bcg.h 文档说明

Haochen Huang
西安交通大学 MFM 课题组

版本：4.02test

日期：2023 年 4 月 6 日

目录

摘　要

本文为 basilisk 的头文件 bcg.h 的说明文档。

添加整体的求解结构详解，强调了向量形式的各种处理，对各种细节加以补充，对之前错误进行矫正，对原本相关遗留问题的详细解答，以及对 bcg.h 文件功能的重新审视。

4.02 更新：对于交错网格相关问题的修正，对于理论推导部分中相关错误进行订正。

1. 理论背景

1.1 文件目的

该头文件旨在利于 bcg 格式构建对流项并求解对流方程

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\Phi = 0 \tag{1}$$

其离散格式为

$$\frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t} + \mathbf{A}^{n+\frac{1}{2}} = 0 \tag{2}$$

并最终返回 Φ^{n+1}

其中 Φ 既可以是标量也可以是矢量，接下来讲解对流项的具体离散方法

bcg 格式要求对流项的时层为 $n+1/2$ 时层即

$$A=[(\mathbf{U}\cdot\nabla)\Phi]^{n+1/2} \tag{3}$$

定义单元为 Γ，单元边界为 $\partial\Gamma$，又因为不可压有

$$\nabla\mathbf{U}=0 \tag{4}$$

对流项可变为:

$$A=[(\mathbf{U}\cdot\nabla)\Phi]^{n+1/2}=[\nabla\cdot(\mathbf{U}\Phi)]^{n+1/2} \tag{5}$$

其中若 Φ 为矢量则其为并矢运算，由有限体积法对单元内进行积分，由广义 Gauss 定理得

$$\int_\Gamma A^{n+1/2}=\int_\Gamma[\nabla\cdot(\mathbf{U}\Phi)]^{n+1/2}=\int_{\partial\Gamma}(\mathbf{U}^{n+\frac{1}{2}}\cdot\mathbf{n})\Phi^{n+\frac{1}{2}} \tag{6}$$

对于正方形或正方体单元有

$$h\Delta A^{n+1/2}=\sum_i u_d^{n+1/2}\Phi_d^{n+1/2} \tag{7}$$

其中 $u_d^{n+\frac{1}{2}}$ 为速度在相关面上法相分量，$\Phi_d^{n+1/2}$ 则为处在面单元位置的物理量（如 Φ 为向量，则可以将其视为三个标量的组合）。h 网格单元长度，上式中等号两边有 h 已经被约掉。

利用网格中心处的 Φ^n 对处于 $n+\frac{1}{2}$ 位于网格面上的物理量进行时间和空间上的差分有

$$\Phi_d^{n+1/2}=\Phi^n+\frac{\Delta}{2}\frac{\partial\Phi^n}{\partial x_d}+\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial\Phi^n}{\partial t}+O(\Delta^2,\Delta t^2) \tag{8}$$

由于 Φ 满足 Euler 方程，将其对时间的偏导（上式右手第三项）进行替换有

$$\Phi_d^{n+1/2}=\Phi^n+[\frac{\Delta}{2}-\frac{\Delta t}{2}\mathbf{U}^n\cdot\mathbf{e}_d]\frac{\partial\Phi^n}{\partial x_d}-\frac{\Delta t}{2}\mathbf{U}^n\cdot\mathbf{e}_j\frac{\partial\Phi^n}{\partial x_j}-\frac{\Delta t}{2}\nabla p^n \tag{9}$$

其中 $\mathbf{U}$ 为单元中心速度，上式右手最后一项一般认为是源项，需要注意地方有两点

1. 若上述方程式中的 $\Phi^{n+1/2}$ 是矢量，得到的对流项 $\mathbf{A}$ 也是矢量，可以将其视为三个标量的加和。
2. 上述方程中速度对时间的偏导数进行替代时假设 Φ 满足 Euler 方程，某些物理量（比如速度）其忽略了粘性项

我们暂且以标量形式进行推导，矢量形式就是标量形式的叠加，并不需要过多赘述

1.2 相关应用

该头文件是为以 Fractional Step Method 方法 [2] 构建的整体求解器 centered.h 的重要组成部分。其功能是构建 bcg 格式的对流项并求解对流方程 [1][3]，从而能够在不可压 NS 方程中将对流项以 bcg 离散格式与非定常项合并，其大概流程如下:

预测步离散方程为:

$$\rho_{n+\frac{1}{2}}\frac{\mathbf{u}^*-\mathbf{u}^n}{\Delta t}+\nabla\cdot(\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}}\otimes\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}})=\nabla\cdot[2\mu^{n+\frac{1}{2}}\mathbf{D}^*]+ [\mathbf{a}^{n-\frac{1}{2}}-\nabla p^{n-\frac{1}{2}}] \tag{10}$$

使用 bcg 格式构建对流项 $\nabla\cdot(\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}}\otimes\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}})$ 并求解方程:

$$u^{**}=u^n-\Delta t\mathbf{A} \tag{11}$$

其中 $\mathbf{A}$ 为 bcg 格式对流项，将上式带入10得:

$$\rho_{n+\frac{1}{2}}\frac{\mathbf{u}^*-\mathbf{u}^{**}}{\Delta t}=\nabla\cdot[2\mu^{n+\frac{1}{2}}\mathbf{D}^*]+[\mathbf{a}^{n-\frac{1}{2}}-\nabla p^{n-\frac{1}{2}}] \tag{12}$$

对流项与非定常项成功合并。整体步骤详见 centered.h 说明文档。

同时该文件还会被 tracer.h 所引用，对某些物理量进行对流方程求解，详见相关文件。

1.3 离散格式

2. 源代码解析

2.1 整体算法思路

整体代码分为两个部分，分别是 tracer flux 以及 advection，矢量的情况实际上就是标量形式的多重叠加，是故假设 Φ 为标量进行示例推演。

根据9，为求解位于方向 d 的面上，处于第 $n+\frac{1}{2}$ 时层的物理量 $\Phi_d^{n+1/2}$ 所需要的已知量有：

- $\mathbf{U}^n$，在第 n 时层位于单元中心的速度
- $\nabla\Phi$ ，目标物理量于单元中心的梯度，计算时需要使用其分量。
- Φ^n，处于网格中心位于第 n 时层的目标物理量

计算出 $\Phi_d^{n+\frac{1}{2}}$ 后，通过7计算 $A^{n+\frac{1}{2}}$，还需要

- $u_d^{n+1/2}$，即位于 $n+1/2$ 时层，处于单元面上的速度法相分量值

由此求解对流方程11。Basilisk 针对速度采用交错网格，即速度分量存储于垂直于速度法相量的单元面中心，如图：

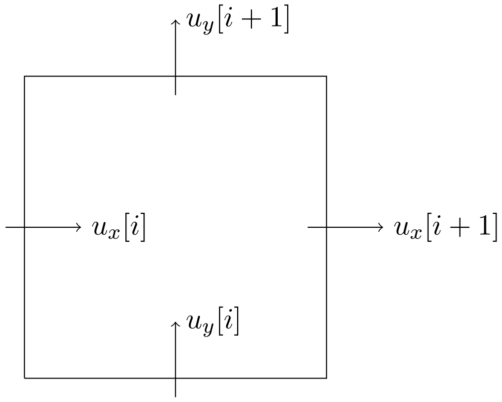


图 1: 交错网格速度存储

网格面上的存储空间不但能够当成交错网格使用，也可以存储相对于网格面的插值差分，相关存储命令为 `face vector f[]` ，如下图所示：

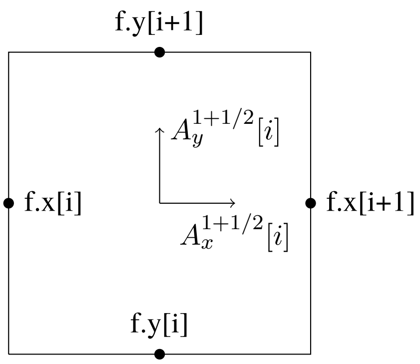


图 2: Basilisk 存储示意

`vector A[]` 等命令可以在单元中心存储向量或标量值。由上文得 $\mathbf{U}^n, \nabla\Phi, \Phi^n$ 存储在网格中心，由他们计算得到的 $\Phi_d^{n+1/2}$ 则储存在网格面上。相应的，Basilisk 的交错网格直接存储的就是下一步计算所需的 $u_d^{n+1/2}$。

