

Гетерогенна крайова задача математичної моделі адвекції-дифузії у середовищі з включенням

Ярема Савула¹, Тарас Мандзак²

¹ д. ф.-м. н., професор, Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Університетська, 1, Львів, 79000, e-mail: savula@franko.lviv.ua

² Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Університетська, 1, Львів, 79000, e-mail: t_mandzak@franko.lviv.ua

Шляхом пониження вимірності співвідношень адвекції-дифузії у тонкому включенні із застосуванням напіваналітичної апроксимації шуканого розподілу за товщиною включення отримано у диференціальній формі гетерогенну крайову задачу, яка описується співвідношеннями різної вимірності за просторовими координатами. Сформульовано основні властивості білінійних форм відповідного варіаційного формулювання у вигляді лем і теорем. Подано числові результати розрахунку тестової гетерогенної задачі із застосуванням експоненційних напіваналітичних апроксимацій.

Ключові слова: адвекція, дифузія, експоненційна апроксимація, метод скінченних елементів, неоднорідне середовище.

Вступ. В інженерії навколишнього середовища, мікроелектроніці, медицині важливе місце посідає числове дослідження процесів адвекції-дифузії у неоднорідних середовищах. У разі середовищ ґрунтів з чужорідними відкладеннями, гірських порід з тріщинами, гідротехнічних споруд, електронних мікросхем, різноманітних тканин людського організму та в інших споріднених випадках маємо справу з наявністю відносно тонких включених неоднорідностей (включень), що характеризуються малою товщиною та відмінними від оточуючого середовища фізико-хімічними параметрами. Числовий аналіз класичних початково-крайових задач адвекції-дифузії у таких середовищах наштовхується на значні труднощі дискретизації та адекватної апроксимації. Математичному моделюванню впливу тонких включень на процеси адвекції-дифузії присвячені праці Дейнеки В. С., Кіта Г. С., Підстригача Я. С., Сергієчка І. В., Скопечького В. В., Сулима Г. Т. та інших. Огляд сучасного стану досліджень у цьому напрямі приведено у роботі [1]. Альтернативний підхід, що полягає у побудові гетерогенних математичних моделей, які описуються співвідношеннями різної вимірності за просторовими координатами у середовищі та включеному тонкому шарі, започатковано у працях [2, 3]. Пониження вимірності співвідношень математичної моделі у тонких включеннях на основі застосування відповідної напіваналітичної апроксимації шуканого розподілу за товщиною включення дозволяє використовувати прості методи дискретизації, зменшити обчислювальні затрати. У статті [4] нами сформульовано процедуру пониження вимірності співвідношень

адвекції-дифузії у тонкому шарі, запропоновано підхід до побудови відповідних напіваналітичних апроксимацій у випадку домінуючої адвекції (великих чисел Пекле), наведено результати тестових числових розрахунків моделі адвекції-дифузії у тонкому шарі з використанням експоненційних апроксимацій та ієрархічних базисів функцій-бульбашок [5]. У даній роботі описано гетерогенну крайову задачу адвекції-дифузії у середовищі з включенням у диференціальній і варіаційній формах, сформульовано властивості відповідних білінійних форм, наведено результати тестових числових розрахунків із застосуванням експоненційних функцій-шапочок [6] та експоненційних напіваналітичних апроксимацій.

1. Диференціальне формулювання гетерогенної крайової задачі

Розглянемо пористе середовище Ω , яке містить проникне включення B з товщиною h , значно меншою за інші характерні розміри (рис. 1).

Область Ω обмежена ліпшицевою границею $\partial\Omega$ і контактує з тонким включенням B вздовж ліпшицевої границі Γ . Область B віднесемо до криволінійної системи координат ξ_1, ξ_2, ξ_3 і подамо у вигляді

$$B = \{ \xi_1, \xi_2, \xi_3 : (\xi_1, \xi_2) \in \Xi, \xi_3 \in (-1, 1) \},$$

де Ξ — прообраз серединної поверхні включення, ξ_3 — координата, що змінюється вздовж товщини включення.

