

Numerické metody vyššího řádu pro řešení transportních úloh

M. Hanuš, M. Smítková

Katedra matematiky
Západočeská univerzita, Plzeň

1 Úvod

Numerické modelování transportních procesů či v obecnější rovině zákonů zachování se stále těší velké pozornosti, a to jak uživatelů (od biologů zájímajících se o proudění krve v cévách až např. po jaderné fyziky simulující šíření neutronového záření), tak vědecko-výzkumných pracovníků. Ti vytvářejí stále efektivnější a přesnější numerické metody schopné zachytit i složité fyzikální jevy, jimiž jsou úlohy tohoto typu často doprovázeny. Velmi oblíbené v tomto oblasti byly a stále jsou metody konečných objemů, v současnosti zejména moderní schémata s vysokým rozlišením. Dnes již však jejich dominantní postavení není zdaleka tak výrazné a do popředí se dostávají alternativní metody, jimiž se budeme zabývat v tomto příspěvku.

2 Testovací úloha

Pro účely testování a porovnání dále zmíněných metod byla vybrána úloha z čl. [2] a bylo pro ni metodou charakteristik sestrojeno přesné řešení.

- *Oblast:* čtverec $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, s hranicí $\partial\Omega = \Gamma_- \cup \Gamma_+$, kde

$$\begin{aligned}\Gamma_- &= \{\mathbf{x} \in \partial\Omega : \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) < 0\} \quad (\text{vtoková hrana}), \\ \Gamma_+ &= \{\mathbf{x} \in \partial\Omega : \mathbf{a}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \geq 0\} \quad (\text{odtoková hrana}),\end{aligned}$$

\mathbf{n} značí vektor vnější normály k $\partial\Omega$ a $\mathbf{x} = (x, y)$.

- *Rovnice:*

$$\nabla \cdot (\mathbf{a}(\mathbf{x})u(\mathbf{x})) + c(\mathbf{x})u(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{v } \Omega, \quad u(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}) \quad \text{na } \Gamma_-. \quad (1)$$

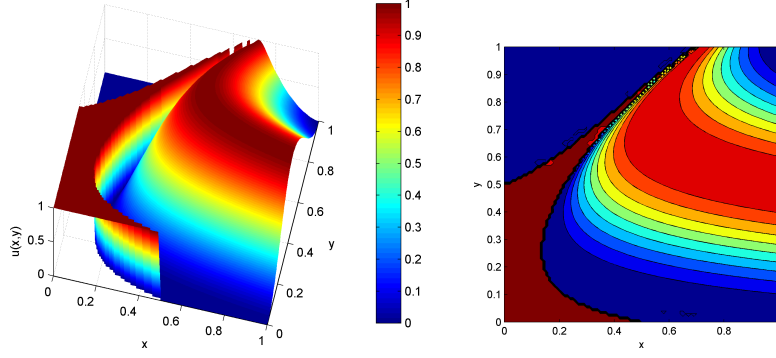
- *Parametry:*

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 10y^2 - 12x + 1 \\ 1 + y \end{bmatrix}, \quad c(\mathbf{x}) = -\nabla \cdot \mathbf{a}(\mathbf{x}) \equiv 11.$$

- *Okrajové podmínky:*

$$g(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \text{pro } (x = 0 \wedge 0.5 < y \leq 1) \vee (0.5 < x \leq 1 \wedge y = 0), \\ 1 & \text{pro } (x = 0 \wedge 0 < y \leq 0.5) \vee (0 \leq x \leq 0.5 \wedge y = 0), \\ \sin^2(\pi y) & \text{pro } x = 1 \wedge 0 \leq y \leq 1. \end{cases}$$

- *Přesné řešení:* znázorněno na obr. 1.



Obrázek 1: Přesné řešení vyhodnocené ve 100×100 bodech čtverce Ω .

