

Я. Г. Савула, О. Г. Шинкаренко

Стабілізація чисельних розв'язків варіаційних задач міграції домішок: протипотокова схема

Вступ. Останнім часом багато уваги приділяється розробці ефективних чисельних схем для побудови наближених розв'язків задач міграції домішок з домінуючою конвекцією [1-7]. У такому випадку розв'язки задач можуть мати внутрішні та приміжеві шари – дуже вузькі області, де самі розв'язки та їх градієнти різко змінюються. Внаслідок цього, чисельні розв'язки, побудовані за схемою Гальоркіна, де параметр дискретизації занадто великий, щоб врахувати всі ці шари, можуть сильно осцилювати у всій області визначення. Щоб досягнути задовільної апроксимації, потрібно використовувати значення параметру дискретизації співрозмірні відношенню між дифузиею та конвекцією. У багатьох випадках такий підхід приводить до величезної кількості степенів свободи і, таким чином, до неможливості ефективного відшукування чисельного розв'язку.

Тому багатьма авторами запропоновано різні протипотокові схеми методу скінченних елементів (МСЕ) (див. напр. [4, 5]), які базуються на додаванні до вихідної чисельної схеми певної кількості штучної дифузії в напрямку потоку. Найбільшого поширення набули протипотокова схема методу Петрова – Гальоркіна та підхід що базується на понятті функцій-бульбашок. Останні дослідження [3] свідчать, що ці підходи є еквівалентними.

Дана праця демонструє відшукування наближених розв'язків варіаційних задач міграції домішок за допомогою протипотокової схеми МСЕ з використанням функцій-бульбашок. Описується математичне підґрунтя протипотокової схеми, а також наводяться результати розв'язування класичних тестових прикладів.

Варіаційна задача міграції домішок. Для простоти розглянемо стаціонарну задачу поширення пасивної домішки в нестисливому суцільному середовищі, яке займає двовимірну область $\Omega \subset R^2$ з ліпшіцевою границею Γ та зовнішньою нормаллю до неї $\nu = \{\nu_i\}_{i=1}^2$. Нехай рух частинок цього середовища описується відомим вектором швидкостей $w = \{w_i\}_{i=1}^2$. Тоді процес міграції домішки буде описува-

тись наступною крайовою задачею:

$$\begin{cases} L\phi = \mathbf{w} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) + \sigma \phi = f & \text{в } \Omega, \\ \phi = 0 & \text{на } \Gamma_\phi, \quad \Gamma_\phi \supset \{x \in \Gamma \mid \mathbf{w} \cdot \nu < 0\}, \\ -(\mu \nabla \phi) \cdot \nu = \alpha(\phi - \phi_c) & \text{на } \Gamma_q = \Gamma \setminus \Gamma_\phi \end{cases} \quad (1)$$

Тут $\phi = \phi(\mathbf{x})$ – шукана концентрація домішки, $\mu = \{\mu_{ij}(\mathbf{x})\}_{i,j=1}^p$ – симетрична додатно визначена матриця коефіцієнтів дифузії, $\sigma = \sigma(\mathbf{x})$ – коефіцієнт біохімічного розпаду, $\alpha = \alpha(\mathbf{x})$ – коефіцієнт обміну з навколишнім середовищем, $f = f(\mathbf{x})$, $\phi_c = \phi_c(\mathbf{x})$ – інтенсивності джерел домішки в області Ω та на межі Γ відповідно. Більш загальна постановка задачі про перенесення та дифузію домішок приведена в [1, 2].

Ввівши функціональні простори

$$H = L^2(\Omega), W = H(\text{div}; \Omega), V = \{\psi \in H^1(\Omega) \mid \psi(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \Gamma_\phi\},$$

сформулюємо відповідну (1) варіаційну задачу міграції субстанції [1,2]

$$\begin{cases} \text{задано } \phi_c \in H, \quad \mathbf{w} \in W, \quad l \in V' \\ \text{знайти } \phi \in V \text{ таку, що} \\ b(\mathbf{w}; \phi, \psi) + a(\phi, \psi) = \langle l, \psi \rangle \quad \forall \psi \in V. \end{cases} \quad (2)$$

Тут

$$\begin{aligned} b(\mathbf{w}; \phi, \psi) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} w_i \left(\psi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} - \phi \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) dx + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_q} \phi \psi \mathbf{w} \cdot \nu d\gamma, \\ a(\phi, \psi) &= \int_{\Omega} \left(\mu_{ij} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \sigma \phi \psi \right) dx + \int_{\Gamma_q} \alpha \phi \psi d\gamma, \\ \langle l, \psi \rangle &= \int_{\Omega} f \psi dx + \int_{\Gamma_q} \alpha \phi_c \psi d\gamma. \end{aligned} \quad (3)$$

Як характеристику впливу конвекції та дифузії на процес розповсюдження домішки введемо число Пекле $Pe = \text{diam}(\Omega) \|\mathbf{w}\| / \|\mu\|$. При домінуючій конвекції ($Pe \rightarrow \infty$) еліптичне рівняння (1) вироджується в рівняння першого порядку гіперболічного типу.

