



Н.Н. САЛЬНИКОВ, С.В. СИРИК

УДК 519.633; 536.252

**ПОСТРОЕНИЕ ВЕСОВЫХ ФУНКЦИЙ МЕТОДА
ПЕТРОВА–ГАЛЁРКИНА ДЛЯ УРАВНЕНИЙ
КОНВЕКЦИИ–ДИФФУЗИИ–РЕАКЦИИ
В ТРЕХМЕРНОМ СЛУЧАЕ**

Аннотация. Предложен способ построения непрерывных кусочно-полиномиальных весовых функций для метода Петрова–Галёркина в трехмерной области. Вид и форма функций определяется конечным числом варьируемых параметров, связанных с ребрами сетки разбиения. С помощью выбора этих параметров можно получать численные аппроксимации для исходной задачи, в которых будут отсутствовать нефизические осцилляции при сохранении приемлемой точности решения. Результаты исследования проиллюстрированы численными примерами.

Ключевые слова: метод конечных элементов, метод Петрова–Галёркина, уравнение конвекции–диффузии–реакции, трехмерный случай.

ВВЕДЕНИЕ

Метод Петрова–Галёркина (МПГ) как метод конечных элементов (МКЭ) [1–4] считается одним из наиболее успешных подходов к построению устойчивых численных аппроксимаций в задачах моделирования процессов конвекции–диффузии–реакции [2, 5, 6]. Отметим, что к этому классу относится большинство процессов, рассматриваемых в гидродинамике и магнитной гидродинамике [7, 8, 2], а также имеющих место в химической промышленности [6].

В настоящее время разработано большое число разновидностей и реализаций МПГ (стабилизированных методов [9, 10, 2, 3], а также методов, сводящихся в конечном итоге к МПГ), которые применяются для численного решения задач конвекции–диффузии–реакции и продолжают совершенствоваться. Следует отметить такие (основные) методы, как SUPG (Streamline Upwind Petrov–Galerkin) [11, 10], в дальнейшем развитый в группу методов SOLD (Spurious Oscillations at Layers Diminishing) [12, 10], а также GLS (Galerkin Least Squares) [13], близкие между собой методы RFB (Residual Free Bubbles) [14, 15], VMM (Variational Multiscale Method) [16, 15], метод конечных суперэлементов [17] и LPS (Local Projection Stabilization) [18, 19]. В работе [10] проведено сравнение (по точности, устойчивости и другим вычислительным аспектам) большинства из указанных методов при различных способах выбора управляющих стабилизационных параметров на нескольких показательных примерах нестационарных задач для двумерного случая, а в работе [20] — для трехмерного случая.

В работе [21] был предложен способ построения весовых функций для задач конвекции–диффузии с двумя пространственными переменными, позволяющий гибко настраивать вид и форму весовой функции в зависимости от величины и направления вектора скорости переноса. Это, в свою очередь, давало возможность влиять на стабилизационные свойства получаемых численных схем и избегать появления в численном решении нефизических осцилляций и неустойчивос-

© Н.Н. Сальников, С.В. Сирик, 2014

тей. Впоследствии использование этих функций показало высокую эффективность при решении различных нестационарных задач (в том числе и в случаях, когда скорость в конвективном слагаемом резко изменяется и по величине, и по направлению), а также нелинейных уравнений [22, 23]. В ряде важных случаев предложенный способ имел преимущества относительной точности и устойчивости численного решения по сравнению с другими МПГ. В частности, численные примеры, приведенные в [21–23], свидетельствуют о таком важном отличительном свойстве предложенного способа, как сохранение необходимой крутизны и формы фронта возмущений в решениях с наличием тонких слоев (например, переходных или пограничных) без чрезмерного их «размытия» ввиду искусственной диссипации (в том числе и диффузии поперек потока, из-за которой многие методы, хорошо работающие в одномерном случае, в многомерном случае оказывались непригодными [2, 3, 9]). Предложенный способ не приводит к существенному увеличению вычислительных затрат по сравнению со стандартным конечноэлементным методом Галёркина. Изложенные свойства, в частности, достигаются благодаря использованию адаптивных весовых функций [22] и применению приема сосредоточения (mass lumping) [24].

В настоящей статье способ построения весовых функций [21] обобщается на случай уравнений, рассматриваемых в трехмерном пространстве. Эффективность предложенного способа и соответствующей версии МПГ продемонстрирована на нескольких численных примерах (считающихся «сложными» для численного решения ввиду наличия в них доминирующих конвективно-реакционных процессов [2, 10]).

1. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ КОНВЕКЦИИ–ДИФФУЗИИ–РЕАКЦИИ МЕТОДОМ ПЕТРОВА–ГАЛЁРКИНА

Рассмотрим кратко применение МПГ для численного решения задач конвекции–диффузии–реакции и требования к весовым функциям на примере процесса распространения тепла в среде, перемещающейся относительно неподвижной декартовой ортогональной системы координат со скоростью v (поле скоростей будем считать бездивергентным [2, 10]). Этот процесс описывается уравнением [2, 5, 7, 8, 10]

$$\partial_t T + v \cdot \nabla T + cT - \sum_{i=1}^3 \partial_i (\kappa^i \partial_i T) = f, \quad T = T(t, x), \quad x \in \text{int } \Omega \subset R^3, \quad t \in (0; t_1], \quad (1)$$

где $\text{int } \Omega$ — (открытое) множество внутренних точек односвязного замкнутого ограниченного множества $\Omega \subset R^3$, T — температура среды в момент времени t в точке $x = (x^1, x^2, x^3)$ с координатами x^i (где $i = 1, 2, 3$), $\kappa^i(t, x)$ — коэффициент диффузии тепла в направлении соответствующей главной оси анизотропии [5], $c(t, x)$ — реакционный коэффициент [7], $f(t, x)$ — свободный член (плотность внешних тепловых источников/стоков), $\partial_i T \equiv \partial T / \partial x^i$, $v \cdot \nabla T$ — скалярное произведение векторов $v(t, x) = (v^1, v^2, v^3)$ и $\nabla T = (\partial_1 T, \partial_2 T, \partial_3 T)$, $\partial_i \equiv \partial / \partial x^i$. Будем также считать, что выполнены требования [5, 6, 10] $c(t, x) \geq 0$ и $0 < C_1 \leq \kappa^i(t, x) \leq C_2 < \infty$, где константы C_1, C_2 не зависят от x и t , и для уравнения (1) заданы начальное и стандартные граничные условия [7, 8], обеспечивающие существование и единственность его решения.

