УДК 519.6

О ЖИДКОМ УСЕЧЕНИИ СЕТОЧНОЙ ЯЧЕЙКИ В МЕТОДЕ VOF

С. В. Яцевич
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Рассматривается задача о жидком усечении полиэдральной сеточной ячейки с неплоскими гранями при геометрической реконструкции в методе VOF численного решения задач со свободной поверхностью. Дается описание конструктивного подхода к решению: определяется вид рабочей функции, приводится ее построение. Предлагается соответствующий алгоритм определения жидкого усечения при кусочно-планарной реконструкции свободной поверхности.

Ключевые слова: свободная поверхность, геометрическая реконструкция, жидкое усечение, сеточная ячейка, рабочая функция.

Введение

При численном решении задач со свободной поверхностью методом VOF с геометрической реконструкцией поверхности [1—7] возникает важная задача построения жидкого усечения сеточной ячейки по заданному полю объемной концентрации жидкости. Решение данной задачи лежит в основе реконструкции. Отметим, что геометрическая реконструкция может применяться и в других областях, например, в задачах ударно-волновой газодинамики с выделением контактных границ [8, 9]. В трехмерном случае наиболее популярна кусочно-планарная реконструкция. Неизбежные при этом разрывы устраняются сглаживанием.

Выделяются два основных подхода к решению рассматриваемой задачи: неявный и явный. При первом подходе параметр секущей плоскости входит в рабочую функцию неявно, что приводит к необходимости итерационной процедуры с определением на каждой итерации пересечения плоскости с ячейкой. Второй подход связан с использованием явной параметризации рабочей функции. Это позволяет при соответствующем выборе рабочего промежутка обойтись без определения пересечений и в ряде случаев получить аналитическое решение либо выбрать начальное приближение для гарантированной сходимости метода Ньютона.

Известны явные параметризации рабочей функции в случае прямоугольных [10], тетраэдральных [11] сеток, для произвольного гексаэдра [2], а также для плоскогранного полиэдра [4, 6, 12, 13]. Заметим, что прямое распространение последнего случая на полиэдр с неплоскими гранями посредством триангуляции приведет к неоправданному увеличению вычислительных затрат.

Среди итерационных процедур, применяемых при неявном подходе, наиболее популярен метод Брэнта [14]. Иногда его используют и при явном подходе, когда параметризация рабочей функции недостаточно проста (см., например, [2]). Недостаток метода Брэнта — замедление сходимости у границ объемного интервала [2, 3].

В данной статье приводится построение явно параметризованной рабочей функции для полиэдра с неплоскими гранями и дается соответствующий алгоритм решения рассматриваемой задачи с использованием метода Ньютона. Попутно приводится неявный алгоритм, основанный на комбинации методов хорд и дихотомии. Основа данного алгоритма может применяться в качестве альтернативы прямому перебору (см., например, [2]) при поиске минимального промежутка, включающего решение. Такая альтернатива может быть оправдана при большом числе вершин полиэдра.

1. Планарное усечение сеточной ячейки

Решение рассматриваемой задачи основано на определении параметром a плоскости

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) - a = 0, \tag{1}$$

которая отсекает в сеточной ячейке заданный жидкий объем V_*, соответствующий объемной концентрации жидкости. Предполагается, что сеточная ячейка объемом V_c является квазивыпуклым многогранником[1]. Под $\mathbf{r}_c$ в (1) подразумевается либо среднее арифметическое радиусов-векторов вершин ячейки, либо часто используемый в вычислительных технологиях центр масс однородной ячейки (модельный центр масс)[2]. При использовании только локальной системы координат, совмещенной с $\mathbf{r}_c$, очевидно, $\mathbf{r}_c = 0$. Здесь и далее используются также обозначения: $\mathbf{n}$ — орт внутренней нормали к поверхности жидкости; $\mathbf{r}$ — радиус-вектор; $\mathbf{r}_a$ — радиус-вектор точки a; $\mathbf{r}_{ab} = \mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a$; $\mathbf{n}_f$ — орт внешней нормали к грани сеточной ячейки; V — текущий объем жидкого усечения; δ — малое положительное число.

Совместное решение уравнения секущей плоскости (1) и параметрического уравнения пересекаемого ребра с концами $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ дает точку пересечения

$$\mathbf{r}_* = \frac{a - \mathbf{r}_{c1} \cdot \mathbf{n}}{\mathbf{r}_{12} \cdot \mathbf{n}} \mathbf{r}_{12} + \mathbf{r}_1. \tag{2}$$

Пусть текущее жидкое усечение ограничено секущей плоскостью, K непосредственно примыкающими к ней гранями и L гранями ячейки. Пусть k-я примыкающая грань и l-я грань ячейки из приведенного перечня образованы N^k и N^l вершинами, обозначаемыми через q_i^k и f_i^l соответственно. Сечение ячейки плоскостью образовано K вершинами, определяемыми по (2). Обозначим через q^k и f^l центры триангуляции k-й примыкающей грани и l-й грани ячейки. Соответствующая схема триангуляции k-й примыкающей к плоскому сечению ячейки грани текущего жидкого усечения приведена на рис. 1.

