

高效计算网格壁面距离的 KD 树方法*

郭中州¹, 何志强¹, 夏陈超², 陈伟芳¹

(1. 浙江大学 航空航天学院, 浙江 杭州 310027;

2. 上海宇航系统工程研究所, 上海 201109)

摘要: 计算流体动力学的一些领域中经常要用到流场点到壁面的最小距离, 为了提高壁面距离计算的精度和效率, 将 KD 树应用于非结构网格的壁面距离计算, 计算了若干三维外形的壁面距离, 结果表明: 基于 KD 树的网格壁面距离计算方法鲁棒性好, 计算效率和结果精度高, 适应复杂外形的能力强; 算法的通用性好, 可以拓展应用到多种网格类型。

关键词: KD 树; 壁面距离; 非结构网格

中图分类号: V211.3 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-2486(2017)04-021-05

KD tree method for efficient wall distance computation of mesh

GUO Zhongzhou¹, HE Zhiqiang¹, XIA Chenchao², CHEN Weifang¹

(1. School of Aeronautics and Astronautics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China;

2. Shanghai Institute of Astronautics System Engineering, Shanghai 201109, China)

Abstract: In some fields of computational fluid dynamics, the nearest distance from a certain point in the flow field to the wall surface is usually required. In order to improve the precision as well as the efficiency of the computation result, the KD tree method was applied to the wall distance computation of unstructured mesh, and then the wall distances of several three dimensional configurations were computed. Results show that the method computing wall distances based on KD tree can achieve the capability of great robustness, high efficiency and precision, and is suitable for complex configuration. Besides, the method has good universality so that it can be applied to many other types of mesh.

Key words: KD tree; wall distance; unstructured mesh

在计算流体动力学 (Computational Fluid Dynamics, CFD) 的一些领域中, 壁面距离是一个重要参数, 准确、高效地计算壁面距离对于 CFD 模拟具有重要意义。如:

在湍流模拟中, 壁面距离反映了湍流的近壁面特性。目前常用的湍流模型, 比如 S-A 模型^[1]、 $k-\varepsilon$ 模型^[2]、 $k-\omega$ 模型^[3] 以及分离涡模拟 (Detached Eddy Simulation, DES)^[4], 许多都需要使用最小壁面距离来进行模化。

在非结构网格生成领域, 生成物面附近的网格时, 需要计算网格点的壁面距离, 以控制生成的黏性层网格的高度。

在生物流体力学领域, 利用 CFD 模拟血液中的气溶胶颗粒的沉积分布时, 为了跟踪颗粒轨迹, 也需要计算颗粒点到壁面的距离^[5]。

以上问题均可以归结为计算流场中的点到壁

面的距离, 常用的做法是: 对于每个流场网格内点, 取该点到最近的壁面网格点的距离为最近壁面距离。目前常用的计算方法可以分为以下两类:

第一类是基于比较查找的计算方法。最常见的是线性查找方法, 即遍历所有壁面点, 比较后得出最小值, 计算过程简单易行。但当壁面网格较密时, 计算量会很大。尤其在计算包含动网格状态的湍流流动时, 迭代过程中需要反复求解壁面距离。流场计算效率会大幅降低。

针对线性查找的缺点, Boger^[6] 利用交替方向数字树 (Alternative Digital Tree, ADT) 和三角不等式实现了壁面距离的快速计算, 并指出, ADT 算法对于内流问题的壁面距离计算效率较高, 但对外流问题则计算效率较低; 王刚等^[7] 提出了一种逐层推进快速算法, 该算法计算效率比线性查

* 收稿日期: 2016-07-09

基金项目: 国家重点基础研究发展计划资助项目 (2014CB340201)

作者简介: 郭中州 (1990—), 男, 河南新乡人, 博士研究生, E-mail: guozhongzhou@aliyun.com;

陈伟芳 (通信作者), 男, 教授, 博士, 博士生导师, Email: chenwfndt@163.com

找方法的高 2~3 个量级。

第二类是基于求解偏微分方程的计算方法。最常用的是 Eikonal 方程。Tucker 等^[8]详细讨论了 3 种基于偏微分方程的方法,指出求解 Eikonal 方程时,度量系数必须采用迎风格式计算。徐晶磊等^[9]通过将 Eikonal 方程构造成一个求解壁面距离的输运方程,计算了重叠网格的壁面距离。

