

*Г.А. Шинкаренко, О.Г. Шинкаренко*

## Чисельне дослідження варіаційних задач міграції пасивних домішок\*

Прогнозування наслідків перенесення та дифузії певної субстанції (тепла, вологи, поживних речовин, забруднювальних домішок тощо) в рухомому середовищі є важливою передумовою у вирішенні різноманітних проблем охорони довкілля та сучасного господарювання [1,3,6,8]. Поряд із очевидною актуальністю можливих застосувань відшукання просторово-часового розподілу концентрації субстанції, що нас цікавить, потребує кваліфікованого використання сучасних числових методів та їх комп'ютерної реалізації [2,7,9,11,13] (див. огляд з цієї тематики [14]).

У даній статті продовжується дослідження праць [4,5] з таких питань, як оцінка впливу стисливості (нестисливості) середовища на коректність задачі міграції та можливості практичного використання запропонованих проекційно-сіткових схем [4,5] шляхом розв'язування модельних задач з домінуючим конвективним перенесенням.

**1. Постановка задачі.** Виділимо в рухомому суцільному середовищі обмежену зв'язну область  $\Omega$  точок  $x = \{x_i\}_{i=1}^n$  евклідового простору  $R^n$ . Нехай межа  $\Gamma$  області  $\Omega$  неперервна за Ліппіцем. Позначимо через  $\nu = \{\nu_i\}_{i=1}^n$  одиничний вектор зовнішньої нормалі до  $\Gamma$ ,  $\nu_i = \cos(\nu, x_i)$ .

Припустимо, що рух частинок цього середовища описується відомим вектором швидкості  $w = \{w_i(x, t)\}_{i=1}^n$ , де  $t$  — змінна часу  $0 < t \leq T < +\infty$ .

Сформулюємо тепер початково-крайову задачу про перенесення (дифузію) пасивної субстанції в такому середовищі:

© Шинкаренко Г.А., Шинкаренко О.Г., 1996

\* Ця робота була частково підтримана Міжнародною Соросівською програмою підтримки освіти в галузі точних наук (ISSEP), грант № APU 051113.

знайти концентрацію домішки  $\phi = \phi(x, t)$  та вектор її повного потоку  $q = \{q_i(x, t)\}_{i=1}^n$  такі, що

$$\begin{aligned} \phi' + \operatorname{div} q + (\sigma - \operatorname{div} w)\phi &= f \\ q_i - \phi w_i + \sum_{j=1}^n \mu_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} &= 0 \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T] \\ \phi = 0, \quad (x, t) \in \Gamma_\phi \times (0, T], \quad \operatorname{mes}(\Gamma_\phi) > 0, \\ \sum_{i=1}^n (q_i - \phi w_i) v_i &= \alpha(\phi - \phi_c), \quad (x, t) \in \Gamma_q \times (0, T], \quad \Gamma_q = \Gamma \setminus \Gamma_\phi \\ \phi|_{t=0} &= \phi_0, \quad x \in \Omega \end{aligned} \quad (1.1)$$

Тут  $\mu = \{\mu_{ij}(x)\}_{i,j=1}^n$  — матриця заданих коефіцієнтів турбулентності, що має властивості симетрії та додатної визначеності:

$$\begin{cases} \mu_{ij}(x) = \mu_{ji}(x) \\ \sum_{i,j=1}^n \mu_{ij}(x) \xi_i \xi_j \geq \mu_0 \sum_{i=1}^n \xi_i^2, \quad \mu_0 = \text{const}, \quad \xi \in R^+ \end{cases}$$

