



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Савенков Е.Б., Иванов А.В.

Реализация метода
множеств уровня для
расчета геометрической
эволюции трещины с
применением
сеточно-характеристического
метода

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Савенков Е.Б., Иванов А.В. Реализация метода множеств уровня для расчета геометрической эволюции трещины с применением сеточно-характеристического метода // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 47. 32 с.
<http://doi.org/10.20948/prepr-2020-47>
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-47>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М. В. КЕЛДЫША

Е.Б. Савенков, А.В. Иванов

Реализация метода множеств уровня для расчета
геометрической эволюции трещины с применением
сеточно-характеристического метода

Москва, 2020

Е.Б. Савенков. А.В. Иванов, Реализация метода множеств уровня для расчета геометрической эволюции трещины с применением сеточно-характеристического метода

Аннотация. В работе рассматривается опыт реализации полного комплекса алгоритмов для расчета эволюции трещины в заданном поле скорости. Подробно описывается комплекс алгоритмов и детали реализации. Приводятся результаты тестовых расчетов.

Ключевые слова: метод множеств уровня, эволюция трещины, уравнения Гамильтона-Якоби.

E. Savenkov, A. Ivanov, Implementation of the level set method for geometric evolution of fracture using mesh-characteristic method

Abstract. In this work we describe implementation of the level set approach for simulation of fracture evolution. Comprehensive description of the corresponding algorithms is provided as well as implementation details. Results of the numerical simulations are presented.

Key words and phrases: level set method, fracture evolution, Hamilton-Jacoby equations.

Содержание

1	Введение	3
2	Основные понятия метода множеств уровня	4
3	Эволюция геометрии трещины	7
4	Инициализация и переинициализация геометрии трещины	10
5	Продолжение поля распространения фронта трещины	11
6	Расчет эволюции функций ϕ и ψ	13
7	Вычислительные алгоритмы	15
8	Примеры расчетов	17
9	Заключение	29
	Литература	31

1 Введение

В настоящее время для численного решения задач механики при наличии крупномасштабных трещин получили распространение вычислительные методы, которые не предполагают согласованность геометрии трещины и расчетной сетки. К таким методам относится, в частности, «расширенный» метод конечных элементов X-FEM (eXtended Finite Element Method), см. работы [Stolarska2001, Moës2002, Gravouil2002].

В рассматриваемом классе методов считается, что трещина описывается своей срединной поверхностью. С геометрической точки зрения расчет эволюции трещины сводится к расчету динамики двумерной поверхности с краем, вложенной в трехмерное пространство в заданном поле скорости. Одной из ключевых задач, возникающих при применении методов рассматриваемого типа, является выбор способа представления геометрии трещины и ее эволюции.

Наиболее популярным способом представления поверхности, применяемым в методе X-FEM и других методах этого класса, является неявное представление поверхности — она рассматривается как множество уровня ноль заданной в пространстве функции. Расчет эволюции поверхности сводится к расчету эволюции функции, заданной в пространстве. Уравнения, описывающие такую эволюцию, являются гиперболическими уравнениями типа Гамильтона-Якоби. Таким образом, задача сводится к достаточно хорошо разработанной. Это обуславливает огромную популярность метода множеств уровня при решении рассматриваемой задачи — равно как и множества других, связанных с описанием динамики поверхностей в пространстве, см. монографии [Osher2002, Sethian1999].

Отметим, что метод множеств уровня не является единственным способом решения описанной задачи. В частности, для этого может быть применен метод проекции ближайшей точки, см. [Ruuth2008, Macdonald2011, Macdonald2008, Macdonald2009]. Другой альтернативой является, например, подход, описанный в работе [Ventura2003]. В нем поверхность задается с помощью так называемых «векторных поверхностей уровня» («vector level sets»), представляющих собой пару функций, первая из которых является оператором проектирования точки на поверхность в смысле ближайшего расстояния, а вторая определяет ориентацию поверхности. Для построения проекторов используется альтернативный способ представления поверхности — она рассматривается как полигональная, образованная заданным множеством плоских многоугольников. По существу, полигональное представление используется для расчета эволюции трещины, ее представление в виде поверхностей уровня — для применения метода X-FEM. В ходе работы алгоритма требуется поддержка, согласованным образом, обоих способов представления: сначала

обновляется полигональное представление, которое затем используется для построения проекторов и функций уровня. Среди методов других классов отметим также метод представления поверхности как «облака точек» («point cloud surfaces», см., например, [Berger2014]).

Целью настоящей работы является описание опыта программной реализации полного комплекса алгоритмов, необходимого для моделирования динамики поверхности с краем в контексте метода X-FEM. В работе описываются комплекс соответствующих алгоритмов, их особенности и детали реализации. Приведены результаты численных расчетов, особенностью которых является использование достаточно грубых расчетных сеток. Их применение более явно, на взгляд авторов, демонстрирует особенности рассмотренных алгоритмов.

2 Основные понятия метода множеств уровня

Будем считать, что срединная поверхность трещины является гладкой односвязной поверхностью

$$\mathcal{F} : D_{\mathcal{F}} \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad D_{\mathcal{F}} \subset \mathbb{R}^2, \quad (1)$$

с краем $\partial\mathcal{F}$, который соответствует фронту трещины.

Непосредственное задание срединной поверхности трещины уравнением (1) неудобно для построения конечномерной задачи расчета эволюции трещины — при таком подходе возникают технические сложности с описанием геометрии развивающейся трещины.

Более удобным подходом, часто используемым в вычислительной практике, является задание поверхности \mathcal{F} как множества уровня некоторой функции, заданной в области Ω или ее подобласти D , содержащей \mathcal{F} и ее небольшую окрестность. Так как далее рассматривается только пространственно трехмерный случай, термины «множество уровня» и «поверхность уровня» будут рассматриваться как эквивалентные и взаимозаменяемые.

В качестве таких функций наиболее удобно использовать функции знакового расстояния, которые определяются в данном конкретном случае следующим образом.

Пусть в некоторой подобласти $D \subset \Omega$, целиком содержащей срединную поверхность \mathcal{F} трещины и ее окрестность, задана функция знакового расстояния $d_{\mathcal{F}}$ от произвольной точки $x \in D$ до поверхности $\tilde{\mathcal{F}}$:

$$\phi(\mathbf{x}) = d_{\mathcal{F}}(\mathbf{x}) = \text{sign dist}(\mathbf{x}, \mathcal{F}) = \pm \min_{\tilde{\mathbf{x}} \in \tilde{\mathcal{F}}} \|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\|,$$

так что поверхность \mathcal{F} принадлежит множеству уровня ноль функции ϕ :

$$\mathcal{F} \subset \tilde{\mathcal{F}} = \{\mathbf{x} \in D : \phi(\mathbf{x}) = 0\}.$$

Знак функции ϕ определяется в зависимости от того, с какой стороны от поверхности \mathcal{F} находится точка \mathbf{x} . Выбор знака однозначен, как только однозначно выбрана ориентация поверхности \mathcal{F} , то есть направление ее нормали \mathbf{n} . В этом случае имеем:

$$\phi(\mathbf{x}) = \text{sign dist}(\mathbf{x}, \mathcal{F}) = \text{sign}(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{n}) \min_{\tilde{\mathbf{x}} \in \mathcal{F}} \|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\|.$$

Второе множество уровня используется для задания края $\partial\mathcal{F}$ поверхности \mathcal{F} — считается, что граница области принадлежит множеству уровня ноль функции знакового расстояния $d_{\partial\mathcal{F}}$,

$$\psi(\mathbf{x}) = d_{\partial\mathcal{F}}(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\mathcal{F}.$$

Для определенности будем считать, что в точках срединной поверхности трещины функция $\psi(\mathbf{x})$ отрицательна,

$$\psi(\mathbf{x}) \leq 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\mathcal{F}.$$

Тогда срединная поверхность \mathcal{F} трещины и ее край полностью определяются как

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= \{\mathbf{x} \in D : \phi(\mathbf{x}) = 0, \psi(\mathbf{x}) \leq 0\}, \\ \partial\mathcal{F} &= \{\mathbf{x} \in D : \phi(\mathbf{x}) = 0, \psi(\mathbf{x}) = 0\}. \end{aligned}$$

При этом будем считать, что множества уровня указанных функций ортогональны, то есть

$$\nabla\phi(\mathbf{x}) \cdot \nabla\psi(\mathbf{x}) = 0.$$

Помимо прочего, это условие гарантирует невырожденность (и хорошую обусловленность) системы уравнений

$$\phi(\mathbf{x}) = 0, \quad \psi(\mathbf{x}) = 0,$$

для определения фронта трещины, а также позволяет, при необходимости, удобным образом ввести ортогональную криволинейную систему координат в окрестности фронта (края) трещины.

Пример трещины и соответствующих множеств уровня показан на рисунке 1.

Задание поверхности трещины в виде неявной функции знакового расстояния позволяет легко вычислять геометрические характеристики поверхности — например, поле ее нормалей, касательные векторы и так далее —

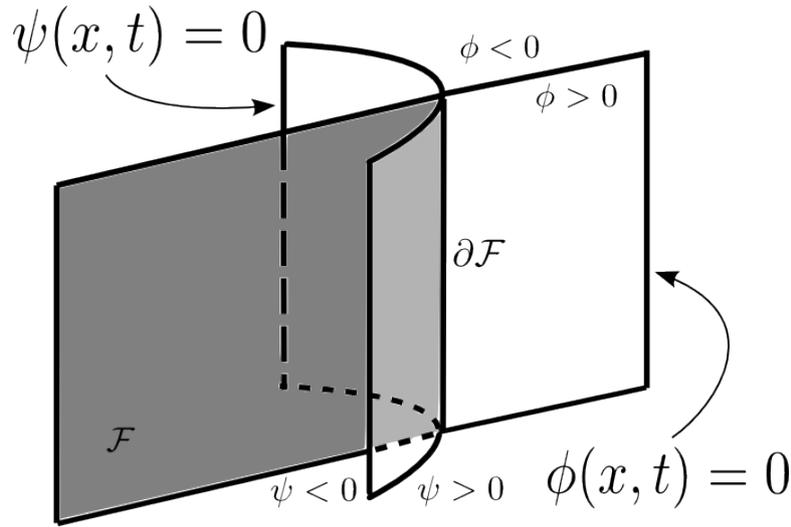


Рис. 1. Модель геометрии трещины: множества уровня функций знакового расстояния ϕ и ψ .

как в непрерывном случае, так и в разностном. Из определения функций, описывающих поверхность трещины и ее границу, следует, что

$$\mathbf{n}_\phi \equiv \mathbf{n}_F = \frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|}$$

— единичная нормаль к поверхности трещины (здесь и ниже $\|\cdot\|$ — евклидова норма в \mathbb{R}^3);

$$\mathbf{n}_\psi \equiv \mathbf{n}_{\partial F} = \frac{\nabla\psi}{\|\nabla\psi\|}$$

— единичная нормаль к фронту трещины (касающаяся поверхности трещины) в точках фронта ∂F трещины;

$$\mathbf{t} = \mathbf{n}_F \times \mathbf{n}_{\partial F}$$

— единичная касательная к фронту трещины. Эти три вектора образуют ортогональный базис и определены всюду в области определения функций ϕ и ψ , а не только на фронте края поверхности.

В случае, если указанные функции — функции знакового расстояния, имеем

$$\|\nabla\phi\| = \|\nabla\psi\| = 1.$$

Такой способ описания геометрии трещины выглядит усложненным, однако на практике он удобен и численно эффективен. А именно:

- В конечномерной задаче ϕ и ψ задаются своими значениями в узлах расчетной сетки и далее интерполируются во все точки области, например, с использованием конечно-элементных базисных функций. Поверх-

ность трещины легко восстанавливается по узловым значениям, причем неважно, проходит ли она через грани, ребра или узлы сетки.

