $u(x_j, y_j)$ - значение функции в квадратурной точке, h - радиус круговой области, k - количество квадратурных точек, B_j - табличный вес квадратурной точки j.

Интеграл от функции ядра по круговой области, учитывая (8) приближается формулой:

$$\int_{\Omega} W(r - r', h)dr' = \pi h^2 \sum_{j=1}^{k} W(r_j, h) B_j \tag{9}$$

Соотношение для аппроксимации функции в точке перепишется в следующем виде:

$$A(r) = \pi h^2 \sum_{j=1}^{k} A(r_j) W(r - r_j, h) B_j \tag{10}$$

где $A(r_j)$ - значение искомой функции в квадратурной точке j, B_j - табличный вес точки j , $r - r_j$ - значение функции ядра в зависимости от расстояния между точкой j и интересующей точкой i, k - предел суммирования равный 7 или 21, в зависимости от количества точек в квадратуре.

Восстановление значения функции в точке по формуле (10) сильно напоминает основную аппроксимацию метода SPH (7). Но различие состоит в том, что суммирование ведется не по неизвестному количеству соседей, а по строго определенным квадратурным точкам; отношение $V_j = \dfrac{m_j}{\rho_j}$ заменено на таблично определенное значение B_j.

2. Первая краевая задача для уравнения Пуассона с несколькими пространственными переменными

2.1 Постановка задачи

Пусть в квадратной области $D = \{(x, y) : 0 \le x \le 1, 0 \le y \le 1\}$ с границей $D = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ решается уравнение Пуассона двух переменных

$$\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = f(x, y) \tag{11}$$

с заданными граничными условиями:

$$\begin{cases} f(x, y)|_{\Gamma_1} = f(x, y)|_{x=1} = f(1, y) \\ f(x, y)|_{\Gamma_2} = f(x, y)|_{y=1} = f(x, 1) \\ f(x, y)|_{\Gamma_3} = f(x, y)|_{x=0} = f(0, y) \\ f(x, y)|_{\Gamma_4} = f(x, y)|_{y=0} = f(x, 0) \end{cases} \tag{12}$$

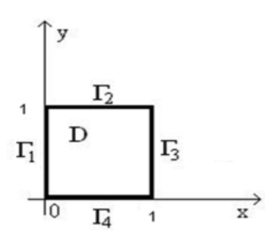

Рис. 3. Область D

Необходимо найти значение функции $u(x, y)$ в $D/\bar{D}$.

2.2 Алгоритм решения первой краевой задачи в методе SPH для уравнения Пуассона

Вторая производная аппроксимируется суммой интегралов от произведения первых частных производных искомой функции и функции ядра, причем неизвестная функция раскладывается в ряд Тейлора с использованием технологии метода SPH [3]:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2 u(x,y)}{dx^2} + \frac{\partial^2 u(x,y)}{dx^2} \left|_{\substack{x=x_i \\ y=y_i}}\right. \approx \iint\limits_{\Omega} \frac{u(x,y) - u(x_i, y_i)}{x_i - x} \frac{\partial W}{\partial x} \left|_{x=x_i}\right. dxdy \ + \\ &+ \iint\limits_{\Omega} \frac{u(x,y) - u(x_i, y_i)}{y_i - y} \frac{\partial W}{\partial y} \left|_{y=y_i}\right. dxdy, \ \Omega = \{x^2 + y^2 \leq h^2\}, \ i = \overline{1, N}. \end{aligned} \tag{13}$$

Очевидно, что после вычисления интеграла по квадратурным формулам на круге для 21 квадратурного узла точность решения получится выше, чем для интегрирования квадратурами с 7 узлами, поэтому решение искалось для 21-точечной квадратуры.