$\sigma = \sigma(x) \geq 0$  — коефіцієнт біохімічного розпаду субстанції;  $\alpha = \alpha(x) \geq 0$  — коефіцієнт взаємодії з контактуючим середовищем;  $f = f(x, t)$  та  $\phi_c = \phi_c(x, t)$  — інтенсивності джерел субстанції, розподілених в області  $\Omega$  та на межі  $\Gamma$  відповідно;

$$\begin{aligned} \Gamma_\phi &:= \left\{ x \in \Gamma \mid \sum_{i=1}^n w_i(x, t) v_i \leq 0 \right\}, \\ \phi' &:= \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad \operatorname{div} w := \sum_{i=1}^n \frac{\partial w_i}{\partial x_i}. \end{aligned}$$

**Зауваження 1.1.** Нехай  $L := \operatorname{diam} \Omega$ , тоді, виконавши заміну змінних за правилом  $z_i := \frac{x_i}{L}$ , надамо вектору повного потоку  $q$  такого вигляду:

$$q_i := \|w\| \left\{ \phi \frac{w_i}{\|w\|} - \frac{1}{Pe} \frac{1}{\|\mu\|} \sum_{j=1}^n \mu_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial z_j} \right\}, \quad (1.2)$$

де  $\|w\|$  і  $\|\mu\|$  деякі норми вектора  $w$  і матриці  $\mu$  відповідно;

$Pe := \frac{\|w\| L}{\|\mu\|}$  — число Пекле, що характеризує міру впливу конвекції та дифузії на процес міграції субстанції. Зокрема, у випадку  $Pe \rightarrow \infty$

формула (1.2) сигналізує, що рівняння параболічного типу задачі (1.1) вироджується в рівняння гіперболічного типу першого порядку. Тому малі збурення (породжені, наприклад, апроксимацією початкових і краївих умов тощо) можуть необмежено поширюватись без помітного згасання. Отже, при великих числах Пекле розв'язування задачі (1.1) ставить підвищені вимоги до чисельних схем.

**2. Варіаційна постановка задачі.** Введемо простори  $H := L^2(\Omega)$ ,  $W := H(\operatorname{div}; \Omega)$ ,  $V := \{v \in H^1(\Omega) | v = 0, x \in \Gamma_s\}$  і сформулюємо відповідну (1.1) варіаційну задачу:

задано  $\phi_0 \in H$ ,  $w \in L^\infty(0, T; W)$ ,  $l \in L^2(0, T; V')$ ;

знайти  $\phi \in L^2(0, T; V)$  таку, що

$$\begin{cases} m(\phi'(t), \varphi) + b(w(t); \phi(t), \varphi) + a(\phi(t), \varphi) = \langle l(t), \varphi \rangle & \forall \varphi \in V \\ m(\phi(0) - \phi_0, \varphi) = 0 \end{cases} \quad (2.1)$$

Тут

$$\left\{ \begin{array}{l} m(\phi, \varphi) := \int_{\Omega} \phi \varphi \, dx, \\ b(w; \phi, \varphi) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left\{ \sum_{i=1}^n w_i \left( \varphi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} - \phi \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) - \phi \varphi \operatorname{div} w \right\} dx + \\ \qquad + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_q} \phi \varphi \sum_{i=1}^n w_i v_i \, d\gamma, \\ a(\phi, \varphi) := \int_{\Omega} \left\{ \sum_{i,j=1}^n \mu_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} + \sigma \phi \varphi \right\} dx + \int_{\Gamma_q} \alpha \phi \varphi \, d\gamma, \\ \langle l, \varphi \rangle := \int_{\Omega} f \varphi \, dx + \int_{\Gamma_q} \alpha \phi_c \varphi \, d\gamma. \end{array} \right. \quad (2.2)$$

**Зауваження 2.1.** Якщо додатково припустити, що міграція субстанції відбувається у нестисливому середовищі, то задача (2.1) збігається з задачею (2.2) з праці [4].