3 Metody konečných prvků (MKP)

MKP, populární zejména pro řešení diferenciálních úloh druhého a vyššího řádu, nebyly zpočátku pro transportní výpočty příliš atraktivní. Předpokládají totiž hladkost řešení, kterou nelze obecně v případě parciálních diferenciálních rovnic hyperbolického typu očekávat. Průlom učinil až článek [3], v němž byla představena metoda nespojitých konečných prvků („Discontinuous Galerkin Method“, dále jen DGM). Přestože DGM umožňuje využít příznivé vlastnosti MKP (geometrická flexibilita, snadno použitelná aproximace vysokého řádu atd.) i pro úlohy s nehladkým řešením, její použití je obvykle spojeno s většími výpočetními nároky než u klasické MKP. Zároveň proto probíhal vývoj tzv. stabilizovaných metod konečných prvků (SMKP), v nichž je zachována globálně spojitá aproximace řešení a problémy s jeho nízkou regularitou jsou adresovány úpravami diskrétní formulace.

DGM i SMKP využívají standardní rozklad (triangulaci) $\overline{\Omega} = \cup_{K \in \tau_h} \overline{K}$ oblasti Ω na množinu τ_h disjunktních elementů (v této práci čtverců) K a přibližné řešení u_h vyjadřují jako lineární kombinaci konečného počtu nad nimi definovaných bázevých funkcí. Dosazením tohoto rozvoje do rovnice (1) a aplikací Galerkinovy metody je původní spojitá úloha v obou případech převedena na řešení soustavy lineárních rovnic pro neznámé koeficienty rozvoje. Praktické provedení tohoto postupu a tvar výsledné soustavy se však pro oba typy metod liší.

Z prostorových důvodů se zde budeme věnovat pouze nespojitě Galerkinově metodě. Prostor bázevých funkcí je pro ni definován jako

$$V_h = \{v \in L^2(\Omega); v|_K \in P^p(K) \ \forall K \in \tau_h\},$$

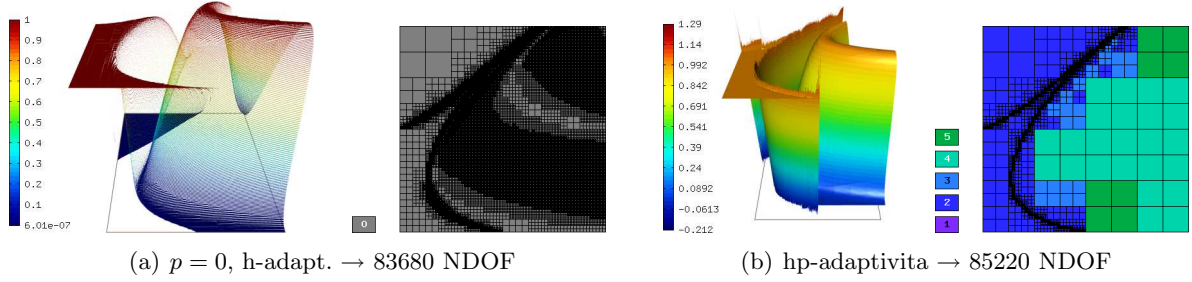
kde P^p představuje prostor polynomů stupně nejvýše p definovaných na elementu K . Klasický Galerkinův postup pro získání diskrétní verze dané úlohy vede v tomto případě (kdy je kvůli nedostatečné globální hladkosti funkcí z V_h nutné pro použití Greenovy věty integrovat po elementech) k jejímu následujícímu znění: Najdi $u_h \in V_h$ tak, aby $\forall v_h \in V_h$ platilo:

$$\sum_{K \in \tau_h} \int_K (-u_h \mathbf{a} \cdot \nabla v_h + c u_h v_h) d\mathbf{x} + \sum_{e \notin \Gamma_-} \int_e \{\mathbf{a} u_h\}_{\mathbf{a}} \cdot [v_h] ds = - \sum_{e \in \Gamma_-} \int_e (\mathbf{a} \cdot \mathbf{n}) g v_h ds,$$