С учетом квадратурной формулы (8) двумерное уравнение Пуассона в i-той точке (x_i, y_i), $i = \overline{1, N}$, записанное через ее квадратурные точки представляется в виде системы равенств:

$$-\frac{24}{h^4} \sum_{j=1}^{kp} \{u(x_{ij}, y_{ij}) - u(x_i, y_i)\} \left(h^2 - (x_i - x_{ij})^2 - (y_i - y_{ij})^2\right) B_j = f(x_i, y_i). \tag{14}$$

Значение функции в квадратурных точках находится методом интерполирования полиномами Лагранжа по известным значениям функции в узлах метода SPH:

$$-\frac{24}{h^4} \sum_{j=1}^{kp} \Big(([u_k c_k + u_l c_l + u_m c_m])_{ij} - \ u_i \Big) \cdot B_j \cdot \left[h^2 - r_{ij}^2\right] = f\left(x_i, y_i\right) \tag{15}$$

где c_k, c_l и c_m - коэффициенты соответствующих вкладов полинома Лагранжа для функции с двумя переменными:

$$c_k = \frac{(x - x_l)(y_l - y_m) - (y - y_l)(x_l - x_m)}{(x_k - x_l)(y_l - y_m) - (y_k - y_l)(x_l - x_m)} \tag{16}$$

$$c_l = \frac{(x - x_m)(y_m - y_k) - (y - y_m)(x_m - x_k)}{(x_l - x_m)(y_m - y_k) - (y_l - y_m)(x_m - x_k)} \tag{17}$$

$$c_m = \frac{(x - x_k)(y_k - y_l) - (y - y_k)(x_k - x_l)}{(x_m - x_k)(y_k - y_l) - (y_m - y_k)(x_k - x_l)} \tag{18}$$

На рис. 4 показано условное расположение квадратурных точек и точек SPH в квадратуре с 7 квадратурными точками. Здесь «звездочками» обозначены точки SPH, расположенные в области D, среди которых текущая i-тая точка, «кружками» обозначены квадратурные узлы для i-той интересующей точки (в центре), среди которых точка j; а «звездочки», которые обозначены индексами k,l и m, являются ближайшими точками области к узлу интерполирования j, по которым двумерной интерполяцией Лагранжа ищется значение функции в этом узле.

Для каждой точки i значение функции $[u]_{ij} = [u_k c_k + u_l c_l + u_m c_m]_{ij}$ в формуле (15) может быть известным, если точка (x_u, y_u) лежит на границе области $(x_u, y_u) \in \bar{D}$, или неизвестным, если точка (x_u, y_u) лежит внутри области $(x_u, y_u) \in D/\bar{D}$, и, следовательно, находится методом интерполирования по полиномам Лагранжа. Если квадратурная точка оказалась за пределами области D, то она стягивается к границе $\bar{D}$, при этом величина носителя h пересчитывается для всех j-тых квадратурных точек, относящихся к данной i-той точке SPH, так, чтобы все j-тые точки оказались внутри области D.

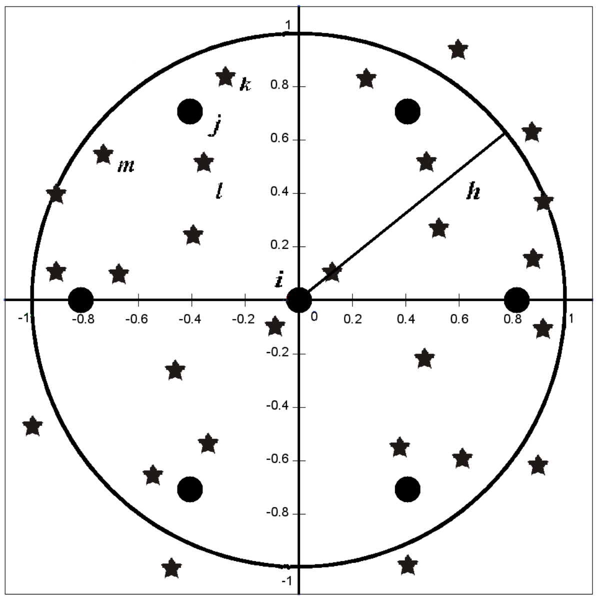

Рис. 4. Расположение ближайших точек SPH относительно квадратурных узлов для i-той точки в квадратуре с 7 квадратурными узлами, носитель $h = 1$

Результаты

Решение первой краевой задачи для уравнения Пуассона с использованием приведенной выше модификацией метода SPH проводилось в области $D = \{(x, y) : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$ для следующих функций: полиномы I и IV степени, тригонометрическая и композиция полиномиальной, тригонометрической и экспоненциальной

$$\begin{array}{l} u_1 = x + y, \\ u_2 = x^2(1-x)^2 + y^2(1-y)^2, \\ u_3 = \sin(2\pi x)\sin(2\pi y), \\ u_4 = e^{\cos(x+y+5)} . \end{array} .$$

Результаты тестирования оценивались по максимальному значению относительной погрешности на векторе решения.

