

Численное решение транспортного уравнения при больших сеточных числах Пекле.

Оглавление

1. Транспортное уравнение	1
Примеры физических явлений описываемых уравнением (1).	1
Электроконвекция.	2
Естественная конвекция.	2
Параметр Пекле.....	2
Численное решение транспортного уравнения.	3
Методы стабилизации решения.	8
Метод увеличения диффузии.....	8
Методы, реализованные в программном пакете COMSOL MULTIPHYSICS.	10
Решение задачи (15) методом конечных элементов Галеркина без стабилизации.	10
Стабилизация с помощью изотропной диффузии.....	12
Стабилизация с помощью анизотропной диффузии (Anisotropic diffusion).....	13
Стабилизация с помощью метода против ветра Петрова-Галеркина.	14

1. Транспортное уравнение

Транспортное уравнение, оно же конвективно-диффузионное уравнение, оно же уравнение Нернста-Планка:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + (\nabla, -D\nabla c + \mathbf{v}c) = S \quad (1)$$

является параболическим (в общем случае нелинейным) уравнением [1]. В одномерном виде можно свести к уравнению диффузии с усложненным источником [2]. Однако в данном случае будем интересоваться численным решением данного уравнения. В большинстве сложных связанных с другими физическими процессами (электроконвекция, теплоперенос с помощью конвекции) скорость конвекции зависит от концентрации (температуры) в данной точке т.е. $v(c)$. Что усложняет задачу, однако численные методы реализованные в программных пакетах ([3] см. The Solvers and Their Settings) используют линеаризацию, что означает, решение уравнения (1) с фиксированной скоростью конвекции. Однако, даже решение линейного уравнения сопряжено с численными трудностями, о которых пойдет речь позже.

Примеры физических явлений описываемых уравнением (1).

Уравнение (1) - дифференциальный закон сохранения массы.

Электроконвекция.

Уравнение (1) как одно из уравнений системы, входит в систему уравнений, описывающую электроконвекцию (электрический ветер, ЭГД течения) в униполярном приближении.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \left(\nabla, \left(-D \nabla c(\mathbf{r}, t) + (\mu \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)) c(\mathbf{r}, t) \right) \right) = S \\ (\nabla, \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)) = \frac{c(\mathbf{r}, t) e}{\epsilon \epsilon_0} \\ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + (\mathbf{v}(\mathbf{r}, t), \nabla) \circ \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) + c(\mathbf{r}, t) e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \\ (\nabla, \mathbf{v}) = 0 \end{array} \right. \quad (2)$$

Эта же система, но без уравнения Навье-Стокса, может описывать лавинно-стримерные процессы в т.н. диффузионно-дрейфовом приближении (см. стр. 116 [4]).

Естественная конвекция.

Также, уравнение (1) фигурирует в системе уравнений описывающих естественную конвекцию (стр. 308 [4]):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T'(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + (\nabla, -\chi \nabla T'(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v} T'(\mathbf{r}, t)) = S(\mathbf{r}, t) \\ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + (\mathbf{v}(\mathbf{r}, t), \nabla) \circ \mathbf{v} \right) = -\nabla p' + \eta \Delta \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) - \rho \beta T'(\mathbf{r}, t) \mathbf{g} \\ (\nabla, \mathbf{v}) = 0 \end{array} \right. \quad (3)$$

$\beta = -\rho^{-1} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p$ - температурный коэффициент расширения жидкости, p' - избыточное давление.

Общность естественной и электрической конвекции.

Уравнения (2)-(3) становятся идентичными в однородном электрическом поле ($E = const$) при соответствующей ориентации электрического и гравитационного полей. Если рассматривается среда с фиксированными ρ, η, β , то можно подобрать поле, чтобы уравнения стали очень близкими (они будут тем ближе, чем $v \gg \mu E$):

среда	β (1/К)	ρ (кг/м3)	$\rho \beta g$ (Н/(м3*К))
воздух	3.67E-03	1.2928	4.65E-02
керосин Т-1	9.55E-04	820	7.67E+00
масло трансформаторное	6.80E-04	880	5.86E+00

Табл. 1 Произведение $\rho \beta g$ для различных веществ.

Из таблицы видно, что при сопоставимой по величине температуре и плотности заряда, естественная конвекция эквивалентна очень малым полям. Однако в действительности величины T' и c отличаются порой существенно.

Однако если говорить о численном решении уравнений конвекции-диффузии входящих (2)-(3), то тут будет полная идентичность, и единственным параметром, влияющим на решение будет число Пекле.

Параметр Пекле.

В уравнениях (2 - 3) можно выделить размерные параметры ([4] стр. 293):

$$[\nu] = [\chi] = [D] = \text{м}^2/\text{с}$$

$$[v] = \text{м/с}$$

$$[L] = \text{м}$$

$$[T_1 - T_0] = \text{град}$$

В качестве независимых безразмерных комбинаций выбирают $Re = \frac{vL}{\nu}$ - число Рейнольдса, $Pr = \frac{\nu}{\chi}$. Также часто вводят число Пекле (см. стр. 293 [5]), равное

$$Pe = Re * Pr = \frac{vL}{\chi} \sim \frac{vL}{D} \sim \frac{\mu U}{D} \sim \frac{\mu Ue}{\mu kT} \sim \frac{U}{\phi_0}. \quad (4)$$

Последнее выражение адаптировано для электроконвекции, U - характерная напряженность поля.