Задачу (2) будемо розв'язувати за допомогою МСЕ з використанням лінійних апроксимацій на трикутниках. Нехай $T_h = \{\Omega_e\}_e$ – деяке розбиття області Ω на трикутні скінченні елементи, де $h = \max_e \text{diam}(\Omega_e)$; тоді простір апроксимацій V_L буде мати вигляд

$$V_L = \{\psi \in H^1(\Omega) \mid \psi(x) = 0, x \in \Gamma_\phi, \psi - \text{лінійна на } \forall \Omega_e\}.$$

Протипотокова схема МСЕ. Ефект стабілізації за рахунок модифікації вихідної білінійної форми задачі (2) може бути отриманий за допомогою розширення простору апроксимацій наступним чином. Для кожного елемента Ω_e визначимо простір функцій-бульбашок:

$B_e = H_0^1(\Omega_e)$ та простір $V_B = \bigoplus_e B_e$. Будемо шукати розв'язок задачі (2) у просторі $V_h = V_L \oplus V_B$.

Таким чином, довільний елемент $\psi_h \in V_h$ може бути поданий у вигляді

$$\psi_h = \psi_L + \psi_B \in V_L \oplus V_B, \text{ а } \psi_B = \sum_e \psi_{B,e}, \psi_{B,e} \in B_e.$$

Тоді варіаційну задачу (2) можна записати наступним чином на просторі V_h

$$\begin{cases} \text{знайти } \phi_h = \phi_L + \phi_B \in V_h \text{ таку, що} \\ b(\mathbf{w}; \phi_L + \phi_B, \psi_L) + a(\phi_L + \phi_B, \psi_L) = \langle l, \psi_L \rangle \quad \forall \psi_L \in V_L, \\ b(\mathbf{w}; \phi_L + \phi_{B,e}, \psi_{B,e})_e + a(\phi_L + \phi_{B,e}, \psi_{B,e})_e = \\ = \langle l, \psi_{B,e} \rangle_e \quad \forall \psi_{B,e} \in V_{B,e}. \end{cases} \quad (4)$$

Тут індекс $(\cdot)_e$ означає, що всі інтеграли білінійних форм та функціоналу з (3) розглядається на скінченному елементі Ω_e .

Перше рівняння задачі (4) можна переписати у вигляді

$$b(\mathbf{w}; \phi_L, \psi_L) + a(\phi_L, \psi_L) + \sum_e [b(\mathbf{w}; \phi_{B,e}, \psi_L) + a(\phi_{B,e}, \psi_L)]_e = \langle l, \psi_L \rangle \quad (5)$$

Нехай L_e^* – лінійний оператор, спряжений до L на Ω_e (з нульовими крайовими умовами на $\partial\Omega_e$). Тоді, враховуючи, що

$$b(\mathbf{w}; u, v)_e + a(u, v)_e = (Lu, v)_e = (u, L_e^* v)_e, \quad (6)$$

отримаємо

$$\sum_e [b(\mathbf{w}; \phi_{B,e}, \psi_L) + a(\phi_{B,e}, \psi_L)]_e = \sum_e (\phi_{B,e}, L_e^* \psi_L)_e.$$

Тепер використаємо друге рівняння задачі (4), щоб виразити $\phi_{B,e}$ через ϕ_L . Враховуючи білінійність форм $a(\cdot, \cdot)$ та $b(\cdot, \cdot)$, можемо записати

$$\begin{aligned} b(\mathbf{w}; \phi_{B,e}, \psi_{B,e})_e + a(\phi_{B,e}, \psi_{B,e})_e = \\ = -[b(\mathbf{w}; \phi_L, \psi_{B,e}) + a(\phi_L, \psi_{B,e}) - \langle l, \psi_{B,e} \rangle]_e \end{aligned}$$

або ж

$$\begin{cases} L\phi_{B,e} = -[L\phi_L - f] & \text{в } \Omega_e, \\ \phi_{B,e} = 0 & \text{на } \partial\Omega_e. \end{cases} \quad (7)$$