基于偏微分方程的方法计算效率较高。但是相对线性查找而言,其得到的结果为近似值,需要额外编制求解程序,进行偏微分方程的迭代求解;对于结构和非结构网格,求解方法有一定差别,增加了 CFD 程序的复杂程度。同时,该方法的物理含义较为抽象,并且在应用于复杂工程问题中时,收敛性和收敛速度难以保证。

KD 树^[10]是一种对多维数据进行划分的数据结构,其本质上是一种平衡二叉树,广泛用于多维空间的邻近搜索,尤其适合于维度远小于样本元素数目的问题。本文基于 KD 树数据结构,通过将壁面点构建成一棵 KD 树实现了壁面距离的快速计算。在范畴上属于上述的第一类方法。

1 计算方法

1.1 KD 树的生成算法

已知 K 维空间中一个给定的集合 S ,若采用各维的方差作为划分标准,则 KD 树的建立过程如下:

1) 创建一棵空的 KD 树。

2) 如果集合 S 中只有一个元素,则将该元素设置为当前子树的根节点。

3) 如果集合 S 中含有多个元素,则计算所有元素在各个维度上的方差,得到方差最大的维度,记为 $dmax$,然后将 S 中的元素按 $dmax$ 维度的分量值由小到大进行排序。取位于正中间的元素作为当前子树的根节点。 $dmax$ 称为根节点的分裂维,将根节点之前的元素放入一个新的子集 L 中,根节点之后的元素放入一个新的子集 R 中。这样,就将原来的集合 S 分割成了两个数目基本平衡的子集。

4) 对两个子集 L 和 R 递归执行过程 2 和过程 3,直到新的子集为空集。

1.2 最近距离查找算法

假设要查找的矢量为 V ,KD 树中离 V 最近的元素为 C ,最近距离为 $Dmin$,则在一棵给定的 KD 树中查找离 V 最近的元素的步骤为:

1) 确定查找路径。从当前树的根节点开始,

递归地向下访问 KD 树。记当前树节点的分裂维为 $dmax$,若当前树节点的 $dmax$ 维度的分量值小于 V 在 $dmax$ 维的分量值,则递归访问树节点的左子树,否则递归访问树节点的右子树,直至访问到某个叶子节点,即表明 V 与该叶子节点在同一子空间。与 V 距离最近的元素也应当在该子空间附近。

在访问过程中,同时计算经过的树节点与 V 的距离 dis ,如果 $dis < Dmin$,则更新 $Dmin$ 的值。同时将 C 的值更新为树节点所对应的元素值。

2) 回溯。沿着步骤 1 中的访问路径进行回溯。记当前回溯到的树节点为 son ,其双亲节点为 $parent$,兄弟节点为 $brother$ 。设 $parent$ 在分裂维上的分量值为 Xm ,如果以 V 为中心,以 $Dmin$ 为半径的超球体与超平面 Xm 相交,则按步骤 1 递归访问以 $brother$ 为根节点的子树。

当回溯到根节点后结束回溯。最终得到集合中离 V 最近的元素 C 以及最近距离 $Dmin$ 。

1.3 时间复杂度分析

假设网格单元数目为 m ,边界点的数目为 n ,所有点均为三维,线性查找方法是遍历所有壁面点进行比较,求出最短壁面距离。进行一次查找的时间复杂度为 $O(n)$,查找所有单元的壁面距离的时间复杂度为 $O(m \times n)$ 。

采用求解偏微分方程的方法计算壁面距离时,需要进行迭代求解,记迭代至收敛所需迭代次数为 N ,由于每次迭代需要遍历所有单元,则总的时间复杂度为 $O(m \times N)$ 。Elias 等^[11]得到的结论为 N 与网格点数成正比。根据文献^[8]和文献^[9]的结果,对于较为简单的外形,仅需几十到几百步就可以得到收敛的结果,但是对于复杂外形,目前尚未有文献进行广泛研究,得到收敛结果可能耗时很久,收敛性难以保证。