Физический смысл числа Пекле - отношение массо(тепло) переноса конвективного к диффузионному. Большие числа Пекле, означают, что конвективный массо(тепло)перенос доминирует.

Оценки числа Пекле.

Оценим характерное число Пекле, **для задач электроконвекции** (электродинамики):

$$Pe = \frac{10^4 \text{В}}{25 * 10^{-3} \text{В}} = 4 * 10^5 - \text{для миграционной компоненты}$$

$$Pe = 0.1 \frac{\text{м}}{\text{с}} * 0.1 \text{ м} \frac{1}{25 * 10^{-3} * 10^{-10} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}} = 4 * 10^9 - \text{для конвективной компоненты}$$

Таким образом, для типичных задач электродинамики, число Пекле велико.

Для задач естественной конвекции, $\chi = \frac{\kappa}{\rho C_p}$ - температуропроводность:

$$Pe = \frac{vL}{\chi} = \frac{vL\rho C_p}{\kappa} = 0.1 * 0.5 * 1 * \frac{1}{0.025} = 1$$

Однако при больших скоростях, в задачах естественной (а также вынужденной конвекции), число Пекле может быть больше.

В задачах о лавинах и стримерах:

$$Pe = \frac{\mu EL}{D} = \frac{\mu Ue}{\mu kT} = \frac{U}{\phi_0} = 4 * 10^5$$

Большие числа Пекле (сеточные числа Пекле) вызывают проблемы со сходимостью численных решений, если не используются специальные методики, о которых пойдет речь далее.

Численное решение транспортного уравнения.

Рассмотрим задачу на примере одномерного уравнения конвекции-диффузии.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D \frac{\partial c}{\partial x} + cv \right) = S$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} c = S(x, t) \quad (5)$$

Для (4) член $\frac{\partial v}{\partial x} c$ не играет принципиальной роли, поэтому его пока не рассматриваем (он прибавляется к диагонали матрицы), а вот конвективный член является принципиальным, он и вызывает численные трудности счета, т.к. за счет него получается несимметричная матрица и осцилляции. Покажем сначала это на примере метода конечных разностей. Будем рассматривать стационарную задачу (т.к. в случае нестационарной неявной конечно-разностной задаче ([5], [6]), член с производной по времени будет добавлять лишь диагональный элемент). Таким образом, если расписать уравнение, используя центральные производные:

$$\begin{aligned} \frac{c_i - c_i^{n-1}}{dt} + \frac{v}{2h} (c_{i+1} - c_{i-1}) - \frac{D}{h^2} (c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}) &= S_i \\ \left(-\frac{v}{2h} - \frac{D}{h^2}\right) c_{i-1} + \left(\frac{2D}{h^2} + \frac{1}{dt}\right) c_i + \left(\frac{v}{2h} - \frac{D}{h^2}\right) c_{i+1} &= S_i + \frac{c_i^{n-1}}{dt} \quad (6) \end{aligned}$$

Или, используя обозначение $Pe = \frac{vh}{2D}$:

$$(-Pe - 1)c_{i-1} + \left(2 + \frac{h^2}{Ddt}\right)c_i + (Pe - 1)c_{i+1} = \frac{h^2}{D} \left(S_i + \frac{c_i^{n-1}}{dt}\right) \quad (7)$$

Для стационарной задачи с нулевым источником можно записать (7) в виде:

$$(1 - Pe)(c_{i+1} - c_i) = (1 + Pe)(c_i - c_{i-1}) \quad (8)$$

Соотношение (8) демонстрирует, что задача при числах $Pe < 1$, дает на соседних узлах разный знак производной - т.е. имеют место осцилляции.

Таким образом, соответствующая матрица имеет трехдиагональный вид (первая и последняя строки матрицы – граничные условия).

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 \\ (-Pe - 1) & \left(2 + \frac{h^2}{Ddt}\right) & (Pe - 1) & 0 & 0 \\ 0 & (-Pe - 1) & \left(2 + \frac{h^2}{Ddt}\right) & (Pe - 1) & 0 \\ 0 & 0 & (-Pe - 1) & \left(2 + \frac{h^2}{Ddt}\right) & (Pe - 1) \\ 0 & 0 & 0 & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \end{pmatrix} \quad (9)$$

Как видно, матрица имеет трехдиагональный несимметричный вид, асимметрия матрицы зависит от параметра $Pe = \frac{vh}{2D}$, который имеет незначительное отличие от безразмерного числа Пекле, характеризующего конвективный теплообмен (4), в виде множителя 2. Это так называемое сеточное число Пекле (element Peclet number [7], [3]). На примере матрицы 2x2 покажем, что ассиметричная матрица вызывает осциллирующее решение