- При развитии трещины нет необходимости каждый раз перестраивать функции знакового расстояния во всей области их определения — достаточно доопределить их в небольшом числе «новых» узлов в окрестности края $\partial\mathcal{F}$ поверхности \mathcal{F} .
- В начальный момент времени геометрия трещины обычно очень простая, поэтому сеточные функции знакового расстояния инициализируются по аналитически заданным зависимостям ϕ и ψ .

При этом после инициализации сеточных функций знакового расстояния работа ведется только с ними.

3 Эволюция геометрии трещины

Для удобства изложения в дальнейшем будем отождествлять термины «поверхность \mathcal{F} » и «трещина \mathcal{F} », а также «край $\partial\mathcal{F}$ поверхности» и «фронт $\partial\mathcal{F}$ трещины».

В любой фиксированный момент времени $t \geq 0$ функции ϕ и ψ полностью описывают геометрию трещины. В случае если геометрия трещины меняется со временем (трещина «растет»), они зависят от времени как от параметра:

$$\phi = \phi(\mathbf{x}, t), \quad \psi = \psi(\mathbf{x}, t).$$

Если срединная поверхность трещины \mathcal{F} априорно известна (например, срединная поверхность трещины в любой момент времени $t \geq 0$ является частью плоскости), то от времени зависит лишь функция ψ , определяющая положение ее фронта $\partial\mathcal{F}$:

$$\phi = \phi(\mathbf{x}), \quad \psi = \psi(\mathbf{x}, t).$$

В дальнейшем будем считать, что эволюция фронта $\partial\mathcal{F}$ трещины в момент времени $t > 0$ полностью определяется заданием векторного поля «скорости» $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\tilde{\mathbf{x}})$ в каждой точке $\tilde{\mathbf{x}} \in \partial\mathcal{F}$. Отметим, что поле \mathbf{v} — это не скорость материальных точек; поле \mathbf{v} на фронте трещины осуществляет геометрическое поточечное отображение края поверхности в момент времени t на край поверхности в момент времени $t + dt$.

Вектор \mathbf{v} может быть разложен по векторам локального ортогонального базиса в точке фронта:

$$\mathbf{v} = v_\phi \mathbf{n}_\phi + v_\psi \mathbf{n}_\psi + v_t \mathbf{t}.$$

Далее будем считать, что направление скорости \mathbf{v} лежит в плоскости, ортогональной фронту, то есть

$$v_t = 0, \quad \mathbf{v} = v_\phi \mathbf{n}_\phi + v_\psi \mathbf{n}_\psi.$$

Эволюция геометрии трещины полностью определяется эволюцией функций $\phi(\mathbf{x}, t)$, $\psi(\mathbf{x}, t)$ во времени. Существует несколько подходов для описания такой эволюции.

Сначала рассмотрим эволюцию двумерной поверхности, вложенной в трехмерное пространство. Будем считать, что в момент времени t положение фронта определяется линией уровня t функции $\psi(\mathbf{x})$:

$$\partial\mathcal{F}(t) : \psi(\mathbf{x}) = t,$$

которая называется функцией «времени прибытия». Начальное положение фронта соответствует линии уровня $t = 0$ и считается заданным.

Скорость распространения фронта \mathbf{v} считаем заданной во всей пространственной области. Тогда функция $\phi(\mathbf{x})$ является решением краевой задачи для уравнения эйконала:

$$\|\nabla\psi\|\mathbf{v} = 0; \quad \psi(\mathbf{x}) = 1, \quad \mathbf{x} \in \Gamma,$$

где Γ — начальное положение фронта. Для численного решения этого уравнения разработаны эффективные методы (Fast Marching Methods, FMM), пригодные для использования как структурированных, так и не структурированных сеток, см. монографии [Osher2002, Sethian1999].

Альтернативный подход заключается в использовании эволюционного уравнения для описания динамики фронта трещины. Пусть в момент времени t фронт описывается поверхностью уровня ноль функции $\psi(t, \mathbf{x})$. Тогда для произвольной точки $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$ фронта в момент времени t справедливо соотношение:

$$\psi(t, \mathbf{x}(t)) = 0.$$

Дифференцируя это уравнение по времени, получим:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \nabla\psi(\mathbf{x}(t), t) \cdot \frac{\partial\mathbf{x}}{\partial t} = 0.$$

Считая, что скорость распространения фронта \mathbf{v} всегда направлена по нормали \mathbf{n}_ψ к фронту, $\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \|\mathbf{v}\|\mathbf{n}_\psi = v\mathbf{n}_\psi$, имеем:

$$\frac{\partial\mathbf{x}}{\partial t} \cdot \mathbf{n}_\psi = \|\mathbf{v}\|.$$

Отсюда эволюция функции ψ (и фронта трещины, как ее множества уровня ноль) описывается задачей Коши для уравнением типа Гамильтона-Якоби вида:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \|\mathbf{v}\| \cdot \|\nabla \psi\| = 0; \quad \psi(t = 0, \mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}).$$

Детали использования последнего, «нестационарного», второго подхода для эволюции трещины рассмотрены в работе [Gravouil2002].

Оба метода позволяют эффективно описывать эволюцию фронта (даже при наличии топологических превращений) и допускают эффективную численную реализацию. Основное отличие методов состоит в следующем: метод с использованием уравнения эйконала применим только в случае, когда скорость распространения фронта положительна, второй же подход можно использовать при произвольной скорости фронта.

При использовании для описания геометрии трещины множеств уровня функций ϕ и ψ могут применяться оба подхода. При этом рассматривается эволюция обеих функций (для описания срединной поверхности трещины и ее края).

Пусть в текущий момент времени t функции $\phi(\mathbf{x}, t) = 0$, $\psi(\mathbf{x}, t) = 0$ заданы, являются функциями знакового расстояния и ортогональны в указанном выше смысле. Алгоритм расчета эволюции фронта трещины на одном временном шаге $[t, t + \Delta t]$ состоит из следующих этапов.

1. Расчет поля \mathbf{v} распространения трещины в точках фронта $\partial\mathcal{F}$. На практике оно определяется используемым в механической модели эволюции трещины критерием разрушения.
2. Построение продолжения поля направлений \mathbf{v} в пространственную окрестность фронта трещины. Построенное продолжение должно гарантировать, что геометрия уже «существующей» части срединной поверхности трещины не поменяется на следующем шаге. Продолжение поля строится таким образом, что при интегрировании по времени уравнений типа Гамильтона-Якоби до установления фронт трещины сдвинется на заданное расстояние.
3. Расчет «новых» полей ϕ и ψ в момент времени $t + \Delta t$ с учетом заданного поля направлений \mathbf{v} с помощью уравнений Гамильтона-Якоби или уравнений эйконала.
4. При необходимости коррекция результата — функции ϕ и ψ должны остаться ортогональными в указанном выше смысле функциями знакового расстояния и на новом временном слое. Соответствующие процедуры называются «ортогонализацией» и «переинициализацией».

5. Определение срединной поверхности и фронта трещины в момент времени $t = t + \Delta t$ как решения уравнений

$$\phi(\mathbf{x}, t + \Delta t) = 0, \quad \psi(\mathbf{x}, t + \Delta t) = 0.$$

Технические детали реализации алгоритма описаны, например, в [Shi2010], [Stolarska2001]. Далее они рассматриваются более подробно.

4 Инициализация и переинициализация геометрии трещины

В начальный момент времени множества уровня функций ϕ и ψ будем считать заданными явно (аналитически). В случае если начальная формы трещины является простой (окружность, эллипс, многоугольник и так далее), легко указать требуемые функции ϕ и ψ , такие, что они описывают геометрию трещины, но не являются функциями знакового расстояния.

Например, для плоской эллиптической трещины с полуосями a и b , расположенной ортогонально оси Oz в плоскости Oxy имеем:

$$\phi(\mathbf{x}, t = 0) = z, \quad \psi(\mathbf{x}, t = 0) = \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} - 1^2.$$

В этом случае ψ не является функцией знакового расстояния, так как не удовлетворят условия нормировки

$$\|\nabla\psi\| = 1. \tag{2}$$

Для построения на основе заданной ψ функции, удовлетворяющей этому условию, воспользуемся методом, описанным в [Peng1999]. В соответствии с ним скорректированная функция ψ (которая будет являться функцией знакового расстояния) строится как стационарное решение следующего уравнения типа Гамильтона-Якоби:

$$\frac{\partial\psi}{\partial\tau} + \text{sign}(\psi) (\|\psi\| - 1) = 0, \tag{3}$$

и начальным условием в виде «ненормализованной» функции знакового расстояния. Искомая «нормализованная» функция ψ будет являться стационарным решением последнего уравнения при $\tau \rightarrow \infty$, которое в дискретном случае определяется методом установления.

В последнем уравнении τ — некоторый временноподобный параметр («псевдовремя»). Он никак не связан с реальным физическим временем и используется как итерационный параметр метода установления для отыскания стационарного решения уравнения (3). При этом для стационарного решения

уравнения (3) условие (2) выполняется автоматически. Данный метод является эффективным, на практике требует расчета всего нескольких временных слоев до установления, не изменяет множество уровня ноль начального условия и имеет алгоритмическую сложность $O(N)$, где N — число неизвестных (параметров, задающих функцию ψ в узлах расчетной сетки), см. [Peng1999].

В случае, когда и ϕ не является функцией знакового расстояния, она корректируется аналогичным образом.

Указанная процедура является необходимой процедурой инициализации функций ϕ и ψ и проводится перед началом расчета. Теоретически, если обе функции заданы как функции знакового расстояния, то они останутся таковыми на протяжении всего расчета. Однако на практике это свойство не выполняется за счет накопления ошибок аппроксимации и округления. По этой причине для обеспечения корректной работы всего алгоритма в целом процедура инициализации может проводиться на каждом шаге работы алгоритма (эволюции трещины во времени). В этом случае указанная процедура называется переинициализацией [Chopp1993].

Алгоритм пересчета функций ϕ и ψ на каждом этапе роста трещины также основан на решении уравнения типа Гамильтона-Якоби. Напомним, что для произвольной функции ψ это уравнение можно получить следующим образом. Пусть $\mathbf{x}(s, t)$ — траектория точки, все время находящейся на множестве уровня ноль функции ψ , то есть

$$\psi(\mathbf{x}(s, t), t) = 0,$$

где s — пространственная координата на фронте $\partial\mathcal{F}$ («лагранжева» координата точки $\mathbf{x} \in \mathcal{F}$). Следовательно, производная по времени в любой точке фронта трещины равна нулю, откуда

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\psi = 0, \quad \mathbf{v} = \frac{\partial\mathbf{x}(s, t)}{\partial t}. \quad (4)$$

Как правило, скорость движения фронта считается заданной по нормали к нулевой поверхности уровня, поэтому из (4) следует:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + v_\psi \|\nabla\psi\| = 0. \quad (5)$$

5 Продолжение поля распространения фронта трещины

Важной составляющей при применении метода множеств уровня для описания эволюции геометрии трещины является алгоритм продолжения поля

«скорости» роста трещины с ее фронта (линии в пространстве) на всю область определения функций ϕ и ψ .

Напомним, что изначально скорость фронта трещины определена только непосредственно на самом фронте, то есть кривой, образуемой пересечением поверхностей $\phi = 0$ и $\psi = 0$. Такое допущение соответствует специфике задачи о росте трещины. Для того чтобы (пере)определить множества уровня на очередном шаге роста трещины, скорость должна быть известна во всей области определения функций ϕ и ψ . Далее поле скоростей в пространстве должно быть построено так, чтобы поверхность уровня $\phi = 0$ не изменялась при $\psi < 0$, то есть чтобы поверхность уже существующей трещины не изменялась бы в процессе пересчета функций ϕ и ψ . Процесс продолжения поля скорости и переопределения множеств уровня состоит из трех шагов:

1. построение предварительного продолжения поля скорости на фронте трещины в пространственную область определения функций ϕ и ψ ;
2. уточнение компоненты скорости v_ϕ ;
3. расчет эволюции функций ϕ и ψ стандартными методами с рассчитанным на предыдущих этапах полем скорости.

