ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

Факультет прикладної математики та інформатики
Кафедра дискретного аналізу та інформаційних систем

Звіт

на тему:

РОВ’ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ КОНВЕКЦІЇ-ДИФУЗІЇ-РЕАКЦІЇ ЗА ДОПОМОГОЮ *h*-АДАПТИВНОГО МЕТОДУ СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ

Виконав: студент V курсу

групи ПМі-53

Паробій Роман

Львів – 2020

Вступ

Метод скінчених елементів (МСЕ) — числова техніка знаходження розв'язків інтегральних та диференціальних рівнянь у частинних похідних.

Оскільки отримати аналітичний розв'язок диференціальних рівнянь в частинних похідних (ДРЧП) складно, застосовуються чисельні методи, які шукають наближений розв'язок поставленої задачі. Суть чисельних методів, у тому числі і МСЕ, полягає в тому, що від ДРЧП переходять до апроксимуючої системи звичайних диференціальних рівнянь, які потім розв'язують простими методами.

В цій роботі МСЕ буде застосовуватись для розв'язання задачі дифузії-конвекції-реакції – задачі знаходження розподілу субстанції із зон з вищою концентрацією у зони з нижчою концентрацією, фізичного переміщення субстанції та зміни маси субстанції внаслідок хімічних реакцій. Модель такої задачі описується крайовою задачею з диференціальним рівнянням у частинних похідних другого порядку.

Суть МСЕ полягає в тому, що простір розбивається на скінченну кількість окремих елементів, для яких шукається наближення розв'язку. Оскільки МСЕ може надати апроксимацію дійсного розв'язку з певною точністю, і для збільшення точності необхідно збільшувати кількість рівновіддалених елементів розбиття, що збільшує обчислювальні витрати, постає питання про оптимізацію. Тому для покращення збіжності та точності апроксимації матиме сенс використання адаптивного МСЕ. Він дозволяє покращити розбиття простору на скінченні елементи, згущуючи сітку розбиття там, де похибка набуває більших значень. Адаптивний МСЕ базується на концепції апостеріорної оцінки похибки кусково-лінійних апроксимацій.

Для знаходження розв'язку поставленої задачі у цій роботі буде здійснено перехід від крайової задачі до варіаційної, апроксимацію Рітца-Гальоркіна, що полягає у використанні поліноміальних базисних функцій Куранта, а потім – розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь для знаходження наближеного значення розв'язку у рівновіддалених вузлах вибраної сітки. Тоді буде проведена апостеріорна оцінка похибки апроксимації – її наближення теж знаходиться методом Гальоркіна для варіаційної задачі апостеріорної оцінки похибки апроксимації, після чого сітку розбиття буде згущено у необхідних місцях для отримання більшої точності та обчислені нові значення апроксимаці включно з доданими вузлами розбиття.

Постановка задачі

Розглянемо стаціонарну крайову задачу конвекції-дифузії-реакції:

$$-\frac{d}{dx}\left(\mu\frac{du}{dx}\right) + \beta\frac{du}{dx} + \sigma u = f$$

$$\Omega \subset R^d$$

Задано такі значення:

- коефіцієнт дифузії $\mu = \mu(x)$;
- "вектор" конвективного перенесення $\beta = \beta(x)$;
- коефіцієнт біохімічного розпаду $\sigma = \sigma(x)$;
- інтенсивність джерел домішки $f = f(x)$.

Крайові умови для задачі задаються як:

$$u(a) = 0$$

$$u(b) = 0$$

Необхідно знайти кусково-лінійне наближення значення $u(x)$, використовуючи адаптивний метод скінченних елементів.