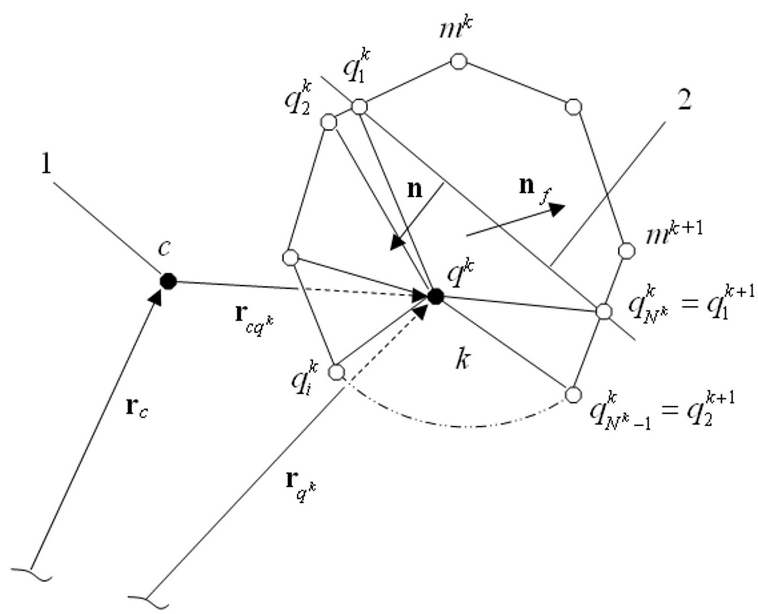

Рис. 1. Триангуляция k-й грани жидкого усечения (1 — центр ячейки; 2 — след секущей плоскости)

[1]Допускаются неплоские грани при условии выпуклости их проекций на средние плоскости.

[2]Назначение $\mathbf{r}_c$ — обеспечить соизмеримость решения a локальному интервалу своего существования, так что формально $\mathbf{r}_c$ не обязательно центр ячейки.

В обозначениях рис. 1 формула (2) имеет вид

$$\mathbf{r}_{q_1^k} = \frac{a - \mathbf{r}_{cq_2^k} \cdot \mathbf{n}}{\mathbf{r}_{q_2^k m^k} \cdot \mathbf{n}} \mathbf{r}_{q_2^k m^k} + \mathbf{r}_{q_2^k}. \tag{3}$$

Теперь можно определить центр триангуляции q^k (для аналогичного определения f^l формулы (3) не требуется):

$$\mathbf{r}_{q^k} = \frac{1}{N^k} \left(\mathbf{r}_{q_1^k} + \mathbf{r}_{q_1^{k+1}} + \sum_{i=2}^{N^k-1} \mathbf{r}_{q_i^k} \right). \tag{4}$$

Триангуляция линейчатых граней означает их кусочно-планарную аппроксимацию. При такой аппроксимации объем многогранника, в частности текущего жидкого усечения, можно определять алгебраической суммой объемов ориентированных тетраэдров, имеющих общую вершину и триангулирующих своими основаниями грани многогранника. С учетом планарности грани, образованной секущей плоскостью, имеем[3]

$$6V = \mathbf{r}_q \cdot \sum_{k=1}^{K} \mathbf{r}_{q_1^k} \times \mathbf{r}_{q_1^{k+1}} + \sum_{k=1}^{K} \mathbf{r}_{q^k} \cdot \sum_{i=1}^{N^k} \mathbf{r}_{q_i^k} \times \mathbf{r}_{q_{i+1}^k} + \sum_{l=1}^{L} \mathbf{r}_{f^l} \cdot \sum_{i=1}^{N^l} \mathbf{r}_{f_i^l} \times \mathbf{r}_{f_{i+1}^l}, \quad \mathbf{r}_q = (a + \mathbf{r}_c \cdot \mathbf{n})\, \mathbf{n}. \tag{5}$$

Здесь и далее значения индексов $K+1$, N^k+1 и N^l+1 заменяются на 1. Специальный учет (1) позволяет исключить из (5) первую сумму, т. е.

$$6V = \sum_{k=1}^{K} \widetilde{\mathbf{r}}_{q^k} \cdot \sum_{i=1}^{N^k} \mathbf{r}_{q_i^k} \times \mathbf{r}_{q_{i+1}^k} + \sum_{l=1}^{L} \widetilde{\mathbf{r}}_{f^l} \cdot \sum_{i=1}^{N^l} \mathbf{r}_{f_i^l} \times \mathbf{r}_{f_{i+1}^l}, \quad \widetilde{\mathbf{r}}_{q^k} = \mathbf{r}_{q^k} - \mathbf{r}_c - a\mathbf{n}, \quad \widetilde{\mathbf{r}}_{f^l} = \mathbf{r}_{f^l} - \mathbf{r}_c - a\mathbf{n}. \tag{6}$$

При прямых вычислениях в некоторых случаях вариант (6) оказывается более экономичным.

Согласно формулам (3)—(6) $V = V(a)$. Поиск жидкого усечения основан на итерационном решении уравнения $F(a) = V(a) - V_* = 0$. Выбор методов определяется видом рабочей функции $F(a)$. Из элементарных геометрических соображений следует кусочно-полиномиальный (третьей степени) характер $F(a)$. Монотонность $F(a)$ и единственность решения a_* (рис. 2) обусловлены аддитивностью объемной меры.