Процедуру продолжения поля скорости удобно рассмотреть сразу в дискретном случае. Будем использовать подход, предложенный в работах [Chen1997, Hou1997]. Чтобы продолжить поле скоростей v_ϕ с фронта трещины в трехмерную расчетную область, сначала определим это поле в узлах ячеек сетки, которые содержат внутри себя фронт трещины. Для этого «снесем» поле скорости с фронта трещины в соответствующий узел. Другими словами, поле скорости в узле сетки, инцидентном ячейке сетки, через который проходит фронт трещины, считается равным значению поля скорости в точке проекции узла сетки на фронт трещины.

После этого значения скорости продолжаются на всю область определения функций ϕ и ψ таким образом, чтобы проекция скорости на нормаль к поверхностям уровней ϕ и ψ оставалась постоянной, то есть

$$\nabla\phi \cdot \nabla v_\phi = 0, \quad \nabla\psi \cdot \nabla v_\phi = 0. \quad (6)$$

Для этого используется подход, предложенный в [Peng1999]. В соответствии с ним продолжение определяется как стационарное решение двух уравнений Гамильтона-Якоби:

$$\frac{\partial v_\phi}{\partial \tau} + \text{sign}(\phi) \frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|} \cdot \nabla v_\phi = 0, \quad (7)$$

$$\frac{\partial v_\phi}{\partial \tau} + \text{sign}(\psi) \frac{\nabla\psi}{\|\nabla\psi\|} \cdot \nabla v_\phi = 0. \quad (8)$$

Стационарное решение этой системы будет являться искомым продолжением поля скоростей роста трещины во все пространство. Геометрическая интерпретация вышесказанного следующая: каждая компонента поля v_ϕ продолжается вдоль линий, ортогональных срединной поверхности трещины \mathcal{F} . Действительно, стационарные решения уравнений (7) и (8) удовлетворяют условиям:

$$\mathbf{n}_\phi \cdot \nabla v_\psi = 0, \quad \mathbf{n}_\psi \cdot \nabla v_\phi = 0, \quad (9)$$

где \mathbf{n}_ϕ и \mathbf{n}_ψ — нормали к множествам уровня ϕ и ψ соответственно.

После того как продолжение поля скорости v_ϕ во все пространство построено, оно модифицируется следующим образом:

$$\bar{v}_\phi = H(\psi) \frac{v_\phi}{v_\psi \Delta t}, \quad \text{при } v_\psi > \epsilon \|\mathbf{v}\|, \quad (10)$$

где H — функция Хевисайда, ϵ — заданный малый параметр. Данная модификация нужна, чтобы построенное поле скоростей удовлетворяло следующим условиям:

1. Так как

$$\bar{v}_\phi = 0 \quad \text{для } \psi < 0,$$

то ортогональная боковой поверхности трещины компонента скорости \mathbf{v} равна нулю.

2. Компонента скорости \bar{v}_ϕ возрастает линейно от фронта трещины до той поверхности уровня функции ψ , на которой фронт трещины приходится на конец очередного шага пересчета геометрии трещины. Это гарантирует, что трещина «продвинется» на заданное расстояние и не более того.

Далее модифицированное поле скоростей используется для обновления множеств уровня.

В случае $v_\psi < \epsilon \|\mathbf{v}\|$ данный метод не применим, так как в этом случае главной ненулевой компонентой является v_ϕ , которая отвечает за образование «излома» у фронта трещины. Однако такая ситуация невозможна, если допустить, что фронт трещины в любой момент времени является гладкой кривой.

6 Расчет эволюции функций ϕ и ψ

Алгоритм пересчета функций, задающих геометрию трещины, состоит из следующих шагов:

1. Ортогональное продолжение срединной поверхности трещины в область пространства $\psi \geq 0$ (см. уравнение (11)). При этом срединная поверхность задана множеством уровня ноль функции ϕ .
2. Продолжение полей v_ϕ и v_ψ во всю область как решений уравнений (7) и (8).
3. Коррекция вектора v_ϕ согласно (10) с целью сохранения уже образовавшейся поверхности трещины неизменной.
4. Обновление и переинициализация функции ϕ путем определения стационарного решения уравнений:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \bar{v}_\phi \|\nabla \phi\| = 0 \text{ (обновление),}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \text{sign}(\phi)(\|\nabla \phi\| - 1) = 0 \text{ (переинициализация).}$$

5. Обновление функции ψ путем решения уравнения

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} + v_\psi \|\nabla \psi\| = 0.$$

6. Ортогонализация и переинициализация функции ψ путем определения стационарного решения уравнений:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \text{sign}(\phi) \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \cdot \nabla \psi = 0 \text{ (ортогонализация),}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \text{sign}(\psi)(\|\nabla \psi\| - 1) = 0 \text{ (переинициализация).}$$

Шаги 1-3 уже обсуждались выше. Обновление функции уровня ϕ на шаге 4 проводится с использованием способа, основанного на решении уравнения (5). Непосредственно после шага 4 проводится нормировка с использованием аналога уравнения (3).

На шагах 5 и 6 производится пересчет функции ψ . Перед переинициализацией ψ она модифицируется так, что ее поверхности уровня становятся ортогональными поверхностям уровня функции ϕ , то есть удовлетворяют условию:

$$\nabla \phi \cdot \nabla \psi = 0.$$

Для такой модификации используется процедура, аналогичная использованной для построения продолжения. Как было указано ранее, с помощью уравнения (7) переменные с фронта продолжают во всю область вдоль ортогональных кривых. Аналогично, данная процедура используется и для ортогонализации множеств поверхностей уровня функций.

Ортогонализация выполняется на шаге 6 путем определения стационарного решения уравнения

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \text{sign}(\phi) \frac{\nabla \phi}{\|\nabla \phi\|} \cdot \nabla \psi = 0, \quad (11)$$

которое имеет тот же вид, что и уравнение (7).

Важно отметить следующие свойства описанного алгоритма:

1. Трещина не изменятся в процессе обновления. Таким образом, функция ϕ строится так, чтобы поле скоростей на «предыдущей» поверхности трещины (то есть для $\psi < 0$) равнялось нулю. Это условие обеспечивается шагом 3 алгоритма.
2. Продолжение каждого скалярного поля скоростей на шаге 2 выполняется в несколько этапов. Сначала строится продолжение одномерного скалярного поля, заданного на фронте трещины в узлы элементов, пересекаемых трещиной [Нои1997]. Далее полученные величины продолжают в ортогональном к ψ направлении внутрь расчетной области. Наконец, полученные на последнем этапе величины продолжают в ортогональном к ϕ направлении.

7 Вычислительные алгоритмы

Были рассмотрены несколько численных методов для решения описанных выше уравнений. Традиционно используемые методы (метод Петрова-Галеркина, метод направленных разностей [Barth1998]) оказались громоздкими и весьма чувствительными к способу задания граничных условий. В итоге был применен сеточно-характеристический метод, обеспечивающий:

- алгоритмическую простоту и легкость реализации;
- различные прозрачные варианты задания граничных условий;
- точный контроль и неизменность положения поверхности трещины и фронта трещины.

Функции ϕ и ψ задаются в узлах неравномерной тетраэдрической сетки, на которой происходит решение уравнений упругости, фильтрации и так далее. При решении уравнения вида

$$\frac{\partial}{\partial t} f + \mathbf{v} \cdot \nabla f = g$$

на временном шаге $\Delta \tau$ производятся следующие действия (считается, что поле скоростей \mathbf{v} — известно):

1. определение, для каждого узла с координатами \mathbf{x}_i , скорости

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{v}(\mathbf{x}_i);$$

2. вычисление значения

$$\tilde{f}_i = f(\mathbf{x}_i - \Delta_\tau \mathbf{v}_i);$$

3. расчет нового значения \hat{f}_i в узле \mathbf{x}_i рассчитываем как

$$\hat{f}_i = \tilde{f}_i + g_i \Delta_\tau,$$

где g_i — значение источника в узле \mathbf{x}_i ;

4. экстраполяция, на основе новых значений \hat{f}_i , значений f в тех граничных узлах области, для которых точки $\mathbf{x}_i - \Delta_\tau \mathbf{v}_i$ оказались за пределами расчетной области.

Для вычисления \tilde{f}_i используется линейная интерполяция f внутри тетраэдра.

В ряде случаев, как видно из предыдущих разделов, в пространственные операторы уравнений входит функция sign . В этом случае в программной реализации использовалась следующая сглаженная ее аппроксимация:

$$\text{sign } f \approx \frac{f}{\sqrt{f^2 + (\Delta_f \nabla f)^2}},$$

где Δ_f — характерный параметр «размазывания» скачка функции sign .

Граничные условия для точек, у которых характеристики выходят за пределы счетной области, не требуются.

В расчетах использовалась сетка из тетраэдров. Для аппроксимации функций ϕ и ψ использовались кусочно-линейные базисные функции. В этом случае их градиент является разрывным на границах между тетраэдрами сетки. Для восстановления градиентов в узлах сетки и значений в узловых точках, для которых ставятся граничные условия типа «втекания» (характеристики которых входят в счетную область), используется метод наименьших квадратов, см. [Zhang2005a]. Значение функции в окрестностях узла аппроксимируется многочленом (были реализованы линейный и квадратичный варианты, в дальнейших расчетах приведены результаты для линейного варианта), коэффициенты которого восстанавливаются методом наименьших квадратов на основе известных значений функции в соседних узлах. При вычислении градиента многочлен дифференцируется в узле. При вычислении граничных условий берется непосредственно значение многочлена в узле, при этом коэффициенты многочлена вычисляются на основе значений функции в конце шага временного интегрирования для внутренних узлов области.

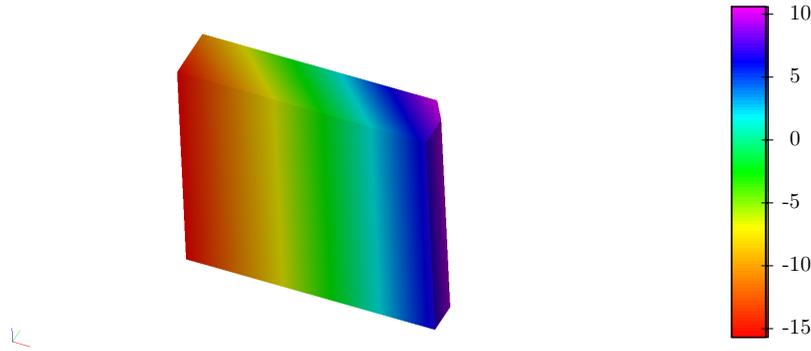


Рис. 2. Внешняя поверхность области сетки, вмещающей плоскую трещину. Цветом показано начальное распределение функции ψ .

8 Примеры расчетов

Описанные в предыдущем разделе методы были реализованы программно в виде расчетного модуля на языке C++. Как уже отмечалось ранее, использовались неструктурированные расчетные сетки из тетраэдров.

Метод был протестирован на двух постановках — с плоской трещиной (рис. 2) и с трещиной, образованной поверхностью гиперboloида (рис. 3).

Результаты для ортогонализации представлены на рис. 4, 5, 6, 7. Из рисунка 6 видно, что для плоской трещины ортогонализация проходит практически идеально, и после 8 единиц псевдовремени τ ошибка составляет порядка ошибки округления.

Для неплоской трещины через три единицы псевдовремени τ ошибка выходит на стационар, на уровень $\sim 2\%$, при этом максимальные отклонения довольно значительны. Однако область, где ошибка велика, расположена вблизи границы расчетной области вдали от фронта трещины, см. рис. 7.

