

**МЕТОД КОНЕЧНЫХ ОБЪЕМОВ: ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ И ПРОГРАММНАЯ
РЕАЛИЗАЦИЯ**

Москва
2022

1 Общие сведения о методе конечных объемов

Метод конечных объемов (МКО, также метод контрольного объема, метод баланса, интегро-интерполяционный метод) наряду с рассмотренными ранее методами конечных разностей (МКР) и конечных элементов (МКЭ) является способом преобразования задачи для уравнения в частных производных в систему алгебраических уравнений для сеточных неизвестных.

В отличие от МКЭ, имеющего обширную математическую базу, МКО строится на более физических принципах. Хотя это затрудняет математический анализ метода, получающаяся численная схема обладает рядом преимуществ, среди которых *консервативность*. Консервативность схемы означает, что полученное численное решение удовлетворяет некоторым законам сохранения, которым удовлетворяет решение исходной задачи. В методе конечных объемов это свойство выполняется на каждой ячейке.

2 Построение метода конечных объемов

2.1 Построение консервативной разностной схемы для одномерного уравнения диффузии

Рассмотрим краевую задачу для одномерного стационарного уравнения диффузии:

$$\begin{cases} -\frac{\partial}{\partial x} (D \frac{\partial C}{\partial x}) = s & \text{в } \Omega = (0; 1), \\ C(0) = a, \quad C(1) = b. \end{cases} \quad (1)$$

Считаем пока коэффициент диффузии D постоянным. Рассмотрим для удобства уравнение в смешанной форме:

$$\begin{cases} \frac{\partial q}{\partial x} = s & \text{в } \Omega = (0; 1), \\ q = -D \frac{\partial C}{\partial x}, \\ C(0) = a, \quad C(1) = b. \end{cases} \quad (2)$$

Введем равномерную сетку на отрезке $(0; 1)$ с шагом $\Delta x = 1/N$. На сей раз неизвестные расположим, в отличие от МКР и МКЭ, не в узлах, а в центрах ячеек сетки (пример для $N = 4$ приведен на рисунке 1). На этой сетке определим ячейки $e_i = [x_i; x_{i+1}]$. Координата центра i -й ячейки обозначается как $x_{i+1/2}$.

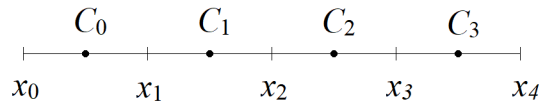


Рис. 1: Одномерная сетка и расположение сеточных значений концентрации в центрах ячеек

Далее проинтегрируем закон сохранения массы (первое уравнение в (2)) по ячейке e_i :

$$\int_{e_i} \frac{\partial q}{\partial x} dx = \int_{e_i} s dx, \quad (3)$$

из которого получим

$$q_{i+1} - q_i = \int_{e_i} s dx, \quad (4)$$

где q_i – поток в узле i .

Перейдем теперь к выражению для потока (второму уравнению в (2)). Для внутренних узлов поток выражается просто:

$$q_i = -D \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta x}, \quad (5)$$

Для граничных же узлов эти выражения несколько меняются

$$q_0 = -D \frac{C_0 - a}{\Delta x/2}, \quad q_{N-1} = -D \frac{b - C_{N-1}}{\Delta x/2}. \quad (6)$$

Полученные выражения для потоков можно подставить в уравнения (4). Для внутренних ячеек они принимают вид

$$-D \frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta x} + D \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta x} = \int_{e_i} s dx. \quad (7)$$

Если интеграл в правой части приблизить формулой $\int_{e_i} f dx \approx f(x_{i+1/2}) \cdot \Delta x$, а затем поделить все на Δx , получим

$$-D \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta x^2} = s(x_{i+1/2}). \quad (8)$$

Уравнения для граничных ячеек отличаются несильно. Итоговая система имеет трехдиагональную матрицу и сильно похожа на дискретизацию традиционной разностной схемой с трехточечным шаблоном.

2.2 Метод конечных объемов в двумерном случае

Подобные действия можно проделать и в двумерном случае. Выпишем и здесь систему в смешанном виде:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{q} = s & \text{в } \Omega \in \mathbb{R}^2, \\ \mathbf{q} = -\mathbb{D} \nabla C, \\ + \text{граничные условия} \end{cases} \quad (9)$$

Пусть e_i – некоторая ячейка сетки. Проинтегрируем закон сохранения массы по ячейке:

$$\int_{e_i} \nabla \cdot \mathbf{q} dV = \int_{e_i} s dV, \quad (10)$$

затем левую часть преобразуем по теореме Остроградского–Гаусса:

$$\int_{e_i} \nabla \cdot \mathbf{q} dV = \int_{\partial e_i} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS, \quad (11)$$

где \mathbf{n} – нормаль к границе e_i . На практике ячейка сетки является многоугольником, поэтому преобразование можно продолжать дальше:

$$\int_{e_i} \nabla \cdot \mathbf{q} dV = \int_{\partial e_i} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS = \sum_{f \in \partial e_i} \int_f \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS \quad (12)$$

Здесь f – грань ячейки; используется терминология, более привычная для трехмерного варианта МКО. В двумерном случае для ячейки грань = ребро, а в INMOST для двумерных ячеек Face и Edge являются одним и тем же понятием.