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = \frac{\Delta x_1}{\Delta} = \frac{f_1 a_{2,2} - f_2 a_{1,2}}{(a_{1,1} a_{2,2} - a_{1,2} a_{2,1})}$$

$$x_2 = \frac{\Delta_{x_2}}{\Delta} = \frac{f_2 a_{1,1} - f_1 a_{2,1}}{(a_{1,1} a_{2,2} - a_{1,2} a_{2,1})}$$

На этом простейшем примере видно, что x_1, x_2 будут больше "осциллировать", чем больше будут по модулю недиагональные элементы, и разными по знаку. Таким образом, даже точное решение СЛАУ (7) будет осциллировать, и осцилляции будут зависеть от сеточного числа Pe . В том случае когда $Pe \gg 1$, осцилляции будут велики, однако, когда $Pe \leq 1$ внедиагональные элементы будут малы. Таким образом на примере явной К.Р. мы показали, природу возникновения осцилляций в численном решении. Если говорить о К.Р. используются схемы "против ветра" - первая производная при конвективном члене вычисляется с опозданием (левая К.Р производная).

$$\begin{aligned} \frac{c_i - c_i^{n-1}}{dt} + \frac{v}{h}(c_i - c_{i-1}) - \frac{D}{h^2}(c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}) &= S_i \\ \left(-\frac{v}{h} - \frac{D}{h^2}\right)c_{i-1} + \left(\frac{2D}{h^2} + \frac{1}{dt} + \frac{v}{h}\right)c_i + \left(-\frac{D}{h^2}\right)c_{i+1} &= S_i + \frac{c_i^{n-1}}{dt} \\ (-2Pe - 1)c_{i-1} + \left(2 + \frac{1}{dt} + 2Pe\right)c_i + (-1)c_{i+1} &= \frac{h^2}{D}\left(S_i + \frac{c_i^{n-1}}{dt}\right) \end{aligned}$$

Данная схема приводит к матрице, в которой выше диагонали константы -1. Т.о. решение стабилизируется, однако при этом аппроксимация производной против ветра $O(h)$. Можно показать, что схема против ветра эквивалентна добавлению искусственной диффузии $\frac{vh}{2}$ (см. стр. 50 [9]).

Аналогичная ситуация возникает при использовании конечных элементов.

Согласно методу конечных элементов [7] мы должны представить искомую функцию в виде комбинации базисных функций: $c_e \approx c = \sum \phi_a N_a$, где k_a искомые коэффициенты, $a=1...N$, где N – общее число узлов задачи. А далее должны приравнять нормированную невязку по области к 0. Для простоты будем рассматривать стационарную задачу. Тогда можем записать, полагая производную по времени в (4) равной нулю, и не рассматривая синий член (он не играет принципиальной роли):

$$\int_{\Omega} W_a \left(-D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v \frac{\partial c}{\partial x} - S(x, t) \right) d\Omega = 0 \quad (10)$$

В уравнении (8) W_a – весовая функция. В методе Галеркина, весовая функция выбирается из того, же класса, что и базисные функции $W_a = N_a$. Для ослабления требования непрерывной дифференцируемости базисных функций переходят к *слабой формулировке* метода конечных элементов. Используя формулу Грина ([8] стр. 174, [9] стр. 224) (в одномерном случае – интегрирование по частям):

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \circ \left(N_a \frac{\partial c}{\partial x} \right) d\Omega = \int_{\Gamma_{\Omega}} \left(N_a \frac{\partial c}{\partial x} \right) d\Gamma = \int_{\Omega} \frac{\partial N_a}{\partial x} \frac{\partial c}{\partial x} d\Omega + \int_{\Omega} N_a \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} d\Omega$$

$$\int_{\Omega} N_a \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} d\Omega = \int_{\Gamma_{\Omega}} (N_a \frac{\partial c}{\partial x}) d\Omega - \int_{\Omega} \frac{\partial N_a}{\partial x} \frac{\partial c}{\partial x} d\Omega$$

$$\int_{\Omega} N_a (v \frac{\partial c}{\partial x} - S(x, t)) d\Omega + \int_{\Omega} D \frac{\partial N_a}{\partial x} \frac{\partial c}{\partial x} d\Omega - \int_{\Gamma_{\Omega}} (N_a \frac{\partial c}{\partial x}) d\Gamma = 0$$

$$\int_{\Omega} (N_a (v \frac{\partial c}{\partial x} - S(x, t)) + D \frac{\partial N_a}{\partial x} \frac{\partial c}{\partial x}) d\Omega - \int_{\Gamma_{\Omega}} (N_a \frac{\partial c}{\partial x}) d\Gamma = 0 \quad (11)$$

Уравнение (9) – слабая формулировка МКЭ. Таким образом, ставится задача на нахождение неизвестных коэффициентов ϕ_a . Итоговую СЛАУ можно представить в виде:

$$K_{ab} \phi_b = f_a, a, b = 1 \dots N$$

$$K_{ab} = \int_0^L v N_a \frac{\partial N_b}{\partial x} dx + \int_0^L D \frac{\partial N_a}{\partial x} \frac{\partial N_b}{\partial x} dx = C_{ab} + D_{ab} \quad (12)$$

$$f_a = \int_0^L N_a S(x, t) dx + \left(N_a \frac{\partial c}{\partial x} \right) \Big|_0^L$$

В выражении (12) матрицы C - матрица конвекции, D - матрица диффузии.