**Теорема 2.1** (про коректність варіаційної задачі):

Нехай дані задачі (2.1) такі, що

$$b(w; \phi, \varphi) \geq 0 \quad \forall \phi, \varphi \in V. \quad (2.3)$$

Тоді варіаційна задача (2.1) має єдиний розв'язок  $\phi$ , причому

$$\phi \in L^\infty(0, T; H) \cap L^2(0, T; V), \quad \phi' \in L^2(0, T; V')$$

і правильною є апріорна оцінка

$$m(\phi(t), \phi(t)) + \int_0^t \{a(\phi, \phi) + b(w(\tau); \phi, \phi)\} d\tau \leq m(\phi_0, \phi_0) + \int_0^t \|l(\tau)\|_{V'}^2 d\tau \quad \forall t \in (0, T]$$

**Доведення.** У разі виконання припущення (2.3) правильною є доведення теореми 4.1 з праці [4].

**3. Проекційно-сіткова схема.** Для розв'язування варіаційної задачі (2.1) застосуємо напівдискретизацію Гальоркіна за просторовими змінними й однокрокову рекурентну процедуру інтегрування в часі [10]; в результаті отримаємо схему:

задано параметри  $h, \Delta t, \gamma = \text{const} > 0$  і  $\phi^0 \in R^N$ ;

знайти вектор  $\phi^{j+1} \in R^N$  такий, що

$$\begin{cases} \{M + \Delta t \gamma (B(t_{j+\frac{1}{2}}) + A)\} \phi^{j+\gamma} = \Delta t \gamma L(t_{j+\frac{1}{2}}) + M \phi^j \\ \phi^{j+1} := \phi^{j+1} + \gamma^{-1} (\phi^{j+\gamma} - \phi^j), \quad j = 0, 1, \dots, K \end{cases} \quad (3.1)$$

Побудова (3.1) передбачає, що процедура Гальоркіна використовує базис  $\{\varphi_i\}_{i=1}^N$  підпростору  $V_h \subset V$ ,  $\dim V_h = N$ , та інтегрування в часі виконується з кроком  $\Delta t$ ,  $\Delta t K = T$ . Тоді наближений розв'язок задачі (2.1) визначається формулою

$$\phi_{h, \Delta t}(x, t) := \sum_{k=1}^N \left\{ \phi_k^j + \frac{t - t_j}{\Delta t} \phi_k^{j+1} \right\} \varphi_k(x), \quad \forall t \in [t_j, t_{j+1}] \quad (3.2)$$

$\forall x \in \Omega \quad j = 0, 1, \dots, K$

**4. Чисельні приклади.** Для чисельної реалізації розв'язку задачі (2.1) розроблено програмний комплекс для персональних комп'ютерів мовою C++. Передбачена можливість розв'язування стаціонарних і нестаціонарних задач з використанням методу скінчених елементів. Обчислення виконується на ізопараметричних білінійних та біквадратичних чотирикутних скінчених елементах. Програма дає змогу повністю використовувати розширену пам'ять комп'ютера, а вільне місце на жорсткому диску розглядається як

віртуальна пам'ять, що забезпечує розв'язування задачі на великих сітках.

Робота програми перевірена на конкретних задачах. Розв'язувались двовимірні стаціонарні та нестаціонарні задачі з домінуючими конвективними членами.

**4.1. Стационарна задача.** В L-подібній області  $\Omega = (0,3) \times (0,2) \setminus (0,1) \times (0,1)$  розв'язувалась стаціонарна крайова задача перенесення (дифузії) [12], для якої  $\sigma = 0$ ,  $\mu_y = 10^{-3} \delta_y$ ,  $w = [1, 0]^T$ . На границі області задана однорідна крайова умова типу Діріхле. Для цих значень параметрів  $Pe \approx 1000$ . Для знаходження розв'язку методом скінчених елементів використовувались біквадратичні чотирикутні елементи з 9 вузлами.

