

# Generator mreže za modeliranje strjevanja teles zapletenih oblik z dvojno recipročno metodo robnih elementov

## Mesh Generator for Modelling Complex Bodies Solidification by the Dual Reciprocity Boundary Element Method

Košir A<sup>1</sup>, B. Šarler, LFDT, FS, Univerza v Ljubljani

V članku izvirno predlagamo, kako z optimizacijsko metodo konstruirati koordinate nestrukturirane mreže točk, primernih za diskretizacijo zapletenih območij. Uspešnost diskretizacije preverimo na modelu strjevanja neskončnega vogala z numerično metodo robnih elementov z dvojno recipročnostjo.

*Ključne besede:* generator mreže, optimizacija, ulivanje, strjevanje, metoda robnih elementov, metoda dvojne recipročnosti, Stefanova naloga, prenos toplote in snovi

*An original method for optimal unstructured mesh generation, suitable for complex shape discretization, is proposed in the paper. Efficiency of discretization is checked numerically by the boundary element method with dual reciprocity on the infinite corner solidification model.*

*Key words:* mesh generation, optimization, casting, boundary element method, dual reciprocity method, Stefan problem, heat and mass transfer

### 1. Uvod

Z uporabo dvojno recipročne metode (DRM) robnih elementov (BEM) smo doslej uspešno numerično izračunali testne primere strjevanja teles preprostih oblik<sup>1</sup> in se prepričali, da je to učinkovita in natančna numerična metoda, primerna tudi za tovrstno družino močno nelinearnih problemov.

Strjevanje kovinskih ulitkov fizikalno najpreprosteje opišemo z ohranitveno enačbo energije v idealni kontinuumski mešanici trdne in tekoče faze v izbrani snovi. Izbrani fizikalni model omogoča upoštevati temperaturno odvisno toplotno prevodnost in specifično toplotno kapaciteto snovi, ki se strjuje, vse tri vrste običajno zanimivih robnih pogojev in poljubne procesne parametre ulivanja. Ker so v industrijski praksi običajno bolj zanimiva telesa zapletenih oblik, je ključna ustrezna učinkovita diskretizacija območja in njegovega roba.

Metoda robnih elementov omogoča v primerjavi z ostalimi klasičnimi numeričnimi metodami večjo svobodo pri diskretizaciji območja. Lege mrežnih točk niso nujno razporejene ortogonalno in enakomerno, pač pa povsem svobodno, običajno bolj zgoščeno na območjih, kjer pričakujemo večjo dinamiko procesov. Čeprav je mreža točk lahko poljubna, nekatere diskretizacije zmanjšajo velikost napake pri enakem številu mrežnih točk.

Namen te raziskave je konstruirati z ustrezno minimizacijo izbranih ciljnih funkcij generator za nestrukturirane mreže.

### 2. Ciljne funkcije

Kartezične koordinate  $m$  točk v  $n$  razsežnem prostoru označimo z  $x_j^i$ ,  $j = 1, \dots, m$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Z izrazom

$$\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_j^i - x_k^i)^2} = \min_{j \neq k} \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_j^i - x_k^i)^2} \quad (1)$$

definiramo indeksni vektor  $j_k$ ,  $k = 1, \dots, m$ , ki za vsako točko  $k$  pove indeks njene najbližje sosedice.

Informacijo o obliki območja, na katerem generiramo mrežo, zajema funkcija

$$\text{Award}(x^k) = \begin{cases} 0, & x^k \in \Omega \cup \Gamma; \\ 1, & x^k \in \Omega \cup \Gamma, \end{cases} \quad (2)$$

kjer množica  $\Omega$  predstavlja odprto povezano območje in  $\Gamma$  njegov rob. Množica  $\bar{\Omega}$  naj bo zaprtje območja,  $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ .

Definirajmo nekaj ciljnih funkcij in si oglejmo njihove lastnosti. Najpreprostejša je prva ciljna funkcija

$$\text{ObjFunc}_1(x) = \sum_{k=1}^m \frac{1}{\text{Award}(x^k)} \quad (3)$$

Funkcija je neomejena, če katera od mrežnih točk leži zunaj območja, sicer pa doseže svoj minimum  $m$  pri katerikoli porazdelitvi točk po območju in njegovem robu. Ker ciljna funkcija upošteva le obliko območja in ne medsebojnih leg mrežnih točk, je zanimiva le primerjalno z ostalimi ciljnimi funkcijami.