Ключевым вопросом при построении схемы МКО является приближение интеграла $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$ на грани – *интегрального потока через грань*. Далее для краткости будем говорить просто "потока через грань".

3 Схема с двухточечной аппроксимацией потока через грань

Эта схема является простейшим вариантом МКО, широко используемым на практике. В выражении для потока через грань используются значения концентрации только в двух точках – центрах масс двух ячеек, разделяемых гранью (если грань внутренняя; а в случае граничной грани вместо центра масс отсутствующей ячейки используется значение концентрации в центре масс грани – об этом далее). Поэтому схема и называется двухточечной (англ. two-point flux approximation, TPFA).

Далее рассмотрим построение аппроксимации для грани f , разделяющей ячейки A и B (см. рисунок 2). Используется следующее выражение:

$$\int_f \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS \approx |f| \cdot t_f \cdot (C_B - C_A), \quad (13)$$

где $|f|$ – площадь грани (длина ребра), C_A, C_B – концентрации в центрах масс ячеек, t_f – коэффициент проводимости (англ. transmissibility). Как его искать?

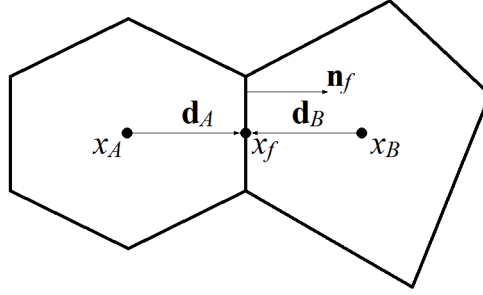


Рис. 2: Две ячейки и необходимые для построения аппроксимации потока величины

Для начала определим некоторые величины (все они приведены на рисунке 2):

- $x_{A,B}$ – центры масс ячеек;
- x_f – центр масс грани;
- $\mathbf{d}_{A,B} = \overrightarrow{x_{A,B}x_f}$ – векторы, соединяющие центры масс ячеек и центр масс грани;
- \mathbf{n}_f – *единичный* вектор нормали к грани, направленный из A в B ;
- $\mathbb{D}_{A,B}$ – тензоры диффузии в ячейках, они могут отличаться.

Введем в центре масс грани f вспомогательную величину – концентрацию C_f . Далее построим с ее помощью выражения, аппроксимирующие поток для ячеек A и B , затем их приравнявением эту неизвестную исключим. Начнем с аппроксимации градиента:

$$(\nabla C)_{A,B} \approx (C_f - C_{A,B}) \frac{\mathbf{d}_{A,B}}{\|\mathbf{d}_{A,B}\|^2}. \quad (14)$$

Используя эти выражения, приблизим величину $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = -\mathbb{D} \nabla C \cdot \mathbf{n}$:

$$(\mathbf{q} \cdot \mathbf{n})_f \approx -(C_f - C_{A,B}) \frac{\mathbb{D} \mathbf{d}_{A,B} \cdot \mathbf{n}_f}{\|\mathbf{d}_{A,B}\|^2}. \quad (15)$$

Далее, выписав отдельно выражения для двух ячеек, приравняем их, приведем известные и выразим C_f . Прodelать это можно в качестве практического задания. Итоговое выражение для потока через грань принимает вид

$$(\mathbf{q} \cdot \mathbf{n})_f \approx (C_B - C_A) \frac{\frac{\mathbb{D}\mathbf{d}_A \cdot \mathbf{n}_f}{\|\mathbf{d}_A\|^2} \cdot \frac{\mathbb{D}\mathbf{d}_B \cdot \mathbf{n}_f}{\|\mathbf{d}_B\|^2}}{\frac{\mathbb{D}\mathbf{d}_A \cdot \mathbf{n}_f}{\|\mathbf{d}_A\|^2} - \frac{\mathbb{D}\mathbf{d}_B \cdot \mathbf{n}_f}{\|\mathbf{d}_B\|^2}}. \quad (16)$$

Таким образом, для коэффициент проводимости равен

$$t_f = \frac{\frac{\mathbb{D}\mathbf{d}_A \cdot \mathbf{n}_f}{\|\mathbf{d}_A\|^2} \cdot \frac{\mathbb{D}\mathbf{d}_B \cdot \mathbf{n}_f}{\|\mathbf{d}_B\|^2}}{\frac{\mathbb{D}\mathbf{d}_A \cdot \mathbf{n}_f}{\|\mathbf{d}_A\|^2} - \frac{\mathbb{D}\mathbf{d}_B \cdot \mathbf{n}_f}{\|\mathbf{d}_B\|^2}}. \quad (17)$$

3.1 Обработка граничных условий

В МКО граничные условия определяются *на гранях*. Для каждой грани задается либо концентрация в центре масс, либо интегральный поток через эту грань. Таким образом, в случае граничного условия Неймана все тривиально: интегральный поток уже известен, и его можно просто отправить в правую часть итоговой линейной системы.

