

Применение неконформных конечноэлементных методов для моделирования процессов с фазовыми переходами

Ю.И. Шокин¹, Э.П. Шурина², Н.Б. Иткина²

¹ Институт вычислительных технологий СО РАН, Новосибирск, Россия

² Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия
shurina@online.sinor.ru

Аннотация. В работе предлагается вычислительная схема решения задачи с подвижной границей на базе разрывного метода Галеркина. Анализируется возможность применения многомасштабного подхода и принципы реализации этого подхода на уровне вариационных постановок, выбора функционального пространства и построения специального многоуровневого решателя. Приводятся результаты вычислительных экспериментов на примере моделирования процесса горения прямоугольного образца.

Ключевые слова: процессы с фазовыми переходами, неконформный метод конечных элементов, разрывный метод Галеркина, многомасштабные методы

1 Введение

Математическое моделирование физических процессов с фазовыми превращениями занимает значительный объем в исследованиях, определяемый широим спектром прикладных задач, таких как: задачи горения твердого топлива, моделирование процессов таяния и замерзания, задачи адсорбции и т.д. Особенности процедуры математического моделирования процессов с фазовыми переходами связаны с физической и геометрической неоднородностью среды, а именно, наличием разномасштабных включений с контрастными физическими свойствами и изменением конфигурации области моделирования. Учет этих особенностей определяет необходимость конструирования специальных вычислительных алгоритмов. Один из наиболее распространенных подходов к решению задач с подвижной границей - разработка специальных адаптивных сеток. Основные идеи построения неравномерных сеток для конечноразностных аппроксимаций изложены в работах Н.С. Бахвалова, Г.И. Шишкина, В.Д. Лисейкина и др. Существуют и другие успешно развивающиеся направления (Adaptive FEM), которые предлагают методику построения адаптивных конечноэлементных сеток. Разрывный метод Галёркина (DG-метод) один из наиболее перспективных численных методов решения задач в геометрически неоднородных областях с (D.Arnold, V.Cosburn, M.G.Larson, F.Brezzi)[1], [2]. Основное достоинство DG-метода для решения данного класса задач состоит в возможности гибкого применения p-h, h, p стратегий.

Понятие конформности и неконформности конечноэлементных методов можно интерпретировать следующим образом: 1) геометрическая неконформность, связанная с невозможностью точной аппроксимации криволинейных поверхностей симплексами и 2) функциональная неконформность, определяемая выбором пространства решения (пространство Лебега), не требующим выполнения условия непрерывности на межэлементных границах. Второй подход и послужил базой для развития различных модификаций разрывного метода Галеркина. Возможность определения разрывного решения исходной задачи (отсутствие требования непрерывности на межэлементных границах) естественным образом реализует процедуру построения несогласованных сеток [3], [4], [5] и др.

2 Постановка задачи

Горение - сложный физико-химический процесс превращения компонентов горючей смеси в продукты сгорания с выделением тепловой энергии. В данной работе математическая модель процесса горения представлена в виде нелинейного дифференциального уравнения

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T) + F(T), (x, y) \in \Omega, \quad (1)$$

где Ω – область моделирования, T – температура, $F(T)$, – источник тепловыделения, c – теплоёмкость, ρ – плотность, λ – теплопроводность вещества.

$$T = T_N(x, y) \in \partial\Omega,$$

$$T = T_0, t = 0,$$

где T_N – температура поджига, T_0 – температура окружающей среды.