Для кожного ϕ_L задача (7) має єдиний розв'язок $\phi_{B,e} \in B_e$, який можна знайти як

$$\phi_{B,e} = M_e(L\phi_L - f), \quad (8)$$

де M_e – обмежений оператор з $V'(\Omega_e) \mapsto B_e$. Підставляючи (8) в (5) і враховуючи співвідношення (6), отримаємо:

$$\begin{aligned} b(\mathbf{w}; \phi_L, \psi_L) + a(\phi_L, \psi_L) + \\ + \sum_e (M_e(L\phi_L - f), L_e^* \psi_L) = \langle l, \psi_L \rangle \quad \forall \psi_L \in V_L. \end{aligned}$$

Беручи до уваги, що коефіцієнти рівняння є кусково постійними на Ω_e , а V_L – простір кусково лінійних функцій, отримаємо остаточний вигляд протипотокової модифікації вихідної варіаційної задачі (2) при $\sigma = 0$:

$$\begin{cases} \text{знайти } \phi_L \in V_L \text{ таку, що} \\ b(\mathbf{w}; \phi_L, \psi_L) + a(\phi_L, \psi_L) + \\ + \sum_e \tau_e \int_{\Omega_e} (\mathbf{w} \cdot \nabla \phi_L - f)(\mathbf{w} \cdot \nabla \psi_L) dx = \langle l, \psi_L \rangle \quad \forall \psi_L \in V_L \end{cases} \quad (9)$$

$$\text{тут } \tau_e = \frac{1}{|\Omega_e|} \int_{\Omega_e} M_e(-1) dx.$$

Враховуючи (8), бачимо, що $M_e(-1) = b_e(x)$, де b_e – розв'язок крайової задачі

$$\begin{cases} Lb_e = 1 & \text{в } \Omega_e, \\ b_e = 0 & \text{на } \partial\Omega_e. \end{cases} \quad (10)$$

При $\|\mathbf{w}\|_{\Omega_e} h_e \gg \|\mu\|_{\Omega_e}$ розв'язок задачі (10) буде мати вигляд піраміди з однією (або двома) майже вертикальними гранями. Решта граней буде мати нахил $1/\|\mathbf{w}\|_{\Omega_e}$ у напрямку $\mathbf{w}|_{\Omega_e}$. Тому, якщо прийняти за $\hat{h}_e$ найдовший відрізок Ω_e паралельний $\mathbf{w}|_{\Omega_e}$, отримаємо

$$\int_{\Omega_e} b_e dx \approx \text{об'єм піраміди} = \frac{|\Omega_e|}{3} \frac{\hat{h}_e}{\|\mathbf{w}\|_{\Omega_e}} \Rightarrow \tau_e \approx \frac{\hat{h}_e}{3 \|\mathbf{w}\|_{\Omega_e}}.$$

Більш детальний опис підходу до стабілізації чисельних розв'язків задач міграції, який базується на використанні функцій-бульбашок приведений у працях [3, 4].

Чисельні приклади (задача Сміта і Хаттона). Цей класичний тест [7] характеризується досить складним полем швидкостей та різкими градієнтами шуканої концентрації домішки. Поле швидкостей задається аналітично у вигляді

$$\mathbf{w}(x, y) = 2y(1-x^2)\mathbf{i} - 2x(1-y^2)\mathbf{j}$$

в області $\Omega = (-1, 1) \times (0, 1)$. Джерела субстанції всередині області відсутні, на границі Γ задаються наступні крайові умови

$$\phi(x, 0) = 1 + \tanh((2x+1)\alpha), \quad y = 0, \quad -1 \leq x \leq 0$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0, \quad y = 0, \quad 0 \leq x \leq 1$$

$$\phi(x, y) = 1 - \tanh \alpha \quad \text{на решті границі.}$$

Тут параметр α набуває значення 10. Ми розглянемо два випадки: $\mu_{ij} = \text{const} = \mu = 10^{-1}$ та $\mu = 10^{-6}$ (див. рис. 1, 2 відповідно).