Результаты переинициализации полей ϕ и ψ представлены на рис. 8, 9, 10, 11, 12. Из рисунка 10 видно, что для плоской трещины при переинициализации поля ϕ через четыре единицы псевдовремени τ ошибка становится менее 0.1% и выходит на стационар. Для неплоской трещины ситуация хуже — ошибка составляет порядка 3% , максимальные отклонения $|\nabla\phi|$ достигают 50% и даже более. Тем не менее проблемные участки расположены главным образом на границе области вдали от поверхности и фронта трещины, см. рис. 12.

Результаты переинициализации поля ψ выглядят значительно хуже — ошибка через 10 единиц псевдовремени τ составляет $\sim 5\%$ для плоской трещины и $\sim 20\%$ для неплоской трещины, максимальные отклонения $|\nabla\psi|$ достигают 30% для плоской трещины и $\sim 100\%$ для неплоской трещины. Время установления также оказывается в разы выше, чем в случае переинициали-

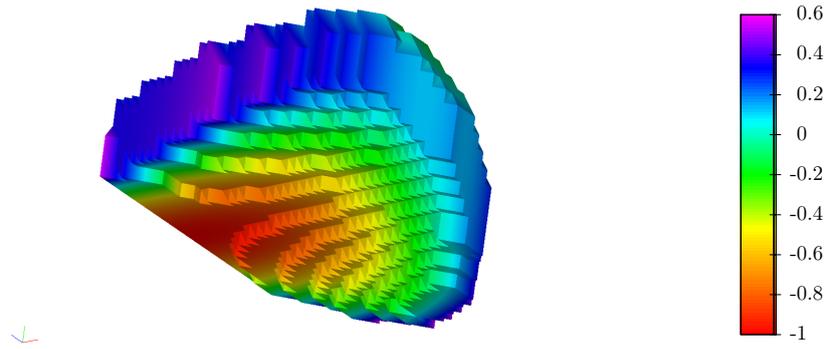


Рис. 3. Внешняя поверхность тетраэдрической сетки, вмещающей трещину, образованную поверхностью гиперboloида. Цветом показано начальное распределение функции ψ .

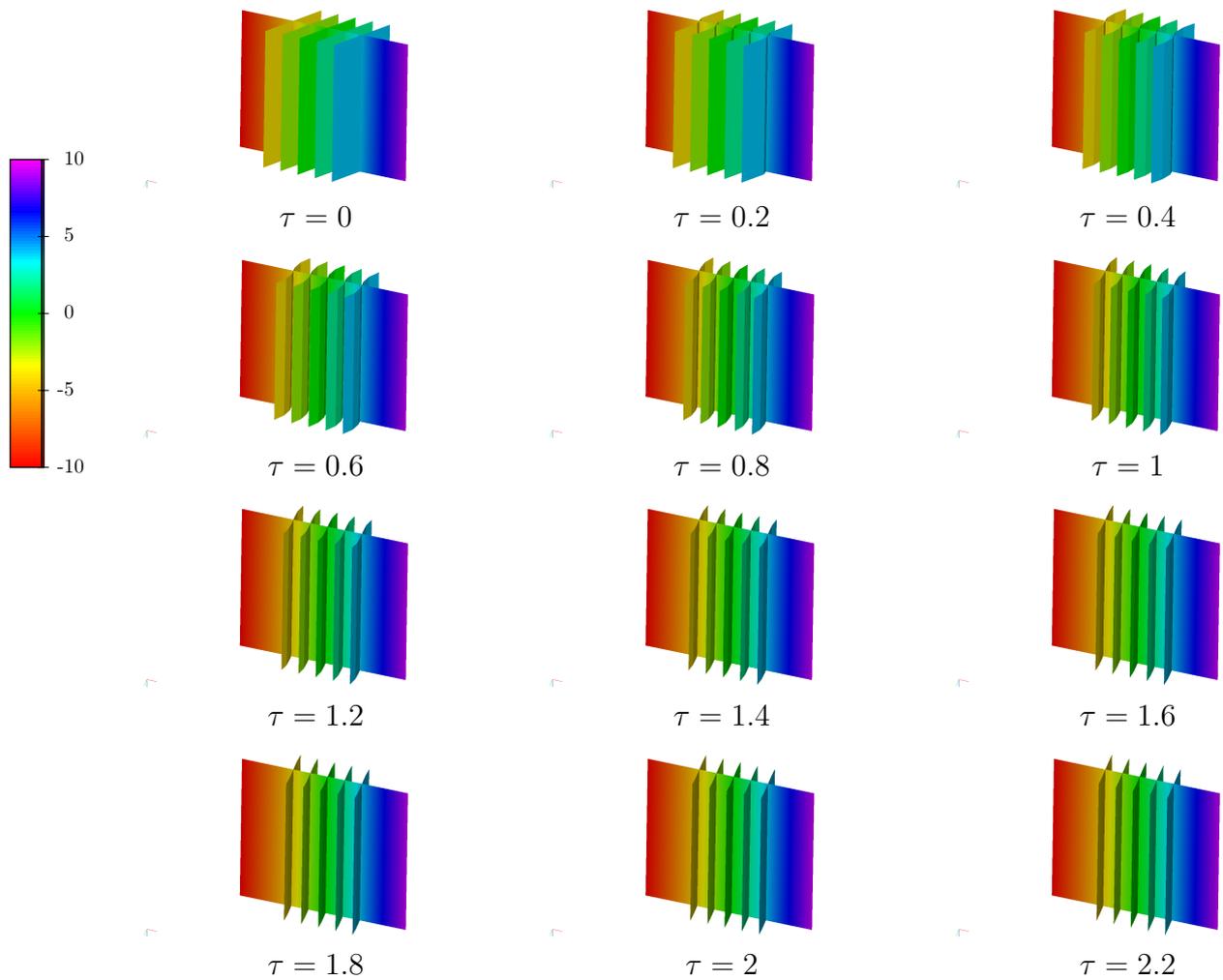


Рис. 4. Изменение поля ψ при ортогонализации плоской трещины. Показаны поверхности уровня $\psi = 0, \psi = -4, -2, 0, 2, 4$.

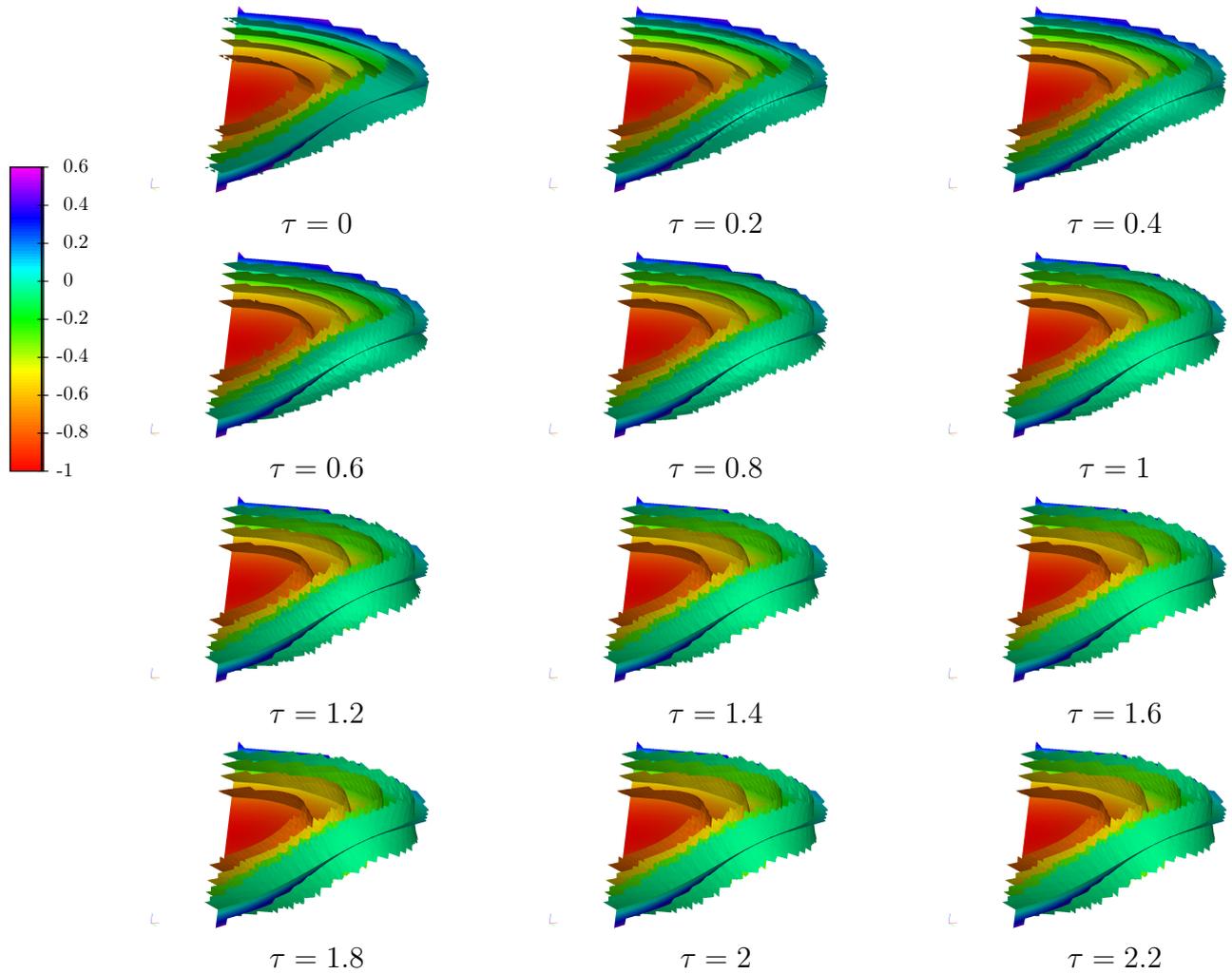


Рис. 5. Изменение поля ψ при ортогонализации неплоской трещины. Показаны поверхности уровня $\phi = 0, \psi = -3/4, -1/2, -1/4, 0$.