Застосовуючи процедуру пониження вимірності співвідношень адвекції-дифузії у тонкому включенні, позбуваючись його товщини, від тривимірної області B переходимо до двовимірної [4]. У включенні B застосуємо напіваналітичну апроксимацію шуканого поля (температури чи концентрації) за товщиною

$$u = \sum_{k=1}^m u_k(\xi_1, \xi_2) \psi_k(\xi_3), \quad (\xi_1, \xi_2) \in \Xi, \quad \xi_3 \in [-1, 1], \quad (1)$$

де $\{ \psi_k(\xi_3) \}_{k=1}^m$ — заданий набір m лінійно незалежних базових функцій, $u_k(\xi_1, \xi_2)$ — нові шукані величини. Враховуючи результати [4], математичну модель адвекції-дифузії у неоднорідному середовищі $\Omega \cup B$ опишемо наступними співвідношеннями різної вимірності за просторовими координатами.

- В області Ω тривимірним рівнянням вигляду

$$-\vec{\nabla} \cdot \vec{j}^\Omega - \phi^\Omega \sigma^\Omega u = 0. \quad (2)$$

Тут $\vec{j}^\Omega = \vec{q}u - \phi^\Omega \hat{D}^\Omega \cdot \vec{\nabla} u$ — адвективно-дифузійний потік в Ω , \vec{q} — поле швидкостей ($\vec{\nabla} \cdot \vec{q} = 0$), u — шукане поле, \hat{D}^Ω — тензор дифузії, $\phi^\Omega, \sigma^\Omega$ — коефіцієнти пористості й поглинання в Ω .

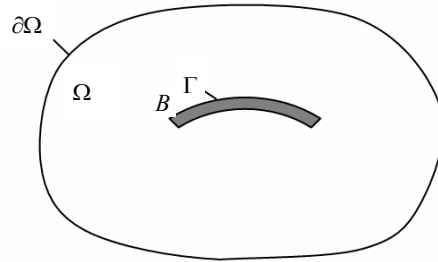


Рис. 1. Середовище з включенням

- В області B системою двовимірних рівнянь пониженої вимірності вигляду

$$\frac{1}{A_1 A_2} \sum_{\alpha=1}^2 \left(A_1 A_2 \mathbf{Q}^\alpha \cdot \vec{u} - A_1 A_2 \mathbf{K}^{\alpha\alpha} \cdot \vec{u}_{,\alpha} \right)_{,\alpha} + \left(-\mathbf{Q}^3 + \mathbf{K}^{33} + \mathbf{R} \right) \cdot \vec{u} + \vec{f} = 0 \quad \text{в } \Xi, \quad (3)$$

де \vec{u} — шуканий вектор коефіцієнтів напіваналітичної апроксимації $u_k(\xi_1, \xi_2)$ з формули (1); $A_1 = A_1(\xi_1, \xi_2)$, $A_2 = A_2(\xi_1, \xi_2)$ — коефіцієнти Ляме на серединній поверхні включення; $(\circ)_{,i} = \frac{\partial(\circ)}{\partial \xi_i}$ — позначення часткової похідної;

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^\alpha &= \frac{h}{2} \int_{-1}^1 q_\alpha \Psi(1 + \kappa h \xi_3) d\xi_3, & \mathbf{Q}^3 &= \frac{h}{2} \int_{-1}^1 q_3 \Psi'(1 + \kappa h \xi_3) d\xi_3, \\ \mathbf{K}^{\alpha\alpha} &= \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \phi D_{\alpha\alpha} \Psi(1 + \kappa h \xi_3) d\xi_3, & \mathbf{K}^{33} &= \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \phi D_{33} \Psi''(1 + \kappa h \xi_3) d\xi_3, \\ \mathbf{R} &= \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \phi \sigma \Psi(1 + \kappa h \xi_3) d\xi_3, & \vec{f} &= -\bar{\psi}(-1) j_- (1 - \kappa h) - \bar{\psi}(1) j_+ (1 + \kappa h), \end{aligned}$$