$$\{\mathbf{a} u_h\}_{\mathbf{a}} = \begin{cases} \mathbf{a} u_h^L, & \text{když } \mathbf{a} \cdot \mathbf{n}^L > 0, \\ \mathbf{a} u_h^R, & \text{když } \mathbf{a} \cdot \mathbf{n}^L < 0, \\ \mathbf{a} \frac{u_h^L + u_h^R}{2}, & \text{když } \mathbf{a} \cdot \mathbf{n}^L = 0, \end{cases} \quad [v_h] = \begin{cases} v_h \mathbf{n}^L + v_h \mathbf{n}^R & \text{pro } e \notin \partial\Omega, \\ v_h \mathbf{n} & \text{pro } e \subset \partial\Omega, \end{cases}$$

kde e značí postupně hrany všech elementů τ_h a L, R sousední elementy na jejich stranách.

Na funkce $v_h \in V_h$ se nekladou žádné požadavky z hlediska spojitosti mezi elementy a teoreticky ani z hlediska maximálního stupně p . To umožňuje relativně snadnou implementaci adaptivního zjemňování sítě (h-adaptivita) a zvyšování řádu aproximace (p-adaptivita) bez starosti o konformitu elementů. Předběžné výsledky adaptivního výpočtu jsou na obr. 2. Byla použita jednoduchá automatická adaptivita, řízená velikostí L2 normy rozdílu řešení na dané síti a jeho L2-projekce na globálně zhrubenou síť. Na obrázcích je patrná dostatečná schopnost h-adaptivity zachytit nespojitosti v řešení. Při použití elementů vyššího řádu je lépe aproximováno řešení na okolí nespojitosti blízko odtokové hrany, objevují se v něm však nerealistické oscilace a ukazuje se, že upwinding zahrnutý v definici $\{\cdot\}_{\mathbf{a}}$ zde sám o sobě k zaručení stability nestačí.



Obrázek 2: Adaptivní DGM. NDOF ... počet neznámých po konvergenci adaptačního procesu. Čísla příslušná barvám elementů odpovídají řádu na nich def. bazových funkcí.

4 Residual distribution schemes (RDS)

Další skupinou metod, jimž je v poslední době věnována značná pozornost, jsou metody typu RDS. Ty vznikly na základě myšlenek inspirovaných přístupem metody konečných objemů i MKP a přirozeně se snaží zachovat dobré vlastnosti obou. Z prvně jmenované tak např. robustnost danou silným vztahem k fyzikální podstatě řešeného problému, z druhé např. kompaktnost diskretizace i pro aproximaci vyššího řádu, jež umožňuje vývoj efektivních implicitních řešičů a jednoduchou paralelizaci (viz [1]).

Pro řešení testovací úlohy nestacionárním schématem typu RDS použijeme metodu ustalování. Pro nestacionární řešení vyššího řádu přesnosti v čase by bylo nutné použít konzistentní časovou diskretizaci, zde stačí nekonzistentní časová diskretizace (detaily viz [1]).

Uvažujme skalární zákon zachování $u_t + \nabla \cdot (\mathbf{a}u) = 0$ a libovolnou triangulaci oblasti Ω . Řešení je, obdobně jako v MKP 1. řádu, aproximováno spojitou funkcí lineární na každém trojúhelníku, $u(x, y, t) \approx \sum_i u_i(t) N_i(x, y)$, kde $u_i(t)$ je hodnota funkce u v uzlu i a N_i jsou standardní P1 bazové funkce.