采用 KD 树方法查找时,需要将网格所有壁面点生成为一棵 KD 树。遍历网格的所有单元,对每个单元中心点在 KD 树中进行查找,就可以得到所有单元的壁面距离。

建立 KD 树的时间复杂度为 $O(n \log_2(n))$ 。如果 KD 树中的点在空间中随机分布,则进行一次查找,平均时间复杂度为 $O(\log_2(n))$ 。查找所有单元的壁面距离的平均时间复杂度为 $O(n \log_2(n)) + O(m \times \log_2(n))$ 。对于三维网格,通常 m 比 n 要大一个量级,所以,建立 KD 树的复杂度可以略去,总的平均时间复杂度为 $O(m \times \log_2(n))$ 。由于网格的壁面点在空间中的分布通常有一定规律,而非随机分布,所以上述一次查找

的复杂度 $O(\log_2(n))$ 只是一个理想值,实际的平均查找次数一般大于这个值。对于三维网格,KD树查找的最坏时间复杂度为 $O(n^{2/3})$ 。实际查找时,KD树方法的平均时间复杂度介于理想值和最坏值之间,与外形的壁面网格点分布有关。

2 程序设计

采用面向对象方法编制基于KD树方法的壁面距离计算程序,KD树模块主要包含了KD树节点类和KD树类,类图如图1所示。

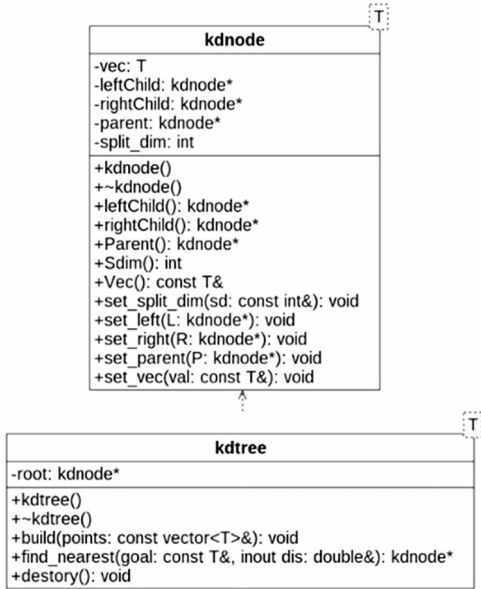


图1 KD树节点类和KD树类

Fig.1 KD tree node class and KD tree class

图中, T 为模板参数, KD树类的主要操作包括:

1) $build(const\ vector\ <T\ \&\ points)$: 从一个给定的点集 $points$ 生成KD树。对于非结构网格,点集取为所有壁面面元的中心点。

2) $find_nearest(const\ T\ \&\ goal, double\ \&\ dis)$: 查找并返回到给定点 $goal$ 距离最近的点,同时返回最近距离值。

3) $destroy()$: 销毁KD树。

由于二叉树数据结构本身的递归性,以上操作均为递归操作。算法简洁明了,易于编程实现。

3 算例验证

为了验证程序的可靠性,分析实际计算时的计算效率,采用编制的程序计算圆柱体、双椭球^[12]、空天飞机^[12]以及DLR-F4^[13]外形的壁面距离。

3.1 圆柱体

圆柱体的直径为0.2 m,生成的网格为四面

体和三棱柱混合网格。其中,四面体单元数目为94 037个,三棱柱单元数目为22 580个。将圆周设置为壁面,壁面的面元数目为2258个。得到壁面距离如图2所示。

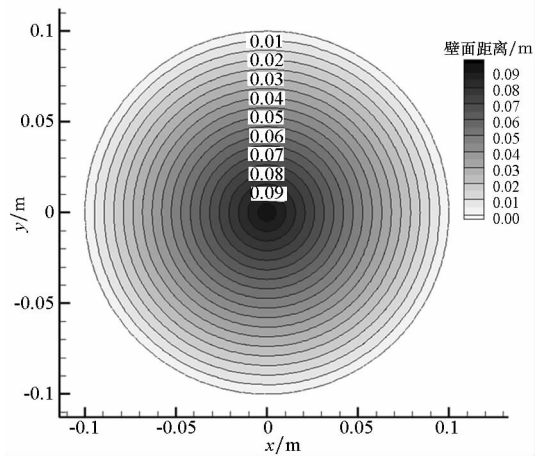


图2 圆柱外形计算结果

Fig.2 Result of cylinder configuration

对于圆柱,壁面距离存在解析值,将沿 $y = 0$ 截线上的壁面距离计算值与解析值进行对比,结果如图3所示。由图3可看出,解析值与KD树方法得到的计算结果吻合良好,从而证明了计算方法的正确性。