Предполагается, что задано разбиение множества Ω на конечное число подмножеств (элементов), характеризуемое точками (узлами) $x_i \in \Omega$ (где $i \in I$) этого множества. Множество I номеров этих узлов может быть представлено в виде $I = I_0 \cup I_1 \cup I_2 \cup I_3$, где I_0 — множество номеров узлов, находящихся внутри Ω ; I_i — множество номеров узлов, находящихся на той части границы Ω , где задано граничное условие i -го рода [7].

Приближенное слабое решение [2, 5] уравнения (1) будем находить в виде

$$\tilde{T}(t, x) = \sum_{i \in I} a_i(t) N_i(x). \quad (2)$$

Здесь $N_i(x)$ — базисные функции, связанные с i -м узлом. В соответствии с процедурой метода Петрова–Галёркина соотношения для определения неизвестных коэффициентов $a_i(t)$ в (2) получим следующим образом [2–6, 22, 23]. Пусть функция $T(t, x)$ удовлетворяет уравнению (1) и граничным условиям. Умножим уравнение (1) последовательно на весовые функции $W_j(x)$, $j \in I \setminus I_1$, (т.е. исключим из множества индексов те узлы границы, в которых задано условие Дирихле [7]) и проинтегрируем полученные равенства по пространственной переменной x по области Ω (при этом чтобы избавиться от вторых производных в диффузионном слагаемом, используем интегрирование по частям [1–6, 22]). В результате получим $|I \setminus I_1|$ тождеств, которым удовлетворяет функция $T(t, x)$. Приближенное решение (2) будем определять из условия выполнения этих тождеств для $\tilde{T}(t, x)$. В результате получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) для определения коэффициентов $a_i(t)$, $i \in I \setminus I_1$. Вопросы учета начальных и граничных условий исходной начально-краевой задачи при решении полученной СОДУ подробно изложены в [2, 5] (см. также [4, 22, 23]).

Необходимость использования весовых функций $W_j(x)$, отличных от базисных $N_i(x)$ при численном решении уравнения (1), зависит от характера его решения. А именно конвективное слагаемое в (1) соответствует процессу переноса вещества, т.е. изменение температуры в некоторой точке является следствием как диффузионных и реакционных процессов, так и переноса среды со скоростью v из соседней области [7, 8]. Поэтому с учетом этого свойства при получении уравнений для $a_i(t)$ интегрировать конвективное слагаемое следует с большим весом со стороны набегающего потока [2, 3, 6, 21].

2. ПОСТРОЕНИЕ ВЕСОВЫХ ФУНКЦИЙ В ТРЕХМЕРНОМ СЛУЧАЕ

С учетом результатов работы [21] обобщим изложенный в ней метод построения весовых функций на случай трех пространственных переменных. Будем считать, что пространственная область Ω представима выражением

$$\Omega = \bigcup_s \Omega_s, \quad \Omega_k \cap \text{int } \Omega_l = \emptyset \quad \forall k \neq l, \quad (3)$$

где элементы Ω_s являются тетраэдрами. Каждый тетраэдр задается набором четырех вершин.

Естественно потребовать по аналогии с двумерным случаем, чтобы у смежных по ребру или по грани элементов в разбиении области (3) общими были ребро или грань целиком. Кусочно-линейные базисные функции $N_i(x)$, связанные с i -м узлом x_i , определяются следующим образом. Обозначим $\Omega(i) = \bigcup_{s \in V_i} \Omega_s$ множество элементов, смежных по i -му узлу, т.е. в $\Omega(i)$ находятся те элементы Ω_s , в состав вершин которых входит i -й узел, V_i — множество номеров таких элементов. Очевидно, что $\Omega(i)$ является многогранником. Множество $\Omega(i)$ принимаем в качестве носителя функции $N_i(x)$. Функция $N_i(x)$ равна единице в i -м узле, на границе $\Omega(i)$ она равна нулю и является линейной на каждом элементе $\Omega_s \subset \Omega(i)$. Известно [25], что такая функция однозначно определяется условиями

$$N_i(x_i) = 1, \quad N_i(x_s) = 0 \quad \forall x_s \in \Omega(i), \quad x_s \neq x_i.$$

Весовую функцию, носитель которой совпадает с $\Omega(i)$, по аналогии с [21] определим выражением

$$W_i(x) = N_i(x) + \sum_{k \in K_i} \alpha_{i,k} W_{(i,k)}(x). \quad (4)$$

Здесь K_i — множество номеров вершин многогранника $\Omega(i)$, которые соединяются ребром с вершиной i . Каждая функция $W_{(i,k)}(x)$ связана с ребром (i, k) . Обозначим $V_{(i,k)}$ множество (список) номеров элементов, смежных по ребру (i, k) . Поло-

жим, что множество $\Omega(i, k) = \bigcup_{s \in V(i, k)} \Omega_s$ является носителем функции $W_{(i, k)}(x)$.

Будем считать, что в каждой точке ребра (i, k) , определяемой выражением $x = x(\lambda) = (1 - \lambda)x_i + \lambda x_k$, $\lambda \in [0; 1]$, имеем $W_{(i, k)}(x) = W_{(i, k)}(x(\lambda)) = {}^n W_i^{\text{sign } \alpha_{i, k}}(\lambda)$.

