

Equazioni di trasporto–diffusione– reazione



Metodi di stabilizzazione

Panoramica

Introduzione

Recap Teorico

Problema

Stabilizzazione

Metodi fortemente consistenti

Test Numerici

Esempi

Problema di Helmholtz

$$\begin{cases} \Delta u + k^2 u = f & \Omega, \\ u = g & \partial\Omega \end{cases}$$

Equazioni di Van Roosbroeck

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (D_n \nabla n - \mu_n n \nabla \phi) = R(n, p) \\ -\nabla \cdot (D_p \nabla p + \mu_p p \nabla \phi) = R(n, p) \\ -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \phi) = q(p - n + C) \end{cases}$$

Formulazione

Noi studieremo le seguenti equazioni differenziali

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (a \nabla u) + \mathbf{b} \cdot \nabla u + cu = f & \Omega \\ u = 0 & \partial\Omega \end{cases}$$

Dove

- ▶ $a \in L^\infty(\Omega)$, $a(x) \geq a_0 > 0$
- ▶ $\mathbf{b} \in [L^\infty(\Omega)]^2$
- ▶ $c \in L^2(\Omega)$ $c(x) \geq 0$ q.o in Ω

Dalla formulazione alla soluzione

Forma sintetica

$$Au = f$$

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

Forma estesa

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{in } \Omega, \\ u = 0 & \text{su } \partial\Omega \end{cases}$$

$$\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx$$

Discretizzazione

Poniamo $V_h = \langle v_i \rangle_{i=1}^n$, allora il problema diventa

$$a(u_h, v_h) = \langle f, v_h \rangle \quad \forall v_h \in V_h.$$

e conduce al sistema lineare

$$Au = F, \quad A_{ij} = a(v_i, v_j), \quad F_j = (f, v_j).$$

Lax-Milgram

Lemma di Lax-Milgram

Sia V uno spazio di Hilbert e $a: V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ un operatore bilineare, limitato e coercivo.

Sia $f \in V'$, allora il problema

$$u \in V : \quad a(u, v) = \langle f, v \rangle \quad \forall v \in V$$

ammette soluzione, unica.

Soluzione numerica

Sia V_h uno spazio finito-dimensionale, allora chiamiamo u_h **soluzione numerica** se soddisfa

$$a(u_h, v_h) = \langle f, v_h \rangle \quad \forall v_h \in V_h$$

Stima errore

Lemma di Ceà

Siano V e V_h come sopra allora posto u la soluzione e u_h la sua approssimazione numerica, abbiamo

$$\|u - u_h\| \leq \frac{M}{\alpha} \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|$$

A priori error estimate

Nel contesto precedente abbiamo

$$\|u - u_h\|_{s,p,\Omega} \lesssim h^{k+1-s} |u|_{k+1,p,\Omega} \quad \forall s \in [0, k]$$

Formulazione debole

Ipotesi su TDR

Il nostro spazio test sarà $V = H_0^1(\Omega)$, la forma bilineare quindi sarà

$$a(u, v) = (a\nabla u, \nabla v)_\Omega + (v, \mathbf{b} \cdot \nabla u)_\Omega + (cu, v)_\Omega$$

che rispetterà l'ipotesi del lemma di Lax-Milgram se

$$-\frac{1}{2}\nabla \cdot \mathbf{b} + c \geq 0 \quad \text{q.o in } \Omega \tag{1}$$