回归算法本身，当我们求解一个标量的对流方程时，tracer flux 会首先计算出位于每个单元面上的分量值即

$$flux = u_d^{n+\frac{1}{2}} \Phi_d^{n+\frac{1}{2}} \tag{13}$$

如下图：

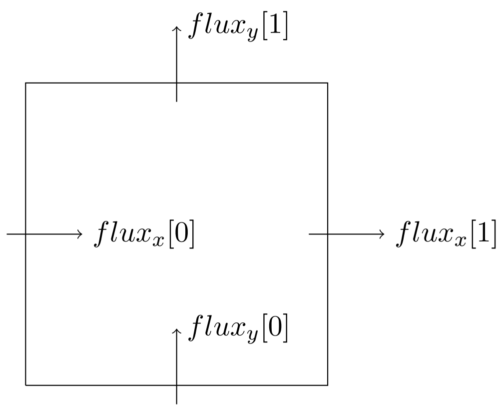


图 3: projection 处理

而 advection 则会遍历每个方向求出相应的对流项值，同时求解对流方程直接返回 Φ^{n+1}

出于工程及代码简洁性考虑，导致除物理量外，只能输如一个面上速度值作为参数，而根据前文的理论推导，我们需要位于 $n, n+\frac{1}{2}$ 时层的两个速度量，代码相应的做了简化，在 advection 函数中只能输入一个面单元速度，是故必须要在二者中选取一个时间层，例如在 center.h 中，选取的时间层就全部都位于 $n+\frac{1}{2}$

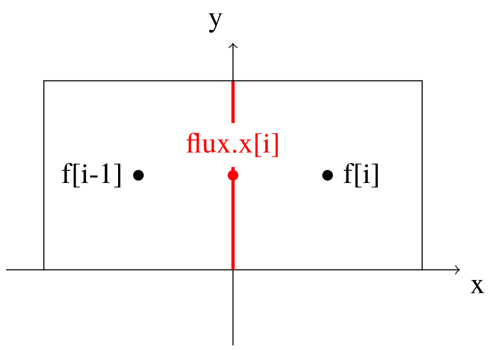
2.2 tracer fluxes 函数

我们统一假设其输入的面上速度时层为第 n 时层则有

```
/* 本函数的目的在于采取上文中推导出的迎风格式计算 $\mathbf{U}_i^{n+1/2}$，已知中心的速度场 $f$ 保存在面中心的单元流量 $uf$，源项 $src$，计算时间步长 $dt$，将最后的结果保存在每个单元表面中心上，指针为 flux*/
void tracer_fluxes (
    scalar f,
    face vector uf,
    face vector flux,
    double dt,
    (const) scalar src)
{
  /* 首先计算 $\nabla f$，gradients() 函数的目的是将第一个参数的梯度赋予第二个 vector 型函数中 */
  vector g[];
  gradients ({f}, {g});

/* 接下来针对每一个面的中心计算 $\Phi_d^{n+1/2}$，在这里我们将源项即压力项放置于 src 中并不进行单独计算 */
  foreach_face() {
/* 首先是法相分量 $\Phi^n + \frac{\Delta}{2} min[1 - \frac{\Delta t}{\Delta} u_i^n, 1] \frac{\partial \Phi^n}{\partial x_i}$ */

    double un = dt*uf.x[]/(fm.x[]*Delta + SEPS), s = sign(un);
    int i = -(s + 1.)/2.;
    double f2 = f[i] + (src[] + src[-1])*dt/4. + s*(1. - s*un)*g.x[i]*Delta/2.;

  /* 其次计算 $-\frac{\Delta t}{2} u_j^n \frac{\partial \Phi^n}{\partial x_j}$ 当为 2 维情况时该项只有一项，3 维为两项，计算需要使用迎风格式 */

    #if dimension > 1
    if (fm.y[i] && fm.y[i,1]) {
      double vn = (uf.y[i] + uf.y[i,1])/(fm.y[i] + fm.y[i,1]);
      double fyy = vn < 0. ? f[i,1] - f[i] : f[i] - f[i,-1];
      f2 -= dt*vn*fyy/(2.*Delta);
    }
    #endif
    #if dimension > 2
    if (fm.z[i] && fm.z[i,0,1]) {
```

```
      double wn = (uf.z[i] + uf.z[i,0,1])/(fm.z[i] + fm.z[i,0,1]);
      double fzz = wn < 0. ? f[i,0,1] - f[i] : f[i] - f[i,0,-1];
      f2 -= dt*wn*fzz/(2.*Delta);
    }
    #endif

    flux.x[] = f2*uf.x[];
  }
  boundary_flux ({flux});
}
```