Здесь функция ${}^n W_i^{\text{sign } \alpha_{i, k}}(\lambda)$ при различных знаках числа $\alpha_{i, k}$ определяется следующими выражениями, взятыми из работы [21]:

$${}^n W_i^-(\lambda) = -{}^n W(\lambda), \quad {}^n W_i^+(\lambda) = -{}^n W(1 - \lambda), \quad \lambda \in [0; 1], \quad (5)$$

где ${}^n W(\lambda) \equiv [(n + 1) / (n - 1)]\lambda(1 - \lambda^{n-1})$, n — порядок полинома (целое $n > 1$). На границе $\Omega(i, k)$ (если только само ребро (i, k) не принадлежит этой границе, например когда оно лежит на границе расчетной области Ω) функция $W_{(i, k)}(x)$ равна нулю.

В частности, простой вид функции $W_{(i, k)}(x)$ имеют при использовании полиномов 2-го порядка, $n = 2$, поскольку в этом случае ${}^2 W_i^-(\lambda) = {}^2 W_i^+(\lambda)$. Рассмотрим сужение $W_{(i, k)_s}(x)$ на элементе Ω_s квадратичной функции $W_{(i, k)}(x)$:

$$W_{(i, k)_s}(x) = W_{(i, k)_s}(x^1, x^2, x^3) = a_{s1} + a_{s2}x^1 + a_{s3}x^2 + a_{s4}x^3 + a_{s5}(x^1)^2 + a_{s6}(x^2)^2 + a_{s7}(x^3)^2 + a_{s8}x^1x^2 + a_{s9}x^1x^3 + a_{s10}x^2x^3. \quad (6)$$

Для определения десяти коэффициентов a_{sr} , $r = \overline{1, \dots, 10}$, требуется задать значение $W_{(i, k)_s}(x)$ в десяти точках элемента Ω_s — его четырех вершинах и, например, в серединах его шести ребер. Во всех точках значение функции $W_{(i, k)_s}(x)$ следует принимать нулевым, кроме середины ребра (i, k) , где, как следует из (5) и равенства ${}^2 W(0,5) = 3/4$, необходимо положить $W_{(i, k)_s}(0,5(x_i + x_k)) = -3/4$. Коэффициенты a_{sr} , $r = \overline{1, 10}$, можно определить, решая полученную систему линейных алгебраических уравнений. Несложно убедиться, что при таком определении $W_{(i, k)_s}(x) \equiv 0$ на всех гранях тетраэдра Ω_s , в которые не входит ребро (i, k) . Если функция $W_{(i, k)_s}(x)$ выбрана в виде полинома порядка n , то для однозначного определения коэффициентов этого полинома необходимо задать на каждом ребре дополнительно к его вершинам $n - 1$ узел, в котором заданы желаемые значения этого полинома. Определение коэффициентов также сводится к решению системы линейных уравнений. При таком задании функции $W_{(i, k)}(x)$, $k \in K_i$, будут непрерывны на всей области Ω , отличны от нуля на $\Omega(i, k)$ и равны нулю на его границе. Числовые параметры $\alpha_{i, k}$ позволяют гибко изменять форму весовой функции $W_i(x)$.

Рассмотрим особенности программной реализации метода Петрова–Галёркина с использованием построенных функций. Необходимым этапом применения МПГ является разбиение области Ω на элементы Ω_s (в рассматриваемом случае — тетраэдры). Эта задача является достаточно сложной, однако в настоящее время многие алгоритмы разбиения доступны в виде готовых компьютерных программ, встроенных в математические пакеты программ такие, например, как система MATLAB. Результатом разбиения являются массивы координат узлов разбиения и массив элементов. Каждый элемент Ω_s однозначно характеризуется набором номеров своих вершин (для тетраэдра число вершин равно четырем). Для каждой i -й вершины элемента необходимо вычислить параметры базисной функции $N_{is}(x)$ на элементе Ω_s , связанной с этим узлом; $N_{is}(x)$ обозначает сужение функции $N_i(x)$ на элементе Ω_s . В рассматриваемом случае при использовании кусочно-линейной функции $N_i(x)$ функция $N_{is}(x)$ однозначно задается с помощью четырех параметров [25].

Для каждого ребра (i, k) элемента Ω_s необходимо вычислить параметры функций $W_{(i, k)_s}(x)$. Любая такая функция однозначно задается, как было показа-

но выше, с помощью десяти вещественных чисел; число этих функций равно шести (количеству ребер тетраэдра). Описанная информация относительно каждого элемента, не является избыточной. Ее удобно хранить, например, в виде структуры [26]. При локальном изменении исходного разбиения области (например, в целях получения решения более высокой точности) необходимо обновить информацию только для новых элементов, а элементы, не входящие в новое разбиение, достаточно легко удалить из списка элементов.

При получении полудискретных аппроксимаций МПГ, т.е. СОДУ, определяющих коэффициенты разложения $\{a_i(t)\}$, возникает необходимость для каждого фиксированного $j \in I \setminus I_1$ вычислять интегралы вида

$$\int_{\Omega} g(t, x) L_1(N_i(x)) L_2(W_j(x)) d\Omega, \quad (7)$$

где $W_j(x)$ определяется выражением (4), $g(t, x)$ — некоторая функция (любой коэффициент из уравнения (1)), L_1, L_2 — некоторые (дифференциальные) операторы. Рассмотрим, например, случай, когда L_1 и L_2 — тождественные операторы. Тогда получим