<sup>1</sup> Aleš KOŠIR, dipl. inž. fiz. Laboratorij za dinam. fluidov in termodin., FS, Univerza v Ljubljani, Aškerčeva 6, 61000 Ljubljana

Definicija druge ciljne funkcije je

$$\text{ObjFunc}_2(x) = \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^m \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i^j - x_i^k)^2} \text{Award}(x^k)} \quad (4)$$

Ta funkcija je do multiplikativne konstante enaka potencialni energiji v območje zaprtih enako nabitih točkastih nabojev. Ker se naboji medsebojno odbijajo, je njihova porazdelitev gostejša na robu območja.

Kot prejšnja ciljna funkcija tudi tretja

$$\text{ObjFunc}_3(x) = - \prod_{k=1}^m \min_{j=1}^m \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i^j - x_i^k)^2} \text{Award}(x^k) \quad (5)$$

pri minimizaciji sili mrežne točke vsaksebi, a ima to zanimivo in uporabno lastnost, da doseže na  $n$  razsežni kocki svoj minimum, če je  $m$  točk enakomerno porazdeljenih in če velja  $m^{1/n} \in \mathbb{N}$ .

### 3. Vsebnostni test

Opišimo, kako smo presodili, ali je testirana točka vsebovana v zaprtju območja,  $x^l \in \bar{\Omega}$ . Ta postopek imenujemo vsebnostni test.

Območje v dvorazsežnem prostoru opišemo s kartezičnimi koordinatami oglišč poligona, ki se območju najbolj prilega. Najprej preskusimo, če leži točka  $x^l$  znotraj minimalnega pravokotnika, ki vsebuje vse območje. Nato z vsebnostnim testom presodimo, ali točka ne leži zunaj poligona.

Stabilni numerični vsebnostni testi so v ravnini zaradi končne aritmetike še danes trd oreh numerične analize<sup>5</sup>. Primerjali smo

- *parnostni vsebnostni test*, pri katerem tvorimo daljico med testirano točko in znano točko zunaj poligona ter izračunamo parnost števila presečišč daljice s stranicami poligona<sup>6</sup>,

- *vsebnostni test z barvanjem* rasterizirane notranjosti poligona,

- *vsebnostni test z določanjem orientacije trikotnikov*, ki jih tvorimo s testno točko in sosednjima ogliščema poligona<sup>4</sup>,

- *vsebnostni test z ovijalnim številom*, ki meri, v kateri smeri poligon ovije testirano točko.

Parnostni vsebnostni test znatno pospeši, če namesto znane zunanje točke uporabimo točko v neskončnosti.

Ko je območje rasterizirano, je rastrski test zelo hiter, vendar nenatančen, če se rob poligona ne ujema z rastrom. Najbolj zanesljive rezultate smo dosegli z ovijalnim vsebnostnim testom, ki je pri danem poligonu hkrati hitrejši od parnostnega in orientacijskega testa. V več kot dvorazsežnem prostoru uporabljamo druge metode.

### 4. Optimizacijske metode za ciljne funkcije

Prostor parametrov, v katerem iščemo minimum ciljne funkcije, je  $n \cdot m$  razsežen, zato je zelo pomembno uporabiti učinkovito optimizacijsko metodo, ki se bo minimu funkcije pri velikem številu mrežnih točk karseda hitro in poljubno približala. Za vsako izmed funkcij si oglejmo, kako smo iskali njen globalni minimum.

Prva ciljna funkcija doseže svoj minimum pri poljubni (stohastični) porazdelitvi mrežnih točk po območju. Če je bila neka mrežna točka od roba območja oddaljena za manj kot  $\sqrt{m}$ , smo jo prestavili v najbližjo točko na robu, sicer bi pri rešitvenem postopku v fizikalnem modelu primanjkovalo robnih pogojev.

Druga ciljna funkcija je znotraj območja  $\bar{\Omega}$  gladka funkcija koordinat, zato izkoristimo informacijo o njenih parcialnih

odvodih in z uporabo Fletcher-Reeves-Polak-Ribiérove metode konjugiranega gradienta<sup>10</sup> učinkovito poiščemo njen globalni minimum.