Un esempio

Problema

Consideriamo il seguente problema di cui sappiamo la soluzione

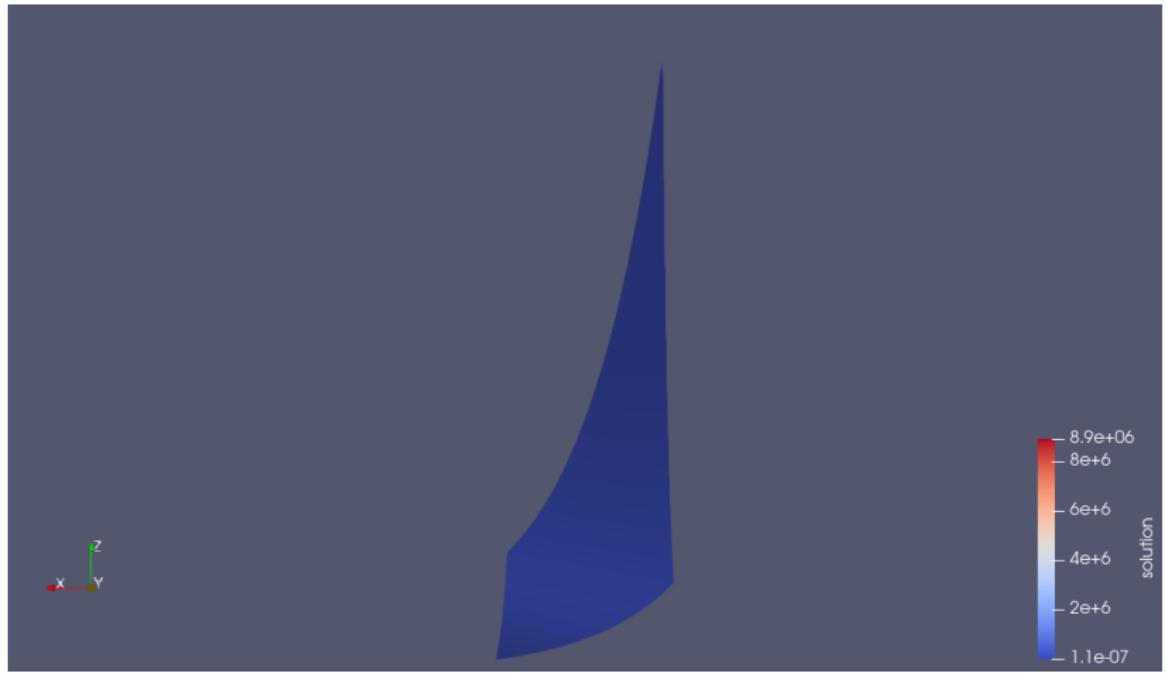
$$u(x, y) = e^{-\frac{x+y}{a}}$$

Sia dunque $\Omega = (-1, 1)^2$

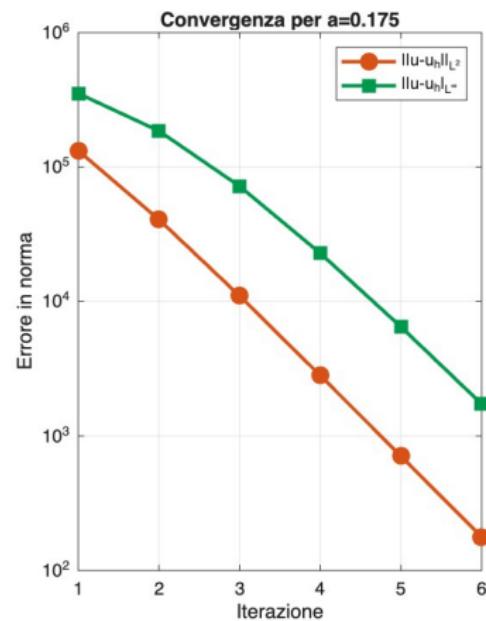
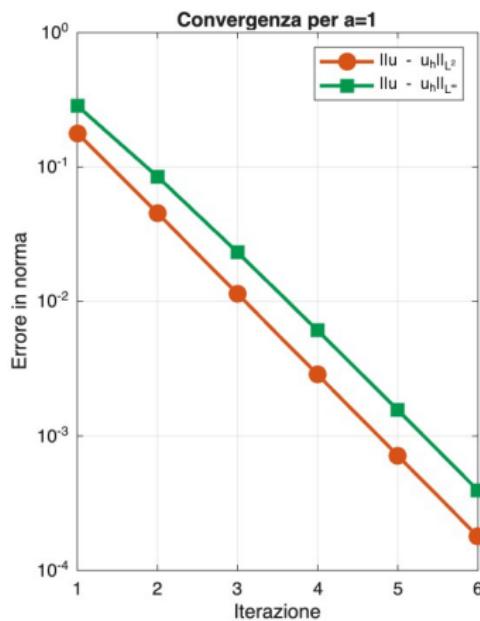
$$\begin{cases} -a\Delta u + \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{3}{a}e^{-\frac{x+y}{a}} & \Omega \\ u(x, y) & \partial\Omega \end{cases}$$

Osserviamo come la condizione (1) è soddisfatta indipendentemente dal parametro a .

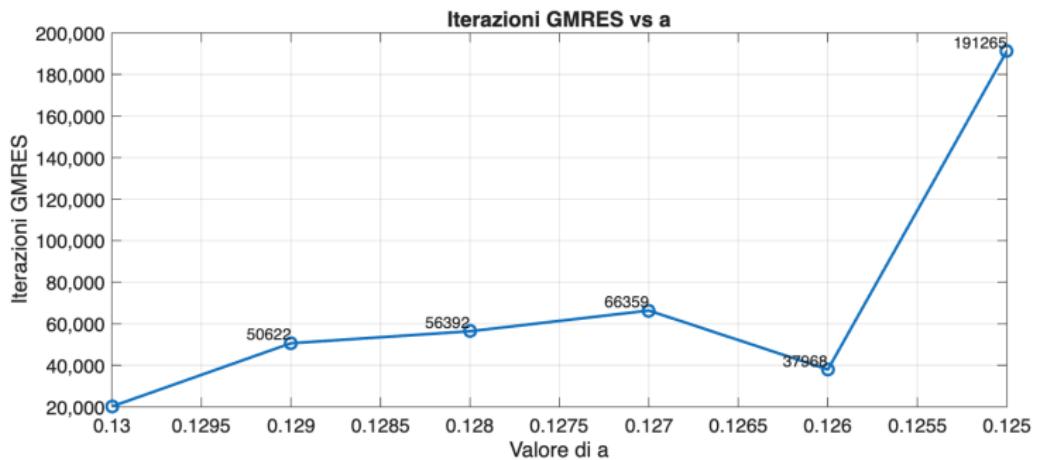
Un esempio



Problema



Problema



Un'osservazione sul problema

Caso monodimensionale

Prendiamo $\Omega = (0, 1)$

$$\begin{cases} -au'' + bu' = 0 \\ u(0) = 0 \quad u(1) = 1 \end{cases}$$

Introducendo un rilevamento dei dati sul bordo, il problema debole diventa

$$\int_0^1 (au'v' + bu'v) dx = - \int_0^1 bv dx \quad \forall v \in H_0^1(\Omega)$$

Introduciamo il **numero di Peclet** globale

$$\mathbb{P}e_g := \frac{bL}{a}$$

Una osservazione sul problema

Soluzione e Osservazioni

La soluzione del problema è

$$u(x) = \frac{e^{\mathbb{P}e_g x} - 1}{e^{\mathbb{P}e_g} - 1}$$

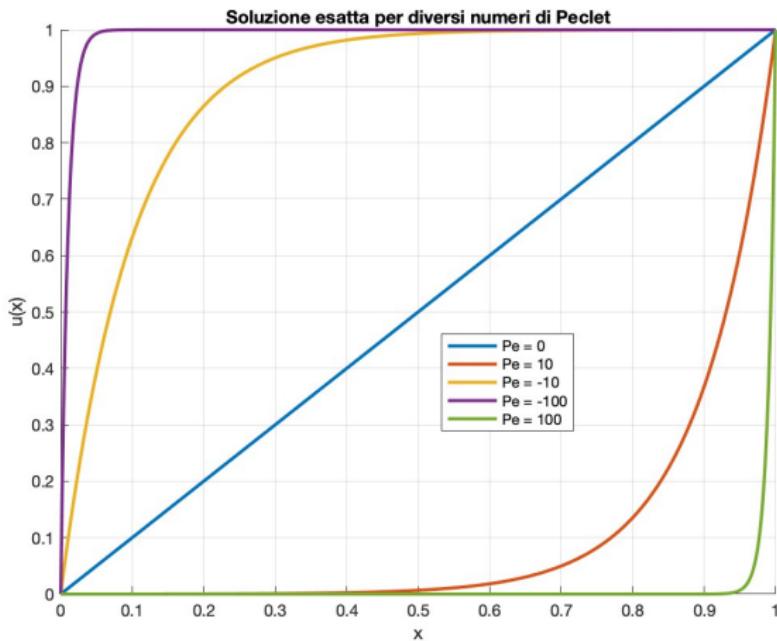
Dunque se $\mathbb{P}e_g \ll 1$ avremo che

$$u(x) \approx x$$

Mentre se $\mathbb{P}e_g \gg 1$ avremo

$$u(x) \approx e^{-\mathbb{P}e_g(1-x)}$$

Soluzione monodimensionale



Soluzione numerica

Calcolo coefficienti

Se passiamo alla formulazione con elementi finiti lineari continui e dando una partizione uniforme otteniamo il seguente sistema

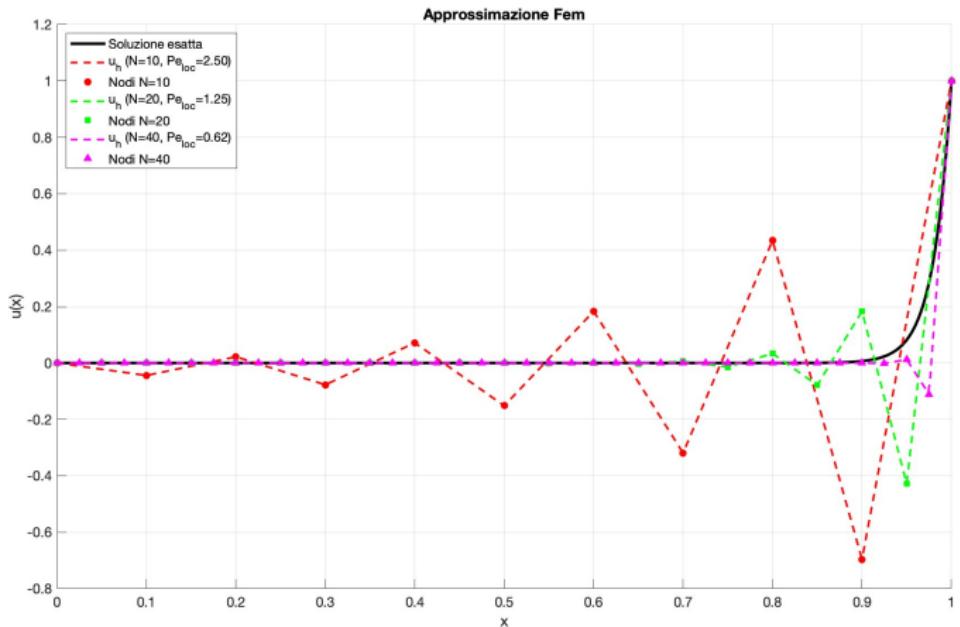
$$(\mathbb{P}e - 1)u_{i+1} + 2u_i - (\mathbb{P}e + 1)u_{i-1} = 0, \quad \mathbb{P}e = \frac{|b|h}{2a}$$

Che ci da

$$u_i = \frac{1 - \left(\frac{1+\mathbb{P}e}{1-\mathbb{P}e}\right)^i}{1 - \left(\frac{1+\mathbb{P}e}{1-\mathbb{P}e}\right)^N} \quad i = 0, \dots, N$$

Quindi, se abbiamo $\mathbb{P}e > 1$, la soluzione sarà oscillante, mentre la soluzione esatta è monotona.