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} g(t, x) N_i(x) W_j(x) d\Omega = \int_{\Omega(i) \cap \Omega(j)} g(t, x) N_i(x) W_j(x) d\Omega = \\ & = \int_{\Omega(i) \cap \Omega(j)} g(t, x) N_i(x) N_j(x) d\Omega + \sum_{k \in K_j} \alpha_{j,k} \int_{\Omega(i) \cap \Omega(j,k)} g(t, x) N_i(x) W_{(j,k)}(x) d\Omega. \end{aligned} \quad (8)$$

Несложно видеть, что

$$\Omega(j, k) = \Omega(k, j) = \Omega(j) \cap \Omega(k), \quad V_{(j,k)} = V_{(k,j)} = V_j \cap V_k. \quad (9)$$

Рассмотрим, каким образом программно можно организовать вычисление интегралов, входящих в правую часть (8). Эти интегралы представимы в виде суммы интегралов по элементам Ω_s , входящим в $\Omega(i), \Omega(j), \Omega(j, k)$. Списки V_j и K_j можно построить одновременно следующим образом. При фиксированном j перебираются все структуры элементов. В список V_j включаются все те номера элементов, которые имеют в своем составе вершину с номером j . Остальные вершины такого элемента (отличные от j) включаются в список K_j , поскольку в тетраэдре каждая вершина соединяется ребрами со всеми остальными. По окончании этого перебора возможные повторяющиеся номера исключаются из списка K_j . В результате с использованием указанных множеств и соотношений (9) получаем (для любых значений индексов i и j)

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} g(t, x) N_i(x) W_j(x) d\Omega = \sum_{s \in V_i \cap V_j} \int_{\Omega_s} g(t, x) N_{is}(x) N_{js}(x) d\Omega + \\ & + \sum_{k \in K_j} \alpha_{j,k} \sum_{s \in V_i \cap V_j \cap V_k} \int_{\Omega_s} g(t, x) N_{is}(x) W_{(j,k)s}(x) d\Omega. \end{aligned} \quad (10)$$

Вычисление интеграла (7) осуществляется полностью аналогично случаю (8) и (10).

Для непосредственного вычисления интегралов из (10) на тетраэдре Ω_s целесообразно использовать специальные кубатурные формулы (см. [4]), предназначенные для этого и способные вычислять интегралы на тетраэдре с наперед заданной точностью. Заметим, что в случае, когда подынтегральные функции являются полиномиальными, указанные интегралы могут быть рассчитаны аналитически [25, 4]. Как следует из (10), стабилизационный параметр $\alpha_{j,k}$ выносится за знак интегрирования, что позволяет, вычислив предварительно интегралы для фиксированного разбиения, впоследствии использовать их с целью повторных расчетов задачи при других значениях этих параметров (а в случае, когда коэффициенты уравнения не зависят от x , то и для разных задач). Выбором $\alpha_{j,k}$ можно гибко влиять на свойства решений, полученных в результате применения МПГ численных аппроксимаций, добиваясь устойчивости и точности их решения [21–23].

3. ЧИСЛЕННЫЕ ПРИМЕРЫ

Пример 1. Рассмотрим начально-краевую задачу для уравнения (1) в параллелепипеде $0 \leq x^i \leq L_i$, $i=1, 2, 3$, при постоянном векторе скорости $v(t, x) = (v^1, v^2, v^3) = \text{const}$. Считаем также, что $\kappa^i(t, x) = \kappa$, $i=1, 2, 3$, где κ — некоторая положительная константа. Функции c и f предполагаем тождественно нулевыми. Начальное условие задается в виде $T(0, x^1, x^2, x^3) = \exp(x^1)$, а граничные условия являются продолжением по непрерывности начального условия на границу области. Получим аналитическое решение этой задачи для последующего сравнения его с численным решением. Используя подстановку вида $T(t, x^1, x^2, x^3) = \exp(\tilde{a}t + \tilde{b}x^1 + \tilde{c}x^2 + \tilde{d}x^3)u(t, x^1, x^2, x^3)$, где $\tilde{b} = v^1 / (2\kappa)$, $\tilde{c} = v^2 / (2\kappa)$, $\tilde{d} = v^3 / (2\kappa)$, $\tilde{a} = -((v^1)^2 + (v^2)^2 + (v^3)^2) / 4\kappa = -\|v\|^2 / (4\kappa)$, уравнение (1) можно привести к уравнению теплопроводности для функции $u(t, x^1, x^2, x^3)$, которое легко решается разделением переменных [7]. Таким образом, решение поставленной начально-краевой задачи можно выразить в виде

$$T(t, x^1, x^2, x^3) = e^{\tilde{a}t + \tilde{b}x^1 + \tilde{c}x^2 + \tilde{d}x^3} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{H_{ijk}}{\Omega_{ijk} - \tilde{a}} (e^{-\tilde{a}t} - e^{-\Omega_{ijk}t}) \sin \frac{\pi i x^1}{L_1} \sin \frac{\pi j x^2}{L_2} \sin \frac{\pi k x^3}{L_3} + e^{x^1},$$

где

$$H_{ijk} = 8\pi^3 ijk (\kappa((1-\tilde{b})^2 + \tilde{c}^2 + \tilde{d}^2) + \tilde{a}) \frac{1 + e^{L_1(1-\tilde{b})} (-1)^{i+1}}{L_1^2 (1-\tilde{b})^2 + \pi^2 i^2} \cdot \frac{1 + e^{-L_2 \tilde{c}} (-1)^{j+1}}{L_2^2 \tilde{c}^2 + \pi^2 j^2} \times \\ \times \frac{1 + e^{-L_3 \tilde{d}} (-1)^{k+1}}{L_3^2 \tilde{d}^2 + \pi^2 k^2}, \quad \Omega_{ijk} = \kappa((\pi i / L_1)^2 + (\pi j / L_2)^2 + (\pi k / L_3)^2).$$