Распишем явно элементы матрицы для линейных лагранжевых элементов:

$$K^e = \int_0^h \left(\begin{pmatrix} \frac{v * (1-x)}{h} \left(-\frac{1}{h} \right) & \frac{v * (1-x)}{h} \frac{1}{h} \\ \frac{v * x}{h} \left(-\frac{1}{h} \right) & \frac{v * x}{h} \left(\frac{1}{h} \right) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{D}{h^2} & -\frac{D}{h^2} \\ -\frac{D}{h^2} & \frac{D}{h^2} \end{pmatrix} \right) dx$$

$$K^e = \frac{U}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{D}{h} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$f^e = \int_0^h \begin{pmatrix} S(x, t) N_e \\ S(x, t) N_{e+1} \end{pmatrix} dx$$

Таким образом, в конечных элементах соответствующая СЛАУ для линейных лагранжевых элементов будет иметь вид:

$$\begin{pmatrix} -\frac{U}{2} + \frac{D}{h} & \frac{U}{2} - \frac{D}{h} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{U}{2} - \frac{D}{h} & -\frac{U}{2} + \frac{D}{h} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{U}{2} - \frac{D}{h} & \frac{U}{2} - \frac{D}{h} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{U}{2} - \frac{D}{h} & -\frac{U}{2} + \frac{D}{h} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{U}{2} + \frac{D}{h} \end{pmatrix}$$

или через число Pe:

$$\frac{D}{h} \begin{pmatrix} -Pe + 1 & Pe - 1 & 0 & 0 & 0 \\ -Pe - 1 & 2 & Pe - 1 & 0 & 0 \\ 0 & -Pe - 1 & 2 & Pe - 1 & 0 \\ 0 & 0 & -Pe - 1 & 2 & Pe - 1 \\ 0 & 0 & 0 & -Pe - 1 & -Pe + 1 \end{pmatrix} \quad (13)$$

Таким образом, приходим к матрице аналогичной (7). При использовании квадратичных лагранжевых элементов, соответствующие матрицы конвекции и диффузии будут иметь вид [10]:

$$C^e = v \int_{-1}^1 \begin{pmatrix} \frac{\left(\frac{1}{2}\xi(\xi-1)\right)'\left(\frac{1}{2}\xi(\xi-1)\right)'}{h} & \frac{\frac{1}{2}\xi(\xi-1)((1-\xi^2))'}{h} & \frac{\frac{1}{2}\xi(\xi-1)\left(\frac{1}{2}\xi(\xi+1)\right)'}{h} \\ \frac{(1-\xi^2)\left(\frac{1}{2}\xi(\xi-1)\right)'}{h} & \frac{(1-\xi^2)(1-\xi^2)'}{h} & \frac{(1-\xi^2)\left(\frac{1}{2}\xi(\xi+1)\right)'}{h} \\ \frac{\frac{1}{2}\xi(\xi+1)\left(\frac{1}{2}\xi(\xi-1)\right)'}{h} & \frac{\frac{1}{2}\xi(\xi+1)(1-\xi^2)'}{h} & \frac{\frac{1}{2}\xi(\xi+1)\left(\frac{1}{2}\xi(\xi+1)\right)'}{h} \end{pmatrix} h d\xi$$

$$C^e = v \int_{-1}^1 \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\xi(\xi-1)(\xi-\frac{1}{2}) & \frac{1}{2}\xi(\xi-1)(-2\xi) & \frac{1}{2}\xi(\xi-1)(\xi+\frac{1}{2}) \\ (1-\xi^2)(\xi-\frac{1}{2}) & (1-\xi^2)(-2\xi) & (1-\xi^2)(\xi+\frac{1}{2}) \\ \frac{1}{2}\xi(\xi+1)(\xi-\frac{1}{2}) & \frac{1}{2}\xi(\xi+1)(-2\xi) & \frac{1}{2}\xi(\xi+1)(\xi+\frac{1}{2}) \end{pmatrix} d\xi = \frac{v}{2} \begin{pmatrix} -1 & \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{4}{3} & 0 & \frac{4}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{4}{3} & 1 \end{pmatrix}$$

$$D^e = \frac{D}{h} \int_{-1}^1 \begin{pmatrix} (\xi-\frac{1}{2})(\xi-\frac{1}{2}) & (\xi-\frac{1}{2})(-2\xi) & (\xi-\frac{1}{2})(\xi+\frac{1}{2}) \\ (-2\xi)(\xi-\frac{1}{2}) & (-2\xi)*(-2\xi) & (-2\xi)*(\xi+\frac{1}{2}) \\ (\xi+\frac{1}{2})*(\xi-\frac{1}{2}) & (\xi+\frac{1}{2})*(-2\xi) & (\xi+\frac{1}{2})*(\xi+\frac{1}{2}) \end{pmatrix} d\xi = \frac{D}{6h} \begin{pmatrix} 7 & -8 & 1 \\ -8 & 16 & -8 \\ 1 & -8 & 7 \end{pmatrix}$$