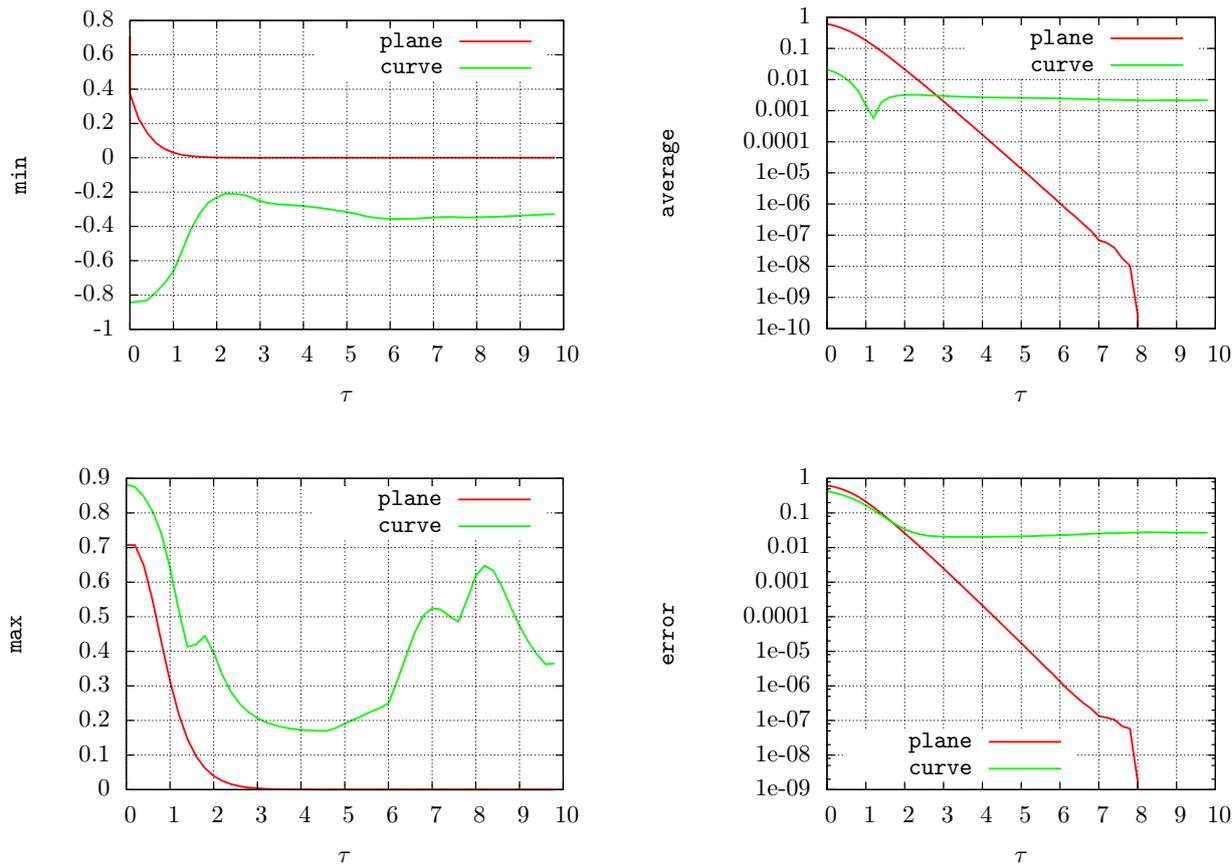


Рис. 6. Поведение минимального, максимального, среднего значения и среднеквадратичного отклонения по области выражения $\nabla\phi \cdot \nabla\psi$ в процессе ортогонализации для плоской (plane) и изогнутой (curve) трещин.

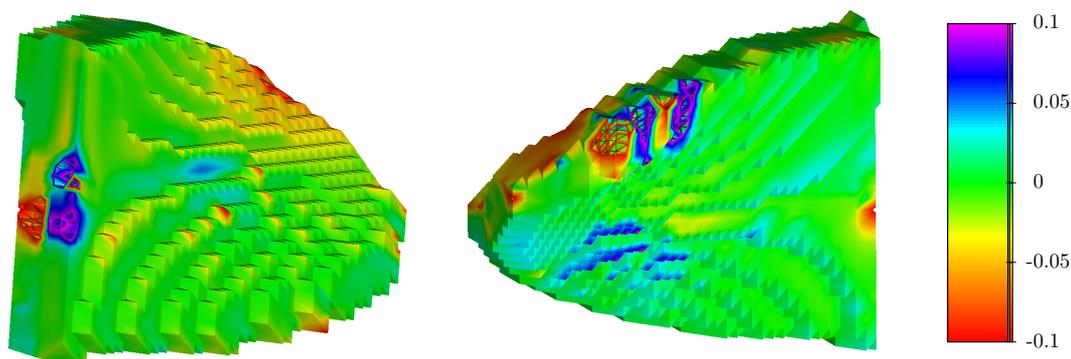


Рис. 7. Значение выражения $\nabla\phi \cdot \nabla\psi$ после ортогонализации в течение 10 единиц псевдовремени τ с шагом $\Delta\tau = 0.2$. «Проблемные» участки расположены на границах области.

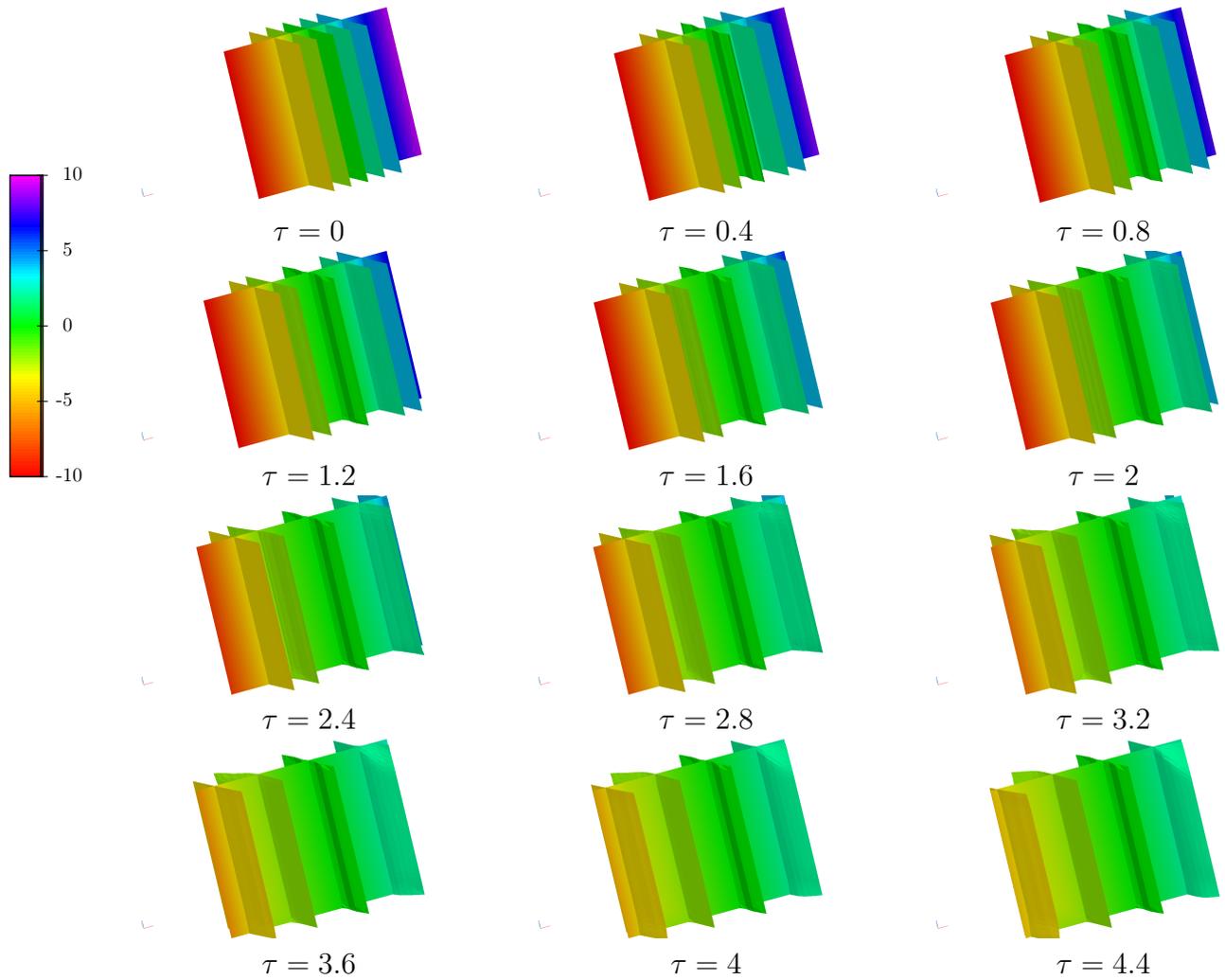


Рис. 8. Изменение поля ψ при переинициализации плоской трещины. Показаны поверхности уровня $\phi = 0$, $\psi = -4, -2, 0, 2, 4$.

зация поля ϕ .

Эти результаты вполне объяснимы — при переинициализации происходит перенос ψ вдоль большей оси области, при этом существенную роль играет экстраполяция поля ψ на границах, что неизбежно приводит к ошибкам. Для устранения этой проблемы необходимо ограничиваться переинициализацией поля ψ лишь в небольшой окрестности фронта трещины — то есть в той области, где важны абсолютные значения ψ для дальнейшего расчета поля скоростей и фильтрации (вдали от фронта трещины значение имеет лишь знак ψ). В этом случае влияние граничных условий будет не столь велико, и ошибки должны быть сопоставимы с ошибками при переинициализации поля ϕ .

Результаты для совместной ортогонализации и переинициализации полей ϕ , ψ представлены на рис. 13, 14, 15, 16. При этом на каждом шаге производится одна итерация (по псевдовремени τ) ортогонализации, затем итерации

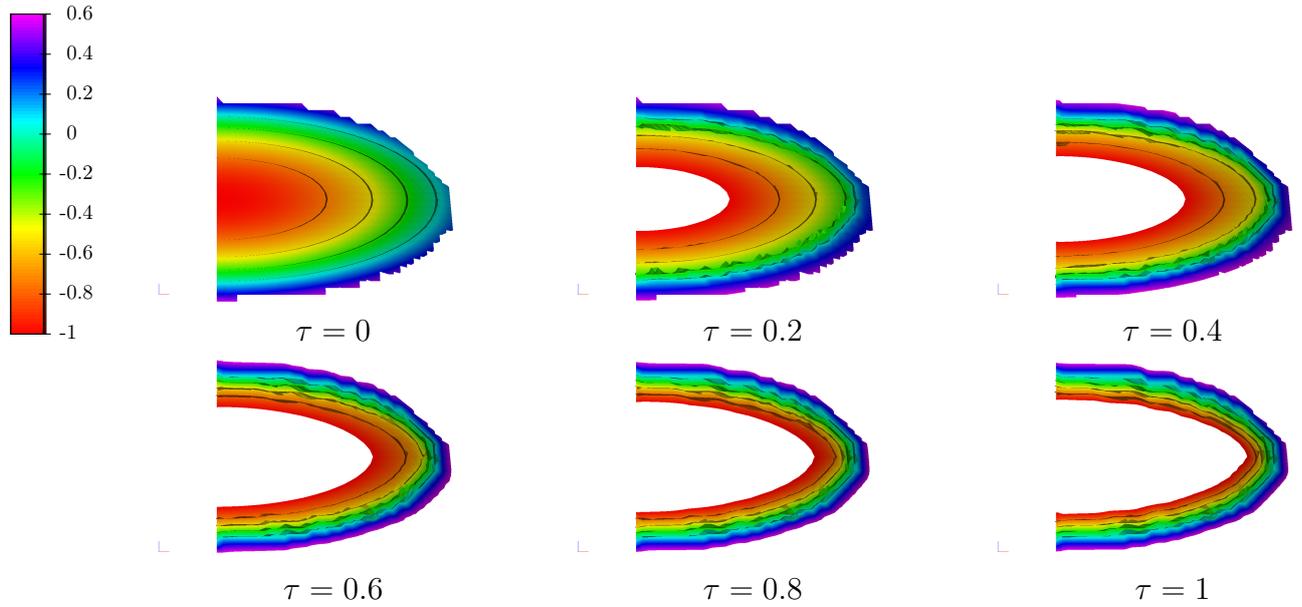


Рис. 9. Изменение поля ψ при переинициализации неплоской трещины. Показаны поверхности уровня $\phi = 0$, $\psi = -3/4, -1/2, -1/4, 0$.

переинициализации полей ϕ и ψ .

В случае плоской трещины решение устанавливается для ортогонализации через 2 единицы псевдовремени τ (рис. 14), для переинициализации поля ϕ — через 4 единицы псевдовремени τ (рис. 15), для переинициализации поля ψ — через 7 единиц псевдовремени τ (рис. 16). Ошибка ортогонализации составляет $\sim 8\%$, максимальное отклонение — 30% (в положительную сторону), ошибка переинициализации поля ϕ составляет $\sim 6 \cdot 10^{-4}$, ошибка переинициализации поля ψ составляет $\sim 6\%$, максимальное отклонение $\sim 30\%$.