将代码细节具体分析，在此以 2D 为例，暂不考虑网格自适应问题，假设研究网格与其邻近网格 level 值相等，得到：



我们以 x 方向为例，上图中标红部分即为所求界面，中点为所求 $\Phi_i^{n+1/2}$ 所在点

需要特别指出的是，在 Basilisk 中 face vector 型数据旨在每一个单元面中心定义数据，假设有 face vector 型数据 fv，有单元中心点的坐标为 (i,j)，那么 $fv.x[]$ 所表示的面中心点的坐标为 $(i-1/2,j)$，$fv.y[]$ 所表示的面中心点坐标为 $(i,j-1/2)$。

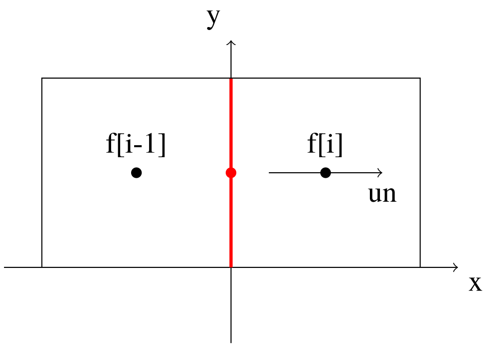
以 x 方向为例，回顾源代码：

`double un = dt*uf.x[]/(fm.x[]*Delta + SEPS), s = sign(un);` 其中 un 指代该方向上在单元中心的速度分量乘以时间步长除以网格长度，即 $v_i^n \times \frac{\Delta t}{\Delta}$，SEPS 是为了防止计算除零添加的备用项。

这里原本的算法应该是 `dt*(uf.x[i] + uf.x[i+1])/((fm.x[] +fm.x[i+1])*Delta)` ,即使用位于该方向上的面元点进行平均计算单元中心位于时层 n 的速度分量，代码作者因为边界条件问题对其进行了简化。

此时会有三种情况，即 $un > 0, un < 0, un = 0$。

当 $un > 0$ 时，此时流动方向为：



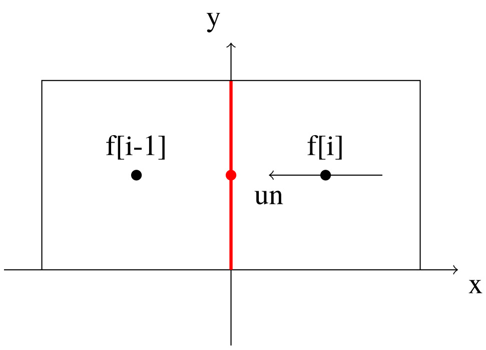
根据迎风格式，我们应该取中心点为 $(i-1, j)$ 的单元对目标点进行拟合，根据代码

`s = sign(un); int i = -(s + 1.)/2.;` 当 $un > 0$ 时 $s = 1, i = -1$，将其带回最后 $f2$ 表达式中：

`double f2 = f[i] + (src[] + src[-1])*dt/4. + s*(1. - s*un)*g.x[i]*Delta/2.;` 能满足针对单元 $(i-1, j)$ 计算：

$$f_2 = f_{i-1} + \frac{\Delta}{2}[1 - \frac{\Delta t}{\Delta} u_i^n] \frac{\partial f_{i-1}}{\partial x_i} \tag{14}$$

而当 $un < 0$ 时，此时流动则变为：



此时需要利用 (i, j) 迎风计算下风段的面中心点，需要注意的是，由于计算是由 (i, j) 反推 $(i - 1/2, j)$，针对空间的差分应该取负号，代码满足关系式为：

$$f_2 = f_{i-1} + (-\frac{\Delta}{2}) \frac{\partial f_{i-1}}{\partial x_i} - \frac{\Delta t}{\Delta} u_i^n \frac{\partial f_{i-1}}{\partial x_i} = f_{i-1} - \frac{\Delta}{2}[1 + \frac{\Delta t}{\Delta} u_i^n] \frac{\partial f_{i-1}}{\partial x_i} \tag{15}$$