$$C^e + D^e = \frac{D}{h} \left(Pe \begin{pmatrix} -1 & \frac{4}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{4}{3} & 0 & \frac{4}{3} \\ \frac{1}{3} & -\frac{4}{3} & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{7}{6} & -\frac{8}{6} & \frac{1}{6} \\ -\frac{8}{6} & \frac{16}{6} & -\frac{8}{6} \\ \frac{1}{6} & -\frac{8}{6} & \frac{7}{6} \end{pmatrix} \right) =$$

$$\frac{4D}{3h} \begin{pmatrix} -\frac{3}{4}Pe + \frac{7}{8} & Pe - 1 & -\frac{Pe}{4} + \frac{1}{8} \\ -Pe - 1 & 2 & Pe - 1 \\ \frac{Pe}{4} + \frac{1}{8} & -Pe - 1 & -\frac{3}{4}Pe + \frac{7}{8} \end{pmatrix} \quad (14)$$

Итоговую СЛАУ (14) можно представить в виде соотношений, типа (7):

для серединных узлов элемента выражение идентичное (7):

$$\frac{v(u_{i+1} - u_{i-1})}{2h} - \frac{D(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}))}{h^2} = 0$$

для краевых узлов элемента:

$$v \left(\frac{2(u_{j+1} - u_{j-1})}{2h} - \frac{(u_{j-2} + u_{j-2})}{4h} \right) - D \left(\frac{2(u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1})}{h^2} - \frac{(u_{j-2} - 2u_j + u_{j+2})}{4h^2} \right) = 0$$

Таким образом, для краевых узлов элемента, необходимы другие условия стабилизации.

Методы стабилизации решения.

В литературе ([7], [10]) описаны методы стабилизации для стационарных задач: **изотропная** диффузия, SU(streamline upwind), оно же **анизотропная диффузия**, **SUPG** (StreamLine Upwind Petrov-Galerkin - метод против-ветра Петрова-Галеркина), **GLS** (Galerkin Least Squares) - метод наименьших квадратов Галеркина, SGS - sub-grid scale, FIC - finite increment calculus - вычисление конечных приращений, Bubble Function. Для нестационарных задач существуют другие методы: метод характеристик, метод Тэйлора-Галеркина. Однако остановимся сейчас на исключительно стационарных методах.

Метод увеличения диффузии.

Традиционно в нашей научной группе используется оригинальный метод увеличения диффузии. Диффузия увеличивается на несколько порядков, что, естественно уменьшает сеточное число Пекле, что в свою очередь приводит к устойчивому решению. С точки зрения физики увеличение диффузии на 2 порядка эквивалентно для изотермических задач в жидких диэлектриках аналогичному увеличению температуры, что следует из соотношения Эйнштейна: $D = \frac{\mu kT}{e}$.

Для анализа данной техники рассмотрим уравнение конвекции-диффузии имеющее аналитическое решение (скорость конвекции подразумевается постоянной - линейная задача):

$$-D \frac{c_0 d^2 c}{L^2 dx^2} + \frac{\mu U}{L} \frac{c_0 dc}{L dx} = 0$$

$$-\frac{D}{\mu U} \frac{d^2 c}{dx^2} + \frac{dc}{dx} = 0$$

$$\frac{1}{Pe} \frac{d^2 c}{dx^2} - \frac{dc}{dx} = 0, c(0) = 1, c(1) = 0 \quad (15)$$

Это уравнение может описывать стационарное распределение концентрации ионов в межэлектродном промежутке, в том случае, когда у одного из электродов концентрация остается постоянной. При этом полагается, что заряд создаваемый ионами не искажает поле

(соответствующее уравнение приведено в безразмерном виде, $Pe = \frac{U}{\phi_0}$, $\phi_0 = \frac{kT}{e} = \frac{keD}{e\mu k} = D/\mu$).

Решение уравнения (15): $c(x) = \frac{e^{Pe*x} - e^{Pe}}{1 - e^{Pe}}$

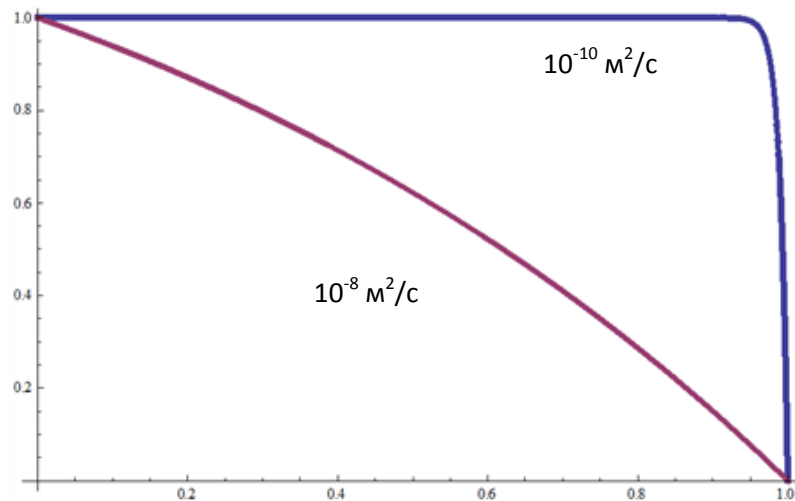


Рис. 1 Иллюстрация метода "увеличения диффузии" на 2 порядка с 10^{-10} до 10^{-8} м²/с