\mathbf{Q}^α , $\mathbf{K}^{\alpha\alpha}$, \mathbf{Q}^3 , \mathbf{K}^{33} , \mathbf{R} — матричні величини розміру $m \times m$, які визначаються через відповідні коефіцієнти вихідного тривимірного співвідношення адвекції-дифузії в області B , товщину включення h , середню кривину серединної поверхні κ , нормальні складові адвективно-дифузійних потоків на лицевих поверхнях j_- , j_+ та базові функції $\psi_k(\xi_3)$ [4]; $\bar{\psi} = \bar{\psi}(\xi_3)$ — вектор розміру m з елементами $\psi_k(\xi_3)$; $\Psi = [\psi_k \psi_l]$, $\Psi' = \left[\frac{d\psi_k}{d\xi_3} \psi_l \right]$, $\Psi'' = \left[\frac{d\psi_k}{d\xi_3} \frac{d\psi_l}{d\xi_3} \right]$ — матриці розміру $m \times m$, $k, l = \overline{1, m}$.

На границі $\partial\Omega$ задамо крайову умову першого роду

$$u = g(\vec{x}) \quad \text{на } \partial\Omega. \quad (4)$$

На Γ , як спільній границі суміжних областей Ω і B , потрібно задати умови спряження [7], які складаються з умови неперервності нормальних складових адвективно-дифузійного потоку та неперервності шуканого поля

$$-\vec{j}^\Omega \cdot \vec{n} \Big|_{\Gamma^\Omega} = \vec{j}^B \cdot \vec{n} \Big|_{\Gamma^B}, \quad (5)$$

$$u \Big|_{\Gamma^n} = u \Big|_{\Gamma^{-n}}, \quad (6)$$

де $\vec{j}^B = \vec{q}u - \phi \hat{D} \cdot \vec{\nabla} u$ — адвективно-дифузійний потік у B , \vec{n} — орт зовнішньої нормалі до поверхні Γ , а Γ^Ω , Γ^B — зовнішня і внутрішня сторони поверхні Γ з нормаллями \vec{n} та $-\vec{n}$ відповідно.

Подано тонку бічну поверхню включення у вигляді

$$\Gamma_S = \{\xi_1, \xi_2, \xi_3 : (\xi_1, \xi_2) \in \partial\Xi, \xi_3 \in [-1, 1]\}.$$

Умову (6) на Γ_S , враховуючи (1), запишемо у вигляді

$$u|_{\Gamma_S^n} = (\vec{\Psi}^T \cdot \vec{u})|_{\Gamma_S^n}. \quad (7)$$

Область визначення оператора цієї гетерогенної задачі можна охарактеризувати так

$$D_P = \{(u, \vec{u}) : u \in W_2^{(1)}(\Omega), u_k \in W_2^{(1)}(\Xi), \text{ умови (4)–(7)}\}.$$

Зауважимо, що оскільки D_P містить елементи $(u, \vec{u}) \in C_0^{(\infty)}(\Omega) \times C_0^{(\infty)}(\Xi)$ і $C_0^{(\infty)}$ утворює щільну множину в L_2 , то D_P є щільною множиною в $L_2(\Omega) \times L_2(\Xi)$ [8].

2. Дослідження варіаційного формулювання

Введемо простір функцій

$$V_\Omega = \{v : v \in W_2^{(1)}(\Omega), v = 0 \text{ на } \partial\Omega\}$$

зі скалярним добутком

$$(u, v)_{1, \Omega} = \int_{\Omega} (uv + \nabla u \cdot \nabla v) d\Omega$$

і нормою

$$\|u\|_{1, \Omega} = (u, u)_{1, \Omega}^{1/2}.$$

Введемо також простір векторних функцій розмірності m

$$V_\Xi = \{\vec{v} : v_k \in W_2^{(1)}(\Xi), v_k = 0 \text{ на } \partial\Xi, k = \overline{1, m}\}$$