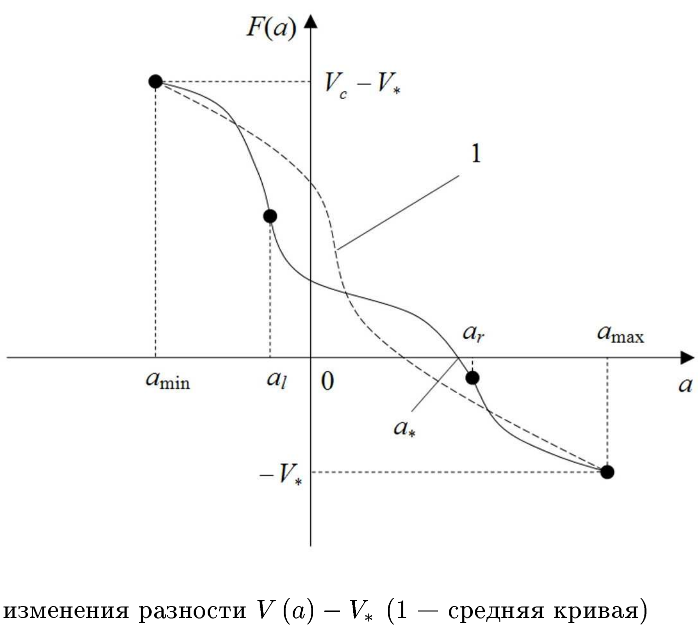

Рис. 2. Условная картина изменения разности $V(a) - V_*$ (1 — средняя кривая)

[3]Здесь и далее запись $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$ означает смешанное произведение векторов $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ и $\mathbf{c}$.

2. Метод прямой итерации

Исходя из вышеизложенного, можно предложить итерационный алгоритм[4] жидкого усечения, основанный на комбинации методов хорд[5] и дихотомии [15]. Данная комбинация исключает расходимость итераций и возможность их зацикливания на локальных перегибах рабочей функции $F(a)$.

Основной алгоритм. *Шаг 1.* Определение промежутка существования решения в рассматриваемой ячейке: $a \in [a_{\min} = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{r}_{\min} - \mathbf{r}_c), a_{\max} = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{r}_{\max} - \mathbf{r}_c)]$, где $\mathbf{r}_{\min}$ и $\mathbf{r}_{\max}$ — радиусы-векторы вершин ячейки, доставляющие минимум и максимум выражению $\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c)$. Инициализация рабочего промежутка: $a_l = a_{\min}$; $a_r = a_{\max}$.

Шаг 2. Очередная итерация методом хорд[6]: $a_k = a_l + \dfrac{a_r - a_l}{F(a_l) - F(a_r)} F(a_l)$. Обращение к F-процедуре (см. ниже) — определение $F(a_k)$. Проверка условия окончания итераций $|F(a_k)|/V_* < \delta$. При выполнении данного условия осуществляется переход к шагу 4. Коррекция рабочего промежутка: $(F(a_l) F(a_k) < 0 \Rightarrow a_r = a_k) \vee a_l = a_k$.

Шаг 3. Очередная итерация методом дихотомии: $a_k = (a_l + a_r)/2$. Обращение к F-процедуре и далее по шагу 2. Переход к шагу 2.

Шаг 4. Фиксирование текущих результатов F-процедуры. Передача управления основной программе.

***F*-процедура (вход: *a*; выход: *F(a)*, множество вершин текущего жидкого усечения).**
Шаг 1. Инициализация: $a = a_k$. Идентификация и определение пересечений ребер рассматриваемой ячейки с секущей плоскостью. Условие идентификации: $\left(\mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{r}_1^i - \mathbf{r}_c\right) - a\right)\left(\mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{r}_2^i - \mathbf{r}_c\right) - a\right) < 0$, где $\mathbf{r}_1^i$ и $\mathbf{r}_2^i$ — радиусы-векторы концов i-го ребра. Точки пересечений определяются по формуле (2) (см. также (3)).

Шаг 2. Формирование структурированного (допускающего идентификацию подмножеств, участвующих в построении (4), (5)) множества вершин текущего жидкого усечения объединением точек пересечений, полученных на шаге 1, и вершин ячейки, удовлетворяющих условию $\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) - a > 0$.

Шаг 3. Вычисление $F(a) = V(a) - V_*$ с помощью формул (4), (5) (или (4), (6)). Возвращение $F(a)$, передача управления основному алгоритму.

Ниже описывается подход, позволяющий учитывать локальную гладкость функции $F(a)$ и открывающий тем самым путь к эффективному применению более быстрых численных методов, в частности, метода Ньютона.