На рис. 1, 2 подані результати виконаних обчислень. У випадку, зображеному на рис. 1, розбиття області складається з 80 елементів з 361 вузлом. “Локальне” число Пекле на елементі  $Pe_e \approx 250$ . Добре видно осциляції розв'язку в тих частинах області  $\Omega$ , де суттєвою є зміна  $grad \phi$ . В іншому випадку (рис. 2), розбиття області складається з 320 елементів з 1361 вузлом. “Локальне” число Пекле на елементі  $Pe_e \approx 125$ . Можемо простежити, як зростає якість обчислень зі зменшенням “локального” числа Пекле.

**4.2. Нестационарна задача.** У прямокутнику  $\Omega = (-1, 1) \times (-1, 1)$  розв'язувалась початково-крайова задача (1.1), яка описує рух по колу початкового викиду субстанції. У цьому прикладі  $\sigma = 0$ ,  $\mu_y = 10^{-3} \delta_y$ ,  $w = w(t) = [2 \sin 2\pi t, -2 \cos 2\pi t]^T$ ;  $\phi_0(x)$  — функція з компактним носієм, яка характеризує початковий розподіл субстанції і не дорівнює нулю лише в області  $D = (-5/6, -1/3) \times (-1/6, 1/6)$ . Таким чином, за одиничний відрізок часу середовище робить повний оберт навколо точки  $(0, 0)$  за рухом годинникової стрілки. На рис. 3 зображені результати обчислень, проведених на 900 біквадратичних елементах з 3721 вузлом. Для інтегрування в часі використовувалась схема (3.1) з параметрами  $\gamma = 0.5$ ,  $\Delta t = 1/30$ : а — розподіл у початковий момент часу, б — після 5 кроків, в — після 20 кроків.