Перехід до варіаційного формулювання задачі

Сформулюємо таку варіаційну задачу для рівняння крайової задачі конвекції-дифузії-реакції:

$$\begin{cases} ?\ u \in \mathrm{V} \\ a(u,v) = < l, v > \\ \forall v \in \mathrm{V} \end{cases}$$

Де простір допустимих функцій:

$$\mathrm{V} = \{v \epsilon H^1\,(\Omega) | v(0) = 0\}$$

Білінійна форма має вигляд:

$$a(u,v) = \int_a^b [\mu u' v' + \beta u' v + \sigma u v] dx$$

Лінійний функціонал має вигляд:

$$< l, v > = \int_a^b f_1 v dx + u_1 \mu(b) v(b)$$

Використання апроксимації Гальоркіна-Рітца

Виберемо скінченновимірний підпростір $V_h \subset V$. Таким чином, варіаційну задачу можна сформулювати вже для скінченновимірного простору:

$$\begin{cases} ?\ u_h \in V_h \\ a(u_h, v) = < l, v > \\ \forall v \in V_h \end{cases}$$

Простір V_h побудуємо з допомогою використання лінійно незалежних базисних функцій, щоб будь-який елемент простору V_h можна було виразити як лінійну комбінацію обраних функцій.

Для цього використаємо функції Куранта:

$$\varphi_i(x) = \left\{ \begin{array}{l} \left. \begin{array}{c} 0, \quad 0 \le x < x_{i-1} \\ \dfrac{x - x_{i-1}}{h_i}, x_{i-1} < x \le x_i \end{array} \right\} i = N \\ \left. \begin{array}{c} \dfrac{x_{i+1} - x}{h_i}, \quad x_i < x \le x_{i+1} \\ 0, \ x_{i+1} < x \le 1 \end{array} \right\} i = 0 \end{array} \right\} i = \overline{1, N-1}.$$

Тут N – кількість функцій Куранта, h – відстань між вершинами. На цьому етапі розглянемо рівновіддалені вузли розбиття сітки.

Наближення розв’язку варіаційної задачі шукатимемо як:

$$u_h(x) = \sum_{i=0}^{N} q_i\, \varphi(x)$$

Невідомі q_i, які необхідно знайти, будуть апроксимацією розв’язку. Їх отримаємо з системи лінійних алгебраїчних рівнянь $Aq = L$, де:

$$A = \begin{pmatrix} a(\varphi_1, \varphi_1) & a(\varphi_1, \varphi_2) & 0 & 0 & 0 \\ a(\varphi_2, \varphi_1) & a(\varphi_2, \varphi_2) & a(\varphi_2, \varphi_3) & 0 & 0 \\ 0 & a(\varphi_3, \varphi_2) & a(\varphi_3, \varphi_3) & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & a(\varphi_{N-1}, \varphi_{N-2}) & a(\varphi_{N-1}, \varphi_{N-1}) & a(\varphi_{N-1}, \varphi_N) \\ 0 & 0 & 0 & a(\varphi_N, \varphi_{N-1}) & a(\varphi_N, \varphi_N) \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} < l, \varphi_1 > \\ < l, \varphi_2 > \\ \dots \\ < l, \varphi_N > \end{pmatrix}$$

$$q = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \dots \\ q_N \end{pmatrix}$$

Елементи матриці A обчислюються за формулою:

$$a(u, v) = \int_a^b [\mu u'v' + \beta u'v + \sigma uv]dx$$

Де:

- Якщо $u = \varphi_i$, $v = \varphi_i$, то $a = x_{i-1}$, $b = x_{i+1}$
- Якщо $u = \varphi_{i-1}$, $v = \varphi_i$, то $a = x_{i-1}$, $b = x_i$
- Якщо $u = \varphi_i$, $v = \varphi_{i+1}$, то $a = x_i$, $b = x_{i+1}$
- Якщо $u = \varphi_N$, $v = \varphi_N$, то $a = x_{N-1}$, $b = x_N$

Елементи вектора L обчислюються за формулою:

$$< l, \varphi_{i,} >= \int_0^1 f_1 \varphi_i dx + u_1 \mu(1) \varphi_i(1)$$

Далі система розв'язується будь-яким методом для знаходження розв'язку СЛАР. В цій роботі використаємо метод прогонки.