В случае неплоской трещины решение устанавливается: для ортогонализации — через 3 единицы псевдовремени τ (рис. 14), для переинициализации поля ϕ — через 2 единицы псевдовремени τ (рис. 15), для переинициализации поля ψ — через 4 единиц псевдовремени τ (рис. 16). Ошибка ортогонализации составляет $\sim 15\%$, максимальное отклонение — $-80/+100\%$, ошибка переинициализации поля ϕ составляет $\sim 3\%$, максимальное отклонение — $-30/+40 - \div 60\%$, ошибка переинициализации поля ψ составляет $\sim 15\%$, максимальное отклонение — $-100/+50\%$.

Эти результаты, видимо, связаны с проблемами переинициализации поля ψ , обусловленными переносом ψ вдоль большей оси области и ошибками экстраполяции поля ψ на границах. В результате ухудшаются как результаты для ортогонализации, так и (косвенно) результаты переинициализации поля ϕ . Скорее всего, эта проблема может быть решена переинициализацией поля ψ лишь в небольшой окрестности фронта трещины.

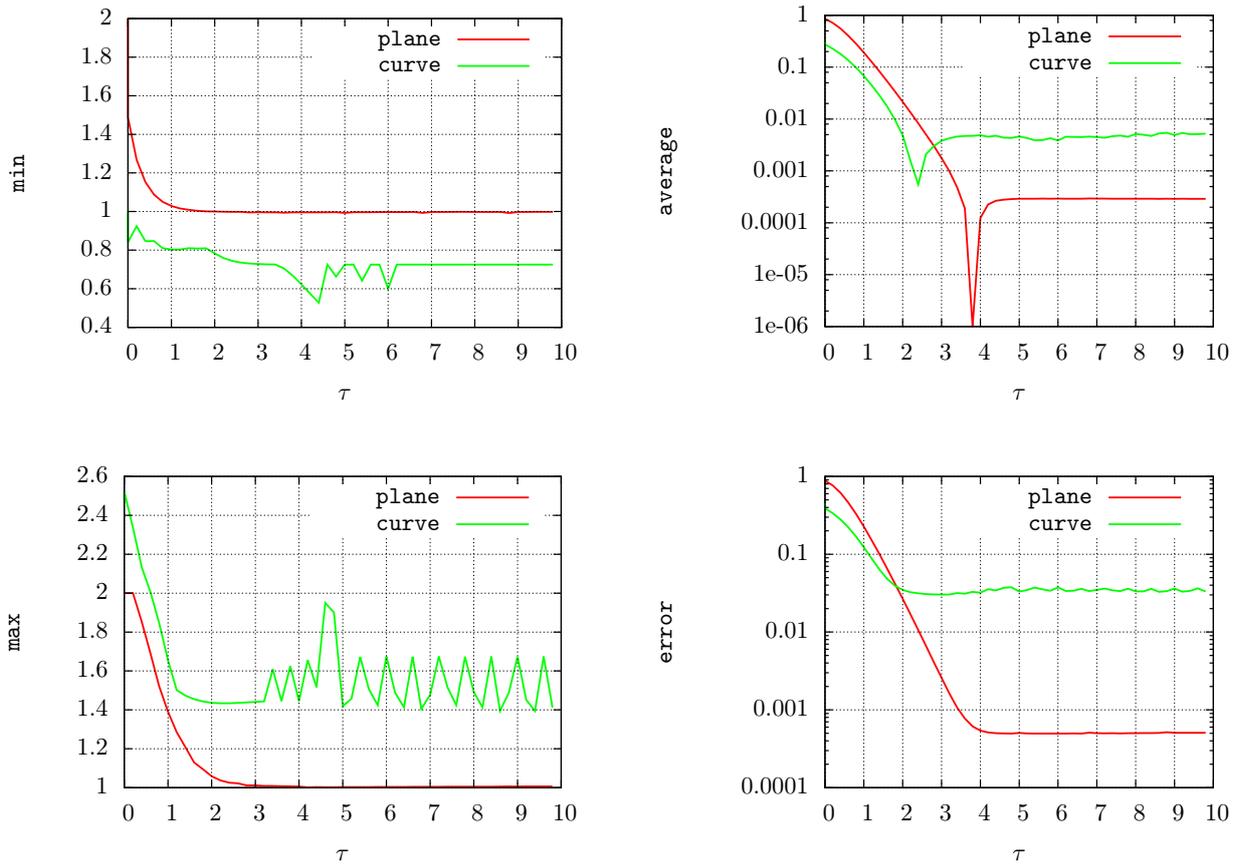


Рис. 10. Поведение минимального, максимального, среднего значения величины $|\langle \|\nabla\phi\| - 1 \rangle|$ и среднеквадратичного отклонения по области выражения $\|\nabla\phi\|$ в процессе переинициализации для плоской (plane) и изогнутой (curve) трещин.

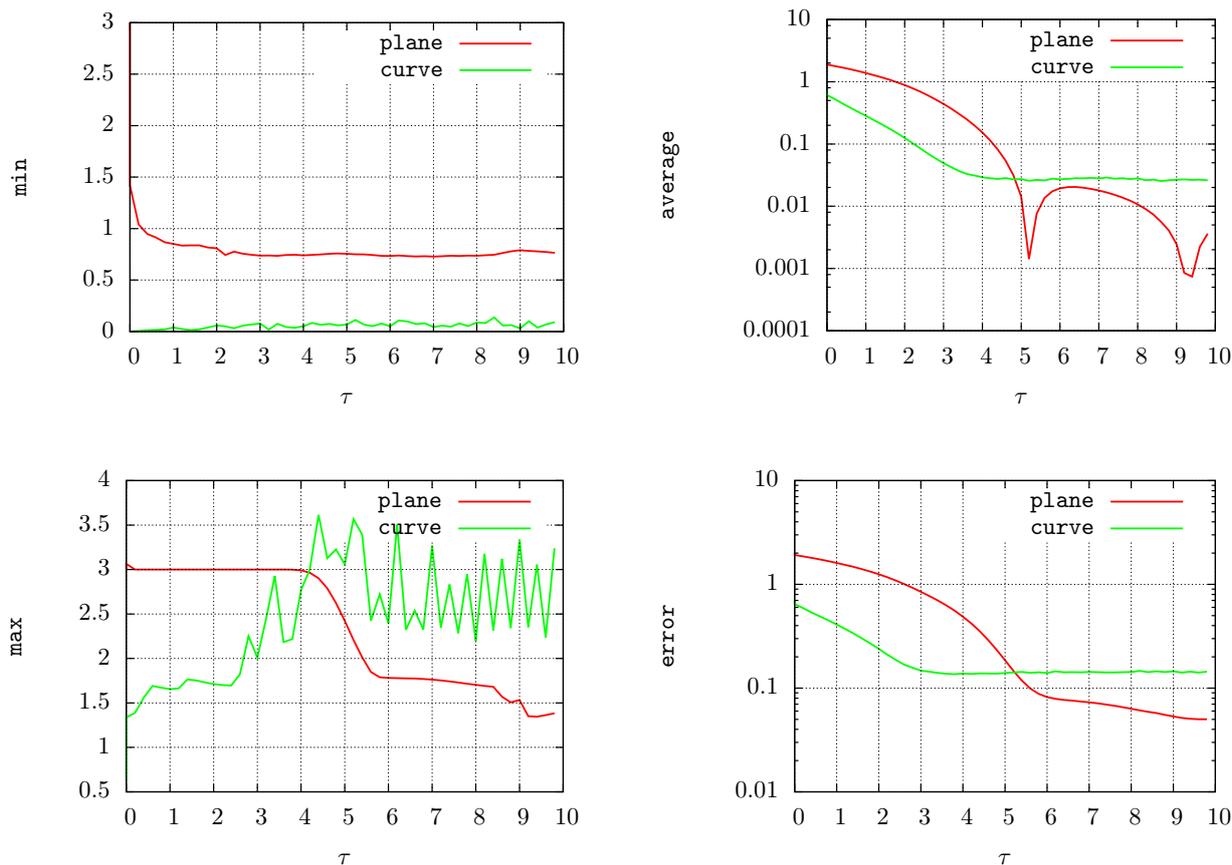


Рис. 11. Поведение минимального, максимального, среднего значения (график построен для величины $|\langle \|\nabla\psi\| - 1 \rangle|$) и среднеквадратичного отклонения по области выражения $\|\nabla\psi\|$ в процессе переинициализации для плоской (plane) и изогнутой (curve) трещин.

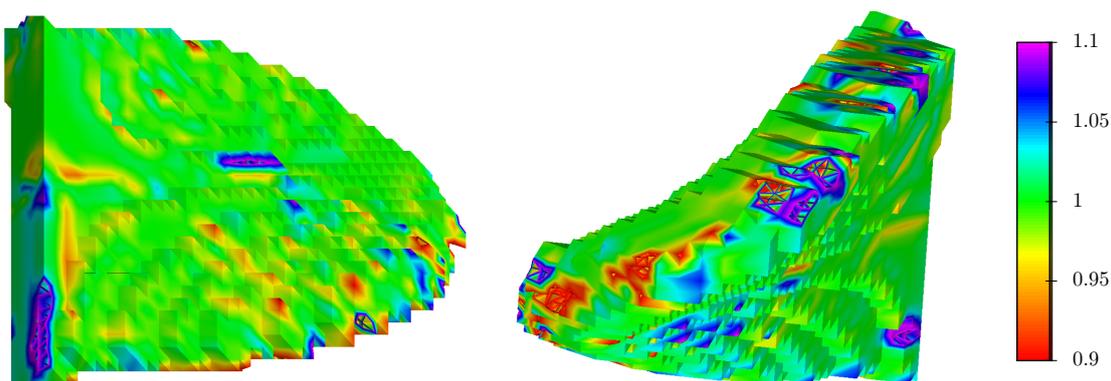


Рис. 12. Значение выражения $\|\nabla\phi\|$ после переинициализации в течении 10 единиц псевдовремени τ с шагом $\Delta\tau = 0.2$. «Проблемные» участки расположены на границах области.