Обычно в качестве аргументации метода увеличения диффузии приводится сравнение плотностей тока миграционной и диффузионной компоненты, и т.к. диффузионная компонента мала, даже при увеличении диффузии на порядки по сравнению с миграционной, то это служит оправданием метода. Сравним токи в нашей задаче: $j_D = -\frac{1}{Pe} \nabla c(x) = -\frac{e^{Pe*x}}{1 - e^{Pe}}$, $j_m = \frac{e^{Pe*x} - e^{Pe}}{1 - e^{Pe}} * 1$.

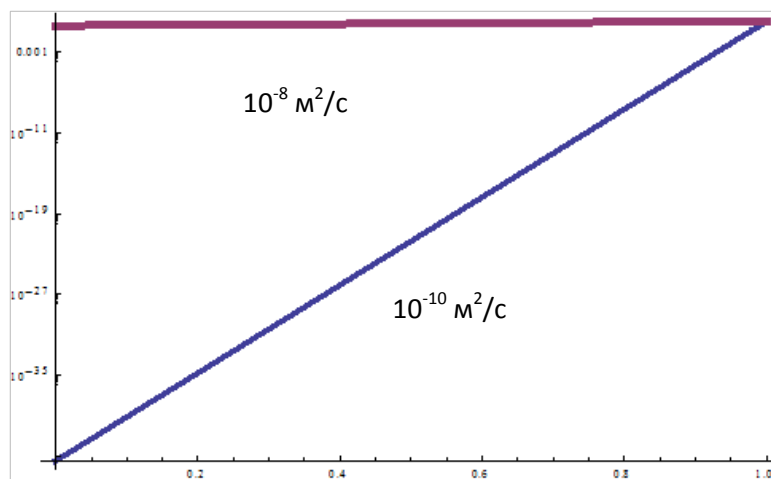


Рис. 2 Существенное изменение диффузионных токов при увеличении диффузии на 2 порядка, особенно существенное влияние в области "инъекции"

Надо заметить, что при этом итоговая плотность тока не меняется. В любом случае метод "увеличения диффузии" является спорным и требует дальнейшего обсуждения.

Методы, реализованные в программном пакете COMSOL MULTIPHYSICS.

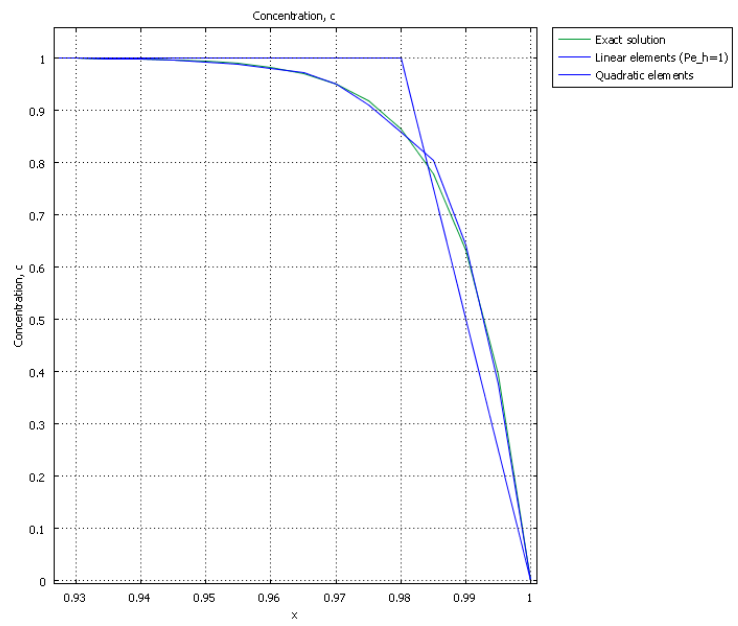
Решение задачи (15) методом конечных элементов Галеркина без стабилизации.

Исходя из условия на сеточное число Пекле, определим размер элемента в расчетной области. Из условия $\frac{vh}{2D} \leq 1$ определяем размер элемента $h \leq \frac{2D}{v}$ или в безразмерных единицах $h \leq \frac{2}{Pe}$.