Система має такий вигляд:

$$a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} = d_i,$$

де $a_1 = 0$ та $c_n = 0$. В матричній формі це записується так:

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}.$$

Розв'язок знаходиться і два кроки (прямий і зворотній хід). Прямий хід:

$$c'_1 = \frac{c_1}{b_1};\ c'_i = \frac{c_i}{b_i - c'_{i-1} a_i},\ i = \overline{2, n-1}$$

$$d'_1 = \frac{d_1}{b_1};\ d'_i = \frac{d_i - d'_{i-1} a_i}{b_i - c'_{i-1} a_i},\ i = \overline{2, n}$$

Зворотній хід:

$x_n = d'_n$

$x_i = d'_i - c'_i x_{i+1};\ i = n-1, n-2, \ldots, 1$

В результаті, шукане наближення розв'язку u_h можна знайти за формулою:

$$u_h(x) = u_0 + \sum_{i=1}^{N} q_i \varphi_i$$

Апостеріорне оцінювання похибки. Адаптивність МСЕ

Для подальших кроків у алгоритмі АМСЕ необхідно мати оцінку похибки отриманої апроксимації. Нехай похибка заданого наближення становить:

$$e = u - u_h$$

Маючи апостеріорну оцінку похибки, можна робити оцінку точності апроксимації на всіх її участках. У цьому звіті розглянемо принцип схеми h-адаптування.

Принцип такої стратегії полягає в тому, що у поточну сітку розбиття додаються нові вузли в тих місцях, де похибка перевищує бажану. Така стратегія добре застосовна для одновимірних задач, розв'язання яких розглядається в цій роботі.

Формулювання варіаційної задачі про похибку

Варіаційну задачу для знаходження наближень до похибки методом Гальоркіна сформулюємо так:

$$\begin{cases} ?\ e_h \in \mathrm{E}_h \\ c(e_h, v) = < c(u_h, v), v > \\ \forall v \in \mathrm{E}_h \end{cases}$$

Тут простір E_h - скінченновимірний, $\mathrm{E}_h \subset \mathrm{V} \backslash \mathrm{V}_h$, $\mathrm{dim}\mathrm{E}_h = N$.

Використання апроксимації Гальоркіна для обчислення похибки

Щоб знайти наближення похибки використаємо апроксимацію Гальоркіна-Рітца для знаходження наближень $\varepsilon_h \sim e_h$. Тоді наближення шукатиметься так:

$$\varepsilon_h(x) = \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_{i+\frac{1}{2}} b_{i+\frac{1}{2}}(x)$$

Тут $\lambda_{i+\frac{1}{2}}$ – невідомі коефіцієнти.

За базис простору E_h виберемо кусково-лінійну бабл-функцію, що є лінійно незалежною у цьому просторі, тому може формувати базис простору E_h:

$$\begin{aligned} b(x) &:= \frac{x - x_i}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_i} \qquad \forall x \in \left[x_i, x_{i+\frac{1}{2}}\right], \\ b(x) &:= \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_{i+\frac{1}{2}}} \qquad \forall x \in \left[x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+1}\right]. \end{aligned} \qquad i = 0,\dots,N\text{-}1$$

Таким чином для обчислення наближення похибки $\varepsilon_h(x_{i+\frac{1}{2}})$ буде правильною така рівність:

$$\lambda_{i+1} = \varepsilon_h\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right) = \frac{3}{2}\left\{\frac{h^2(f - \sigma q - (\beta - \mu')q')}{\mu(12 + \frac{h^2\sigma}{\mu})}\right\}_{i+\frac{1}{2}}$$

Розв’язавши отриману СЛАР по аналогії з попередніми пунктами, отримаємо апостеріорні оцінки похибок апроксимації МСЕ для кожного з проміжків апроксимації.