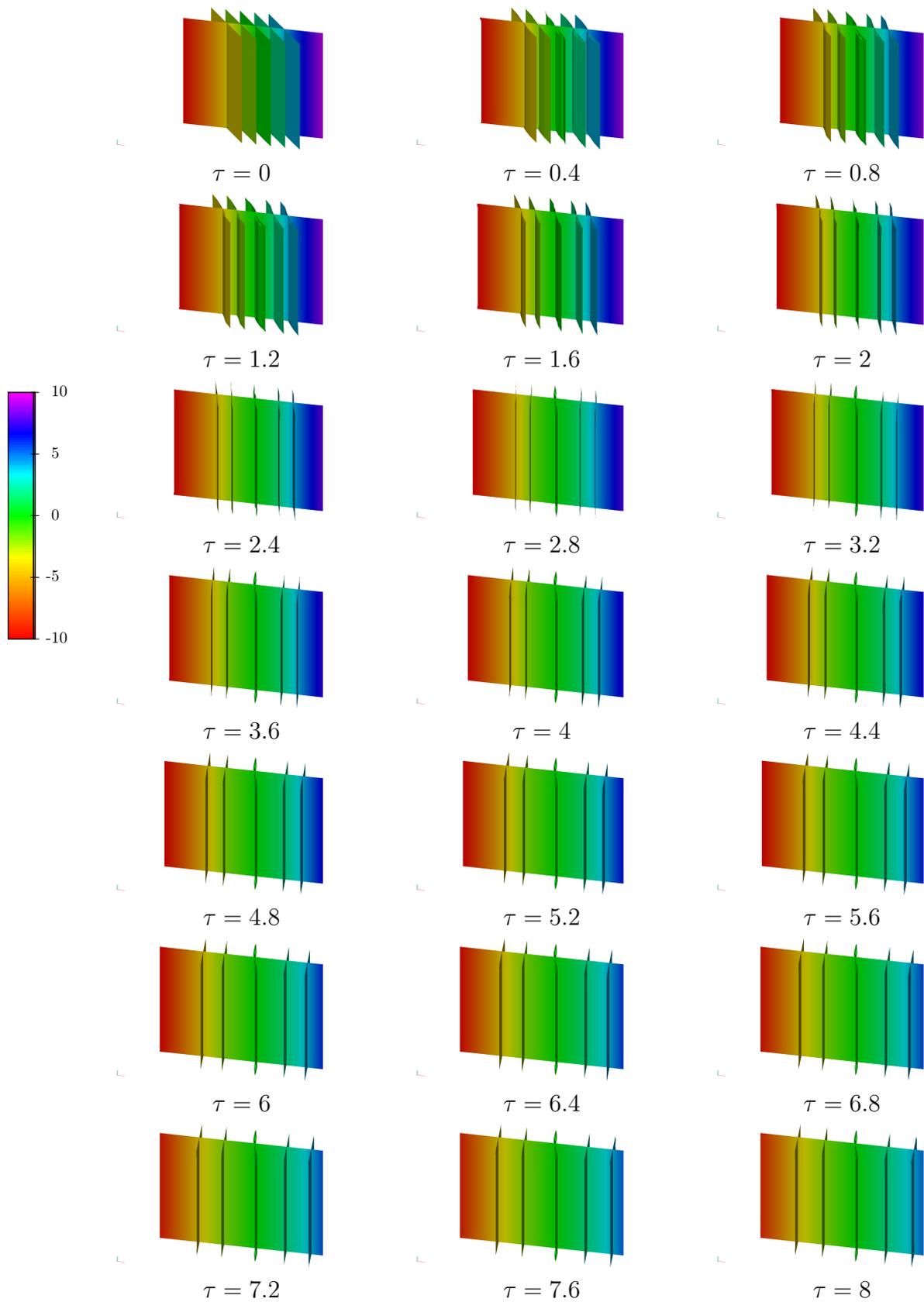


Рис. 13. Изменение поля ψ при совместной ортогонализации и переинициализации полей ϕ и ψ для плоской трещины. Показаны поверхности уровня $\phi = 0, \psi = -4, -2, 0, 2, 4$.

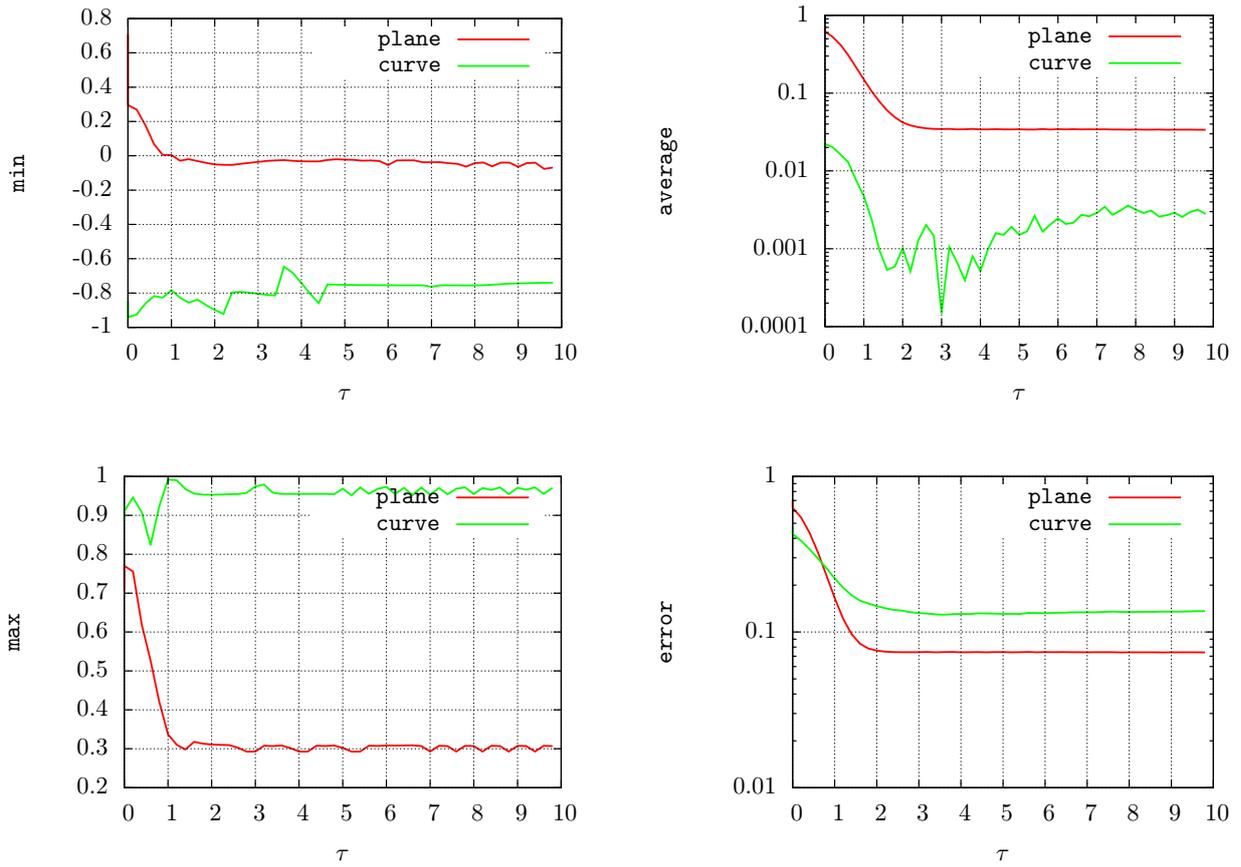


Рис. 14. Поведение минимального, максимального, среднего значения и среднеквадратичного отклонения по области выражения $\nabla\phi \cdot \nabla\psi$ в процессе совместной ортогонализации и переинициализации функций ϕ и ψ для плоской (plane) и изогнутой (curve) трещин.

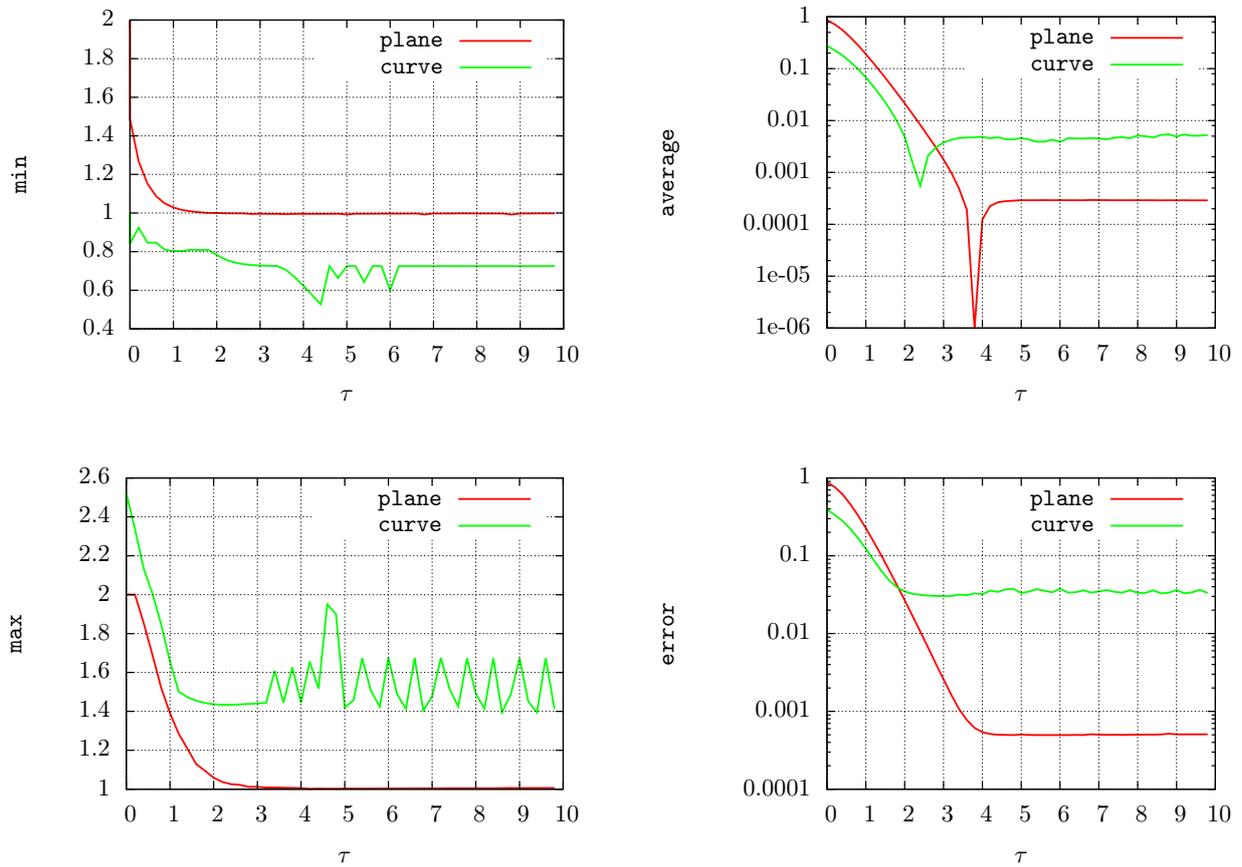


Рис. 15. Поведение минимального, максимального, среднего значения (график построен для величины $|\langle \|\nabla\phi\| - 1 \rangle|$) и среднеквадратичного отклонения по области выражения $\|\nabla\phi\|$ в процессе совместной ортогонализации и переинициализации функций ϕ и ψ для плоской (plane) и изогнутой (curve) трещин.

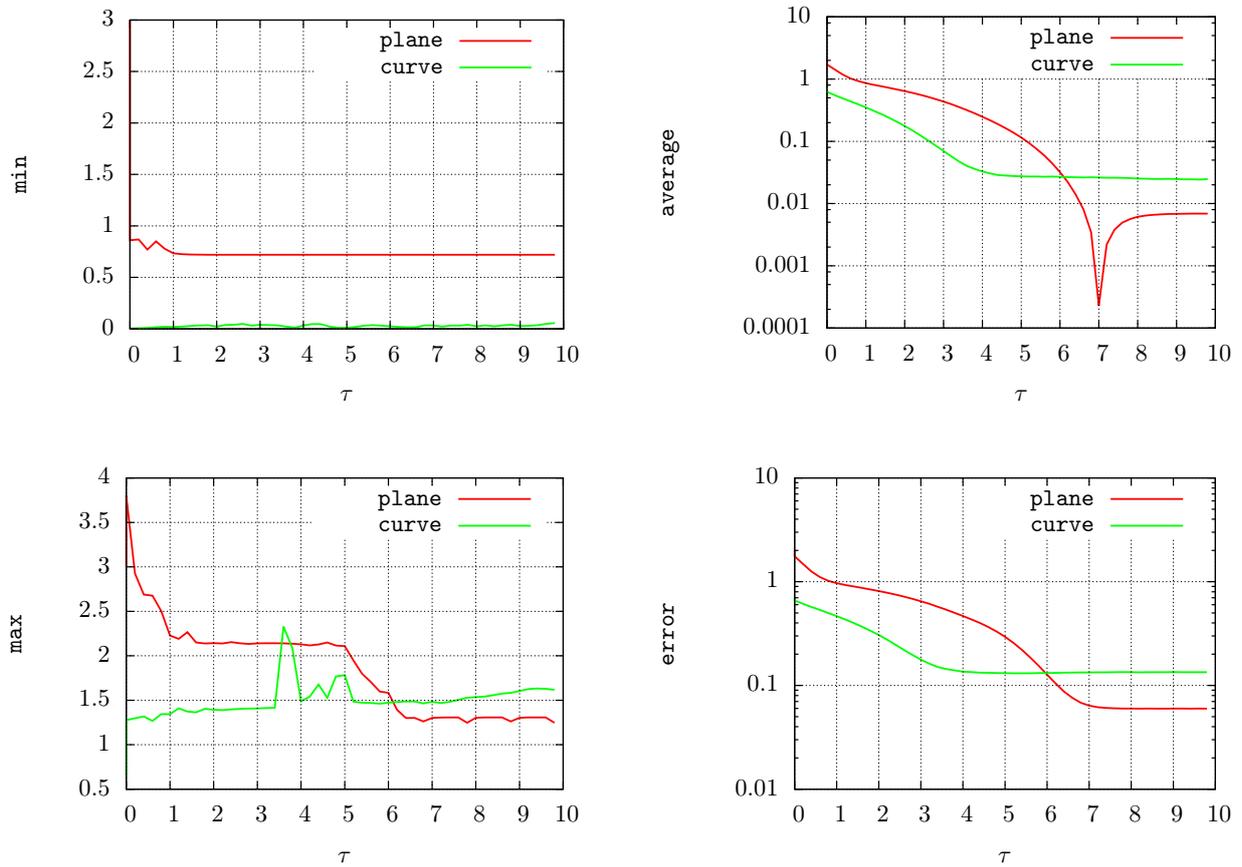


Рис. 16. Поведение минимального, максимального, среднего значения (график построен для величины $|\langle \|\nabla\psi\| - 1 \rangle|$) и среднеквадратичного отклонения по области выражения $\|\nabla\psi\|$ в процессе совместной ортогонализации и переинициализации функций ϕ и ψ для плоской (plane) и изогнутой (curve) трещин.