відповідно зі скалярними добутками та нормою

$$(\vec{u}, \vec{v})_{1, \Xi} = \int_{\Xi} (\vec{u}^T \cdot \vec{v} + \vec{u}_{,\alpha}^T \cdot \vec{v}_{,\alpha}) A_1 A_2 d\xi_1 d\xi_2, \quad (\vec{u}, \vec{v})_{\Xi} = \int_{\Xi} \vec{u}^T \cdot \vec{v} A_1 A_2 d\xi_1 d\xi_2,$$

$$\|\vec{u}\|_{1, \Xi} = (\vec{u}, \vec{u})_{1, \Xi}^{1/2}.$$

Визначимо також простір \mathbf{V}

$$\mathbf{V} = \{\vec{v} = (v, \vec{v}) : v \in V_\Omega, \vec{v} \in V_\Xi, \text{ умови (6), (7)}\}$$

з нормою $\|\vec{v}\|_{1, \mathbf{V}} = \left(\|v\|_{1, \Omega}^2 + \|\vec{v}\|_{1, \Xi}^2 \right)^{1/2}$.

Дано варіаційне формулювання гетерогенної задачі (2)-(7) для випадку однорідних крайових умов.

$$\begin{cases} \text{знайти } \bar{u} \in \mathbf{V} \text{ таке, що} \\ A(u, v) + a(\bar{u}, \bar{v}) = 0 \quad \forall \bar{v} \in \mathbf{V}, \\ \bar{\nabla} \cdot \bar{q} = 0, \end{cases} \quad (8)$$

де

$$A(u, v) = - \int_{\Omega} (\bar{q}u - \phi^{\Omega} \hat{D}^{\Omega} \cdot \bar{\nabla} u) \cdot \bar{\nabla} v d\Omega + \int_{\Omega} \phi^{\Omega} \sigma^{\Omega} uv d\Omega \quad (9)$$

— білінійна форма, що відповідає рівнянню (2),

$$\begin{cases} a(\bar{u}, \bar{v}) = c(\bar{u}, \bar{v}) + d(\bar{u}, \bar{v}) + r(\bar{u}, \bar{v}), \\ c(\bar{u}, \bar{v}) = \left(\frac{1}{A_1 A_2} (A_1 A_2 \mathbf{Q}^a \cdot \bar{u})_{,\alpha} - \mathbf{Q}^3 \cdot \bar{u}, \bar{v} \right)_{\Xi}, \\ d(\bar{u}, \bar{v}) = - \left(\frac{1}{A_1 A_2} (A_1 A_2 \mathbf{K}^{aa} \cdot \bar{u}_{,\alpha})_{,\alpha}, \bar{v} \right)_{\Xi}, \\ r(\bar{u}, \bar{v}) = \left((\mathbf{K}^{33} + \mathbf{R}) \cdot \bar{u}, \bar{v} \right)_{\Xi} \end{cases} \quad (10)$$

— білінійні форми, що відповідають рівнянню (3).

Зауважимо, що для отримання співвідношень (8), (9) застосовано теорему Остроградського-Гауса і враховано природну умову (5). Введені у поданнях (9), (10) білінійні форми мають властивості, які сформульовані в наступних лемах і теоремах.

Теорема 1. Білінійна форма $A(\cdot, \cdot): V_{\Omega} \times V_{\Omega} \rightarrow R$ неперервна і V_{Ω} — еліптична

$$|A(u, v)| \leq M_1^2 \|u\|_{1, \Omega} \|v\|_{1, \Omega},$$

$$A(u, u) \geq \rho_1^2 \|u\|_{1, \Omega}^2.$$

Лема 1. Білінійна форма $c(\cdot, \cdot): V_{\Xi} \times V_{\Xi} \rightarrow R$ косиметрична

$$c(\bar{u}, \bar{v}) = -c(\bar{v}, \bar{u}) \quad \forall \bar{u}, \bar{v} \in V_{\Xi}$$

і справедлива рівність

$$c(\bar{u}, \bar{v}) = \int_{\Xi} \bar{v}^T \cdot A_1 A_2 (\mathbf{Q}^a \cdot \bar{u}_{,\alpha} + \mathbf{Q}^{3T} \cdot \bar{u}) d\xi_1 d\xi_2 \quad \forall \bar{u}, \bar{v} \in V_{\Xi},$$