Soluzione numerica



Perchè?

Boundary layers

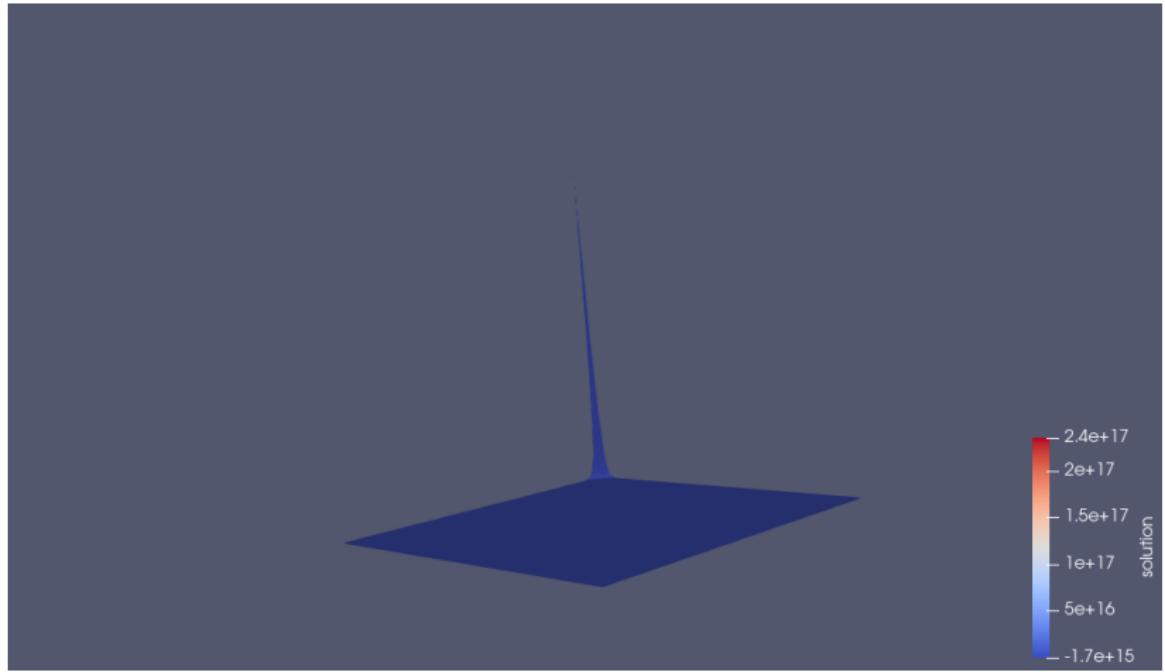
Abbiamo visto che quando $\mathbb{P}e_g \gg 1$, si ha che

$$u(x) \approx e^{-\mathbb{P}e_g(1-x)} \approx \frac{b}{a} \quad a \rightarrow 0, x \rightarrow 1$$

quindi abbiamo uno **strato limite**, cioè una regione molto piccola (ordine di $\mathbf{O}(\frac{a}{b})$) dove la funzione ha gradiente in norma illimitato.

Pertanto il fenomeno di oscillazione viene amplificato e rende rapidamente la matrice associata al problema

Strato Limite

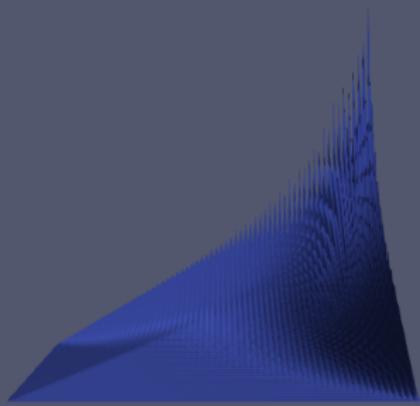


Perchè?

Coercività

Le forti oscillazioni introdotte vanno a inficiare sulle ipotesi del lemma di Lax-Milgram e sulla invertibilità della matrice derivata dalla formulazione del problema, arrivando a non avere una convergenza del metodo iterativo.

Coercività



Perchè?

Costanti

In particolare, c'è da tenere di conto che le costanti di limitatezza M e di coercività α dipendano dalle funzioni del problema.

1. $M = \|a\|_{L^\infty} + \|\mathbf{b}\|_{L^\infty} + K^2 \|c\|_{L^2}$
2. $\alpha = \frac{a_0}{1+K_\Omega^2}$

Lemma di Ceà

Quindi, ricordando il Lemma di Ceà

$$\|u - u_h\| \leq \frac{M}{\alpha} \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|$$

quindi il rapporto $\|\mathbf{b}\|_{L^\infty}/\|a\|_{L^\infty}$ e $\|c\|_{L^2}/\|a\|_{L^\infty}$ possono rendere vuota la maggiorazione

Stabilizzazione

Metodo degli elementi finiti stabilizzanti

La soluzione numerica che abbiamo usato finora è del tipo

$$a(u_h, v_h) = \langle f, v_h \rangle \quad \forall v_h \in V_h$$

L'idea della **stabilizzazione** è di risolvere un altro problema variazionale

$$a_h(u_h, v_h) = F_h(v_h)$$

al fine di eliminare le oscillazioni numeriche.

Forte consistenza

Forte consistenza

Definiamo

$$\tau_h(u, v_h) := a_h(u, v_h) - F_h(v_h)$$

e chiamiamo **errore di troncamento**

$$\tau_h(u) = \sup \frac{|\tau_h(u, v_h)|}{\|v_h\|_V}$$

Un metodo si dice **consistente** se

$$\lim_{h \rightarrow 0} \tau_h(u) = 0$$

diremo invece che è **fortemente consistente** se

$$\tau_h(u) = 0 \quad \forall h$$

Parte Simmetrica e Antisimmetrica di un operatore

Definizione

Sia $L: V \rightarrow V'$, V spazio di Hilbert, diremo che è **simmetrico** se

$$\langle Lu, v \rangle_V = \langle u, Lv \rangle_V \quad \forall u, v \in V$$

diremo che è **antisimmetrico** se

$$\langle Lu, v \rangle_V = -\langle u, Lv \rangle_V \quad \forall u, v \in V$$

Osservazione

Ogni operatore può essere scomposto come somma della sua parte simmetrica e antisimmetrica

$$Lu = L_S u + L_{S^*} u$$

Scomposizione operatore

Osservazione

Noi siamo interessati all'operatore, in forma conservativa e con a costante

$$Lu = -a\Delta u + \nabla \cdot (\mathbf{b}u) + cu$$

la cui scomposizione sarà

$$Lu = \underbrace{-a\Delta u + [c + \frac{1}{2}\nabla \cdot \mathbf{b}]u}_{L_S} + \underbrace{\frac{1}{2}[\nabla \cdot (\mathbf{b}u) + \mathbf{b} \cdot \nabla u]}_{L_{SS}}$$

Metodo GLS e SUPG

Formulazione

Sia $V = H_0^1(\Omega)$ e $a(u,v)$ la forma bilineare associata all'operatore L .