Для обчислення норми похибки можна використовувати таку рівність:

$$\|\varepsilon_h\|_V^2 = \frac{3}{4}\sum_{i=0}^{N-1}\left\{\frac{h^3(f - \sigma q - (\beta + \mu')q')^2}{\mu(12 + \frac{h^2\sigma}{\mu})}\right\}_{i+\frac{1}{2}}$$

Адаптування сітки розбиття. Опис алгоритму

Використовуючи описаний раніше спосіб обчислення наближення апостеріорної похибки можна побудувати рекурсивний алгоритм адаптування сітки розбиття МСЕ, щоб збільшити точність наближення розв’язку на елементах, де похибка перевищує бажану.

На сітці розбиття $T_k = \{K_{i+\frac{1}{2}}\}$ можна застосувати послідовність індикаторів похибки, що визначатимуть відсоткове співвідношення норми похибки до середнього значення норми розв’язку:

$$\eta_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{N}\|\varepsilon_h\|_{i+\frac{1}{2}}}{\sqrt{\sum_{j=0}^{N-1}(\|u_h\|_{j+\frac{1}{2}}^2 + \|\varepsilon_h\|_{j+\frac{1}{2}}^2)}} * 100\%, i = 0,1,\dots,N-1$$

Де

$$\|u_h\|^2_{j+\frac{1}{2}} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} q'^2\, dx, i = 0,1, \dots, N-1$$

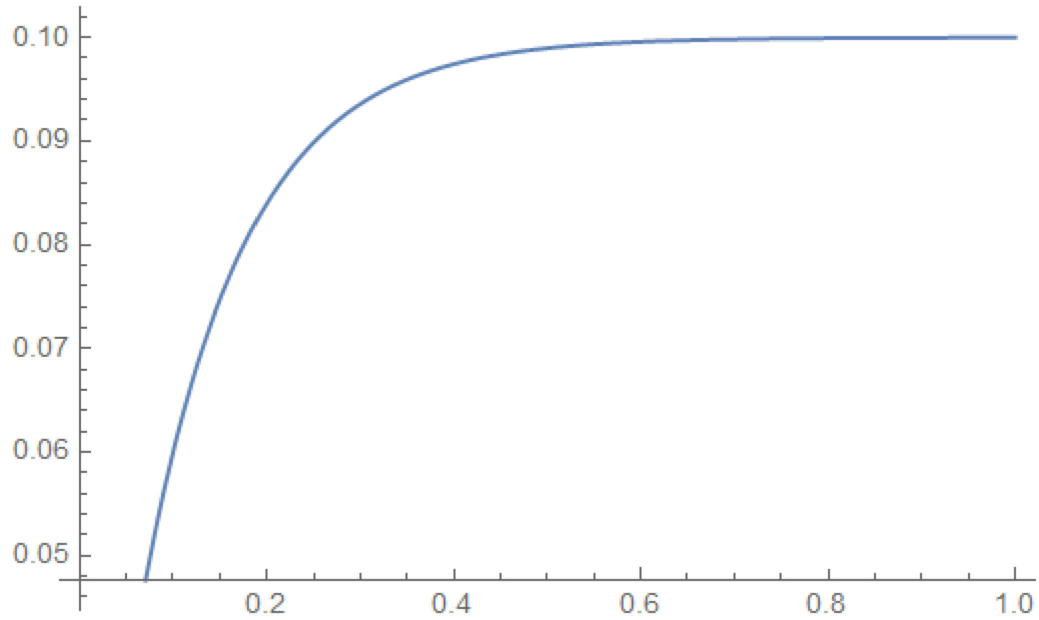
Якщо на конкретному скінченному елементі значення індикатора перевищує бажану похибку, тоді цю частину розбиття поділяють на два, додаючи ще один вузол сітки розбиття в центр ваги обраного елемента. Якщо значення індикатора не перевищує зазначену похибку, то скінченний елемент залишають без змін до наступної ітерації апроксимування розв'язку, описаної на початку цього звіту.
Коли значення похибки не перевищує бажане на кожному елементі розбиття, алгоритм адаптивного МСЕ завершує роботу.