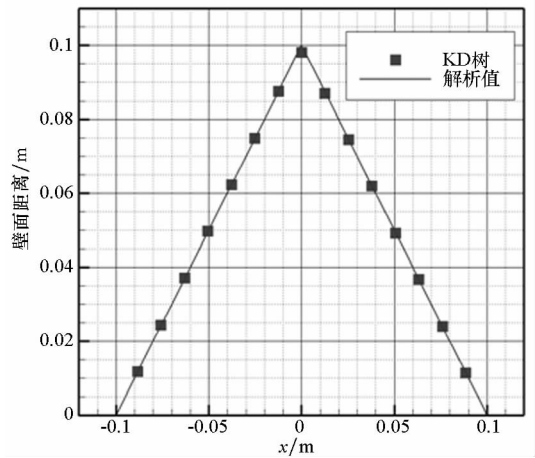


图3 KD树计算的壁面距离与解析值对比

Fig.3 Comparison of wall distance computed by KD tree method and theoretical value

3.2 双椭球外形

双椭球外形如图4所示,采用的网格类型为四面体,单元数目为479 939个,壁面面元数目为50 525个。经验证,KD树的计算结果与线性查找的结果完全一致。从图5和图6也可以看出,两种方法得到的距离等值线图完全一致。因此,后续算例只展示KD树方法的结果。