Формула расчета относительной погрешности на векторе решения:

$$\delta_k = \frac{\max\limits_i |[u_i^t]_k - [u_i]_k|}{\max\limits_i |[u_i^t]_k|} 100\% \ , \ i = \overline{1, N} \ , \ k = \overline{1, 4}$$

где u^t и u - соответственно точное и приближенное решения вышеозначенной задачи, k- индекс тестируемой функции.

Относительные погрешности решения первой краевой задачи для уравнения Пуассона для точек, лежащих внутри области D представлены в таблице 1:

Таблица 1. Относительные погрешности решения

Число точек	δ_1	δ_2	δ_3	δ_4
19	1.35E-014	0.25	0.32	0.12
30	1.68E-014	6.25E-002	1.25	0.11
67	1.25E-014	2.78E-002	0.14	4.9E-002
108	6.33E-013	8.67E-002	0.09	1.76E-002
228	1.79E-014	2.49E-003	1.29E-002	0.41E-002

Следует отметить высокоточные решения для полинома I степени, интерполяция которых методом Лагранжа (15)-(18) удачна. Для полинома IV степени происходит уменьшение погрешности с ростом количества точек. Для тестов остальных более сложных функций погрешность практически не изменяется.

Заключение

В рамках данной работы был рассмотрен метод интегрирования для аппроксимации значения функции в точке методом SPH для решения первой краевой задачи уравнения Пуассона, обходящийся без использования массы и плотности, использовалась степенная функция ядра. Модификация состоит в том, что интеграл в основном определении метода вычисляется по квадратурным формулам высокой степени точности. Значение функции в квадратурных точках ищется методом интерполирования по известным значениям функции в узлах SPH. Аппроксимация второй производной осуществляется методом, подробно описанным в статье Брукшоу (см. [3]), через разложение функции в ряд Тейлора. Данный подход был протестирован, показал достаточно низкую погрешность. Тестирование метода проводилось на решении первой краевой задачи для уравнения Пуассона.

Если аппроксимирование интеграла от функции ядра осуществляется простыми суммами Римана, то искомые точки - точки решения, но интеграл в условии нормировки (5) восстанавливается к единице недостаточно точно. При аппроксимация интеграла от функции ядра квадратурными формулами, интеграл от функции ядра восстанавливается к единице с хорошей погрешностью, значения функции в квадратурных точках строго определены, но никакого отношения к точкам решения не имеют. Следовательно, неоходимо переносить указанное аналитическое решение в квадратурные точки, прибегая к процедуре интерполяции, которая может снизить точность метода, так как вносит погрешность в вычисления и требует дополнительных временных затрат.

Результатом данной работы стала модификация метода SPH для аппроксимации второй производной, которая может применяться в других приложениях метода, причем нет необходимости в вычислении объема V или $\dfrac{m}{\rho}$ (без чего не обходилась основная аппроксимация метода SPH (2),(7)), что позволяет решать более широкий круг задач.

Список литературы

[1] Абрамовица, М. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / М. Абрамовица, И. Стиган // М.: Наука, главная редакция физико-математической литературы, 1979.
[2] Афанасьев К.Е., Ильясов А.Е., Макарчук Р.С., Попов А.Ю. Численное моделирование течений жидкости со свободными границами методами SPH и MPS. // Вычислительные технологии, 2006. - Том 11, N 9,С. 26-44.
[3] Brookshaw, L. Solving the Heat Diffusion Equation in SPH // Proc. ASA. - 1994.
[4] Liu G.R. Mesh-free Methods - Moving Beyond Finite Element Methods / Liu G.R. // CRC Press LLC, 2003.
[5] Liu G.R. Smoothed Particle Hydrodynamics: a meshfree particle method / Liu G.R., Liu M.B. // World Scientific, 2003.