3. Метод кусочно-полиномиального представления рабочей функции

Определение аналитической формы $F(a)$ основано на выделении в (3)—(6) параметра a в качестве независимой переменной. Формулы (3), (4) приводятся к линейному виду:

$$\mathbf{r}_{q_1^k} = \boldsymbol{\lambda}_k a + \boldsymbol{\eta}_k, \quad \boldsymbol{\lambda}_k = \frac{\mathbf{r}_{q_2^k m^k}}{\mathbf{r}_{q_2^k m^k} \cdot \mathbf{n}}, \quad \boldsymbol{\eta}_k = \mathbf{r}_{q_2^k} - \frac{\mathbf{r}_{q_2^k m^k}}{\mathbf{r}_{q_2^k m^k} \cdot \mathbf{n}} \mathbf{r}_{c q_2^k} \cdot \mathbf{n}; \tag{7}$$

$$\mathbf{r}_{q^k} = \frac{\boldsymbol{\lambda}_k + \boldsymbol{\lambda}_{k+1}}{N^k} a + \frac{1}{N^k}\left(\boldsymbol{\eta}_k + \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \sum_{i=2}^{N^k - 1} \mathbf{r}_{q_i^k}\right). \tag{8}$$

[4]Как отмечалось во Введении, основа данного алгоритма может применяться в качестве альтернативы прямому перебору при поиске минимального промежутка, включающего решение. Такая альтернатива может быть оправдана при большом числе вершин полиэдра.

[5]Имеется в виду метод хорд [15], отличный от распространенного дискретного метода Ньютона (метода секущих). Последний метод в рассматриваемой ситуации может привести к расходимости итераций.

[6]Согласно рис. 2 на первой итерации $F(a_l) = V_c - V_*$; $F(a_r) = -V_*$.

Из формул (5), (6) выберем вариант (5), поскольку выделение параметра a снимает потенциальное преимущество (6), отмеченное в разд. 1. Входящие в (5) выражения модифицируются с учетом (7), (8) следующим образом:

$$\sum_{i=1}^{N^k} \mathbf{r}_{q_i^k} \times \mathbf{r}_{q_{i+1}^k} = \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \times \boldsymbol{\lambda}_k a^2 + \Big(\boldsymbol{\lambda}_k \times \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} - \boldsymbol{\eta}_{k+1}\Big) + \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \times \Big(\boldsymbol{\eta}_k - \mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\Big)\Big)\, a +$$
$$+ \boldsymbol{\eta}_k \times \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} - \boldsymbol{\eta}_{k+1}\Big) + \mathbf{r}_{q_2^{k+1}} \times \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \sum_{i=2}^{N^k-2} \mathbf{r}_{q_i^k} \times \mathbf{r}_{q_{i+1}^k}; \tag{9}$$

$$\sum_{k=1}^{K} \mathbf{r}_{q_1^k} \times \mathbf{r}_{q_1^{k+1}} = \sum_{k=1}^{K} \boldsymbol{\lambda}_k \times \boldsymbol{\lambda}_{k+1} a^2 + \sum_{k=1}^{K} \left(\boldsymbol{\eta}_k \times \boldsymbol{\lambda}_{k+1} + \boldsymbol{\lambda}_k \times \boldsymbol{\eta}_{k+1}\right) a + \sum_{k=1}^{K} \boldsymbol{\eta}_k \times \boldsymbol{\eta}_{k+1}. \tag{10}$$