Čeprav tretja ciljna funkcija znotraj območja ni povsod gladka, smo jo poskusili tako kot drugo funkcijo optimizirati z omenjeno metodo konjugiranega gradienta. Navedimo njen parcialni odvod po  $l$ -ti koordinati  $p$ -te točke znotraj območja

$$\frac{\partial \text{ObjFunc}_3(x)}{\partial x_p^l} = \text{ObjFunc}_3(x) \left( \frac{x_p^l - x_p^j}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i^l - x_i^j)^2}} - \sum_{k=1}^m \frac{x_p^k - x_p^l}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i^k - x_i^l)^2}} \delta_{j,k,l} \right) \quad (6)$$

To minimizacijo smo primerjali s posebej konstruiranim, na Boltzmannovem simuliranem ohlajanju temelječim postopkom, ki statistično zagotavlja konvergenco h globalnemu minimumu funkcije. V prvi fazi postopka po območju stohastično posejemo mrežne točke in jim predpišemo skupno umetno temperaturo kot mero fluktuacij njihovih leg v koordinatnem prostoru. V korakih nižamo temperaturo, pri tem premikamo lege točk in spremenjena stanja sprejmemo ali zavrzemo glede na spremembo vrednosti ciljne funkcije. Če je nova vrednost ciljne funkcije nižja kot stara, potem novo stanje brezpogojno sprejmemo, sicer pa le sorazmerno z Boltzmannovo verjetnostjo, odvisno od vrednosti umetno predpisane temperature. Od zahtevane kvalitete rezultatov je odvisno, kako dolgo postopek simuliranega ohlajanja ponavljamo. Točnemu globalnemu minimumu se sčasoma poljubno približamo.

### 5. Strjevanje neskončnega vogala. Rezultati generatorja mreže

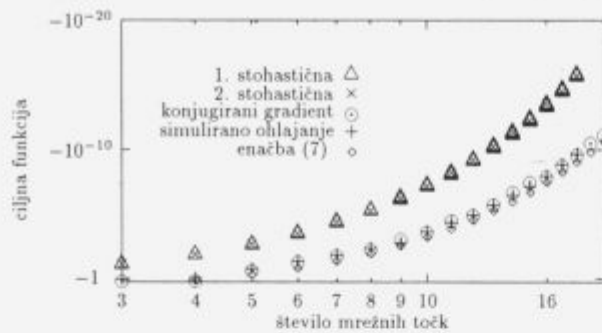
Ocenimo najprej učinkovitost optimizacijske metode. Optimizacija prvih dveh funkcij ni problematična. Prva funkcija doseže svoj minimum pri katerikoli porazdelitvi točk po  $\bar{\Omega}$ . Minimumu druge funkcije se pri  $m$  točkah približamo na relativno natančnost koordinat  $10^{-5}$  v približno  $0,1 \cdot m$  zaporednih korakih metode konjugiranega gradienta.

Izkaže se, da je minimalna vrednost tretje ciljne funkcije na  $n$ -razsežni kocki pri pogoju  $m^{1/n} \in \mathbb{N}$  enaka

$$\text{ObjFunc}_3(x) = \frac{-1}{(\sqrt[n]{m-1})^m} \quad (7)$$

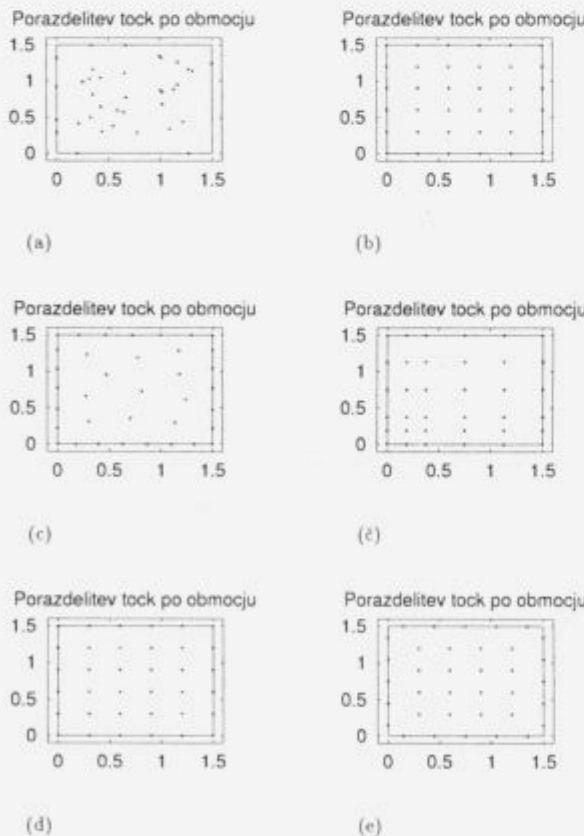
Z metodo konjugiranega gradienta smo se tej vrednosti pri poljubni začetni porazdelitvi  $m$  točk pri  $m > 10$  približali, vendar je nismo dosegli, ker optimizacijski algoritem ni našel globalnega minimuma. Z metodo simuliranega ohlajanja smo se uspešneje približali globalnemu minimumu, kar kaže **slika 1**.