Considereremo il problema di Galerkin generalizzato seguente

$$a(u_h, v_h) + \mathcal{L}_h(u_h, f; v_h) = (f, v_h) \quad \forall v_h \in V_h$$

facendo la scelta

$$\mathcal{L}_h(u_h, f; v_h) = \mathcal{L}_h^{(\rho)}(u_h, f; v_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (Lu_h - f, \tau_K S^{(\rho)}(v_h))_{L^2(K)}$$

dove

$$S^{(\rho)}(v_h) = L_{SS}(v_h) + \rho L_S(v_h)$$

Osservazione

Il metodo è fatto in maniera che si abbia

$$\mathcal{L}_h^{(\rho)}(u, f; v_h) = 0$$

e pertanto è fortemente consistente.

Osservazione

Al variare del parametro ρ si vanno a definire i due metodi

- ▶ GLS: $\mathcal{L}_h^{(1)}(u_h, f; v_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (Lu_h - f, \tau_K L(v_h))_{L^2(K)}$
- ▶ SUPG: $\mathcal{L}_h^{(0)}(u_h, f; v_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (Lu_h - f, \tau_K L_{SS}(v_h))_{L^2(K)}$

Parametro di stabilizzazione

Definizione

ricordiamo che il numero di peclet locale si definisce come

$$\mathbb{P}e_K = \frac{\|\mathbf{b}(x)\| h_K}{2a(x)} \quad \forall x \in K, \quad \forall K \in \mathcal{T}_h$$

definiamo dunque il **parametro di stabilizzazione** come

$$\tau_K = \frac{h_K}{2\|\mathbf{b}(x)\|} \xi(\mathbb{P}e_K)$$

Andiamo a dare una spiegazione il perchè di questa definizione

Parametro di stabilizzazione

Caso SUPG

Se andiamo a risolvere il problema SUPG su $\Omega = (0, 1)$ del problema di diffusione trasporto monodimensionale otteniamo la scrittura variazionale

$$a_h(u_h, v_h) = F_h(v_h)$$

dove

$$a_h(u_h, v_h) = \int_0^1 (au'v' + buv')dx + \int_0^1 \tau |\mathbf{b}|^2 u'v'$$

$$F_h(v_h) = - \int_0^1 \mathbf{b}v dx$$

Viscosità

Quindi è naturale introdurre un parametro, chiamato **viscosità artificiale**

$$\mu = a(1 + \tau \frac{|\mathbf{b}|^2}{a})$$

così da avere

$$a_h(u_h, v_h) = \int_0^1 \mu u' v' dx + \int_0^1 \mathbf{b} u' v dx$$

τ è quindi una maniera di avere controllo sulla viscosità del sistema.

Caso SUPG

Viscosità

facendo quindi la scelta

$$\xi(x) = \coth(x) - \frac{1}{x}$$

otteniamo

$$\mu = a(1 + \phi(\mathbb{P}e_g)), \quad \phi(x) = x - 1 + B(2x)$$

dove

$$B(x) = \frac{x}{e^x - 1} \quad x > 0, \quad B(0) = 1$$

Viscosità

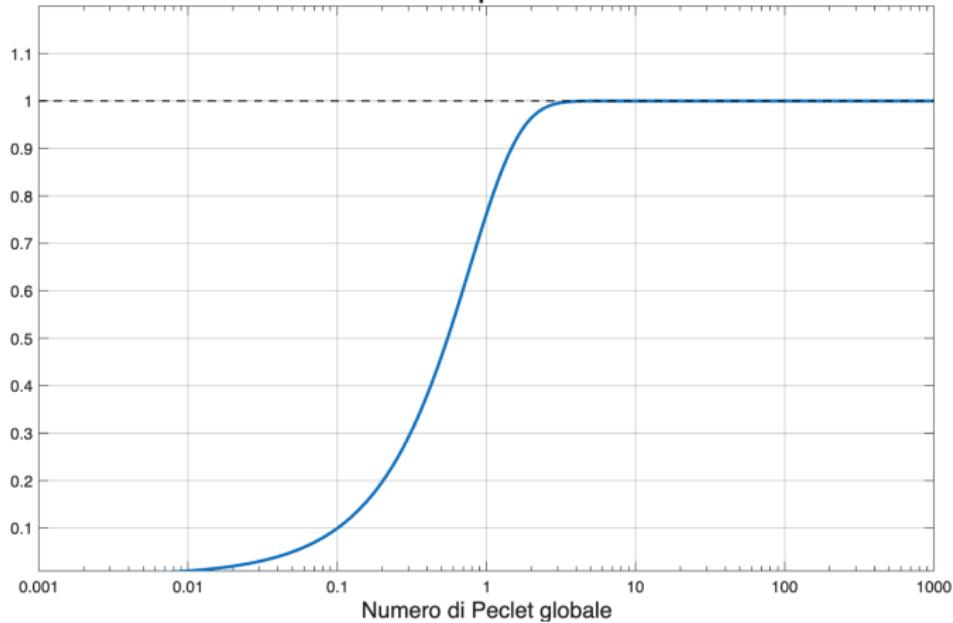
Osserviamo quindi che in questo caso avremo che il numero di Péclet locale varrà

$$\mathbb{P}e_K = \frac{bh}{2\mu} = \frac{\mathbb{P}e_g}{1 + \phi(\mathbb{P}e_g)} < 1$$

Dunque agendo sulla viscosità del sistema riusciamo ad eliminare le oscillazioni.

Caso SUPG

Funzione upwind SUPG



Stabilità ed errore

Al fine di valutare i metodi presi in esame, andiamo a introdurre la **norma** ρ

$$\|u\|_{(\rho)}^2 = a\|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\sqrt{\gamma}u\|_{L^2+(\Omega)}^2 + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\mathcal{S}^{(\rho)}u, \tau_K \mathcal{S}^{(\rho)}u)_{L^2(\Omega)}$$

Dove abbiamo che γ è una costante per cui, nel caso conservativo

$$\frac{1}{2}\nabla \cdot \mathbf{b} + c \geq \gamma > 0$$

Per mezzo di questa norma possiamo definire il concetto di **stabilità** dei metodi GLS e SUPG.