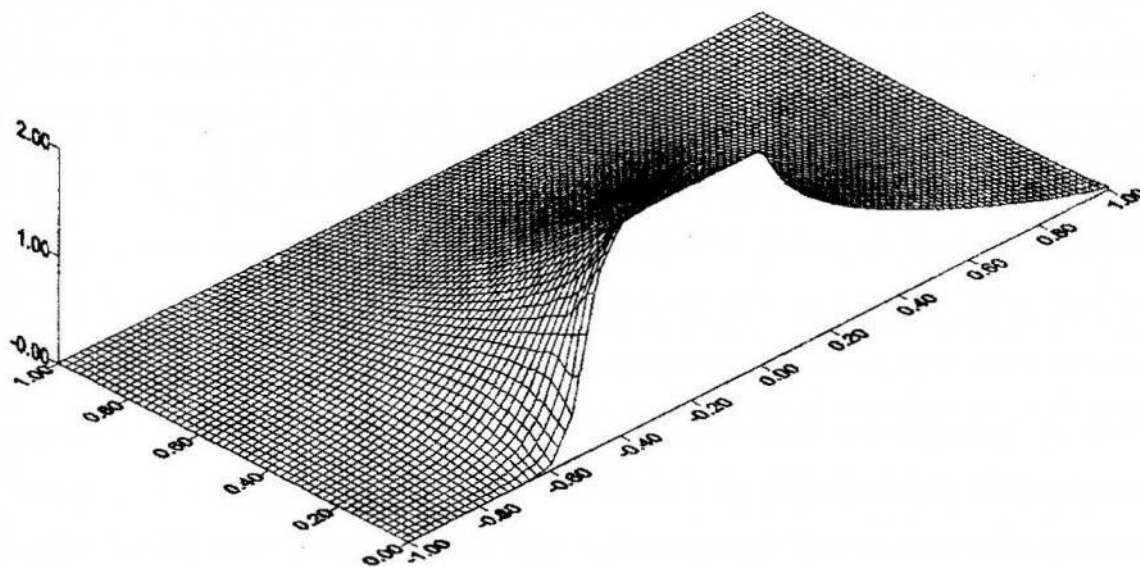


Рис. 1.

У першому випадку домінує дифузія. Конвекція практично не має впливу на розподіл концентрації домішки в області. У другому випадку домінує конвективне перенесення, дифузія практично відсутня.

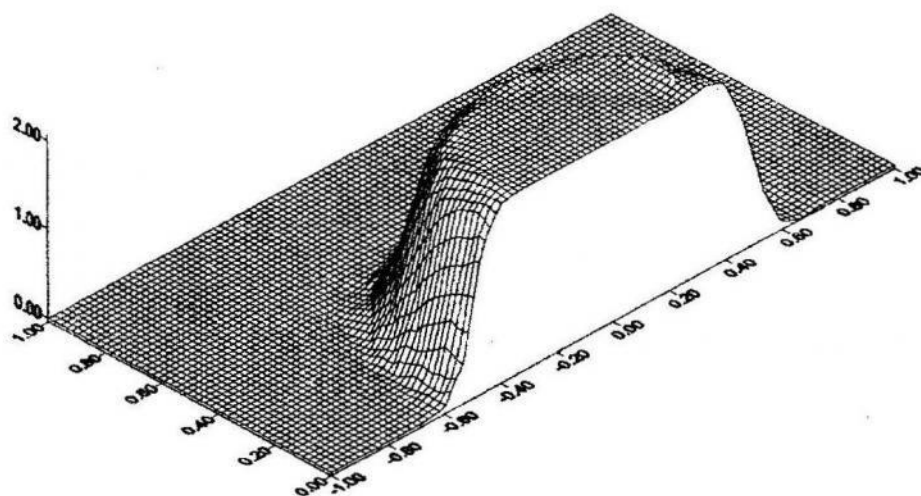


Рис. 2.

Яскраво видно різкі зміни значень концентрації в області внутрішнього шару, так як не відбувається вигладжування розв'язку внаслідок дифузії. Результати обчислень погоджуються з результатами праці [7].

Чисельні приклади (чиста конвекція). У цьому прикладі покладемо $\mu_{ij} = 0$ і будемо розв'язувати однорідне гіперболічне рівняння першого порядку в області $\Omega = (-1,1) \times (-1,1)$. Вектор швидкостей має вигляд

$$\mathbf{w} = \cos \theta \mathbf{i} + \sin \theta \mathbf{j}, \quad \theta = \pi/6.$$

Крайові умови ставимо лише на частині межі $\Gamma = \{(x, y) | x = -1, y \in (-1, 1)\} \cup \{(x, y) | y = -1, x \in (-1, 1)\}$ наступним чином:

$$\begin{cases} \phi = 0, y = -1, & x \in (-1, 1), \\ \phi = 0, x = -1, & y \in (-1, -\sin \theta), \\ \phi = 1, x = -1, & y \in [-\sin \theta, 1) \end{cases}$$

Отже, на границі розв'язок терпить розрив зі стрибком, рівним 1. На рис. 3 зображено результати обчислень на спеціальній сітці, де границі елементів розміщені вздовж лінії розриву (її напрямок задає вектор швидкостей).