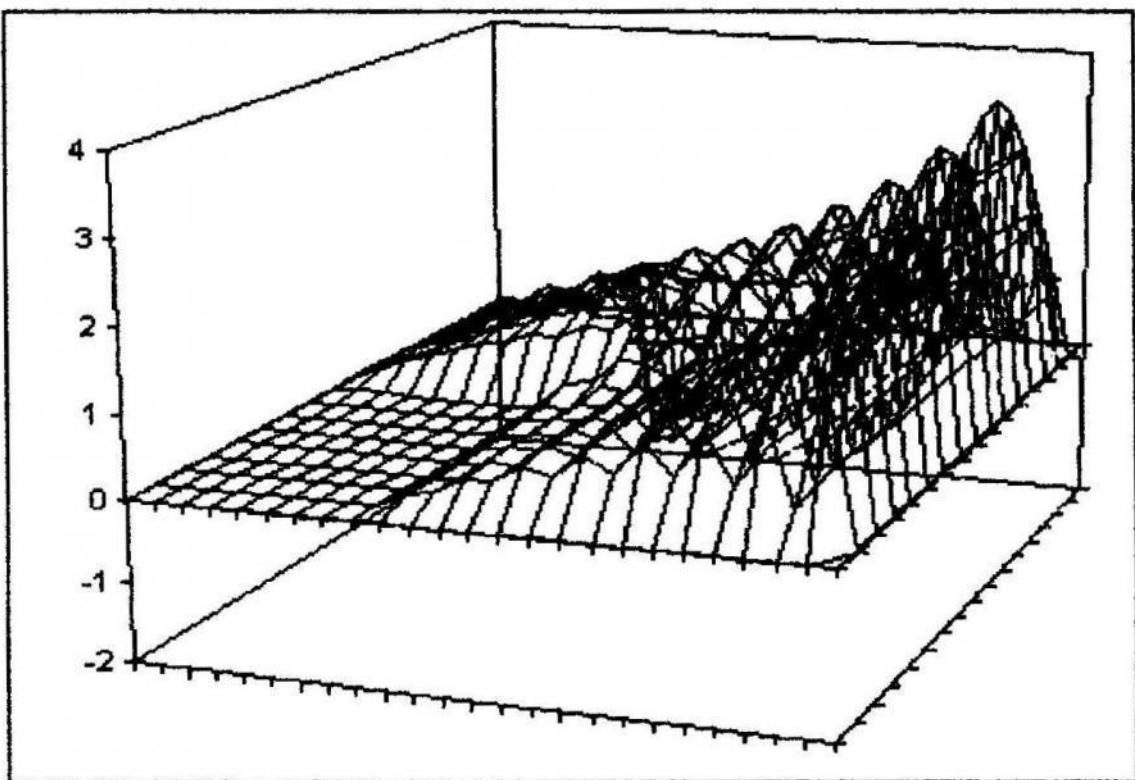


Рис. 1

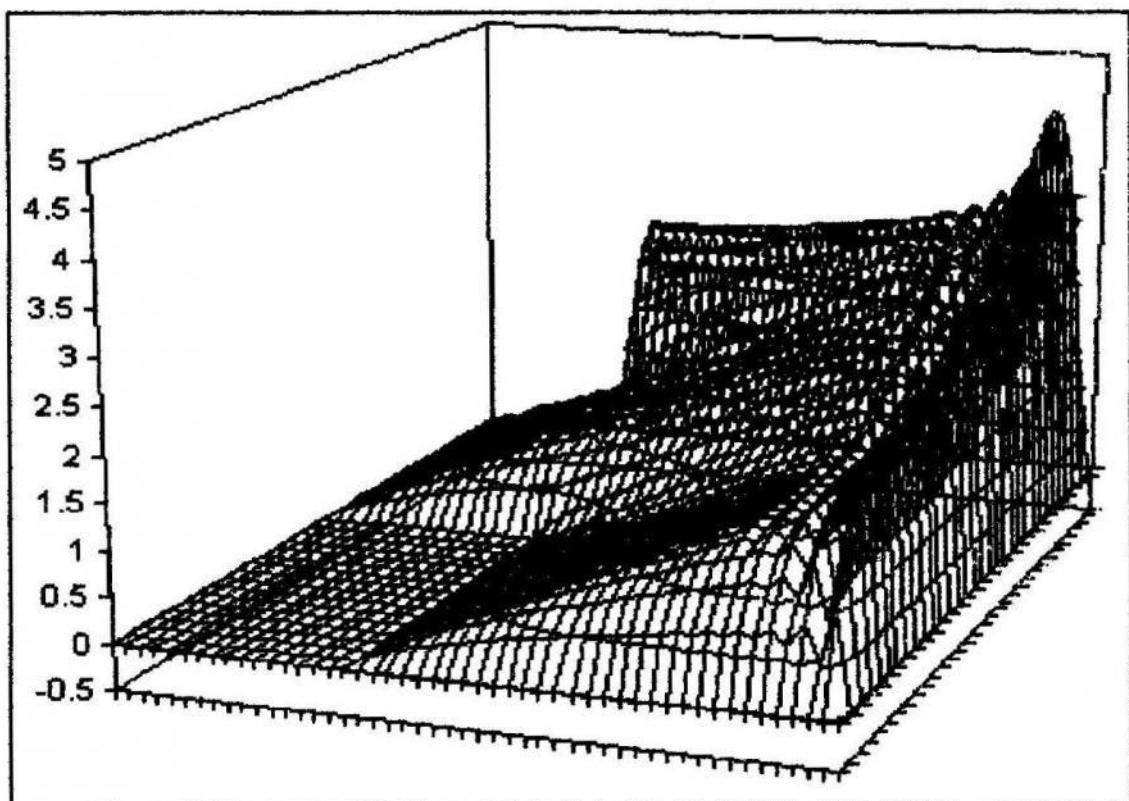


Рис. 2

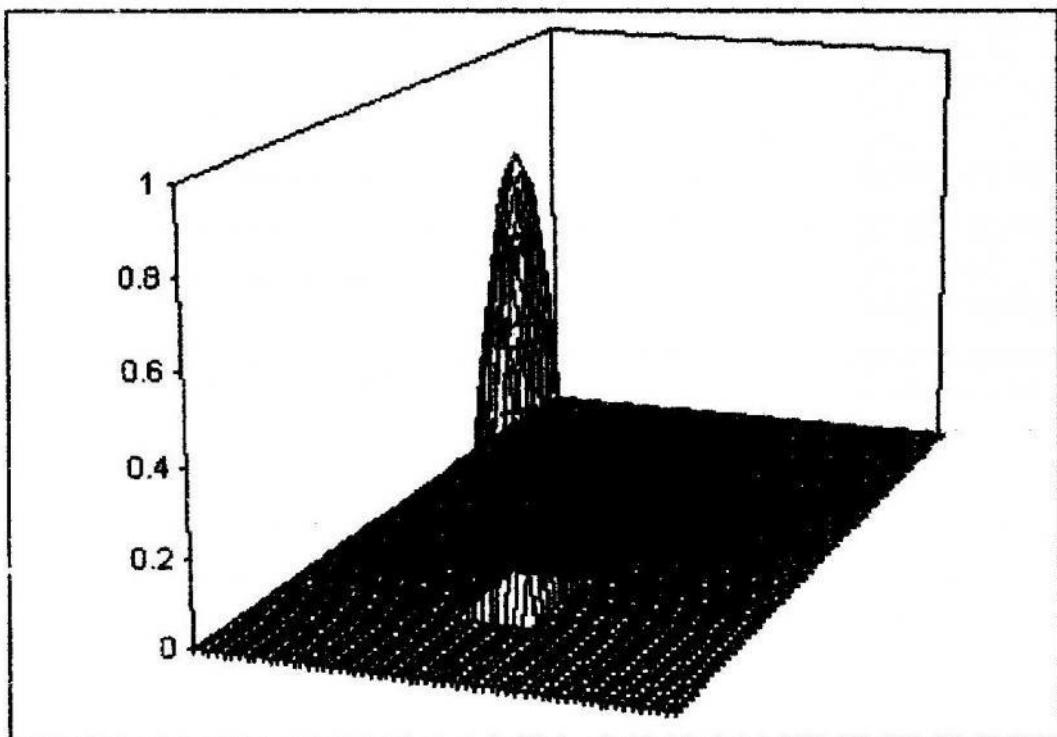


Рис. 3, а

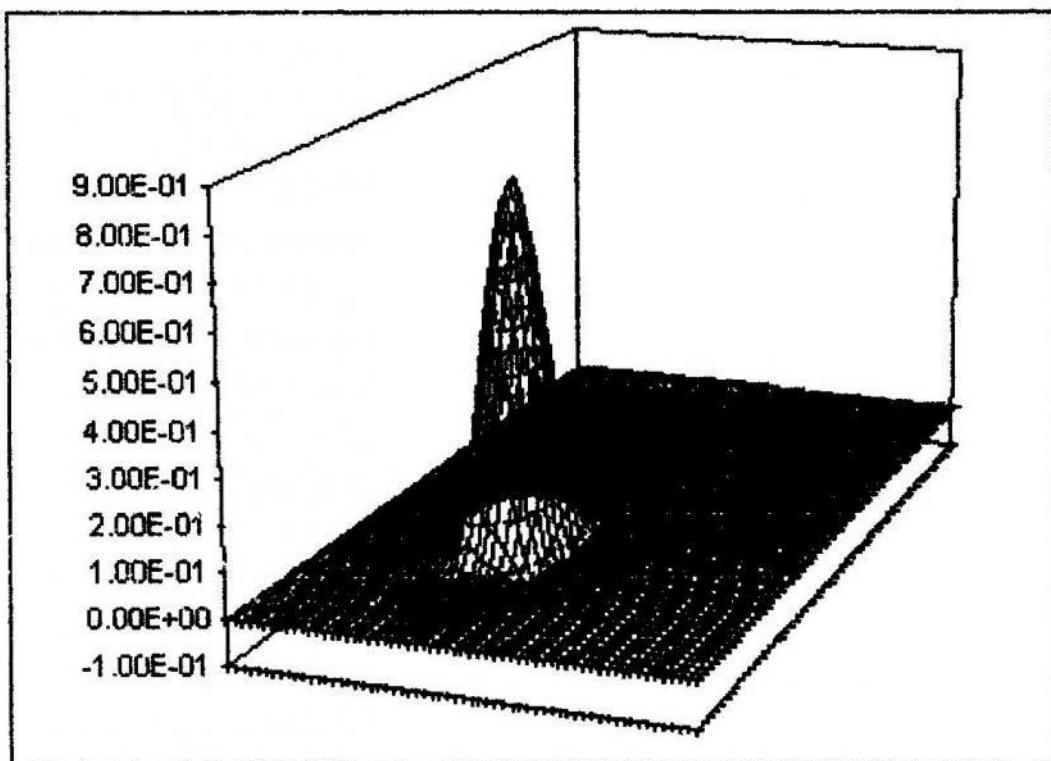


Рис. 3, б

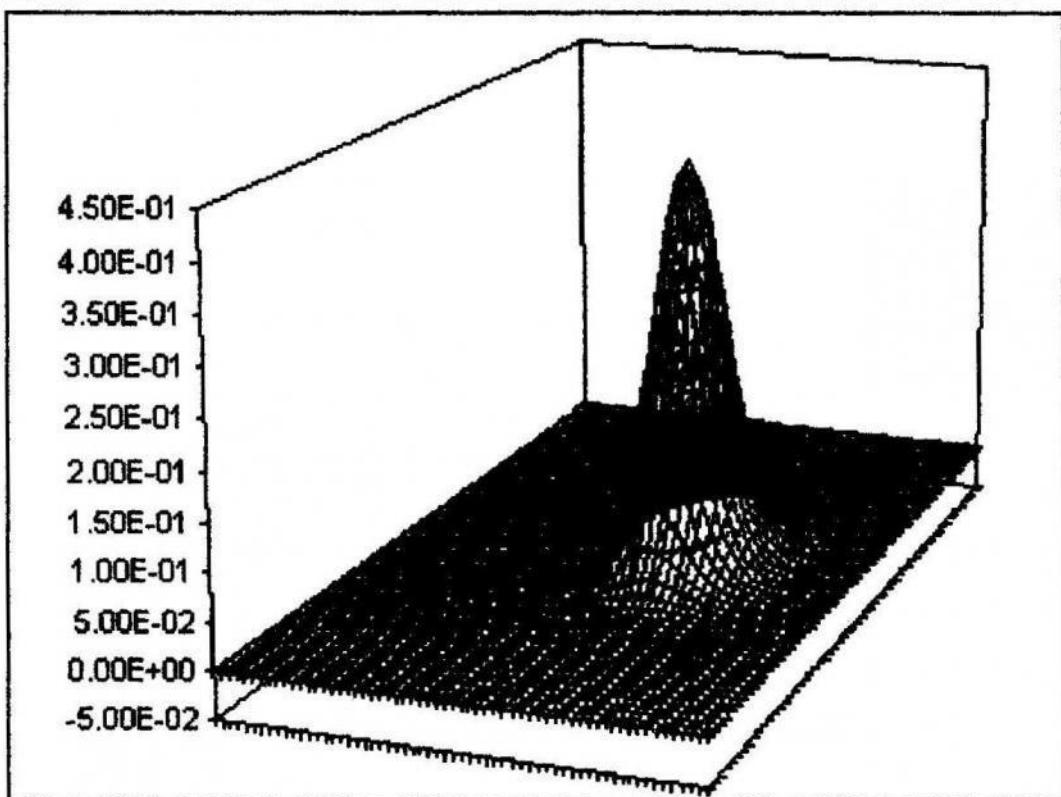


Рис. 3, в

1. Владимиров А.М., Ляхин Ю.И., Матвеев Л.Т., Орлов В.Г. Охрана окружающей среды. Л.:Гидрометеоиздат, 1991. 424 с.
2. Дейнека В.С., Сергиенко И.В., Скопецкий В.В. Математические модели и методы расчета задач с разрывными решениями.К.: Наук. думка, 1995. 262 с.
3. Запити атмосфери от промышленных загрязнений. Справ. в 2 ч./Под ред. Кальверта С., Инглунда Г.М. М.:Металлургия, 1988.Ч.2. 712 с.
4. Зубов В.М., Терлецька С.Ю., Шинкаренко Г.А. Розв'язуваність та апроксимація узагальнених розв'язків початково-крайових задач міграції атмосферних домішок //Віsn. Львів. ун-ту. Сер. мех.-мат. 1995. Вип. 41. С. 62-70.