Для условия Дирихле все тоже не очень сложно. Аппроксимация строится аналогично случаю внутренних граней, только отсутствует ячейка B , и для аппроксимации потока можно оставить выражение (15).

3.2 Детальный алгоритм сборки системы уравнений

```

1 for  $f \in$  все грани сетки do
2   Найти величины  $\mathbf{n}_f, x_f$ ;
3   if  $f$  – граничная грань then
4     if  $f$  – грань Дирихле then
5       Определить соответствующую ячейку  $A$ ;
6       Найти величины  $x_A, \mathbf{d}_A, \mathbb{D}_A$ ;
7       Найти коэффициент в выражении (15);
8       Добавить в линейную систему в строку, соответствующую ячейке  $A$ ,
          соответствующие элементы в матрицу и в правую часть (через «+=», не через
          «=»!);
9       Не забыть умножить на  $|f|$ ;
10    else
11      В случае грани Неймана добавить в правую часть в строку, соответствующую
          ячейке  $A$ , значение интегрального потока на грани.
12    end
13  else
14    Для внутренней грани определить ячейки  $A$  и  $B$ ;
15    Найти величины  $x_{A,B}, \mathbf{d}_{A,B}, \mathbb{D}_{A,B}$ ;
16    Вычислить проводимость  $t_f$  в соответствии с (17);
17    В соответствии с (13) (не забыть там  $|f|$ ) добавить элементы в матрицу системы
        (всего 4 элемента, по 2 в строках для  $A$  и  $B$ );
18    Не забыть использовать «+=» вместо «=» при модификации матрицы.
19  end
20 end
21 for  $c \in$  все ячейки сетки do
22   Найти центр масс ячейки  $x_c$ ;
23   Добавить в правую часть элемент  $s(x_c) \cdot |c|$ ;
24   Не забыть использовать «+=» вместо «=»;
25 end

```

Полезные функции INMOST, которые пригодятся здесь:

- `Barycenter()` – вычислить центр масс. Не путать с `Centroid()`, которая ищет центроид – среднее арифметическое координат, что может не быть центром масс;
- `Face::UnitNormal()` – найти единичную нормаль к грани;
- `Face::BackCell()` – получить для грани ячейку, по отношению к которой нормаль является внешней (на рисунке 2 – ячейку A);
- `Face::FrontCell()` – получить для грани ячейку, по отношению к которой нормаль является внутренней (на рисунке 2 – ячейку B). Не сработает для граничной грани;
- `rMatrix::FrobeniusNorm()` – посчитать фробениусову норму матрицы, для матрицы-столбца выдаст обычную евклидову норму вектора;
- `Face::Area()` – найти площадь грани (длину ребра);
- `Cell::Volume()` – найти объем (площадь) ячейки.

4 Что нужно запрограммировать

Устройство кода похоже на код по МКЭ. Отличия следующие:

- Значения концентраций (рассчитанной и аналитической) и источника находятся в ячейках, а не в узлах;
- Соответственно, тег глобальных индексов тоже должен быть определен на ячейках;
- Граничные условия задаются на гранях, а не в узлах;
- Наличие ГУ Дирихле не влияет на число неизвестных, оно всегда равно числу ячеек.

Дополнительно нужно сделать следующее:

- Оценку L_2 – и C –норм ошибки, при этом воспользоваться старым заданием, где это проделывалось для кусочно-постоянных функций;
- Создать специальный тег, определенный на гранях, и записать туда проводимости t_f ;
- С помощью этого тега затем можно вычислять потоки. Поскольку визуализировать данные на гранях мы не можем, будем хранить вектор потока на ячейках, вычисляя его для ячейки e как

$$\mathbf{q}|_e = \frac{1}{|e|} \sum_{f \in \partial e} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n})|_f \cdot (x_f - x_e),$$

где значения $(\mathbf{q} \cdot \mathbf{n})|_f$ находятся с использованием рассчитанных концентраций и проводимостей.

5 Заключение

Рассмотрен метод конечных объемов с простейшей двухточечной аппроксимацией интегрального потока через грани ячеек. В отличие от МКЭ, этот метод располагает неизвестными в ячейках, а не в узлах. Количество неизвестных не меняется в зависимости от граничных условий и всегда равно числу ячеек. Метод локально консервативен, по построению его в каждой ячейке выполняется закон сохранения массы, а двухточечная аппроксимация потока обладает рядом преимуществ – компактный шаблон и удовлетворение дискретному принципу максимума, простота программирования. В чем же подводные камни? Ответ дадут численные эксперименты.