Численное решение рассматриваемых примеров определялось с помощью МПГ с предложенными в данной статье весовыми функциями (для определенности были использованы квадратичные весовые функции (6)). Стабилизационные параметры $\alpha_{i,k}$ задавались в виде [22, 23]: $\alpha_{i,k} = \theta \cdot \alpha(\gamma_{i,k})$, где $\alpha(\gamma) = \coth(\gamma) - 1/\gamma$, $\gamma_{i,k} = (v \cdot h_{i,k}) / (2\kappa)$, $h_{i,k} = x_k - x_i$, θ — некоторая константа, увеличение или уменьшение которой приводит соответственно к увеличению или уменьшению вводимой в численную схему искусственной диссипации [22, 23]. Обычно, по умолчанию, ее принимают равной единице [22]. Увеличение этой константы может быть необходимым при возникновении в решении больших градиентов и соответствующих тонких слоев [3, 10, 19]. Заметим, что при $\theta = 0$ МПГ трансформируется в классический метод Галёркина. Были взяты следующие численные параметры задачи: $v^1 = v^2 = v^3 = 5$, $\kappa = 10^{-2}$, $L_1 = L_2 = L_3 = 1$. Отметим, что $\|v\|/\kappa \approx 866$, т.е. в рассматриваемой задаче конвективные процессы значительно преобладают над процессом диффузии.

График численного решения задачи в момент времени $t=0,2$ при $x^2 = x^3 = 1/2$ методом Галёркина при использовании равномерной сетки $20 \times 20 \times 20$ узлов изображен на рис. 1. Здесь (и на остальных рисунках) жирной линией обозначен график вычисленного решения, зависящего от пространственной координаты x^1 , тонкой линией — график известного аналитического решения. Поскольку задача имеет доминирующую конвекцию, то, как и следовало ожидать, метод Галёркина дает осциллирующее решение (как видим, не имеющее ничего общего с настоящим), причем с течением времени погрешность только нарастает. График решения задачи предложенным в статье МПГ при тех же значениях параметров и входных данных (и $\theta = 1$) показан на рис. 2. Как видим, он обеспечивает весьма хорошую точность, а графики численного и аналитического

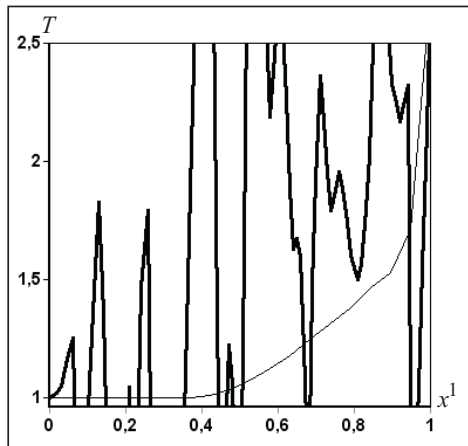


Рис. 1

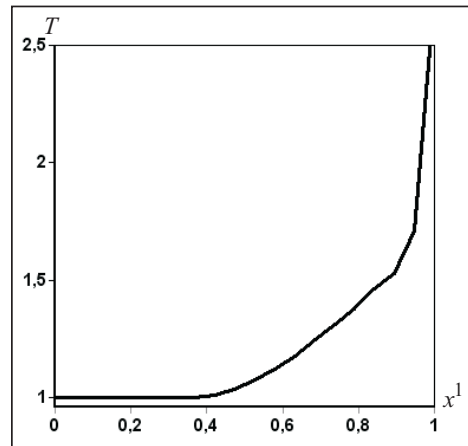


Рис. 2

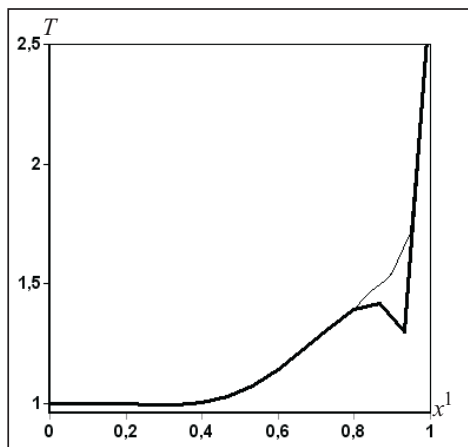


Рис. 3

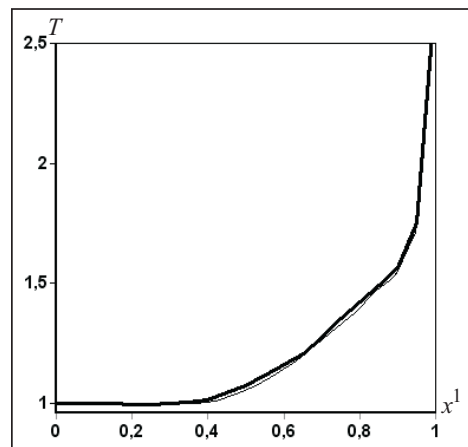


Рис. 4

ского решений визуально совпадают. На рис. 3 изображен график решения МПГ при использовании равномерной сетки $15 \times 15 \times 15$ узлов, $\theta = 1$. Как видим, уменьшение количества узлов привело к тому, что в тонком приграничном слое (области укручения решения) численное решение имеет «выброс». Заметим, что в случае стандартного метода Галёркина ложные осцилляции заполняют всю область решения, в то время как в ситуации на рис. 3 большая погрешность возникает лишь в некоторой части области. В целом это является характерной проблемой для всех существующих ныне стабилизированных методов [10], в особенности при использовании грубых сеток (при разбиении $20 \times 20 \times 20$ узлов подобный дефекта, как показано ранее, не наблюдается (см. рис. 2)). Одним из эффективных средств противодействия подобным проблемам является использование сеток, сгущающихся в окрестностях особенностей решения [2]. Так, поскольку в данном примере перенос начального условия осуществляется вдоль линии, проходящей через $(0,0,0)$ и $(1,1,1)$, то естественно вблизи точки $(1,1,1)$ использовать более густую сетку. На рис. 4 изображен график решения МПГ на сетке $15 \times 15 \times 15$ узлов, но эти узлы, в отличие от рис. 3, распределены неравномерно и сгущаются при приближении к точке $(1,1,1)$: $(g(x_i^1), g(x_j^2), g(x_k^3))$, где $g(s) = (e^{-2s} - 1) / (e^{-2} - 1)$, (x_i^1, x_j^2, x_k^3) — соответствующие узлы равномерного разбиения $15 \times 15 \times 15$. Как видим, численное решение здесь практически совпадает с точным. Кроме того, от осцилляций в приграничном слое можно избавиться, увеличив уровень искусственной диссипации (для чего следует увеличить значе-