以迎风格式处理完切向分量后，最终我们得到 $\Phi_i^{n+1/2} \times u_i^n$ 的近似式 `flux.x[] = f2*uf.x[];`，近似式是因为：

1. 该结果只保留了数值值，并没有考虑面的外法线方向正负
2. $uf.x[]$ 并不是 $u_i^{n+1/2}$ 的数值值，根据前文叙述其是位于第 n 时层的面上速度，且还需要除以网格单位长度

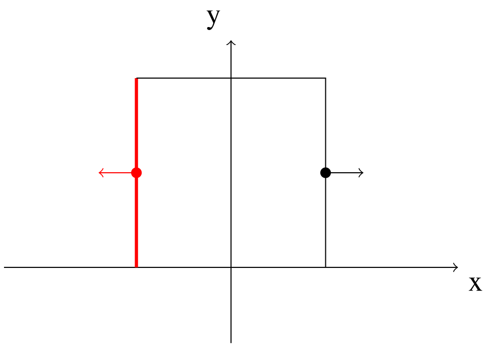
2.3 advection 函数

首先值得注意的是本函数对 tracer flux 的应用，在 tracer flux 求出各个方向的 $\Phi_d^{n+1/2} u_d^n$ 分量后，advection 按照方向归类加和成 $\mathbf{A}^{\mathbf{n}+\frac{1}{2}}$ 的分量。

其次该函数目的是直接计算预测步的单元中心下一个时层的物理量 Φ^{n+1}

$$\Phi^{n+1} = \Phi^n - \Delta t A^{n+1/2} \tag{16}$$

其中 Φ^n 已知，在代码中以 $f[]$ 形式出现，而对于对流项，如下图



可以确定的是 $flux.x[]$ 的数值因法相量与坐标轴方向相悖，在对流项中应取负值则有：

$$\Phi^{n+1}(i) = f[i] - \frac{\Delta t}{\Delta}\sum_{d} flux.x[i+1] - flux.x[i] \tag{17}$$

表现为代码为：

```
for (f,src in p.tracers,lsrc) {
    face vector flux[];
    tracer_fluxes (f, p.u, flux, p.dt, src);

foreach()
    foreach_dimension()
    f[] += p.dt*(flux.x[] - flux.x[1])/(Delta*cm[]);//注意 f[] 已经赋值了,Φ^{n+1} 被直接更新在 f[] 中了
```

3. 附录：cneter.h 中 bcg 格式的误差

如前文所述，真正的代码构建的 bcg.h 方程为：

$$\mathbf{U}_d^{n+1/2} = \mathbf{U}^n + [\frac{\Delta}{2} - \frac{\Delta t}{2} u_i^{n+1/2}]\frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial x_d} - \frac{\Delta t}{2} u_j^{n+1/2}\frac{\partial \mathbf{U}^n}{\partial x_j} - \frac{\Delta t}{2}\nabla p^n \tag{18}$$

这么做的解释有二

1. bcg.h 的职责并不只是构建 NS 方程的对流项，其还担负着求解各种对流方程物理场的任务（详见 tracer.h），所以在 centered.h 对对流项的合并中，只是简单的将 **U** 作为一个物理量，而并没有考虑在某个时刻已经计算出相关内容了，这样可以减少代码量（因为如果不用 bcg.h 的 advection 函数计算对流方程就还得在 centered.h 中再写一个，十分麻烦）
2. bcg.h 应该是为了精简变量数量（因为按照原来理论得输入两个位于不同时层的面上速度），所以干脆输入一个，最大程度简化代码复杂度

以上论断仅为推论，需要继续论证完善，但可以确定的是，在计算所有的 tracer 对流方程中，都会存在这样的误差，至于在计算速度中无视粘性项使用 Euler 方程替代速度对时间偏导数的误差和 bcg 的做法有没有关系还是有待商榷

参考文献

[1] John B Bell, Phillip Colella, and Harland M Glaz. “A second-order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations”. In: *Journal of computational physics* 85.2 (1989), pp. 257–283.

[2] John Kim and Parviz Moin. “Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations”. In: *Journal of computational physics* 59.2 (1985), pp. 308–323.

[3] Stéphane Popinet. “Gerris: a tree-based adaptive solver for the incompressible Euler equations in complex geometries”. In: *Journal of computational physics* 190.2 (2003), pp. 572–600.