3 Функциональные пространства

Введём триангуляцию τ_h области Ω на непересекающиеся открытые множества K такие, что $\bigcup_{K \in \tau_h} \bar{K} = \bar{\Omega}$, пространство $H^1(K)$ – множество функций, интегрируемых с квадратом на K вместе со своей первой производной со скалярным произведением $(u, v) = \int_K u(x)v(x) dx + \int_K u'(x)v'(x) dx$ и порождаемой им нормой $\|u\| = \left(\int_K u(x)^2 dx + \int_K (u'(x))^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}$ и пространства $H^1(\tau_h) = \{v(x) \in L^2(\Omega) : x \in \Omega, v(x)|_K \in H^1(K)\}$, $H_0^1(\tau_h) = \{v(x) : v \in H^1(\tau_h), v|_{\partial\Omega} = 0\}$, конечномерные подпространства пространств $H^1(\tau_h)$ и $H_0^1(\tau_h)$: $V_h = \{v \in H^1(K) : v|_K \in P^{p_K}(K) \forall K \in \tau_h\}$, $V_{h0} = \{v(x) \in V_h : v|_{\partial\Omega} = 0\}$, где $P^{p_K}(K)$ – множество полиномов степени не более p_K , определённых на K . А также векторное пространство $(H^1(\tau_h))^3 = \{q(x) : x \in \Omega, q|_K \in (H^1(K))^3 \forall K \in \tau_h\}$ и его конечномерное подпространство $\Sigma_h = \{q_h \in (L^2(\Omega))^3 : q_h|_K \in (P^{p_K}(K))^3 \forall K \in \tau_h\}$.

Определим поведение функций $u \in H^1(\tau_h)$ и $\sigma = \nabla u \in \Sigma_h$ на границах конечного элемента $K \in \tau_h$ как результат действия оператора следа $\hat{u}_K = (\hat{u}_K)_{K \in \tau_h} \in \operatorname{Tr}(\Gamma)$, где $\operatorname{Tr}(\Gamma) = \prod_{K \in \tau_h} L^2(\partial K)$, $\Gamma = \bigcup_{K \in \tau_h} \partial K$.

Существует множество способов определения конкретного вида операторов следа или так называемых численных потоков (см. [1]). В данной работе применяется способ Басси и др. [4]: $\hat{u} = \{u\}$, $\hat{\sigma} = \{\nabla u\} + \eta_e r([u])$, где $\nabla u = \sigma$, $\Gamma = \bigcup_{K \in \tau_h} \partial K$, $T(\Gamma) = \prod_{K \in \tau_h} L^2(\partial K)$, η_e – некоторое неотрицательное число, e – грань конечного элемента, на котором определены численные потоки.

Обозначим $V = H^1(\tau_h)$, $V_c = H^1(\Omega)$, $V_d = H^1(\tau_h)$. Представим пространство V как прямую сумму подпространств с разрывными (V_d) и с непрерывными функциями (V_c): $V = V_c \oplus V_d$. Тогда

$$u \in V \iff u = u_c + u_d, u_c \in V_c, u_d \in V_d. \quad (2)$$

Конечномерные подпространства пространств V_c и V_d будем обозначать соответственно V_{ch} и V_{dh} .

Для пространства V_{ch} будем использовать обычный лагранжев базис. Для пространства V_{dh} – разрывные финитные функции, имеющие в качестве носителя один конечный элемент.

4 Вариационная формулировка задачи

Найти $u \in V$ такое, что

$$a(u, v) = (f, v) \quad \forall v \in V, \quad (3)$$

где $a(u, v)$ – билинейная форма разрывного метода Галёркина. Такой подход к задачам конвекции-диффузии рассмотрен в [4]. Для задач с подвижными границами декомпозиция пространства решений на «грубое» и «мелкое» подпространства реализована впервые. Применение разрывного метода Галёркина позволяет повысить точность и устойчивость решения, введение многомасштабности – значительно уменьшить размерность задачи.