Можна спостерігати незначне вигладжування розв'язку всередині області, не зважаючи на відсутність фізичної дифузії. Це відбувається через присутність штучної дифузії чисельної схеми. Результати проведених обчислень добре погоджуються з результатами праці [6].

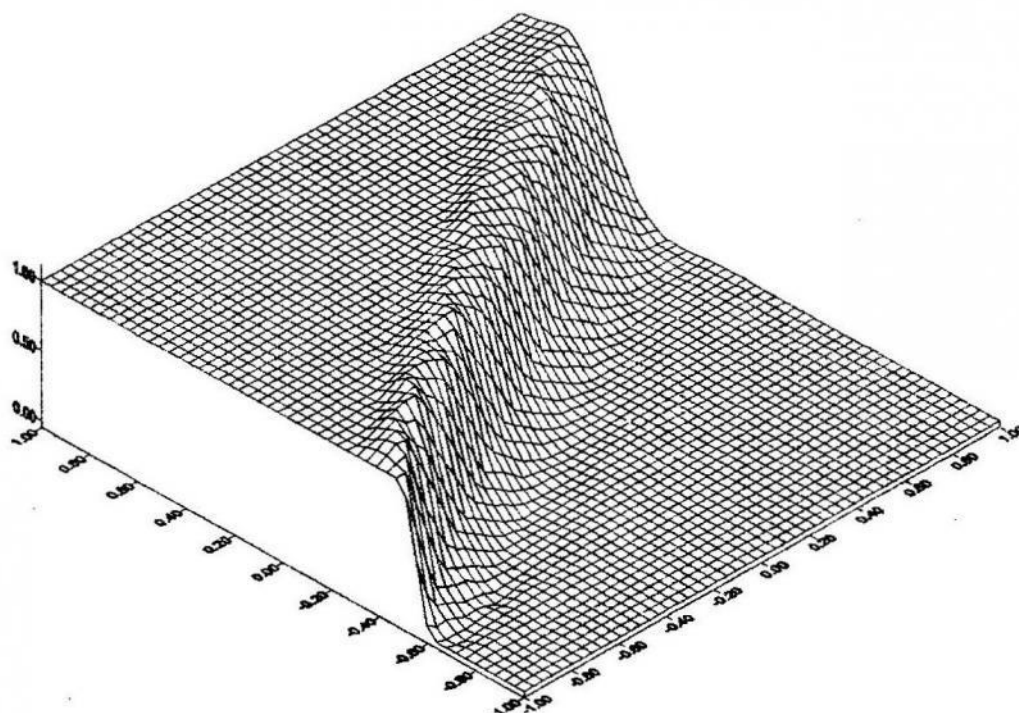


Рис. 3

Таким чином, вищенаведені приклади свідчать про те, що описана вище протипотокова схема МСЕ може ефективно застосовуватись як для розв'язування задач міграції домішок з великими числами Пекле, так і задач, які описують чисту конвекцію.

- 1.Зубов В.М.,Терлецька С.Ю.,Шинкаренко Г.А. Розв'язуваність та апроксимація узагальнених розв'язків початково-крайових задач міграції атмосферних домішок //Вісн. Львів. ун-ту сер. мех.-мат. вип. 41, (1995) с.62-70.
2. Шинкаренко Г.А., Шинкаренко О.Г. Чисельне дослідження варіаційних задач міграції пасивних домішок //Вісн. Львів. ун-ту сер. мех.-мат. вип. 44, (1996) с.37-45.
3. Brezzi F., et. al. $b = \int g$. //Comput. Methods Appl. Mech. Engrg, 145 (1997), pp. 329-339.
4. Brezzi F., et. al. Pseudo Residual-Free Bubbles and Stabilized Methods //Comput. Meth. Appl. Sciences, 1996, pp.3-8.
5. Brooks A.N., Hughes T.J.R. Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulation for Convective Dominated Flows with a Particular emphasis on the Incompressible Navier – Stokes Equations //Comput. Methods Appl. Mech. Engrg, 32 (1982), pp. 199-259.
6. Huang Y.-H. Higher-Order Exponential Difference Schemes for the Computations of the Steady Convection-Diffusion Equations //J. Comput. Physics, 129 (1996) pp. 134-159.
7. Paillere H. et. al. Multidimensional Upwind Residual Distribution Schemes for Convection-Diffusion Equation //Int. J. Numer. Meth. Fluids, 23 (1996), p. 923-936.

Стаття надійшла до редакції 22.10.97