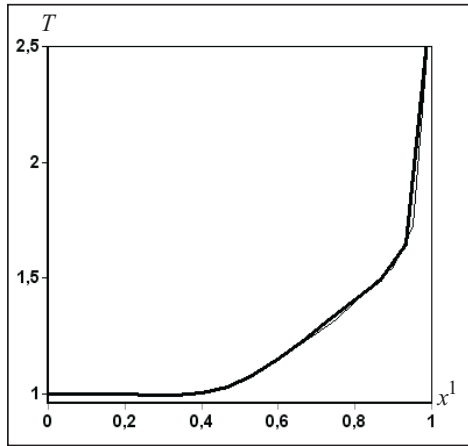


Рис. 5

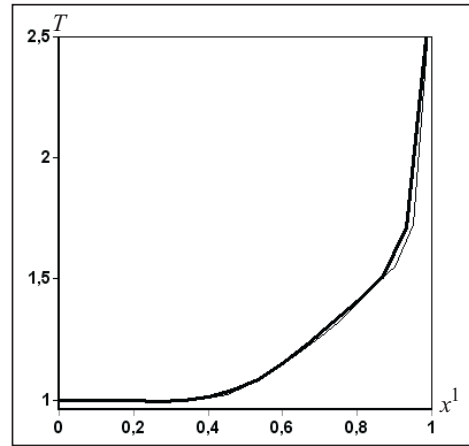


Рис. 6

ние θ). На рис. 5 изображен график решения на равномерной сетке $15 \times 15 \times 15$ узлов при $\theta = 1,5$ (графики численного и аналитического решений визуально практически совпадают).

График решения методом SUPG (и совпадающим с ним в случае линейных элементов методом GLS) на сетке $15 \times 15 \times 15$ узлов показан на рис. 6: используется поэлементная стабилизация в виде $\tau_K v \cdot \nabla N_i$, $\tau_K = h_K \alpha(Pe_K) / (2||v||)$, где h_K — диаметр элемента K , а $Pe_K = ||v|| h_K / (2\kappa)$ (см. [10]). Как видим, погрешность увеличилась незначительно (по сравнению с предлагаемым в работе МПГ). Из графика также видно, что эти методы пытаются сгладить крутизну тонкого слоя («выровнять» кривую решения), что может косвенно свидетельствовать о вводе чрезмерной искусственной диффузии в окрестности тонкого слоя для данной (нестационарной) задачи.

Пример 2. Рассмотрим более сложный вычислительный пример, в котором одновременно присутствуют конвекционные и реакционный процессы, причем они значительно преобладают над процессом диффузии. Данный пример предложен и описан в [20], где он применялся для тестирования работоспособности стабилизированных методов. На границе области $\Omega = [0; 1]^3 \subset R^3$ ставятся граничные условия смешанного типа, а именно при $x \in \partial\Omega_{in} \equiv \{0\} \times (5/8; 6/8) \times (5/8; 6/8)$ значение решения определяется как

$$T(t, x) = \begin{cases} \sin(\pi t / 2), & t \in [0; 1], \\ 1, & t \in (1; 2], \\ \sin(\pi(t-1) / 2), & t \in (2; 3] \end{cases}$$

(считаем, что $t_1 = 3$), при $x \in \partial\Omega_{out} \equiv \{1\} \times (3/8; 4/8) \times (4/8; 5/8)$ решение удовлетворяет однородному граничному условию второго рода (условию типа Неймана), в остальных точках границы решение равно нулю. В начальный момент времени (при $t = 0$) решение тождественно нулевое. Вектор скорости $v = (1, -1/4, -1/8)$ в (1) направлен вдоль прямой AB , проходящей через центры множеств $\partial\Omega_{in}$ и $\partial\Omega_{out}$. Коэффициент $c(t, x)$ равен единице, если расстояние от точки x до прямой AB не превышает $1/10$, и равен нулю в противном случае. Диффузионные коэффициенты $\kappa^i(t, x) = 10^{-6}$, $i = 1, 2, 3$. Правая часть f предполагается тождественно нулевой. Отметим, что постановка задачи и заданные значения параметров соответствуют случаям, часто используемым на практике [27, 20], при этом решение задачи $T(t, x)$ имеет физический смысл концентрации вещества. Из этого, а также из постановки задачи следует, что решение не может быть отрицательным и принимает значения в диапазоне $[0; 1]$ (см. [20]).