Результаты для совместной ортогонализации и переноса полей ϕ и ψ в случае плоской трещины представлены на рис. 17. При этом на каждом шаге производится одна итерация переноса со скоростью \mathbf{v} , затем одна итерация (по псевдовремени τ) ортогонализации. Шаги по времени равны $\Delta_t = \Delta_\tau = 0.1$. В процессе расчета начальная скорость $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ меняет свое направление (поворачивается в горизонтальной плоскости с угловой скоростью $\omega = 1/4$). Для поля ϕ считается, что $\mathbf{v} = 0$ при $\psi < 0$ (за фронтом трещины). Результаты расчета показывают, что эволюция полей ϕ и ψ происходит ожидаемо и качественно верно — поверхность трещины поворачивает вслед за изменением скорости, фронт трещины движется в нужном направлении, поверхности уровня $\psi = \text{const}$ разворачиваются ортогонально поверхностям уровня $\phi = \text{const}$.

9 Заключение

В работе рассматривается опыт реализации комплекса алгоритмов для расчета эволюции трещины в заданном поле скорости. Подробно описывается полный комплекс алгоритмов и детали реализации. Приводятся результаты тестовых расчетов. Все алгоритмы реализованы с использованием неструктурированных тетраэдральных сеток.

Результаты численного исследования позволяют сделать следующие выводы. Описанный в многочисленных работах и реализованный в настоящей работе комплекс алгоритмов является одним из самых естественных для моделирования динамики поверхности с краем, которая описывает срединную поверхность трещины в среде.

Вместе с тем «наивное» применение распространенных методов решения гиперболических уравнений типа Гамильтона-Якоби затруднено: специфика метода множеств уровня накладывает на них целый ряд дополнительных ограничений, решение которых в общем случае неочевидно. В частности, это касается вопросов построения поля скоростей, с которыми «переносятся» функции, задающие множества уровня, постановки граничных условий на срединной поверхности трещины, по возможности точного сохранения уже существующей поверхности трещины в ходе ее эволюции. Помимо этого, метод требует применения достаточно подробных расчетных сеток даже в том случае, когда геометрия поверхности достаточно гладкая.

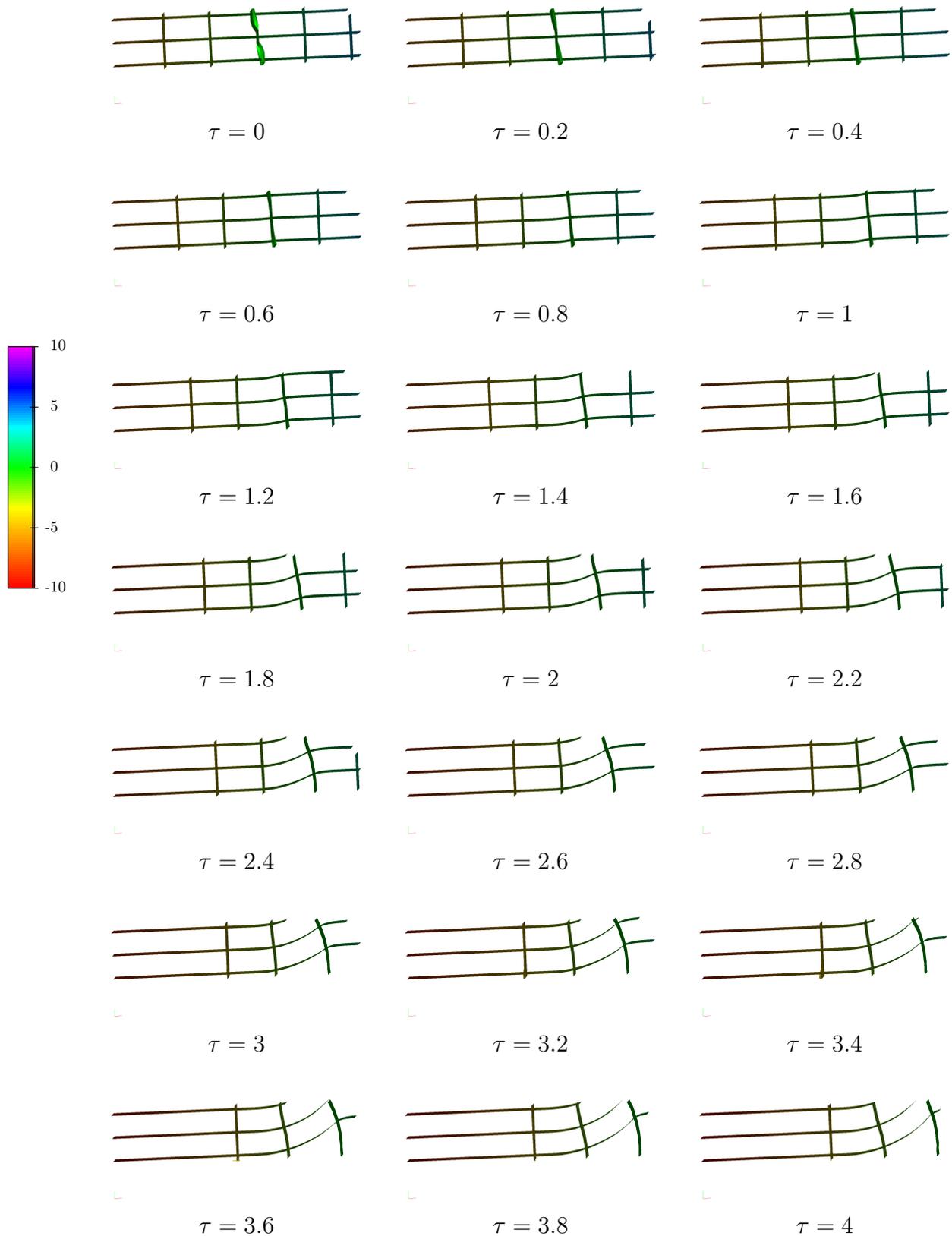


Рис. 17. Изменение поля ψ при совместном переносе и ортогонализации ϕ , ψ плоской трещины, показаны поверхности уровня $\phi = -1, 0, 1$, $\psi = -4, -2, 0, 2, 4$. Скорость движения фронта трещины $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ поворачивается в процессе движения с угловой скоростью $\omega = 1/4$ вокруг вертикальной оси.

Список литературы

- [Barth1998] Barth, T.J., Sethian, J.A. Numerical schemes for the Hamilton–Jacobi and level set equations on triangulated domains // Journal of Computational Physics, vol. 145, pp. 1–40, 1998.
- [Berger2014] Berger M., Tagliasacchi A., Seversky L., Alliez, P., Levine, J., Sharf, A., Silva, C. State of the Art in Surface Reconstruction from Point Clouds // EUROGRAPHICS 2014 / S. Lefebvre and M. Spagnuolo. STAR — State of The Art Report, 2014.
- [Chen1997] Chen, S., Merriman, B., Osher, S., Smereka, P. A simple level set method for solving Stefan problems // Journal of Computational Physics, vol. 135, pp. 8–29, 1997.
- [Chopp1993] Chopp, D.L. Computing minimal surfaces via level-set curvature flow // Journal of Computational Physics, vol. 106, pp. 77–91. 1993.
- [Gravouil2002] Gravouil, A., Moës, N., Belytschko, T. Non-planar 3D crack growth by the extended finite element and level sets — Part II: Level set update // Int. J. Num. Meth. Eng. vol. 53, issue 11. pp. 2569-2586. 2002.
- [Hou1997] Hou, T.Y., Li, Z., Osher, S., Zhao, H. A hybrid method for moving interface problems with application to the Hele–Shaw flow // Journal of Computational Physics, vol. 134, pp. 236–252. 1997.
- [Osher2002] Osher, S. J., Fedkiw, R.P. Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces. Springer-Verlag. ISBN 0-387-95482-1. 2002.
- [Ruuth2008] Ruuth, S.J., Merriman, B. A simple embedding method for solving partial differential equations on surfaces // Journal of Computational Physics, 227, pp. 1943–1961, 2008.
- [Sethian1999] Sethian, J. A. Level Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science. Cambridge University Press. ISBN 0-521-64557-3. 1999.
- [Stolarska2001] Stolarska M., Chopp D., Moës N., Belytschko T. Modelling crack growth by level sets in the extended finite element method // Int. J. Numer. Meth. Engng. 2001; 51:943–960.
- [Macdonald2008] Macdonald C.B., Ruuth S.J. Level set equations on surfaces via the Closest Point Method // J. Sci. Comput., 35 (2008), pp. 219–240.

- [Macdonald2009] Macdonald C.B., Ruuth S.J. The implicit Closest Point Method for the numerical solution of partial differential equations on surfaces // SIAM J. Sci. Comput., 31 (2009), pp. 4330–4350.
- [Macdonald2011] Macdonald C.B., Brandman J., Ruuth S.J. Solving eigenvalue problems on curved surfaces using the Closest Point Method // J. Comput. Phys., 230 (2011), pp. 7944–7956.
- [Moës2002] Moës, N., Gravouil, A., Belytschko, T. Non-planar 3D crack growth by the extended finite element and level sets—Part I: Mechanical model // Int. J. Numer. Meth. Engng 2002; 53:2549–2568 (DOI: 10.1002/nme.429)
- [Peng1999] Peng, D., Merriman, B., Osher, S., Zhao, H., Kang, M. A PDE-based fast local level set method // Journal of Computational Physics, vol. 155, pp. 410 – 438, 1999.
- [Shi2010] Shi J., Chopp D., Lua J., Belytschko T. Abaqus implementation of extended finite element method using a level set representation for three-dimensional fatigue crack growth and life predictions // Engineering fracture mechanics (ISSN 0013-7944). 2010, vol. 77, № 14, pp. 2840-2863.
- [Ventura2003] Ventura, G., Budyn, E., Belytschko, T. Vector level sets for description of propagating cracks in finite elements // Int. J. Numer. Meth. Engng 2003; 58:1571–1592.
- [Zhang2005a] Zhang, Z., Naga, A. A new finite element gradient recovery method: superconvergence property // SIAM J. Sci. Comput., 26 (4) (2005), pp. 1192–1213