коли виконується умова

$$\Psi \cdot \bar{u} q_3 (1 + \kappa h \xi_3) \Big|_{-1}^{+1} = 0.$$

Лема 2. Білінійна форма $d(\cdot, \cdot): V_{\Xi} \times V_{\Xi} \rightarrow R$ симетрична

$$d(\bar{u}, \bar{v}) = d(\bar{v}, \bar{u}) \quad \forall \bar{u}, \bar{v} \in V_{\Xi}$$

і справедлива рівність

$$d(\bar{u}, \bar{v}) = \int_{\Xi} \bar{v}_{,\alpha}^T \cdot A_1 A_2 \mathbf{K}^{aa} \cdot \bar{u}_{,\alpha} d\xi_1 d\xi_2.$$

Лема 3. Білінійна форма $r(\cdot, \cdot): V_{\Xi} \times V_{\Xi} \rightarrow R$ симетрична

$$r(\bar{u}, \bar{v}) = r(\bar{v}, \bar{u}) \quad \forall \bar{u}, \bar{v} \in V_{\Xi}.$$

Лема 4. Білінійна форма $a(\cdot, \cdot): V_{\Xi} \times V_{\Xi} \rightarrow R$ неперервна

$$|a(\bar{u}, \bar{v})| \leq M_2^2 \|\bar{u}\|_{1,\Xi} \|\bar{v}\|_{1,\Xi}.$$

Теорема 2. Білінійна форма $a(\cdot, \cdot): V_{\Xi} \times V_{\Xi} \rightarrow R$ V_{Ξ} — еліптична

$$a(\bar{u}, \bar{u}) \geq \rho_2^2 \|\bar{u}\|_{1,\Xi}^2$$

за умови $\kappa < 1/h$.

Доведення теореми 2 ґрунтується на лінійній незалежності послідовності $\{\psi_k(\xi_3)\}_{k=1}^m$ і полягає у застосуванні теореми Релея-Рітца та попередніх лем.

3. Числові експерименти

Для проведення тестового числового розрахунку розглянемо двовимірний частковий випадок задачі (2)-(7) у квадратній області Ω , приймаючи фізико-хімічні параметри включення й оточуючого середовища однаковими, а контакт між ними — ідеальним. Тоді можемо порівняти числовий розв'язок гетерогенної крайової задачі з аналітичним розв'язком деякої класичної крайової задачі в області без включення. Розглянемо, наприклад, таку задачу

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \text{Pe}_1 \frac{\partial u}{\partial x} + \text{Pe}_2 \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad (x, y) \in \Omega = (0, 1) \times (0, 1), \quad (11)$$

$$u|_{x=0} = \frac{1 - e^{(y-1)\text{Pe}_2}}{1 - e^{-\text{Pe}_2}}, \quad u|_{x=1} = 0, \quad u|_{y=0} = \frac{1 - e^{(x-1)\text{Pe}_1}}{1 - e^{-\text{Pe}_1}}, \quad u|_{y=1} = 0. \quad (12)$$

Тут Pe_1, Pe_2 — числа Пекле за напрямками осей Ox, Oy відповідно.

Аналітичний розв'язок задачі має вигляд

$$u^{ex}(x, y) = \frac{(1 - e^{(x-1)\text{Pe}_1})(1 - e^{(y-1)\text{Pe}_2})}{(1 - e^{-\text{Pe}_1})(1 - e^{-\text{Pe}_2})}. \quad (13)$$

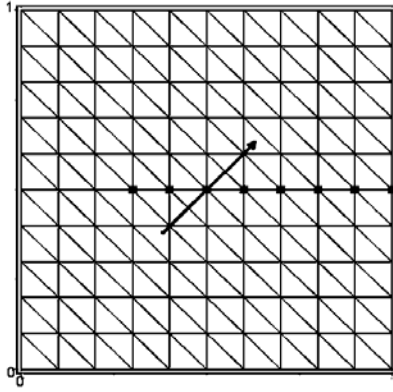


Рис. 2. Дискретизація області

Дискретизація області Ω зображена на рис. 2, де виділеними вузлами позначено область включення, а вектор вказує на напрям адвективного потоку.