Аналіз отриманих результатів

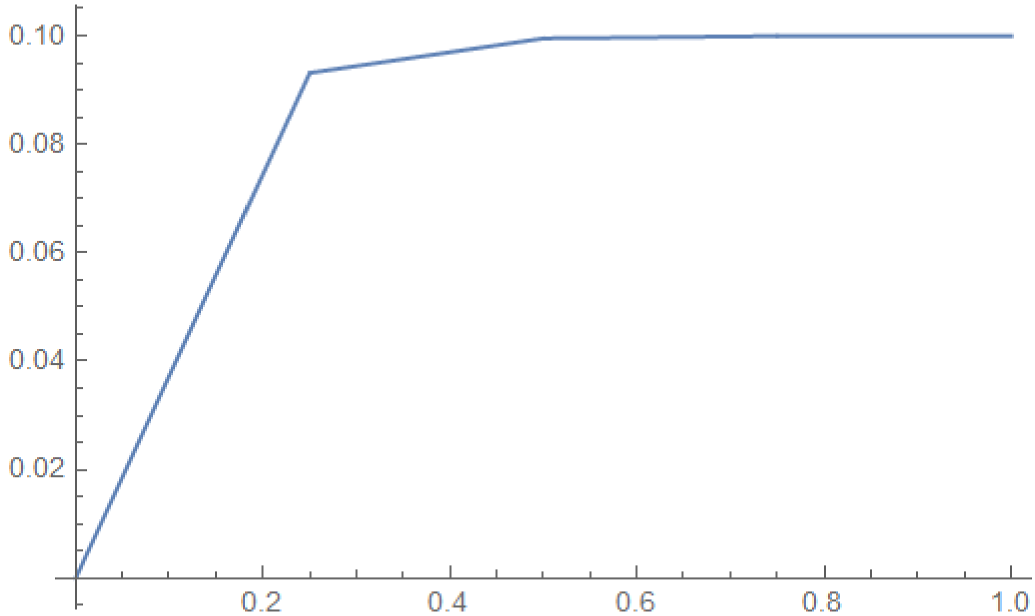
Для прикладу розглянемо такі коефіцієнти задачі конвекції-дифузії-реакції:

a = 0
b = 1
μ = 1
β = 100
σ = 1000
u_0 = 0
u_1 = 0.1
f = 100

Точний розв'язок цієї задачі матиме вигляд:

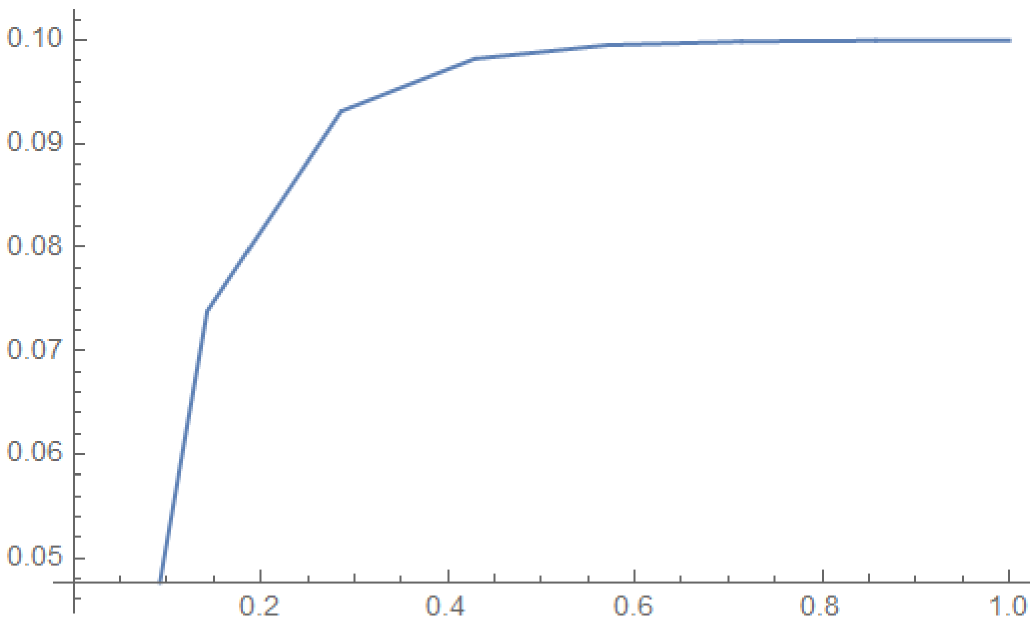


Тепер розглянемо розв’язок, отриманий з допомогою МСЕ та сітки з 4 вузлами розбиття:

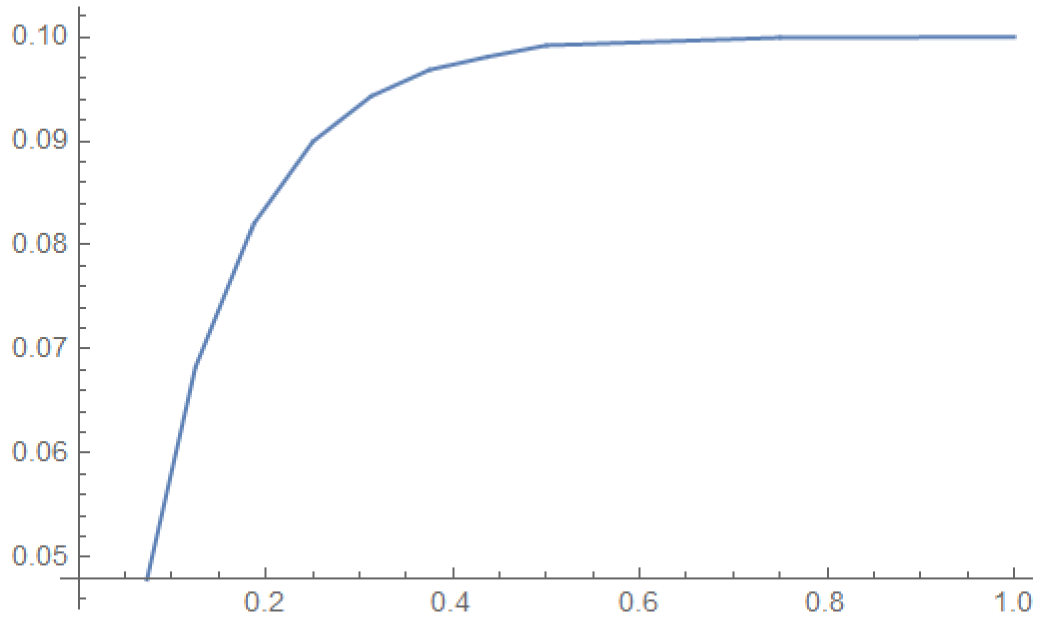


Як видно, похибка апроксимації зменшується для більших значень x, коли для менших значень необхідне уточнення.

Після першої ітерації АМСЕ додано 2 нові вузли розбиття для менших x:



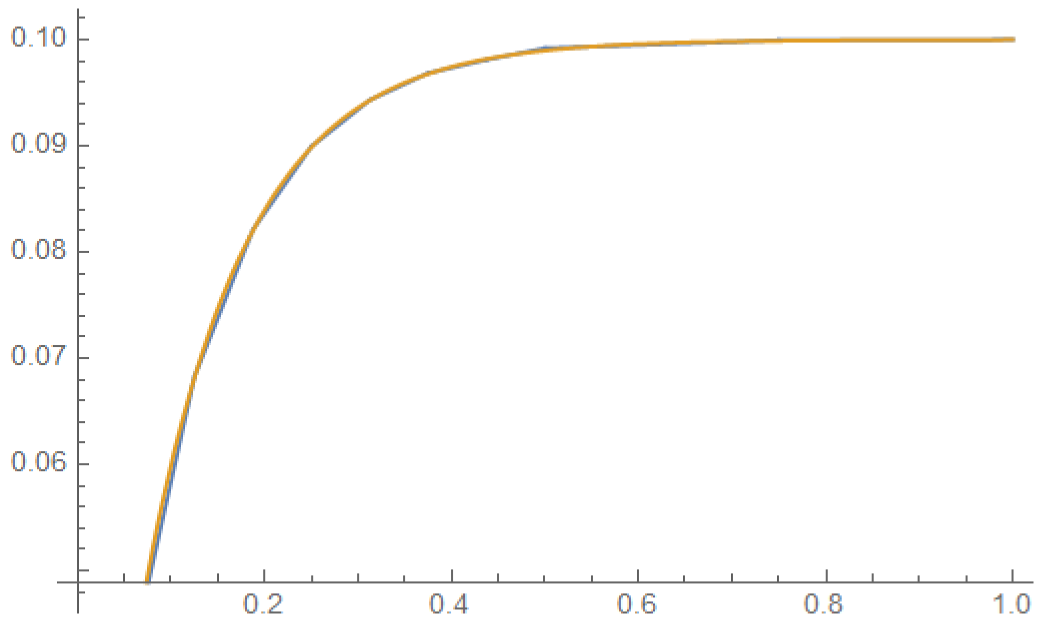
Після другої ітерації додано ще 4 вузли розбиття, у результаті отримали таке наближення розв’язку:



Після завершення процесу згущення сітки можна побачити, що кількість вузлів збільшилась в лівій частині графіку, оскільки для більших значень x необхідна точність була досягнута на першій ітерації з 4 вузлами розбиття.

На цьому етапі було досягнуто необхідної точності, тобто значення $\eta_{i+\frac{1}{2}}$ не перевищує задані 15% для кожного з проміжків розбиття.

Накладені графіки точного розв'язку, обчисленого бібліотечною функцією, та апроксимованого розв'язку:



Висновок

Метод скінченних елементів дає можливість досить просто та з високою точністю апроксимувати розв’язок диференціальних рівнянь у частинних похідних. Метод потребує використання квадратурних формул для обчислення інтегралів та метод прогонки (або будь-який інший) для розв’язання системи алгебраїчних рівнянь.

Ідея методу полягає у переході з нескінченновимірного до скінченновимірного простору – апроксимації розв’язку ДРЧП з допомогою розбиття на скінченні елементи. При згущенні сітки вузлів точність розв’язку підвищується, але це потребує більше часу і ресурсів на обчислення, тому згущення сітки має сенс тільки там, де точність апроксимації розв’язку є нижчою ніж бажана.

Алгоритм h-адаптивного МСЕ апостеріорно оцінює похибку апроксимації для кожного відрізку розбиття, базуючись на розв’язанні варіаційної задачі для обчислення апроксимації похибки методом Гальоркіна. Таким чином, оцінивши похибку на кожному скінченному елементі розбиття, якщо похибка є більшою заданого раніше значення, алгоритм ділить обраний елемент на два, додаючи ще один в центр ваги обраного елементу. Тому сітка розбиття згущується тільки в місцях де похибка апроксимації є більшою за допустиму, оминаючи вузли де розв’язок був достатньо точно апроксимований на перших ітераціях роботи алгоритму.

Таким чином адаптивність МСЕ дозволяє знизити обчислювальні витрати за рахунок переходу від рівновіддаленої сітки вузлів розбиття до нерівновіддаленої з введенням нових елементів у тих місцях, де необхідна більша їх частота.