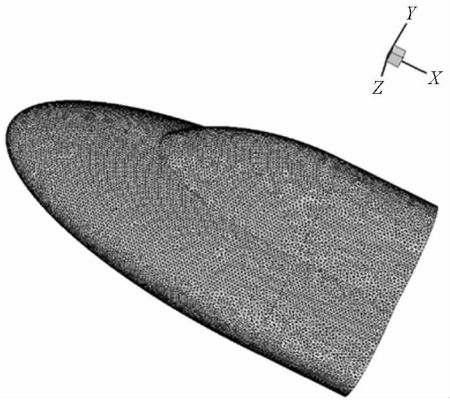


图 4 双椭球外形

Fig. 4 Configuration of dual ellipsoid

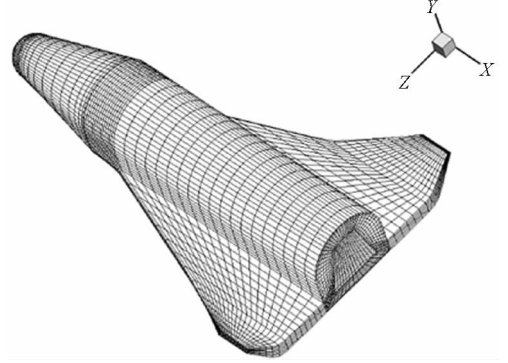


图 7 空天飞机外形

Fig. 7 Configuration of space shuttle

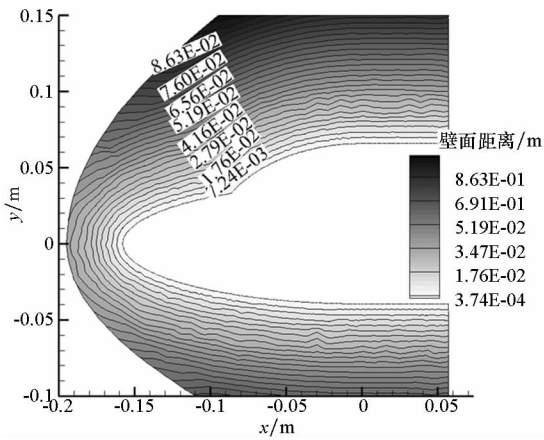


图 5 线性查找结果

Fig. 5 Result of liner search

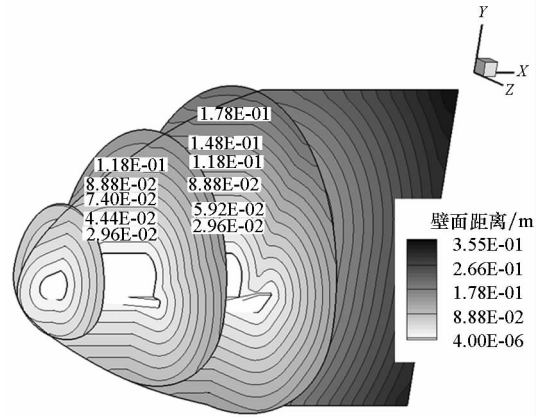


图 8 空天飞机外形计算结果

Fig. 8 Result of space shuttle configuration

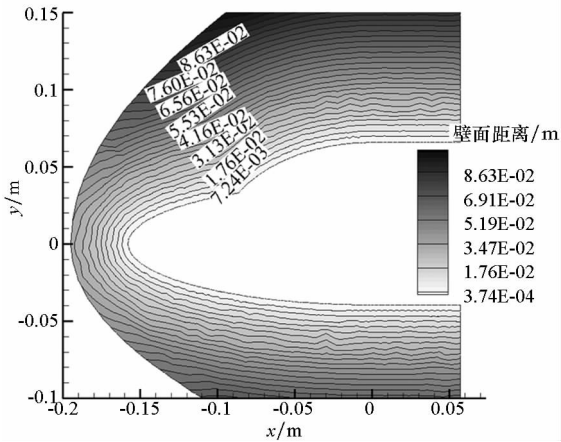


图 6 KD 树计算结果

Fig. 6 Result of KD tree method

3.3 空天飞机外形

壁面网格如图 7 所示,使用的网格是由结构网格转化成的非结构六面体网格。网格单元数目为 669 546 个,壁面面元数目为 9478 个,计算得到的壁面距离如图 8 所示。

3.4 DLR - F4 外形

DLR - F4 是第一届阻力预测会议的外形。网格采用四面体网格,单元数目为 947 793 个,物面面元数目为 30 462 个,计算得到的壁面距离如图 9 所示。所得距离的等值线图光滑、平滑,符合物理实际。

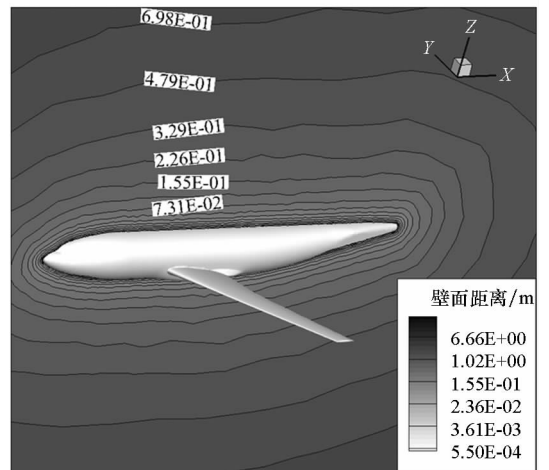


图 9 DLR - F4 外形计算结果

Fig. 9 Result of the DLR - F4 configuration

3.5 计算效率分析

为了考察实际计算中的计算效率,针对双椭球外形和空天飞机外形,分别计算了一系列壁面网格点数目不同的外形的壁面距离,统计了平均查找次数,结果如图 10 所示。

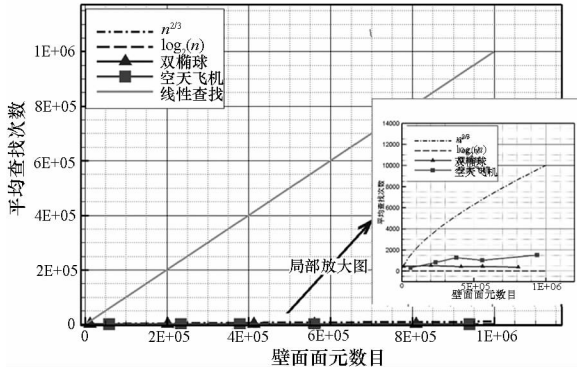


图 10 不同壁面点数目时的平均查找次数

Fig. 10 Average search time of different number of wall elements

由图 10 可以看出:对于实际的网格,KD 树方法的平均查找次数要大于 $O(\log_2(n))$ 的量级,但是小于 $O(n^{2/3})$ 量级,更远小于线性查找的 $O(n)$ 量级,一般比线性查找降低了两到三个数量级,从而证明 KD 树查找方法在计算效率上具有明显优势。图中测试算例对应的网格单元数目从几十万到几百万不等,可直接采用串行方式查找,对于更大的网格量,可采用并行方式进行查找。