Для скінченноелементної апроксимації застосуємо неявні експоненційні функції-шапочки на трикутних елементах [5], вигляд яких залежить від чисел Пекле (рис. 3). За товщиною включення застосуємо експоненційну напіваналітичну апроксимацію (1) на основі таких базових функцій [4]

$$\psi_1 = 1, \quad \psi_2 = e^{\text{Pe}_2 \xi_3}.$$

Прийmemo товщину включення $h = 10^{-6}$ м при розмірі області 1×1 м. З огляду на малу товщину, для спрощення числових розрахунків, прийmemo розподіл концентрації на лівому краї включення сталим.

Зауважимо, що числове розв'язання гетерогенної крайової задачі адвекції-дифузії (2)-(7) зводиться до розв'язування єдиної системи лінійних алгебричних рівнянь, яка формується звичайним чином на основі білінійних форм (9), (10) із спеціальним врахуванням головних умов спряження (6). Числовий та аналітичний (див. формулу (13)) розв'язки тестової гетерогенної крайової задачі для $\text{Pe}_1 = \text{Pe}_2 = 100$ зображено на рис. 4.

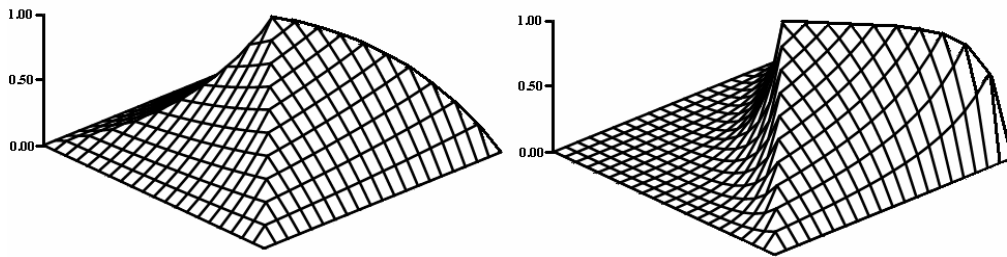


Рис. 3. Протабульовані функції-шапочки для $\text{Pe}_1, \text{Pe}_2 = 2$ (зліва) і $\text{Pe}_1, \text{Pe}_2 = 10$ (справа)

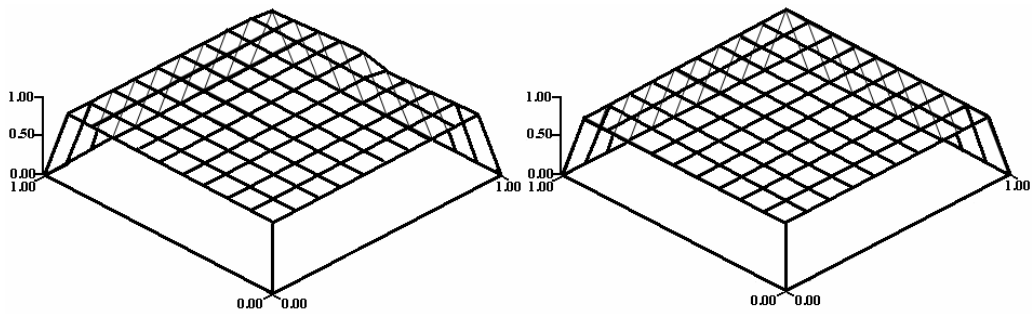


Рис. 4. Числовий розв'язок (зліва) і аналітичний (справа)

Таким чином, можемо зробити висновок про адекватність числового розв'язку гетерогенної крайової задачі до вхідних даних математичної моделі. На рис. 5 показано числовий розв'язок для випадку, коли швидкість адвективного перенесення вздовж включення ϵ у 100 разів більшою, ніж у середовищі.

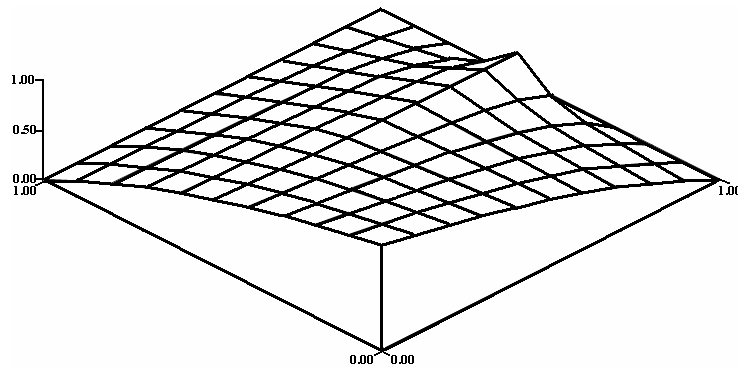


Рис. 5. Числовий розв'язок за домінуючої адвекції у включенні

Про це свідчить відповідний «виступ» на графіку розподілу шуканого поля в області розташування включення.