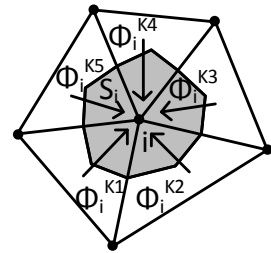
Definujeme reziduum na trojúhelníku K jako

$$\phi^K = - \int_K u_t \, d\mathbf{x} = \oint_{\partial K} (\bar{\mathbf{a}}u) \cdot d\mathbf{n}, \quad \text{kde} \quad \bar{\mathbf{a}} = \frac{1}{K} \int_K \mathbf{a} \, d\mathbf{x}.$$

Metoda RDS je založena na distribuci částí tohoto rezidua na sousední uzly. Vyjdeme-li z nekonzistentní formulace a Eulerovy explicitní integrace v čase, získáme následující schéma

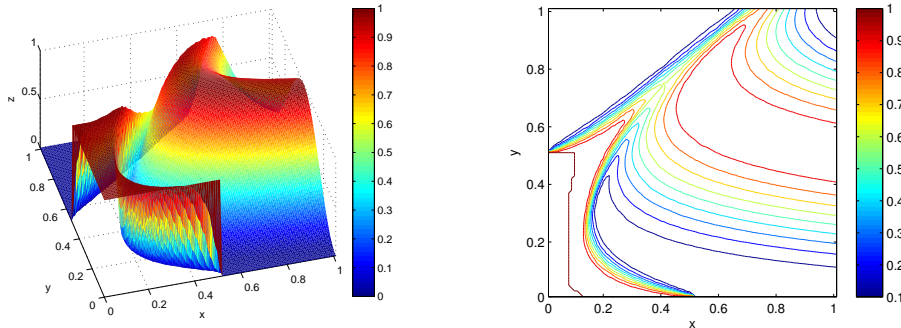
$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{S_i} \sum_T \beta_i^K \phi^K = u_i^n - \frac{\Delta t}{S_i} \sum_T \phi_i^K,$$

kde S_i je obsah duální buňky okolo uzlu i , tj. $1/3$ obsahu všech trojúhelníků se společným vrcholem v uzlu i . Pro daný trojúhelník požadujeme, aby $\beta_1^K + \beta_2^K + \beta_3^K = 1$ (konzervativita). Distribuční koeficienty β mohou být stanoveny různými způsoby s ohledem na požadované vlastnosti monotónnosti a přesnosti řešení, kompaktní stencil zůstává zachován. Formálně definujeme distribuovaná rezidua jako $\phi_i^K = \beta_i^K \phi^K$.



Obrázek 3: Geometrické znázornění základních prvků RDS.

Z metod typu RDS jsme vybrali N (Narrow) schéma s $\phi_i^{K,N} = -\frac{k_i^+}{\sum_j k_j^+} \sum_j k_j^- (q_i^n - q_j^n)$ (monotónní lineární 1. řádu). Čísla k_i , definovaná jako $k_i = \frac{1}{2} \mathbf{a} \cdot \mathbf{n}_i$, nám dovolují rozlišit mezi vtokovými a odtokovými stranami a vrcholy trojúhelníka. Vektory \mathbf{n}_i jsou definované jako vnitřní normály trojúhelníku o velikosti rovné délce příslušné strany. Pro více informací viz [1].



Obrázek 4: Numerické výsledky pro N schéma.

5 Závěr

Předběžné výsledky prezentované výše slibují použitelnost RDS i DGM pro řešení netriviálních transportních úloh. Obě metody však mají své nedostatky (patrné při porovnání obr. 2 a 4 s obr. 1, na jejichž odstranění autoři textu v současné době pracují. Na semináři pak budou RDS, DGM i SMKP důkladněji porovnány.

Reference

- [1] Deconinck H., Ricchiuto M., and Sermeus K.: Introduction to residual distribution schemes and comparison with stabilized finite elements. In: H. Deconinck (Ed.), *33rd VKI Lecture Series CFD*. Von Karman Institute, Sint-Genesius-Rode, 2003.
- [2] Houston P., Rannacher R., Süli E.: A posteriori error analysis for stabilised finite element approximations of transport problems. In: *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 190, 2000, pp. 1483–1508.
- [3] Reed W. H., Hill T. R.: Triangular mesh methods for the neutron transport equation. Tech. Report LA-UR-73-479, Los Alamos Scientific Laboratory, 1973.