Комбинируя (8)—(10), имеем

$$\mathbf{r}_{q^k} \cdot \sum_{i=1}^{N^k} \mathbf{r}_{q_i^k} \times \mathbf{r}_{q_{i+1}^k} =$$
$$= \frac{1}{N^k} \left[\left(\boldsymbol{\eta}_k + \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \sum_{i=2}^{N^k-1} \mathbf{r}_{q_i^k}\right) \cdot \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \times \boldsymbol{\lambda}_k + \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \cdot \boldsymbol{\lambda}_k \times \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} - \boldsymbol{\eta}_{k+1}\Big) + \right.$$
$$\left. + \boldsymbol{\lambda}_k \cdot \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \times \Big(\boldsymbol{\eta}_k - \mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\Big)\right] a^2 + \frac{1}{N^k} \left\{\left(\boldsymbol{\eta}_k + \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \sum_{i=2}^{N^k-1} \mathbf{r}_{q_i^k}\right) \cdot \Big[\boldsymbol{\lambda}_k \times \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} - \boldsymbol{\eta}_{k+1}\Big) + \right.$$
$$\left. + \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \times \Big(\boldsymbol{\eta}_k - \mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\Big)\Big] + (\boldsymbol{\lambda}_k + \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) \cdot \left[\boldsymbol{\eta}_k \times \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} - \boldsymbol{\eta}_{k+1}\Big) + \mathbf{r}_{q_2^{k+1}} \times \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \sum_{i=2}^{N^k-2} \mathbf{r}_{q_i^k} \times \mathbf{r}_{q_{i+1}^k}\right]\right\} a +$$
$$+ \frac{1}{N^k} \left(\boldsymbol{\eta}_k + \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \sum_{i=2}^{N^k-1} \mathbf{r}_{q_i^k}\right) \cdot \left[\boldsymbol{\eta}_k \times \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} - \boldsymbol{\eta}_{k+1}\Big) + \mathbf{r}_{q_2^{k+1}} \times \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \sum_{i=2}^{N^k-2} \mathbf{r}_{q_i^k} \times \mathbf{r}_{q_{i+1}^k}\right] =$$
$$= \frac{1}{N^k} \left(\sum_{i=2}^{N^k-1} \mathbf{r}_{q_i^k} + \mathbf{r}_{q_2^k} + \mathbf{r}_{q_{N^k-1}^k}\right) \cdot \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \times \boldsymbol{\lambda}_k a^2 +$$
$$+ \frac{1}{N^k} \left\{\sum_{i=2}^{N^k-1} \mathbf{r}_{q_i^k} \cdot \Big[\boldsymbol{\lambda}_k \times \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} - \boldsymbol{\eta}_{k+1}\Big) + \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \times \Big(\boldsymbol{\eta}_k - \mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\Big)\Big] + \right.$$
$$\left. + \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \cdot \boldsymbol{\eta}_k \times \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} + \mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\Big) - \boldsymbol{\lambda}_k \cdot \boldsymbol{\eta}_{k+1} \times \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} + \mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\Big) + (\boldsymbol{\lambda}_k + \boldsymbol{\lambda}_{k+1}) \cdot \sum_{i=2}^{N^k-2} \mathbf{r}_{q_i^k} \times \mathbf{r}_{q_{i+1}^k}\right\} a +$$
$$+ \frac{1}{N^k} \left(\boldsymbol{\eta}_k + \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \sum_{i=2}^{N^k-1} \mathbf{r}_{q_i^k}\right) \cdot \left[\boldsymbol{\eta}_k \times \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} - \boldsymbol{\eta}_{k+1}\Big) + \mathbf{r}_{q_2^{k+1}} \times \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \sum_{i=2}^{N^k-2} \mathbf{r}_{q_i^k} \times \mathbf{r}_{q_{i+1}^k}\right] =$$
$$= \frac{1}{N^k} \left(\sum_{i=2}^{N^k-1} \mathbf{r}_{q_i^k} + \mathbf{r}_{q_2^k} + \mathbf{r}_{q_{N^k-1}^k}\right) \cdot \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \times \boldsymbol{\lambda}_k a^2 +$$
$$+ \frac{1}{N^k} \left\{\sum_{i=2}^{N^k-1} \mathbf{r}_{q_i^k} \cdot \Big[\boldsymbol{\lambda}_k \times \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} - \boldsymbol{\eta}_{k+1}\Big) + \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \times \Big(\boldsymbol{\eta}_k - \mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\Big)\Big] + \right.$$
$$+ \Big(\mathbf{r}_{q_2^k} + \mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\Big) \cdot \Big[\boldsymbol{\lambda}_{k+1} \times \Big(\boldsymbol{\eta}_k - \mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\Big) - \boldsymbol{\lambda}_k \times \Big(\boldsymbol{\eta}_{k+1} - \mathbf{r}_{q_2^k}\Big) + \boldsymbol{\lambda}_{k+1} \times \mathbf{r}_{q_2^{k+1}} - \boldsymbol{\lambda}_k \times \mathbf{r}_{q_2^k}\Big] +$$

$$+\left(\boldsymbol{\lambda}_k+\boldsymbol{\lambda}_{k+1}\right)\cdot\sum_{i=2}^{N^k-2}\mathbf{r}_{q_i^k}\times\mathbf{r}_{q_{i+1}^k}\Bigg\}a+$$

$$+\frac{1}{N^k}\left(\boldsymbol{\eta}_k+\boldsymbol{\eta}_{k+1}+\sum_{i=2}^{N^k-1}\mathbf{r}_{q_i^k}\right)\cdot\left[\boldsymbol{\eta}_k\times\left(\mathbf{r}_{q_2^k}-\boldsymbol{\eta}_{k+1}\right)+\mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\times\boldsymbol{\eta}_{k+1}+\sum_{i=2}^{N^k-2}\mathbf{r}_{q_i^k}\times\mathbf{r}_{q_{i+1}^k}\right]=$$

$$=\frac{1}{N^k}\left(\sum_{i=2}^{N^k-1}\mathbf{r}_{q_i^k}+\mathbf{r}_{q_2^k}+\mathbf{r}_{q_{N^k-1}^k}\right)\cdot\boldsymbol{\lambda}_{k+1}\times\boldsymbol{\lambda}_k a^2+$$

$$+\frac{1}{N^k}\left\{\left(\sum_{i=2}^{N^k-1}\mathbf{r}_{q_i^k}+\mathbf{r}_{q_2^k}+\mathbf{r}_{q_{N^k-1}^k}\right)\cdot\left[\boldsymbol{\lambda}_k\times\left(\mathbf{r}_{q_2^k}-\boldsymbol{\eta}_{k+1}\right)+\boldsymbol{\lambda}_{k+1}\times\left(\boldsymbol{\eta}_k-\mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\right)\right]+\right.$$

$$\left.+\left(\boldsymbol{\lambda}_k+\boldsymbol{\lambda}_{k+1}\right)\cdot\left(\sum_{i=2}^{N^k-2}\mathbf{r}_{q_i^k}\times\mathbf{r}_{q_{i+1}^k}+\mathbf{r}_{q_{N^k-1}^k}\times\mathbf{r}_{q_2^k}\right)\right\}a+$$

$$+\frac{1}{N^k}\left(\boldsymbol{\eta}_k+\boldsymbol{\eta}_{k+1}+\sum_{i=2}^{N^k-1}\mathbf{r}_{q_i^k}\right)\cdot\left[\boldsymbol{\eta}_k\times\left(\mathbf{r}_{q_2^k}-\boldsymbol{\eta}_{k+1}\right)+\mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\times\boldsymbol{\eta}_{k+1}+\sum_{i=2}^{N^k-2}\mathbf{r}_{q_i^k}\times\mathbf{r}_{q_{i+1}^k}\right];\qquad(11)$$