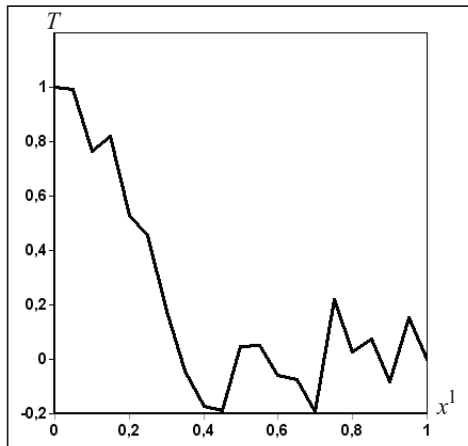


Рис. 7

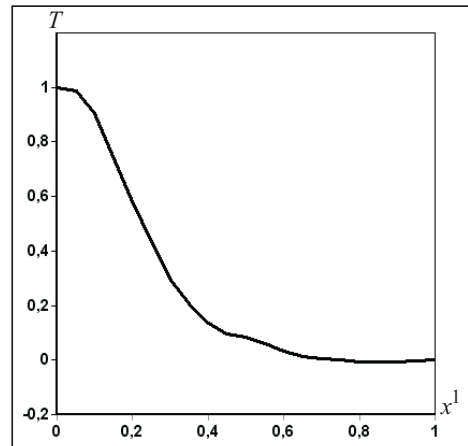


Рис. 8

Решение задачи методом Галёркина на равномерной сетке $20 \times 20 \times 20$ узлов в момент времени $t = 2$ при $x^2 = x^3 = 11/16$ (прямая, проходящая через центр множества-источника $\partial\Omega_{in}$) графически изображено на рис. 7. Как видим, решение имеет неустойчивый колебательный характер и не соответствует физическому смыслу задачи. График решения задачи с помощью предложенного МПГ (при $\theta = 1$) на этой же сетке приведен на рис. 8. В этом случае решение свободно от нефизических осцилляций и не принимает отрицательных значений, с физической точки зрения не имеющих смысла. Для более полной характеристики численного решения обозначим T_{\min} минимальное значение решения T (на всех узлах разбиения области). Расчеты показывают, что в данном случае для метода Галёркина $T_{\min} \approx -17,05$, т.е. решение далеко выходит за пределы допустимых значений и нарушается физический смысл (получается негативная концентрация вещества). Для предложенного МПГ имеем $T_{\min} \approx -0,13$. Отметим, что реализация метода SUPG, используемая в [20], на равномерной сетке $33 \times 33 \times 33$ узла приводит в данной задаче к сильно осциллирующим решениям, причем даже с наилучшим (наиболее подходящим для данной задачи) выбором стабилизирующих параметров (см. [28]) для этого метода $T_{\min} \approx -0,58$. Методы SOLD, специально разработанные для уменьшения величины нефизических осцилляций метода SUPG в тонких слоях [12, 10, 28], как показывают расчеты [20], в целом также неудовлетворительно выполняют свою задачу и в данном примере дают осциллирующие решения, выходящие в область отрицательных чисел. В расчетах, приведенных в [20] на равномерной сетке $33 \times 33 \times 33$ узла, SOLD-метод KLR02 [28, 12] (по результатам наблюдений наилучший среди группы методов SOLD, см. [10]) дает минимальное значение T между $T_{\min} \approx -0,18$ и $T_{\min} \approx -0,1$, причем увеличение этого значения достигается ценой значительного увеличения времени на вычисление и ресурсы вычислительной машины (тем более учитывая, что указанный метод вводит в расчетную схему нелинейные стабилизирующие члены и потому является нелинейным). Например, расчет по методу KLR02, при котором $T_{\min} \approx -0,1$, занял около девяти часов [20], в то время как расчет задачи с помощью предлагаемого в данной работе МПГ (см. рис. 8) занял около двух часов (при сравнительно одинаковых конфигурациях вычислительных средств).

Отметим, что в обоих примерах при интегрировании возникающих СОДУ использовались явный стандартный метод Рунге-Кутты 4-го порядка и явный адаптивный метод 3-го порядка из работы [29]. Шаг по времени $\tau = 10^{-3}$ (начальный для метода из [29], при этом в настройках выставлялись значения допустимой абсолютной и относительной ошибок [29] интегрирования СОДУ, также равные 10^{-3}).

Таким образом, приведенные примеры показывают, что предложенная в работе версия МПГ в целом способна обеспечить большую устойчивость и точ-

ность решения (причем даже на более грубых сетках и без существенного увеличения вычислительных затрат) по сравнению с некоторыми другими версиями и реализациями стабилизационного подхода Петрова–Галёркина, также добавляющими стабилизационные члены в оригинальную формулировку Галёркина и считающимися одними из лучших и перспективных для решения задач конвекции–диффузии–реакции [10, 20]. Достигается это за счет регулирования формы весовой функции, подстраивания ее под текущий поток и соответственно регулирования уровня и направления вносимой в численную схему искусственной диссипации. Отметим, что более высокая точность может быть достигнута за счет специального подбора стабилизационных параметров, учитывающего процесс реакции (в приведенных примерах использовался их выбор, хорошо зарекомендовавший себя при решении задач конвекции–диффузии [21–23], но без учета реакционных процессов), а также за счет использования тонких процедур коррекции потоков и диффузии подобно подходу FEM-FCT [30] (результаты работ [31, 20, 10] свидетельствуют в пользу этого). Отметим, однако, что FEM-FCT и другие подобные подходы и методы выходят за рамки подхода Петрова–Галёркина к стабилизации решений (и могут требовать больших вычислительных затрат). Эти вопросы являются тематикой дальнейшего исследования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен способ построения непрерывных кусочно-полиномиальных весовых функций метода Петрова–Галёркина в трехмерной области для интегрирования уравнений конвекции–диффузии–реакции. Вид и форма функций определяются конечным числом варьируемых параметров, связанных с ребрами сетки разбиения. Путем надлежащего выбора данных параметров можно гибко влиять на стабилизационные свойства получаемых численных аппроксимаций и избегать появления (по крайней мере, уменьшать до приемлемого уровня) нефизических осцилляций и неустойчивостей в численном решении даже при сильном преобладании конвективных и реакционных процессов над процессом диффузии, что проиллюстрировано соответствующими численными расчетами. Приведены примеры, где предложенная версия МПГ обеспечивает большую точность и устойчивость решения по сравнению с некоторыми стабилизированными методами.