С учётом декомпозиции (2) пространства V на два подпространства получим:

найми $u_c \in V_c$ и $u_d \in V_d$ такие, что

$$a(u_c, v_c) + a(u_d, v_c) = (f, v_c) \quad \forall v_c \in V_c, \quad (4)$$

$$a(u_c, v_d) + a(u_d, v_d) = (f, v_d) \quad \forall v_d \in V_d. \quad (5)$$

5 Билинейная форма разрывного метода Галёркина

Введём следующие обозначения [4]; [5]:

$$\Gamma_{int} = \Gamma \setminus \partial\Omega, \{ \cdot \} : T(\Gamma) \rightarrow L^2(\Gamma_{int}),$$

- Оператор среднего: $\{ \cdot \} : [T(\Gamma)]^3 \rightarrow [L^2(\Gamma)]^3$:
на внутренней грани e_{int} $\{v\} = \frac{1}{2}(v_K + v_N)$, $\{q\} = \frac{1}{2}(q_K + q_N)$,
на внешней грани e_{bnd} $\{v\} = v_K$, $\{q\} = q_K$.
- Оператор скачка :
 $[\cdot] : T(\Gamma) \rightarrow [L^2(\Gamma)]^3$, $[\cdot] : [T(\Gamma)]^3 \rightarrow L^2(\Gamma_{int})$:
на внутренней грани e_{int} $[v] = v_K n_K + v_N n_N$, $[q] = q_K \cdot n_K + q_N \cdot n_N$,
на внешней грани e_{bnd} $[v] = v_K n_K$, $[q] = q_K \cdot n_K$.
- Лифтинг-оператор $r : (L^2(\Gamma))^2 \rightarrow \Sigma_h$ определяется соотношением:

$$\int_{\Omega} r(q) \cdot \tau \, dx dy = - \int_{\Gamma} q \cdot \{ \tau \} \, ds, \quad \tau \in \Sigma_h.$$

С учётом этих обозначений выпишем билинейную форму разрывного метода Галёркина (6):

$$\begin{aligned} a(u, v) = & \int_{\Omega} \lambda \nabla u \cdot \nabla v \, dx dy - \int_{\Gamma_{int} \cup \Gamma_D} \lambda ([u] \cdot \{ \nabla v \} + \{ \nabla u \} \cdot [v]) \, ds - \\ & \sum_{e \in \Gamma_{int}} \eta_e \int_e \lambda \{ r_e([u]) \} \cdot [v] \, ds - \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e, g_D}([u]) \cdot v n \, ds + \\ & \int_{\Gamma_D} \lambda g_D n \cdot \nabla v \, ds. \end{aligned} \quad (6)$$

Тогда вариационная формулировка (4), (5) примет вид:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \lambda \nabla u_c \cdot \nabla v_c \, dx + \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,gD}(u_c) \cdot v_c n \, ds + \int_{\Gamma_D} \lambda g_D n \cdot \nabla v_c \, ds + \\
& \int_{\Omega} \lambda \nabla u_d \cdot \nabla v_c \, dx + \int_{\Gamma_{int} \cup \Gamma_D} \lambda [u_d] \cdot \{\nabla v_c\} \, ds + \\
& \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,gD}(u_d) \cdot v_c n \, ds + \int_{\Gamma_D} \lambda g_D n \cdot \nabla v_c \, ds = \\
& \int_{\Omega} f v_c \, dx \quad \forall v_c \in V_c, \tag{7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \lambda \nabla u_c \cdot \nabla v_d \, dx + \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,gD}([u_c]) \cdot v_d n \, ds + \int_{\Gamma_D} \lambda g_D n \cdot \nabla v_d \, ds + \\
& \int_{\Omega} \lambda \nabla u_d \cdot \nabla v_d \, dx - \int_{\Gamma_{int} \cup \Gamma_D} \lambda ([u_d] \cdot \{\nabla v_d\} + \{\nabla u_d\} \cdot [v_d]) \, ds - \\
& \sum_{e \in \Gamma_{int}} \eta_e \int_e \lambda \{r_e([u_d])\} \cdot [v_d] \, ds - \sum_{e \in \Gamma_D} \eta_e \int_e \lambda r_{e,gD}([u_d]) \cdot v_d n \, ds = 0 \quad \forall v_d \in V_d. \tag{8}
\end{aligned}$$

6 Алгоритм решения задачи

Область моделирования можно разделить на четыре подобласти: подобласть в окрестности источника, подобласть, включающая фронт реакции и области прореагировавшего вещества, область еще не прореагировавшего вещества. Специфика решаемой задачи:

1. резкое изменение решения в малой окрестности фронта реакции и достаточно гладкое решение в областях, в которых вещество уже полностью прореагировало или ещё не достигнуты необходимые условия превращения;
 2. необходимость максимально точного учёта движения границы раздела фаз определяет конструкцию многомасштабности: представление пространства решения в виде прямой суммы разрывной и непрерывной составляющих. Причём разрывная составляющая присутствует в подобласти, окружающей источник и в окрестности фронта реакции. Такой подход позволил использовать «стандартные» разбиения области моделирования: мелкую почти равномерную сетку в подобластях с разрывной составляющей и грубую сетку в подобластях с непрерывной составляющей решения. Согласованность сеток не требуется.
- Задать начальное условие $T|_{t=0} = T_0$ и подобласть с разрывной компонентой в окрестности источника;
 - Для каждого $i = 1 \dots N$:
 - на i -м шаге по времени находим решение $T(t_i)$ с использованием имеющегося разбиения расчётной области;
 - анализируя решение $T(t_i)$, задаём новое положение фронта реакции $\xi(t_i)$;
 - в соответствии с положением $\xi(t_i)$ определяем новую подобласть с разрывным решением и триангулируем её;
 - интерполируем полученное решение T_i на новую триангуляцию области.

Таким образом, на каждом шаге по времени при необходимости строится сетка не во всей области, а лишь в окрестности границы раздела фаз.

7 Результаты вычислительных экспериментов

На примере задачи горения прямоугольного образца рассматривались три различных вариационных постановки: 1) стандартный конформный метод конечных элементов, треугольные конечные элементы, квадратичные непрерывные лагранжевы базисные функции, сетка согласованная с локальными сгущениями в области горения; 2) неконформный метод конечных элементов (DG-метод), прямоугольная несогласованная сетка с локальными сгущениями в области горения, квадратичные разрывные лагранжевы базисные функции; 3) многомасштабный разрывный метод Галеркина, прямоугольная несогласованная сетка с локальными сгущениями в области горения, квадратичные разрывные и непрерывные лагранжевы базисные функции. Применение разрывного метода Галеркина и несогласованных прямоугольных сеток позволило сократить время генерации сетки в практически в 100 раз по сравнению с временем генерации согласованной треугольной сеткой для конформного метода конечных элементов (CG-метод) при одинаковой точности решения задачи. По сравнению с CG-методом примерно в три раза увеличилось время генерации глобальной матрицы СЛАУ, но общее время вычислений уменьшилось примерно в 2-2,5 раза. Использование многомасштабной вариационной постановки позволило сократить время вычислений примерно на треть.

8 Выводы

Применение MDG-метода к решению класса задач с движущимися границами позволило значительно упростить процедуру построения адаптивной сетки (не требуется согласованность разбиений, существует возможность использования стандартных сеток) и значительно сократить время решения задачи.

Список литературы

1. Arnold D.N., Brezzi F., Cocburn B., Marini D. Unified analysis of discontinuous Galerkin methods for elliptic problems //SIAM J. Numer. Anal. – 2002.– V.39, №5.– pp.1749-1779.
2. Cocburn B. Discontinuous Galerkin methods for convection-dominated problems //In High -Order Methods for Computational Physics. –1999.– v.9. – Springer. – pp.69-224.
3. Baumann C.E. and Oden J.T. A discontinuous hp finite element method for convection-diffusion problems //Comput. Methods Appl. Mech. Eng.–1999. – v.175. – pp.311-341.
4. Larson M.G. and Niklasson A.J.. Analysis of a family of Discontinuous Galerkin methods for elliptic problems: the one dimensional case //Chalmers Finite Element Center. Preprint 2001-12. P.20.
5. Hughes T. J. R., Feijoo G. R., Mazzei L., Quincy J-B. The variational multiscale method a paradigm for computational mechanics // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.. - 1998 . - №166. – pp. 3-24.