Teorema, caso GLS

Sia u_h la soluzione numerica ottenuta mediante il modello GLS, allora abbiamo che, per ogni parametro τ_K , esiste una costante C tale che

$$\|u_h\|_{(1)} \leq C \|f\|_{L^2(\Omega)}$$

Lemma

Sia $a_h^{(1)}$ la forma bilineare associata al metodo, abbiamo

$$a_h^{(1)}(v_h, v_h) = a \|\nabla v_h\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\sqrt{\gamma} v_h\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (L v_h, \tau_K L v_h)_{L^2(\Omega)}$$

Stabilità

Dimostrazione

useremo la *diseguaglianza di Young*

$$ab \leq \epsilon a^2 + \frac{1}{4\epsilon} b^2 \quad \forall \epsilon > 0 \quad \forall a, b \in \mathbb{R}$$

Andiamo a maggiorare termine a termine

$$(f, u_h)_{L^2(\Omega)} = \left(\frac{1}{\sqrt{\gamma}} f, \sqrt{\gamma} u_h \right)_{L^2(\Omega)} \leq \left\| \frac{1}{\sqrt{\gamma}} f \right\|^2 + \frac{1}{4} \left\| \sqrt{\gamma} u_h \right\|^2$$

Mentre per l'altro membro

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} (f, \tau_K L u_h)_{L^2(K)} = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\sqrt{\tau_K} f, \sqrt{\tau_K} L u_h)_{L^2(K)}$$

Dimostrazione

Procediamo a usare Cauchy-Schwartz

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\sqrt{\tau_K} f, \sqrt{\tau_K} L u_h)_{L^2(K)} \leq \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \|\sqrt{\tau_K} f\|_{L^2(K)} \|\sqrt{\tau_K} L u_h\|_{L^2(K)}$$

cioè otteniamo

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} (f, \tau_K L u_h)_{L^2(K)} \leq \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (f, \tau_K f)_{L^2(K)} + \frac{1}{4} \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (L u_h, \tau_K L u_h)_{L^2(K)}$$

osservando che $h_K \leq h$ e che $a_h^{(1)}(v_h, v_h) = \|u_h\|_{(1)}^2$

Stabilità

Dimostrazione

Otteniamo

$$\|u_h\|_{(1)}^2 \leq \frac{4}{3} \left[\left\| \frac{1}{\sqrt{\gamma}} f \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (\tau_K f, f)_{L^2(K)} \right]$$

cioè

$$\|u_h\|_{(1)}^2 \leq C^2 \|f\|_{L^2(\Omega)}^2$$

dove

$$C^2 = \frac{4}{3} \max_{x \in \Omega} \left(\frac{1}{\gamma} + \tau_K \right)$$

Convergenza

Teorema

Sia V_h con la seguente proprietà: per ogni $v \in V \cap H^{r+1}(\Omega)$ esiste una $\hat{v}_h \in V_h$ per cui

$$\sum_{i=0}^2 \|v - \hat{v}_h\|_{H^i(\Omega)} \leq Ch_k^{r+1} |v|_{H^{r+1}(\Omega)} \quad \forall K \in \mathcal{T}_h$$

e supponiamo che il numero di Péclet sia maggiore di 1 in ogni triangolo, allora

$$\|u_h - u\|_{(1)} \leq Ch_K^{r+\frac{1}{2}} |u|_{H^{r+1}(\Omega)}$$

Ricordiamo

Metodi

ricordiamo che siamo nel contesto

$$a(u_h, v_h) + \mathcal{L}_h(u_h, f; v_h) = (f, v_h) \quad \forall v_h \in V_h$$

e studiamo i due casi specifici

$$GLS: \mathcal{L}_h^{(1)}(u_h, f; v_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (Lu_h - f, \tau_K L(v_h))_{L^2(T)}$$

$$SUPG: \mathcal{L}_h^{(0)}(u_h, f; v_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (Lu_h - f, \tau_K L_{SS}(v_h))_{L^2(T)}$$

Osservazione

Osserviamo che nel caso di elementi finiti lineari in cui si ha

$$\nabla \cdot \mathbf{b} = 0 \quad c = 0$$

i due metodi coincidono.

Infatti abbiamo che

$$\Delta u_h|_K = 0 \Rightarrow Lu = \mathbf{b} \cdot \nabla u$$

Problema

Stiamo risolvendo il problema, questa volta con $\Omega = (0, 1)^2$

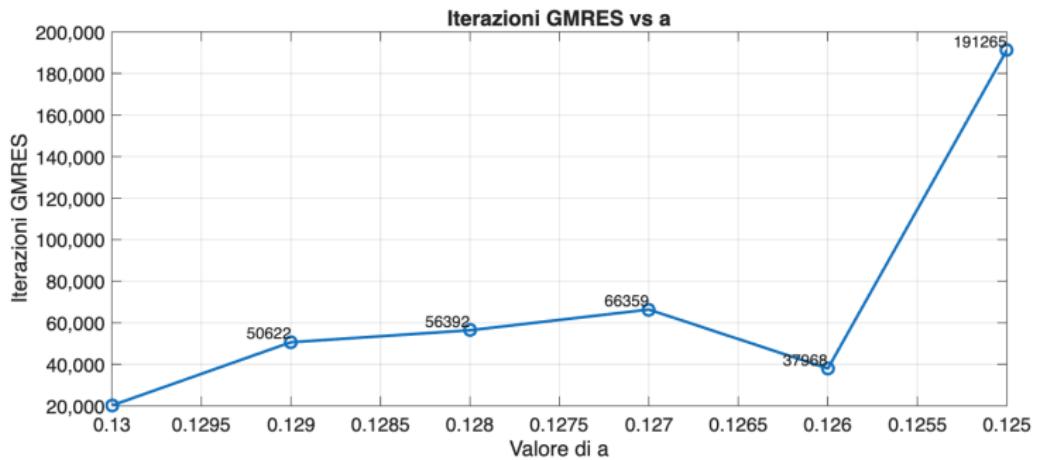
$$\begin{cases} -a\Delta u + \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{3}{a}e^{-\frac{x+y}{a}} & \Omega \\ u(x, y) & \partial\Omega \end{cases}$$