В дальнейшем планируется детальное изучение характера устойчивости и сходимости предложенной версии МПГ в разных нормах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галёркина: Пер. с англ. — М.: Мир, 1988. — 352 с.
2. Roos H.-G., Stynes M., Tobiska L. Robust numerical methods for singularly perturbed differential equations. — Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2008. — 604 p.
3. Fries T.P., Matthies H.G. A review of Petrov-Galerkin stabilization approaches and an extension to meshfree methods. — Brunswick: Techn. Univ. Braunschweig, 2004. — 71 p.
4. Zienkiewicz O.Z., Taylor R.L. The finite element method. — Oxford: Butterworth-Heinemann, 2000. — Vol. 1: The Basis. — 690 p.
5. Дейнека В.С., Сергиенко И.В., Скопецкий В.В. Математические модели и методы расчета задач с разрывными решениями — К.: Наук. думка, 1995. — 262 с.
6. Finlayson B.A. Numerical methods for problems with moving fronts. — Seattle (Wash.): Ravenna Park Publ. Inc., 1992. — 613 p.
7. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1972. — 736 с.
8. Ладиков-Роев Ю.П., Черемных О.К. Математические модели сплошных сред. — К.: Наук. думка, 2010. — 551 с.
9. Hughes T.J.R., Scovazzi G., Tezduyar T.E. Stabilized methods for compressible flows // J. Sci. Comput. — 2010. — 43. — P. 343–368.

10. John V., Schmeyer E. Finite element methods for time-dependent convection–diffusion–reaction equations with small diffusion // *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* — 2008. — **198**. — P. 475–494.
11. Brooks A.N., Hughes T.J.R. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on incompressible Navier–Stokes equations // *Ibid.* — 1982. — **32**, N 1–3. — P. 199–259.
12. John V., Knobloch P. A comparison of spurious oscillations at layers diminishing (SOLD) methods for convection–diffusion equations: Part I — A review // *Ibid.* — 2007. — **196**. — P. 2197–2215.
13. Hughes T.J.R., Franca L.P., Hulbert G.M. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VIII. The Galerkin/Least-squares method for advective-diffusive equations // *Ibid.* — 1989. — **73**. — P. 173–189.
14. Brezzi F., Russo A. Choosing bubbles for advection–diffusion problems // *Math. Models Methods Appl. Sci.* — 1994. — N 4. — P. 571–587.
15. Russo A. Streamline-upwind Petrov/Galerkin method (SUPG) vs residual-free bubbles (RFB) // *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* — 2006. — 195. — P. 1608–1620.
16. Hughes T.J.R., Feijoo G., Mazzei L., Quincy J-B. The variational multiscale method – a paradigm for computational mechanics // *Ibid.* — 1998. — **166**. — P. 3–24.
17. Жуков В. Т., Новикова Н. Д., Страховская Л. Г., Федоренко Р. П., Федоритова О. Б. Применение метода конечных суперэлементов для решения задач конвекции–диффузии // *Мат. моделирование.* — 2002. — **14**, № 11. — С. 78–92.
18. Braack M., Burman E. Local projection stabilization for the Oseen problem and its interpretation as a variational multiscale method // *SIAM J. Numer. Anal.* — 2006. — **43**. — P. 2544–2566.
19. Becker R., Braack M. A finite element pressure gradient stabilization for the Stokes equations based on local projections // *Calcolo.* — 2001. — **28**. — P. 173–199.
20. John V., Schmeyer E. On finite element methods for 3d time-dependent convection-diffusion-reaction equations with small diffusion / A. Hegarty et al. (Eds) // *BAIL 2008 – Boundary and Interior Layers: Lect. Notes Comput. Sci. Eng.* — **69**. — Berlin; Heidelberg: Springer, 2009. — P. 173–181.
21. Сальников Н. Н., Сирик С. В., Терещенко И. А. О построении конечномерной математической модели процесса конвекции–диффузии с использованием метода Петрова–Галёркина // *Проблемы управления и информатики.* — 2010. — № 3. — С. 94–109.
22. Сирик С. В., Сальников Н. Н. Численное интегрирование уравнения Бюргерса методом Петрова–Галёркина с адаптивными весовыми функциями // *Там же.* — 2012. — № 1. — С. 94–110.
23. Молчанов А. А., Сирик С. В., Сальников Н. Н. Выбор весовых функций в методе Петрова–Галёркина для интегрирования двумерных нелинейных уравнений типа Бюргерса // *Мат. машины и системы.* — 2012. — № 2. — С. 136–144.
24. Сирик С. В. Анализ применения сосредоточенных аппроксимаций в методе конечных элементов при решении задач конвекции–диффузии // *Кибернетика и системный анализ.* — 2013. — № 5. — С. 153–164.
25. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов. — М.: Мир, 1979. — 392 с.
26. Страуструп Б. Язык программирования C++. Специальное издание: Пер. с англ. — М.: ООО «Бином-Пресс», 2006. — 1104 с.
27. John V., Roland M., Mitkova T. et al. Simulations of population balance systems with one internal coordinate using finite element methods // *Chem. Eng. Sci.* — 2009. — **64**. — P. 733–741.
28. Knopp T., Lube G., Rapin G. Stabilized finite element methods with shock capturing for advection-diffusion problems // *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* — 2002. — **191**. — P. 2997–3013.
29. Скворцов Л. М. Простые явные методы численного решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений // *Вычисл. методы и программирование.* — 2008. — **9**. — С. 154–162.
30. Kuzmin D. Explicit and implicit FEM-FCT algorithms with flux linearization // *J. Comput. Physics.* — 2009. — **228**. — P. 2517–2534.
31. John V., Novo J. On (essentially) non-oscillatory discretizations of evolutionary convection-diffusion equations // *Ibid.* — 2012. — **231**. — P. 1570–1586.

Поступила 21.08.2013