$$\mathbf{r}_q\cdot\sum_{k=1}^{K}\mathbf{r}_{q_1^k}\times\mathbf{r}_{q_1^{k+1}}=\mathbf{n}\cdot\sum_{k=1}^{K}\boldsymbol{\lambda}_k\times\boldsymbol{\lambda}_{k+1}a^3+$$

$$+\left[\mathbf{r}_c\cdot\mathbf{nn}\cdot\sum_{k=1}^{K}\boldsymbol{\lambda}_k\times\boldsymbol{\lambda}_{k+1}+\mathbf{n}\cdot\sum_{k=1}^{K}\left(\boldsymbol{\eta}_k\times\boldsymbol{\lambda}_{k+1}+\boldsymbol{\lambda}_k\times\boldsymbol{\eta}_{k+1}\right)\right]a^2+$$

$$+\left[\mathbf{r}_c\cdot\mathbf{nn}\cdot\sum_{k=1}^{K}\left(\boldsymbol{\eta}_k\times\boldsymbol{\lambda}_{k+1}+\boldsymbol{\lambda}_k\times\boldsymbol{\eta}_{k+1}\right)+\mathbf{n}\cdot\sum_{k=1}^{K}\boldsymbol{\eta}_k\times\boldsymbol{\eta}_{k+1}\right]a+\mathbf{r}_c\cdot\mathbf{nn}\cdot\sum_{k=1}^{K}\boldsymbol{\eta}_k\times\boldsymbol{\eta}_{k+1}.\qquad(12)$$

Подставляя результаты (11), (12) в (5), приводя подобные члены и учитывая определение $F(a)$, получаем

$$6F(a)=6V(a)-6V_*=Aa^3+Ba^2+Ca+D,$$

$$A=\mathbf{n}\cdot\sum_{k=1}^{K}\boldsymbol{\lambda}_k\times\boldsymbol{\lambda}_{k+1},$$

$$B=\mathbf{r}_c\cdot\mathbf{nn}\cdot\sum_{k=1}^{K}\boldsymbol{\lambda}_k\times\boldsymbol{\lambda}_{k+1}+\mathbf{n}\cdot\sum_{k=1}^{K}\left(\boldsymbol{\eta}_k\times\boldsymbol{\lambda}_{k+1}+\boldsymbol{\lambda}_k\times\boldsymbol{\eta}_{k+1}\right)+$$

$$+\sum_{k=1}^{K}\frac{1}{N^k}\left(\sum_{i=2}^{N^k-1}\mathbf{r}_{q_i^k}+\mathbf{r}_{q_2^k}+\mathbf{r}_{q_{N^k-1}^k}\right)\cdot\boldsymbol{\lambda}_{k+1}\times\boldsymbol{\lambda}_k,$$

$$C=\mathbf{r}_c\cdot\mathbf{nn}\cdot\sum_{k=1}^{K}\left(\boldsymbol{\eta}_k\times\boldsymbol{\lambda}_{k+1}+\boldsymbol{\lambda}_k\times\boldsymbol{\eta}_{k+1}\right)+\mathbf{n}\cdot\sum_{k=1}^{K}\boldsymbol{\eta}_k\times\boldsymbol{\eta}_{k+1}+$$

$$+\sum_{k=1}^{K}\frac{1}{N^k}\left\{\left(\sum_{i=2}^{N^k-1}\mathbf{r}_{q_i^k}+\mathbf{r}_{q_2^k}+\mathbf{r}_{q_{N^k-1}^k}\right)\cdot\left[\boldsymbol{\lambda}_k\times\left(\mathbf{r}_{q_2^k}-\boldsymbol{\eta}_{k+1}\right)+\boldsymbol{\lambda}_{k+1}\times\left(\boldsymbol{\eta}_k-\mathbf{r}_{q_2^{k+1}}\right)\right]+\right.\qquad(13)$$

$$\left.+\left(\boldsymbol{\lambda}_k+\boldsymbol{\lambda}_{k+1}\right)\cdot\left(\sum_{i=2}^{N^k-2}\mathbf{r}_{q_i^k}\times\mathbf{r}_{q_{i+1}^k}+\mathbf{r}_{q_{N^k-1}^k}\times\mathbf{r}_{q_2^k}\right)\right\},$$

$$
\begin{aligned}
D = {} & \mathbf{r}_c \cdot \mathbf{nn} \cdot \sum_{k=1}^{K} \boldsymbol{\eta}_k \times \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \\
& + \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{N^k} \left(\boldsymbol{\eta}_k + \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \sum_{i=2}^{N^k-1} \mathbf{r}_{q_i^k} \right) \cdot \left[\boldsymbol{\eta}_k \times \left(\mathbf{r}_{q_2^k} - \boldsymbol{\eta}_{k+1} \right) + \mathbf{r}_{q_2^{k+1}} \times \boldsymbol{\eta}_{k+1} + \sum_{i=2}^{N^k-2} \mathbf{r}_{q_i^k} \times \mathbf{r}_{q_{i+1}^k} \right] + \\
& + \sum_{l=1}^{L} \frac{1}{N^l} \sum_{i=1}^{N^l} \mathbf{r}_{f_i^l} \cdot \sum_{i=1}^{N^l} \mathbf{r}_{f_i^l} \times \mathbf{r}_{f_{i+1}^l} - 6V_*.
\end{aligned}
$$