del quale sappiamo la soluzione essere

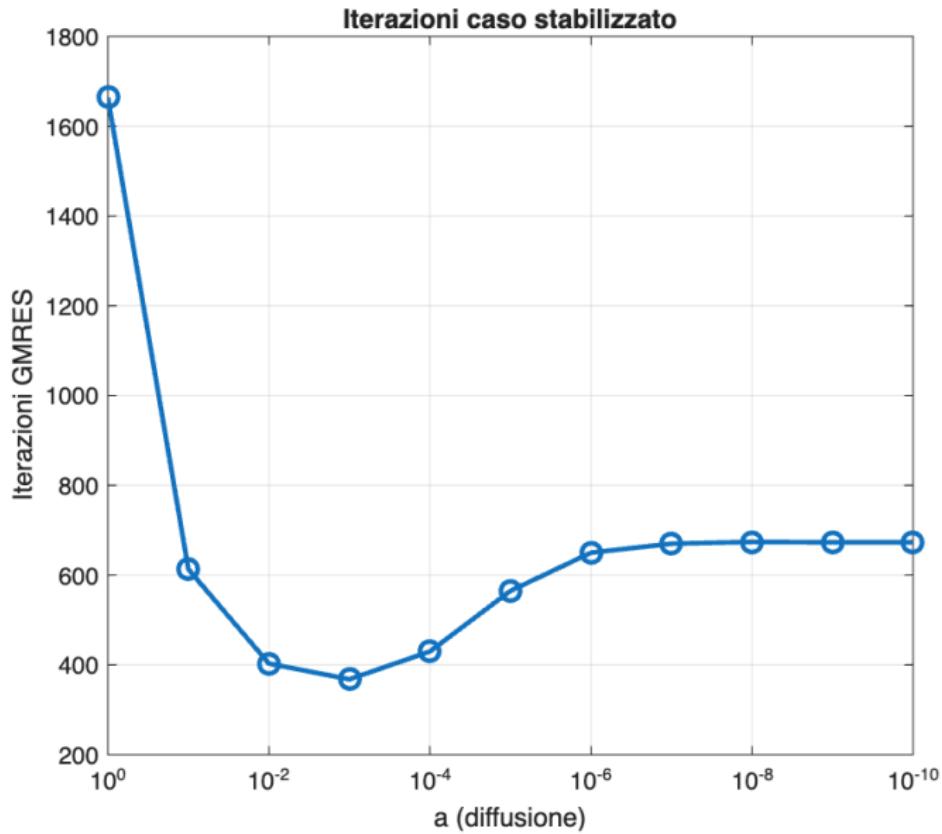
$$u(x, y) = e^{-\frac{x+y}{a}}$$

vediamo il caso stabilizzato e quello non stabilizzato a confronto

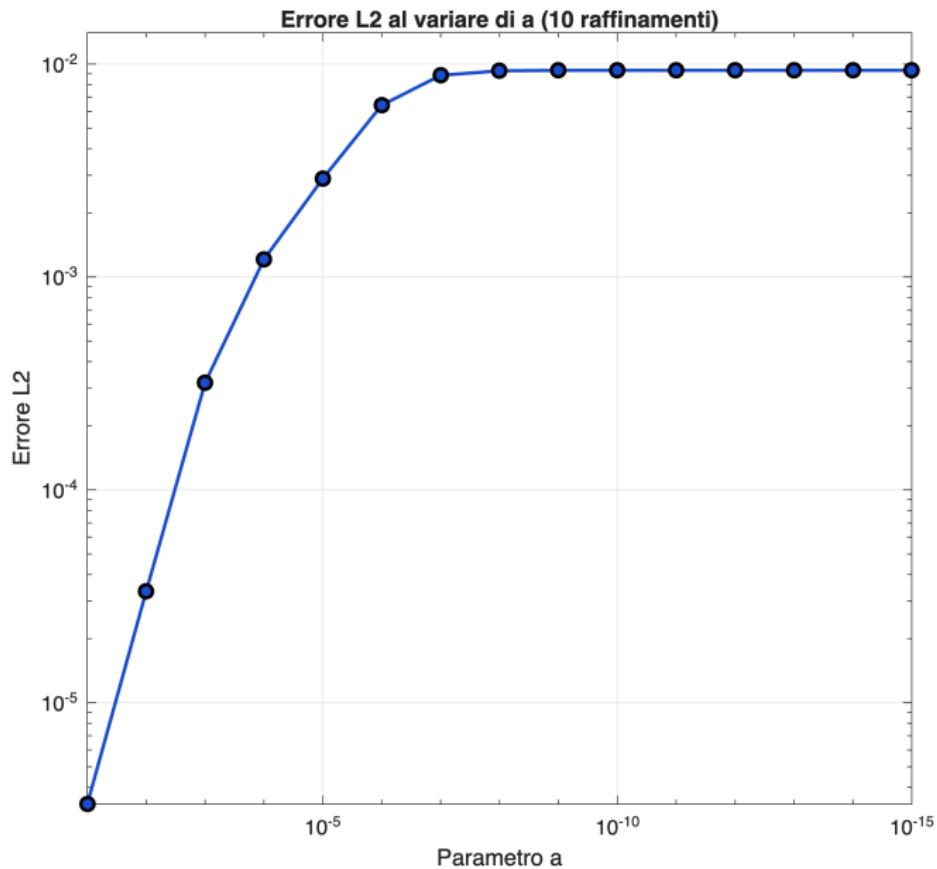
Iterazioni



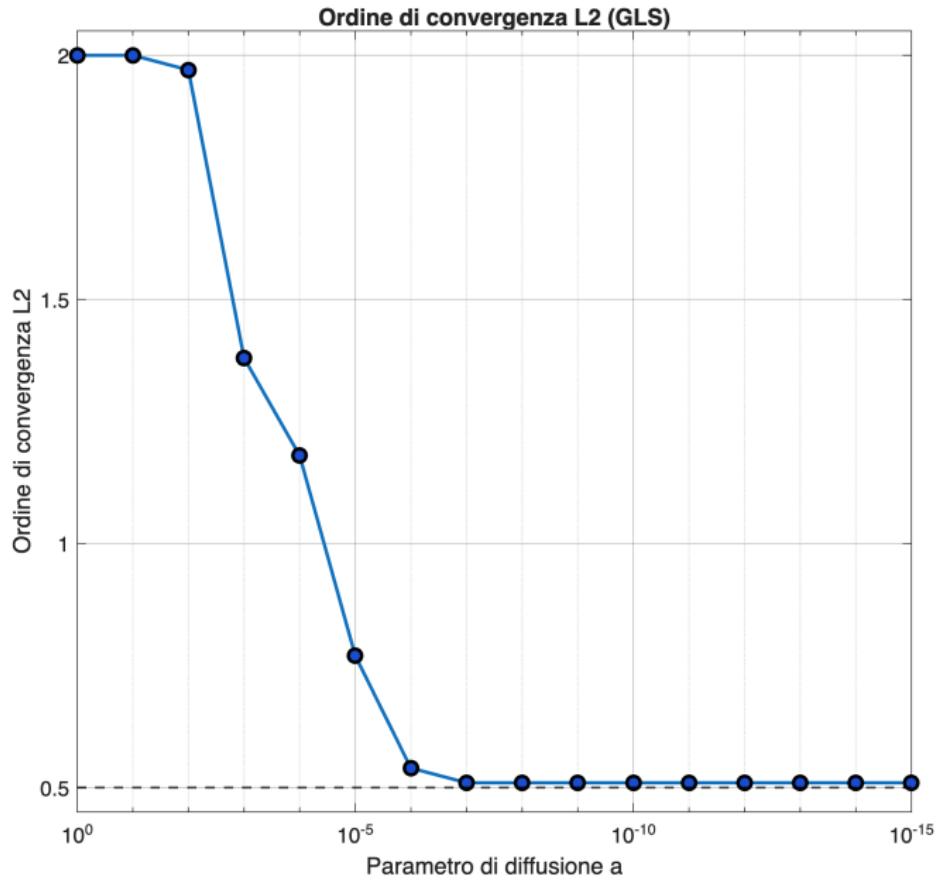
Iterazioni



Convergenza



Ordine di Convergenza



Test

Andiamo a considerare il problema su $\Omega = (-1, 1)^2$

$$\begin{cases} -a\Delta u + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} = 1 & \Omega \\ u(x, y) = 0 & \partial\Omega \end{cases}$$

Dove è stato messo $a=0.001$.