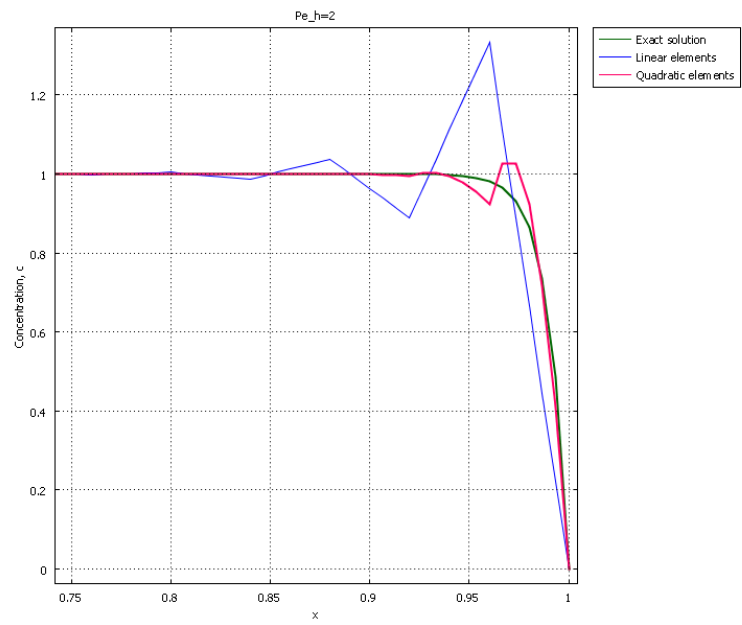
Положим подвижность ионов $\mu = 10^{-11} \frac{\text{м}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}$, $U = 1000 \text{ В}$. Для диффузии $D = 10^{-10} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$, $h \leq$

$\frac{2}{1000 \cdot \frac{10^{-11}}{10^{-10}}} = 0.02$. Для диффузии $D = 10^{-8} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$, $h \leq 2$ (т.е. для такой диффузии достаточно одного элемента).

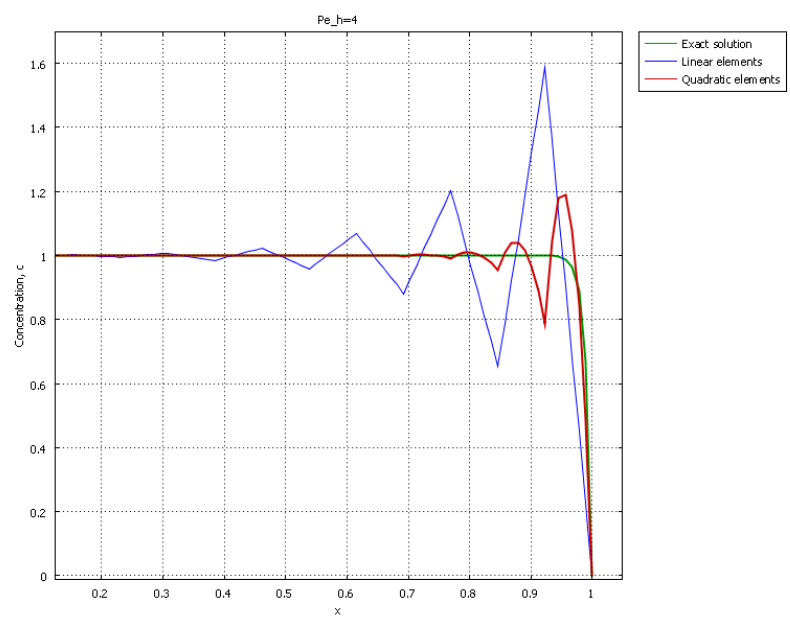
$Pe = 1, h = 0.02$



$Pe = 2, h = 0.04$



$Pe = 4, h = 0.08$



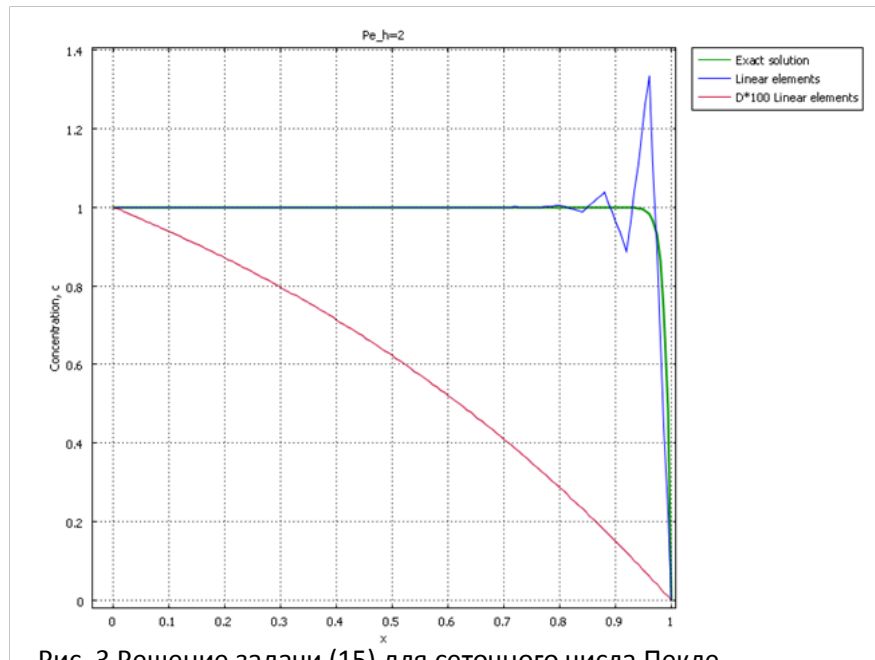


Рис. 3 Решение задачи (15) для сеточного числа Пекле 2, а также решение полученное для диффузии $10^8 \text{ м}^2/\text{с}$

Стабилизация с помощью изотропной диффузии.