Generator mreže smo preskusili na modelu strjevanja neskončnega pravokotnega vogala. Model je bolj obširno opisan v ref. 1,2. Neskončno območje smo aproksimirali s končnim kvadratom s stranico, dolgo 1,5 enote. Ob začetnem času je vogal pri konstantni začetni temperaturi, višji od temperature tališča. Po začetnem času temperatura na robu območja skokovito pade na temperaturo, nižjo od evtektične, in vogal začne zmrzovati.



**Slika 1:** Primerjava dveh optimizacijskih metod za minimizacijo na enotskem kvadratu. Najprej so predstavljene vrednosti dveh stohastičnih porazdelitev točk, kot smo jih uporabili za začetni približek v optimizacijskem postopku. Nato so predstavljene minimalne vrednosti, dobljene z metodo konjugiranega gradienta, z metodo simuliranega ohlajanja in z enačbo (7). Slika kaže, da se pri številu mrežnih točk, enakemu kvadratu celega števila, s konjugiranim gradientom in simuliranim ohlajanjem dobro približamo teoretičnemu globalnemu minimumu ciljne funkcije

**Figure 1:** A comparison of two optimization methods for minimizing on a unit square. First, values were given for two stochastically distributed points which were used as starting points for an optimization algorithm. Then the minimal values given by the conjugated gradient method, the simulated annealing method and by equation (7) were added. The figure shows that if the number of grid points is equal to the square of an integer, the theoretical minimum value of the object function can be closely approximated with the conjugated gradient and simulated annealing methods



**Slika 2:** Primerjava porazdelitev mrežnih točk, kot jih da minimizacija prve (a), druge (c) in tretje (d) ciljne funkcije, z enakomerno (b), neenakomerno (č) in premaknjeno (e) mrežo

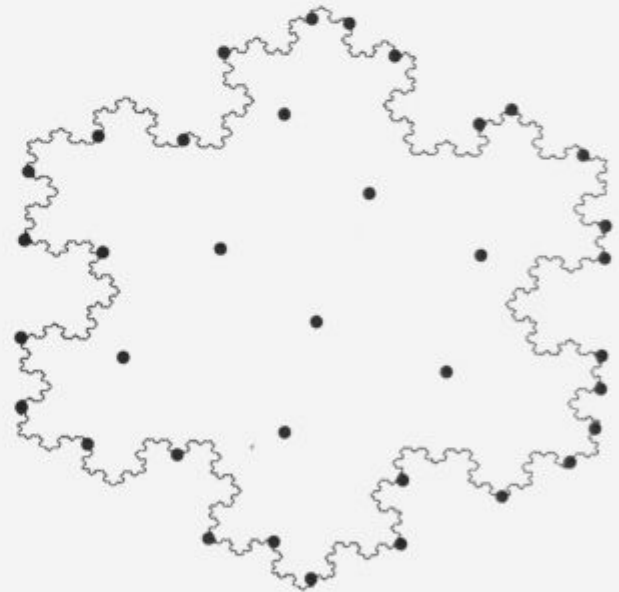
**Figure 2:** Comparison of grid point distribution given by the minimization of the first (a), second (c) and third (d) object function, with equidistant (b), non-equidistant (č) and displaced (e) grids

V delu<sup>2</sup> smo raziskovali, kako na temperaturno polje vpliva širina talilnega intervala in kako se vede numerična metoda pri različnih vrednostih Stefanovega števila in pri različnih diskretizacijah območja. Numerično izračunano temperaturno polje v mrežnih točkah smo primerjali s semianalitičnimi vrednostmi, dobljenimi s standardno referenčno metodo<sup>12</sup>.

V pričujočem delu smo te raziskave nadaljevali s poudarkom na optimalni porazdelitvi danega števila mrežnih točk, tako da je napaka temperaturnega polja kar najmanjša. Podrobneje smo primerjali povprečno in maksimalno vrednost napake temperaturnega polja, dobljenega z novimi diskretizacijami območja, z napakami, izračunanimi z enakomerno, neenakomerno in premaknjeno diskretizacijo območja<sup>1</sup>. Diskretizacije so shematično predstavljene na **sliki 2** z značilnimi mrežami, ki jih tvorimo s šestintridesetimi mrežnimi točkami.