GLS:Oscillazioni

GLS:Oscillazioni

GLS vs SUPG

Esempio trasporto dominante

Andiamo ora a considerare un'equazione c

$$\begin{cases} -a\Delta u + \mathbf{b} \cdot \nabla u + cu = f & \Omega \\ u = u(x, y) & \partial\Omega \end{cases}$$

e introduciamo un altro parametro reale b

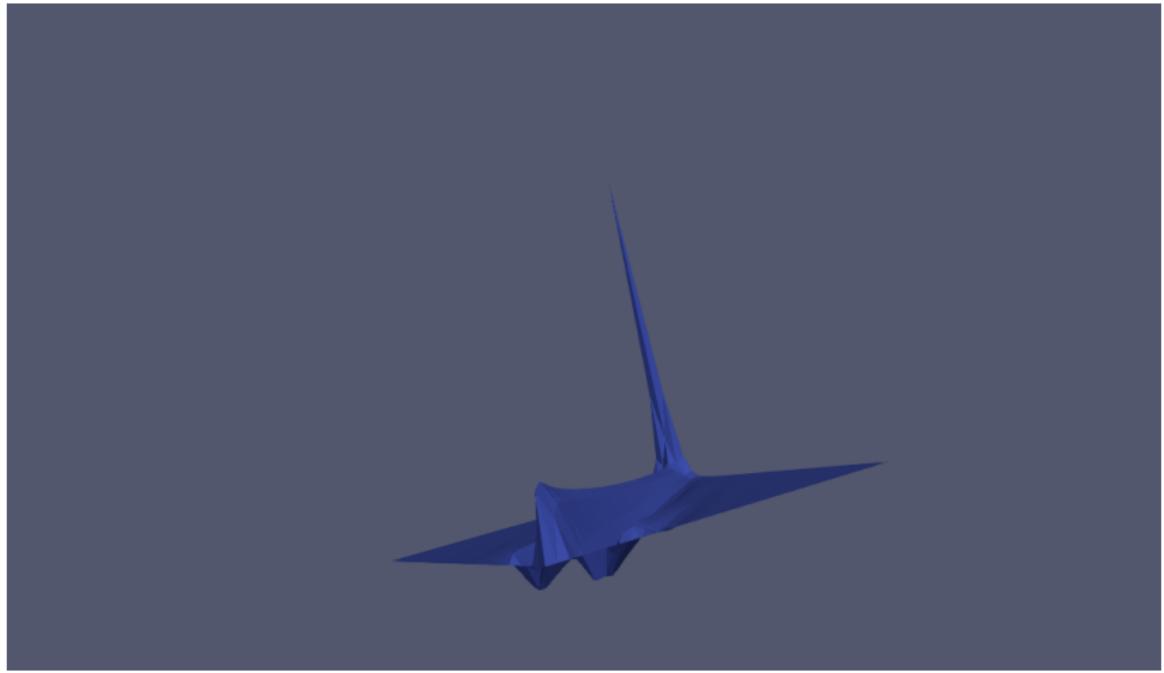
$$\mathbf{b}(x, y) = b \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

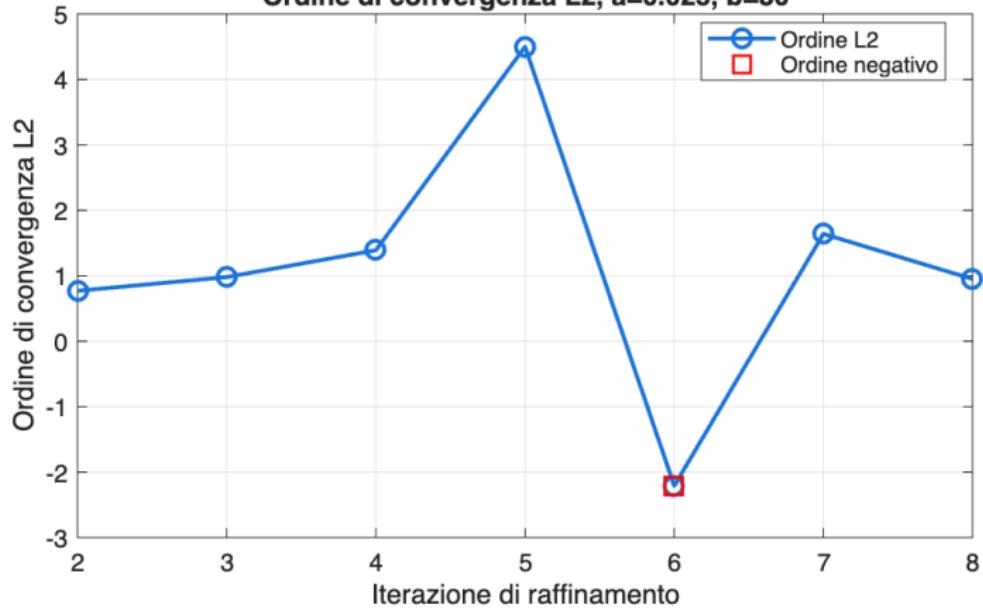
$$c(x, y) = 1$$

Osserviamo che quindi, avendo reazione non nulla i due metodi non sono equivalenti.

La soluzione è la medesima del primo esempio.

GLS



Ordine di convergenza L2, $a=0.025$, $b=80$ 

Osservazione

Il precedente grafico mostra come il metodo gls sia molto più suscettibile alla norma infinito del termine di trasporto, infatti per valori poco superiori a $b=80$ il sistema introduce delle oscillazioni troppo marcate che portano il problema a non avere convergenza iterativa.

Perchè?

Minimi quadrati

ricordando che col metodo GLS aggiungiamo

$$\mathcal{L}_h^{(1)}(u_h, f; v_h) = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} (Lu_h - f, \tau_K L(v_h))_{L^2(K)}$$