Согласно (13) функция $F(a)$ представляется кусочным полиномом третьей степени: если изменение параметра a сопровождается изменением пересекаемого плоскостью (1) множества ребер, коэффициенты представления (13) также меняются. Объем вычислений в (13) можно сократить, применяя следующие формулы:

$$
\sum_{i=2}^{N^k-2} \mathbf{r}_{q_i^k} \times \mathbf{r}_{q_{i+1}^k} = \begin{cases} \displaystyle\sum_{i=1}^{(N^k-4)/2} \mathbf{r}_{q_{2i+1}^k} \times \mathbf{r}_{q_{2i}^k q_{2i+2}^k} + \mathbf{r}_{q_{N^k-2}^k} \times \mathbf{r}_{q_{N^k-1}^k}, & N^k = 2n, \quad n \in \mathbf{N}; \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{(N^k-3)/2} \mathbf{r}_{q_{2i+1}^k} \times \mathbf{r}_{q_{2i}^k q_{2i+2}^k}, & N^k = 2n+1, \quad n \in \mathbf{N}; \end{cases} \tag{14}
$$

$$
\sum_{i=1}^{N^l} \mathbf{r}_{f_i^l} \times \mathbf{r}_{f_{i+1}^l} = \begin{cases} \displaystyle\sum_{i=1}^{N^l/2} \mathbf{r}_{f_{2i}^l} \times \mathbf{r}_{f_{2i-1}^l f_{2i+1}^l}, & N^l = 2n, \quad n \in \mathbf{N}; \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{(N^l-1)/2} \mathbf{r}_{f_{2i}^l} \times \mathbf{r}_{f_{2i-1}^l f_{2i+1}^l} + \mathbf{r}_{f_{N^l}^l} \times \mathbf{r}_{f_1^l}, & N^l = 2n+1, \quad n \in \mathbf{N}. \end{cases} \tag{15}
$$

Выражения для $\displaystyle\sum_{k=1}^{K} \boldsymbol{\lambda}_k \times \boldsymbol{\lambda}_{k+1}$, $\displaystyle\sum_{k=1}^{K} \boldsymbol{\eta}_k \times \boldsymbol{\eta}_{k+1}$ аналогичны (15).

Предлагаемый подход ориентирован на применение высокоэффективных методов, в частности, метода Ньютона. Эффективность метода Ньютона в рассматриваемом случае основана на выборе начального приближения a_0, учитывающем расположение точки локального перегиба[7] a_p. Предлагается следующая схема выбора a_0 (см. также рис. 2):

$$
\begin{aligned}
& a_p \in (a_l, a_r) \wedge F(a_p) \neq 0 \Rightarrow \begin{cases} F''(a_r) > 0 \Rightarrow a_0 = a_p; \\ F(a_p) > 0 \Rightarrow a_0 = a_r; \\ a_0 = a_l; \end{cases} \\
& a_p \notin (a_l, a_r) \Rightarrow \begin{cases} F''\left(\dfrac{a_l + a_r}{2}\right) > 0 \Rightarrow a_0 = a_l; \\ a_0 = a_r; \end{cases} \qquad 6F''(a) = 6Aa + 2B; \quad a_p = -\frac{B}{3A}.
\end{aligned} \tag{16}
$$

Суть предлагаемой модификации представленного в разд. 2 алгоритма состоит в следующем изменении F-процедуры:

Шаг 1. Инициализация: $a = a_k$. Идентификация пересечений ребер рассматриваемой ячейки с секущей плоскостью. Условие идентификации: $\left(\mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{r}_1^i - \mathbf{r}_c\right) - a\right) \left(\mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{r}_2^i - \mathbf{r}_c\right) - a\right) < 0$, где $\mathbf{r}_1^i$ и $\mathbf{r}_2^i$ — радиусы-векторы концов i-го ребра. Формирование множества пересекаемых ребер. Определение промежуточных параметров: $\widetilde{a}_l = \mathbf{n} \cdot (\mathbf{r}_{\max}^- - \mathbf{r}_c)$ и $\widetilde{a}_r = \mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{r}_{\min}^+ - \mathbf{r}_c\right)$, где $\mathbf{r}_{\max}^-$ и $\mathbf{r}_{\min}^+$ — радиусы-векторы концов ребер из сформированного множества, доставляющие максимальное отрицательное и минимальное положительное значения выражению $\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c)$.

[7]Ввиду кусочной кубичности функции $F(a)$ любой ее гладкий участок содержит не более одной точки перегиба.

Шаг 2. Формирование структурированного (допускающего идентификацию подмножеств, участвующих в построении (13)) объединения множества концов пересекаемых ребер (см. шаг 1) с множеством остальных вершин ячейки, удовлетворяющих условию $\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) - a > 0$.