Ugotovili smo, da je najmanj primerna stohastična mreža. Pri njej so napake temperaturnega polja povprečno za velikostni red večje od napak temperaturnega polja na mrežah, dobljenih z minimizacijo ostalih dveh ciljnih funkcij. Napake temperaturnega polja na mrežah, dobljenih z minimizacijo druge in tretje ciljne funkcije, so si po velikosti podobne. V izračunanih primerih se napake razlikujejo za največ 10 %, pri čemer so pri drugi ciljni funkciji vedno večje.

Če je število mrežnih točk kvadrat celega števila, smo z minimizacijo tretje ciljne funkcije dobili po kvadratu enako porazdeljene točke in dosegli enako napako, kot pri enakomerni mreži, cf.1, s čimer smo preverili uspešnost minimizacijskega postopka.



**Slika 3:** Območje v obliki fraktalne Kochove snežinke smo z minimizacijo druge ciljne funkcije diskretizirali s 36 točkami. Ni znano, ali obstaja za poljubno število mrežnih točk na tem območju ena sama porazdelitev točk, ki da globalni minimum druge oziroma tretje ciljne funkcije, vsekakor pa je v njegovi okolici veliko lokalnih minimumov, od katerih smo enega dosegli. S slike razberemo, da je notranjih točk 8 in robnih 28

**Figure 3:** Domain in the form of a fractal Koch snowflake which was discretized over 36 points with the second object function. It is not known whether there is a unique distribution for an arbitrary number of grid points which gives a global minimum value for the second or third object functions, however many local minima exist in their vicinity, which can be used to approximate the global minimum. The figure indicates 8 interior and 28 boundary points

## 6. Zaključek

Po dosedanjih preskusih ocenjujemo, da je predlagana optimizacijska tehnika s simuliranim ohlajanjem primerna in učinkovita metoda za generacijo optimalne diskretizacije poljubnega povezanega območja, na katerem rešujemo nelinearni problem s taljenjem in strjevanjem z metodo robnih elementov z dvojno recipročnostjo. Kot primer uspešne realizacije mreže naj navedemo diskretizacijo Kochove fraktalne snežinke na **sliki 3**.

Čeprav smo v dosednji raziskavi preskusili več minimizacijskih tehnik, je pri velikem številu mrežnih točk ( $m > 10^4$ ) minimizacija še vedno dolgotrajna. Nadaljevanje raziskav bo zato kazalo predvsem v smer, kako pospešiti minimizacijo.

## Zahvala

Predstavljena raziskava je del temeljnih raziskav pri projektu Dvofluidno modeliranje sistemov s trdno-kapljevinskimi faznimi prehodi. Avtorja se za podporo zahvaljujeta Ministrstvu za znanost in tehnologijo Republike Slovenije in Mednarodnemu biroju Raziskovalnega centra Jülich, Nemčija.

## Literatura

- <sup>1</sup> Šarler, B., Košir, A., Kuhn, G.: Dual reciprocity boundary element method for Stefan problems, (v recenziji) *Int. J. Numer. Methods Eng.*
- <sup>2</sup> Šarler, B., Košir, A.: Solution of melting and solidification problems by the dual reciprocity boundary element method, Lewis, R. W.: *Numerical Methods in Thermal Problems*, Pineridge Press, Swansea 1993, 139-150
- <sup>3</sup> Košir, A., Šarler, B.: Influence of mesh on dual reciprocity boundary element method for Stefan problems, *GAMM Abstracts* 1994
- <sup>4</sup> Knuth, D. E.: *Axioms and hulls*, Springer, Berlin 1992
- <sup>5</sup> Arvo, J.: *Graphics gems*, Academic Press, New York 1992
- <sup>6</sup> Harrington, S.: *Computer graphics*, McGraw-Hill, New York 1987
- <sup>7</sup> Fletcher, R., Powell, M. J. D.: A rapidly convergent method for minimization, *Comp. J.* 6, 1963, 163-168
- <sup>8</sup> Fletcher, R., Reeves, C. M.: Function minimization by conjugate gradients, *Comp. J.* 7, 1964, 149-154
- <sup>9</sup> Polak, E.: *Computational methods in optimization*, Academic Press, New York 1971
- <sup>10</sup> Shewchuk, J. R.: An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain, *Carnegie Mellon University report* 1994
- <sup>11</sup> Szu, H., Hartley, R.: Fast simulated annealing, *Phys. Lett. A* 122, 1987, 157-162
- <sup>12</sup> Rathjen, K. A., Jiji, L. M.: Heat conduction with melting or freezing in a corner, *J. Heat Transfer* 93, 1971, 101-109