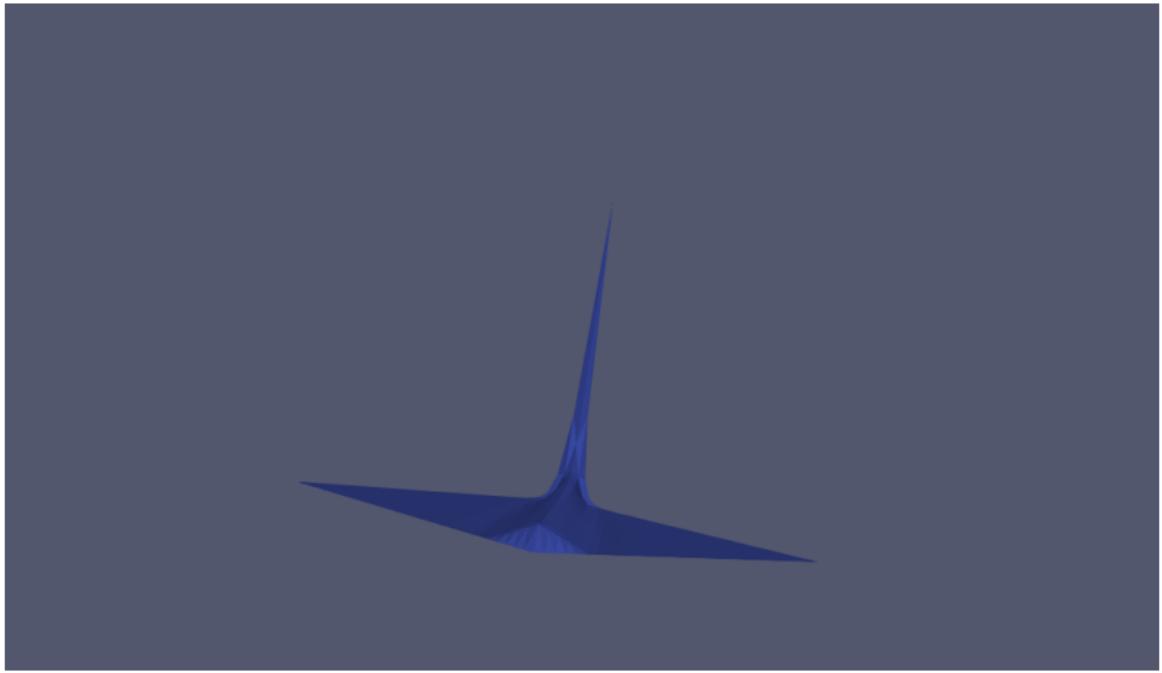
Che possiamo scrivere come

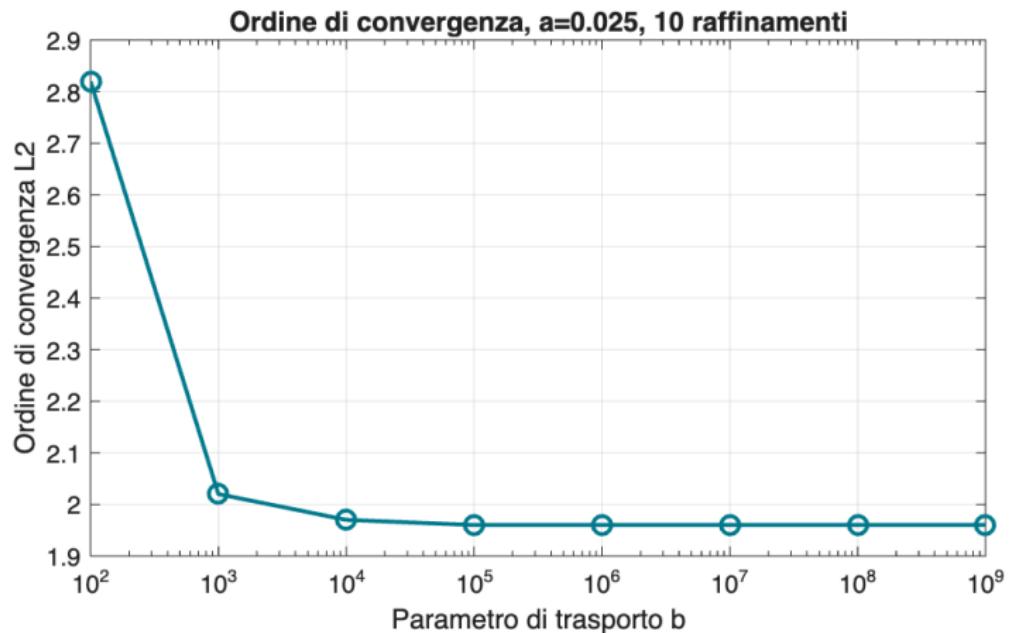
$$\mathcal{L}_h^{(1)}(v_h, f; v_h) = \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T \tau_K (Lv_h)^2 dK - (f, \tau_K Lv_h)_{L^2(K)}$$

e

$$\mathcal{L}_h^{(1)}(u_h, f; v_h) \rightarrow \mathcal{L}_h^{(1)}(u, f; v_h) = 0$$

SUPG





Perchè?

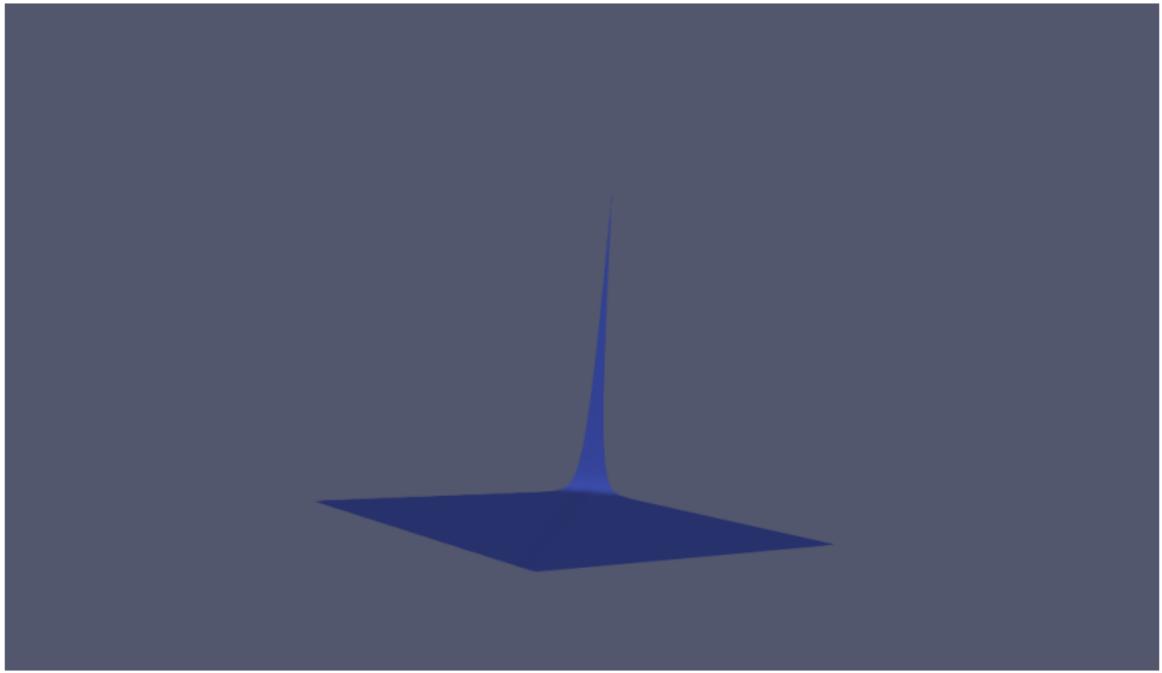
Streamline Upwind

In questo caso osserviamo che, dato che il campo è a divergenza nulla

$$L_{SS}v = \mathbf{b} \cdot \nabla u$$

quindi, usando il medesimo ragionamento di prima, abbiamo un'attenzione specifica all'argomento di trasporto

SUPG



Test finale

Formulazione

Consideriamo ora il caso da cui siamo partiti

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (a\nabla u) + \mathbf{b} \cdot \nabla u + cu = f & \Omega \\ u = 0 & \partial\Omega \end{cases}$$

dove abbiamo

$$\mathbf{b}(x, y) = \begin{bmatrix} 30(y - 0.5) + 50 \sin(5\pi y) \\ -30(x - 0.5) + 50 \cos(5\pi x) \end{bmatrix}$$

$$c(x, y) = 50 e^{-50((x-0.5)^2+(y-0.5)^2)} + 15 \sin(5\pi x) \cos(5\pi y)$$

$$f(x, y) = 20 \exp \left(-(x - 0.3)^2 - (y - 0.1)^2 \right)$$

A large, abstract 3D surface graphic composed of a grid of colored facets. The surface rises and falls in a smooth, organic wave-like pattern. The colors transition from a warm orange at the peaks to a cool blue at the troughs, with intermediate shades of white, light blue, and light orange. The lighting is soft, creating gentle highlights and shadows on the curved facets.

**Grazie per la vostra
attenzione**