Висновки. Сформульовано гетерогенну математичну модель, яка описується три- та двовимірними рівняннями адвекції-дифузії й умовами спряження на границі контакту тонкого включення з середовищем. Побудовано варіаційне формулювання гетерогенної моделі, досліджено відповідні білінійні форми й показано, що за певних умов вони зберігають властивості неперервності та V -еліптичності, як і вихідні оператори, до яких застосовано процедуру пониження вимірності. Наведено результати успішних тестових числових експериментів, які дозволяють перейти до розрахунку реальних задач адвекції-дифузії у середовищах із включеннями.

Література

- [1] Сулим Г. Т., Піскозуб Й. З. Умови контактної взаємодії тіл (Огляд) // Мат. методи та фіз.-мех. поля. — 2004. — Т. 47, № 3. — С. 110-125.
- [2] Дяконюк Л., Кухарський В., Савула Я. Математичне моделювання процесів теплопровідності у багатошарових середовищах із тонкими включеннями // Математичні проблеми механіки неоднорідних структур. — Львів: 2000. — Т. 1. — С. 212-216.
- [3] Савула Я. Г., Сина І. М., Струтинській І. В. Математичні моделі теплопровідності для тіл з тонкими покриттями та включеннями // Вісник Львів. ун-ту. Сер. мех.-матем. — 1992. — Вип. 37. — С. 39-45.
- [4] Мандзак Т. І., Савула Я. Г. Пониження вимірності математичної моделі адвекції-дифузії у тонкому включенні з використанням експоненційних апроксимацій // Волинський математичний вісник. Сер. прикл. матем. — 2004. — Вип. 2 (11). — С. 52-57.
- [5] Мандзак Т. І., Савула Н. Я. Про використання ієрархічних базисів у методі скінченних елементів // Вісник Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. та інформ. — 2003. — Вип. 6. — С. 80-85.
- [6] Song Wang, Zi-Cai Li. An analysis of a conforming exponentially fitted finite element method for a convection-diffusion problem // Journal of Computational and Applied Mathematics. — 2002. — Issue 143. — P. 291-310.
- [7] Дейнека В. С., Сергиенко И. В., Скопецкий В. В. Модели и методы решения задач с условиями сопряжения. — К.: Наук. думка, 1998. — 615 с.
- [8] Ректорис К. Вариационные методы в математической физике и технике. — М.: Мир, 1985. — 590 с.

Heterogeneous Boundary Value Problem of Advection-Diffusion Mathematical Model in Medium with Inclusion

Yarema Savula, Taras Mandzak

By dimensional reduction of advection-diffusion equations in thin inclusion with use of semi analytical approximations of thought field in thickness direction heterogeneous boundary value problem in differential form is obtained. It is described by mathematical relations at different dimensions by special coordinates. Main properties of bilinear forms of corresponding variational formulation are presented. Results of test numerical computations of heterogeneous problem in case of use of exponential semi analytical approximation are presented.

Гетерогенная краевая задача математической модели адвекции-диффузии в среде с включением

Ярема Савула, Тарас Мандзак

Путем снижения порядка соотношений адвекции-диффузии в тонком включении на основании использования полуаналитических аппроксимаций искомого распределения по толщине включения получено в дифференциальной форме гетерогенную краевую задачу, которая описывается соотношениями разной размерности по пространственным координатам. Сформулированы главные свойства соответственной вариационной формулировки в виде леммы и теоремы. Приведены численные результаты расчета тестовой гетерогенной задачи с использованием экспоненциальной полуаналитической аппроксимации.

Отримано 08.02.06