Шаг 3. Построение полиномиального представления F по формулам (13)—(15). Вычисление значений $F\,(a)$, $F\,(\widetilde{a}_l)$ и $F\,(\widetilde{a}_r)$ по первой формуле из (13). Условный переход:

$$\begin{cases} F\,(\widetilde{a}_l)\,F\,(a) < 0 \Rightarrow a_l = \widetilde{a}_l,\ a_r = a, \text{ переход к шагу 4;} \\ F\,(a)\,F\,(\widetilde{a}_r) < 0 \Rightarrow a_l = a,\ a_r = \widetilde{a}_r, \text{ переход к шагу 4;} \\ \text{возвращение значения } F\,(a)\,, \text{ передача управления основному алгоритму.} \end{cases}$$

Шаг 4[8]. Решение уравнения $F\,(a) = 0$ методом Ньютона: $a_{s+1} = a_s - \dfrac{F\,(a_s)}{F'\,(a_s)}$, $6F'\,(a) = 3Aa^2 + 2Ba + C$, с выбором начального приближения по схеме (16).

Шаг 5. Корректировка входного параметра: $a = a_*$, где a_* — полученное на шаге 4 решение (см. также рис. 2). Определение пересечений ребер сформированного на шаге 1 множества с секущей плоскостью (1) по аналогии с шагом 1 исходной F-процедуры (см. разд. 2).

Шаг 6[9]. Формирование множества вершин искомого жидкого усечения объединением результатов шага 5 и подмножества с шага 2, удовлетворяющего условию $\mathbf{n}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}_c) - a > 0$. Передача управления на шаг 4 основного алгоритма (см. разд. 2).

Заключение

Предложено решение задачи о жидком усечении полиэдральной сеточной ячейки с неплоскими гранями при кусочно-планарной реконструкции свободной поверхности в методе VOF. Алгоритм решения основан на поиске и построении накрывающего решение гладкого участка рабочей функции.

Информация об аналитической форме гладкого участка построенной кусочно-гладкой рабочей функции позволяет гарантированно и быстро получить решение методом Ньютона. Для поиска участка могут применяться как прямой перебор по вершинам ячейки (см., например, [2]), так и основы различных неявных алгоритмов, например, комбинация методов хорд и дихотомии.

Список литературы

1. *Hirt C. W., Nichols B. D.* Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // J. Comp. Phys. 1981. Vol. 39. P. 201—225.
2. *Kothe D. B., Rider W. J., Mosso S. J. et al.* Volume Tracking of Interfaces Having Surface Tension in Two and Three Dimensions. Technical Report AIAA 96-0859. Los Alamos National Laboratories, 1996.
3. *Rider W. J., Kothe D. B.* Reconstructing volume tracking // J. Comp. Phys. 1998. Vol. 141. P. 112—152.
4. *Hernández J., López J., Gómez P. et al.* A new volume of fluid method in three dimensions. Part I: Multidimensional advection method with face-matched flux polyhedra // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 2008. Vol. 58. P. 897—921.
5. *López J., Zanzi C., Gómez P. et al.* A new volume of fluid method in three dimensions. Part II: Piecewise-planar interface reconstruction with cubic-Bézier fit // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 2008. Vol. 58. P. 923—944.

[8]На данном шаге под a подразумевается обычная независимая переменная, а не инициализированная в начале процедуры.

[9]См. также шаг 2 исходной F-процедуры в разд. 2.

6. *Ivey C., Moin P.* Conservative volume of fluid advection method on unstructured grids in three dimensions. Center for Turbulence Research Annual Research Briefs, 2012. P. 179—192.
7. *Marić T., Marschall H., Bothe D.* voFoam — A geometrical volume of fluid algorithm on arbitrary unstructured meshes with local dynamic adaptive mesh refinement using OpenFOAM. http://arxiv.org/pdf/1305.3417v1.2013.
8. *Башуров В. В., Бондаренко Ю. А., Губков Е. В. и др.* Экспериментальное и численное исследование развития двумерных возмущений контактной границы, ускоряемой серией ударных волн: Препринт № 45—96. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1996.
9. *Стенин А. М., Бондаренко Ю. А., Матвеев Ю. М. и др.* Методика расчета газодинамических течений с выделением контактных границ между веществами, несовпадающих с линиями сетки // Межд. семинар "Супервычисления и математическое моделирование": Тез. докл. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1998. С. 23.
10. *Scardovelli R., Zaleski S.* Analytical relations connecting linear interfaces and volume fractions in rectangular grids // J. Comp. Phys. 2000. Vol. 164. P. 228—237.
11. *Yang X., James A. J.* Analytic relations for reconstructing piecewise linear interfaces in triangular and tetrahedral grids // Ibid. 2006. Vol. 214. P. 41—54.
12. *Schneider P. J., Eberly D. H.* Geometric Tools for Computer Graphics. London: Morgan Kaufman Publishers, 2003.
13. *López J., Hernández J.* Analytical and geometrical tools for 3D volume of fluid methods in general grids // J. Comp. Phys. 2008. Vol. 227. P. 5939—5948.
14. *Brent R. P.* An algorithm with guaranteed convergence for finding a zero of a function // Computer J. 1971. Vol. 14. P. 422—425.
15. *Мысовских И. П.* Лекции по методам вычислений. М.: Физматгиз, 1962.

Статья поступила в редакцию 18.06.13.