5. Зубов В.М., Шинкаренко Г.А. Розв'язуваність та апроксимація варіаційних задач переносу та дифузії домішок у нестисливій атмосфері//Віsn. Львів. ун-ту. Сер. мех.-мат. 1992. Вип. 37. С. 55-60.
6. Лукнер Л., Шестаков В.М. Моделирование миграции подземных вод.М.:Недра, 1986. 208 с.
7. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.:Наука, 1982. 320 с.
8. Сиротенко О.Д. Математическое моделирование водно-теплового режима и продуктивности агрозкосистем. Л.: Гидрометеоиздат, 1981. 168 с.
9. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. В 2 т. М:Мир, 1991. Т.17 504 с.
10. Шинкаренко Г.А. Проекційно-сіткові методи розв'язування початково-крайових задач. К.: НМК ВО, 1991. 88 с.
11. Bermudes A. Numerical modelling of water pollution problems//Environment, economics and their mathematical models/Ed. Diaz J.-I., Lions J.-L.. Paris:Masson, 1994. P. 1-18.
12. Glowinski R. Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems. N.Y.: Springer, 1984.

493р. 13. Hughes T.J.R., Wing K.L., Brooks A. Finite Element Analysis of Incompressible Viscous Flows by the Penalty Function Formulation//J. Comput. Phys. 1979. Vol.30. N1. P. 1-60, 14. Pironneau O. The Finite Element Method for Hyperbolic Systems//Finite Element: Theory and Application/Ed. Dwoyer D.L. et. al. N.Y. etc.: Springer, 1988. P. 67-93.

*Стаття надійшла до редколегії 11.01.96.*

УДК 539. 214

*P. I. Кісіль, I. C. Муха*

## Двовимірні схеми методу скінчених елементів для дослідження пружнопластичного деформування тонкостінних гнучких тіл

Нехай тверде тіло займає об'єм  $V$  в  $R^3$  та обмежене поверхнею  $S$ . Припустимо, що тіло віднесене до деякої системи криволінійних координат  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  і

$$V = \{\bar{R}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) : (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \in v\}.$$

Розглядатимемо процес деформування твердого, трансверсально-ізотропного, однорідного тіла під дією силових навантажень. Припустимо, що всі зовнішні та внутрішні сили є консервативними. Крім цього, вважатимемо, що деформації тіла є помірно малими, тобто такими, при яких приріст віртуальних робіт внутрішніх сил може бути поданий у вигляді

$$\delta W_B = \int_V \Sigma : \delta \varepsilon(U) dV,$$

де  $\Sigma$  — симетричний тензор напружень Піоли-Кірхгофа;

$\varepsilon(U) = E(U) + \frac{1}{2} \Omega(U, U)$  — симетричний тензор деформацій Гріна;

$E(U) = \frac{1}{2} (\nabla U^T + \nabla U)$  — тензор лінійних (малих) деформацій;

$\nabla U$  — тензор дисторсії:  $[\nabla U]_{ij} = U_{j,i}$ ;  $\Omega(U, U)$  — деякий симетричний білінійний оператор.