4 结论

发展了基于 KD 树的非结构网格壁面距离计算方法,计算了双椭球和空天飞机、DLR - F4 等外形的壁面距离,以及同一外形不同物面点数目网格,验证了程序的精度、效率和鲁棒性。所得结果与线性查找的结果完全一致,表明该方法可以准确高效地计算复杂外形的网格壁面距离。

此外,该方法只需知道所有壁面网格点的坐标,无须对点集的拓扑关系作任何假定,因此可以便捷地移植到现有的 CFD 程序中。其不仅适用于非结构混合网格,而且适用于结构网格,还可以拓展应用到重叠网格、滑移网格、多重网格等多种网格拓扑类型的壁面距离计算以及网格之间的流场信息传递,具有广阔的应用场景。

参考文献 (References)

- [1] Spalart P R, Allmaras S R. A one-equation turbulence model for aerodynamic flows [C]//Proceedings of 30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA 1992 - 439, 1992.
- [2] Launder B E, Spalding D B. The numerical computation of turbulent flows[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1990, 3(2): 269 - 289.
- [3] Menter F R. Zonal two equation kappa-omega turbulence models for aerodynamic flows; NASA-TM-111629 [R]. NASA Technical Reports Server, 1993.
- [4] Spalart P R, Jou W H, Strelets M, et al. Comments on the feasibility of LES for wings, and on hybrid RANS/LES approach [C]//Proceedings of Advances in DNS/LES, 1997, 1: 4 - 8.
- [5] Tambasco M, Steinman D A. Calculating particle-to-wall distances in unstructured computational fluid dynamic models[J]. Applied Mathematical Modelling, 2001, 25(10): 803 - 814.
- [6] Boger D A. Efficient method for calculating wall proximity[J]. AIAA Journal, 2001, 39(12): 2404 - 2406.
- [7] 王刚, 曾铮, 叶正寅. 混合非结构网格下壁面最短距离的快速计算方法 [J]. 西北工业大学学报, 2014 (4): 511 - 516.
WANG Gang, ZENG Zheng, YE Zhengyin. An efficient search algorithm for calculating minimum wall distance of unstructured mesh [J]. Journal of Northwestern Polytechnical University, 2014(4): 511 - 516. (in Chinese)
- [8] Tucker P G, Rumsey C L, Spalart P R, et al. Computations of wall distances based on differential equations [J]. AIAA Journal, 2004, 43(3): 539 - 549.
- [9] 徐磊磊, 阎超, 范晶晶. 通过求解输运方程计算壁面距离 [J]. 应用数学和力学, 2011, 32(2): 135 - 143.
XU Jinglei, YAN Chao, FAN Jingjing. Computations of wall distances by solving a transport equation [J]. Applied Mathematics and Mechanics, 2011, 32(2): 135 - 143. (in Chinese)
- [10] Bentley J L. Multidimensional binary search trees used for associative searching [J]. Communications of the ACM, 1975, 18(9): 509 - 517.
- [11] Elias R N, Martins M A D, Coutinho A L G A. Simple finite element-based computation of distance functions in unstructured grids [J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2007, 72(9): 1095 - 1110.
- [12] 李素循. 典型外形高超声速流动特性 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2007.
LI Suxun. Hypersonic flow characteristics of typical appearance [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2007. (in Chinese)
- [13] Levy D W, Zickuhr T, Vassberg J, et al. Summary of data from the first AIAA CFD drag prediction workshop [C]// Proceedings of 40th AIAA Aerospace Sciences Meeting, AIAA Paper 2002 - 0841, 2002, 3: 1 - 31.