Стабилизация решения с помощью изотропной диффузии реализует самый простой, но в то же время самый грубый алгоритм. Суть алгоритма [3] заключается в добавлении к реальной диффузии задачи, дополнительной диффузии, порядка $O(h)$:

$$D_m = D + D_a = D + \alpha h \|v\|$$

В этом случае сеточное число Pe принимает вид:

$$Pe_h = \frac{\|v\|h}{2D} = \frac{\|v\|h}{2D + 2\alpha h \|v\|}. \quad (16)$$

$$h\|v\|(1 - 2\alpha) = 2D$$

Из (16) следует, что при значении параметра $\alpha > 0.5$, число Pe_h в любом случае будет меньше 1, и схема будет устойчива. Однако в этом случае надо понимать, что решается задача возмущенная, и добавка к реальной диффузии может быть велика. В примере, когда $h = 0.04$, $v = 1$, $D = \frac{1}{Pe} = \left(\frac{U\mu}{D}\right)^{-1} = \left(1000 * \frac{10^{-11}}{10^{-10}}\right)^{-1} = 0.01 \Rightarrow 2\alpha h\|v\| = 2 * 0.5 * 0.04 = 0.04$. Таким образом, при данных условиях, диффузия увеличивается в 5 раз! Однако, даже этот метод предпочтительнее «метода увеличения диффузии», т.к. при уменьшении размера элемента добавка стремится к нулю как $O(h)$, а с другой стороны, этот прием для $\alpha > 0.5$ гарантирует устойчивость схемы. Однако в этом методе есть абсурдность, которая заключается в следующем:

если $D_a < D$, условие $Pe_h < 1$ выполняется автоматически.

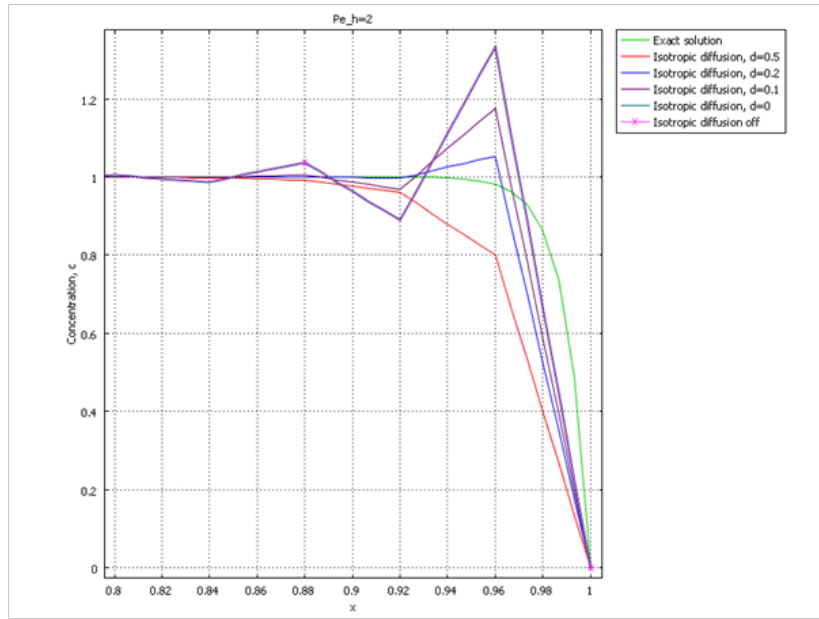


Рис. 4 Решение задачи (15) с помощью изотропной диффузии

Стабилизация с помощью анизотропной диффузии (Anisotropic diffusion).

Различие изотропной и анизотропной диффузии могут проявляться только на многомерных задачах (для одномерной задачи изотропная и анизотропная задача дают идентичный результат).

$$D_{i,j} = \frac{\alpha h \beta_i \beta_j}{\|\beta\|}$$

$$(\nabla, D_{i,j} \nabla c) = \left(\nabla, \begin{pmatrix} D_{1,1} & D_{1,2} & D_{1,3} \\ D_{2,1} & D_{2,2} & D_{2,3} \\ D_{3,1} & D_{3,2} & D_{3,3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \\ c_z \end{pmatrix} \right) = \left(\nabla, \begin{pmatrix} c_x D_{1,1} + c_y D_{1,2} + c_z D_{1,3} \\ c_x D_{2,1} + c_y D_{2,2} + c_z D_{2,3} \\ c_x D_{3,1} + c_y D_{3,2} + c_z D_{3,3} \end{pmatrix} \right)$$

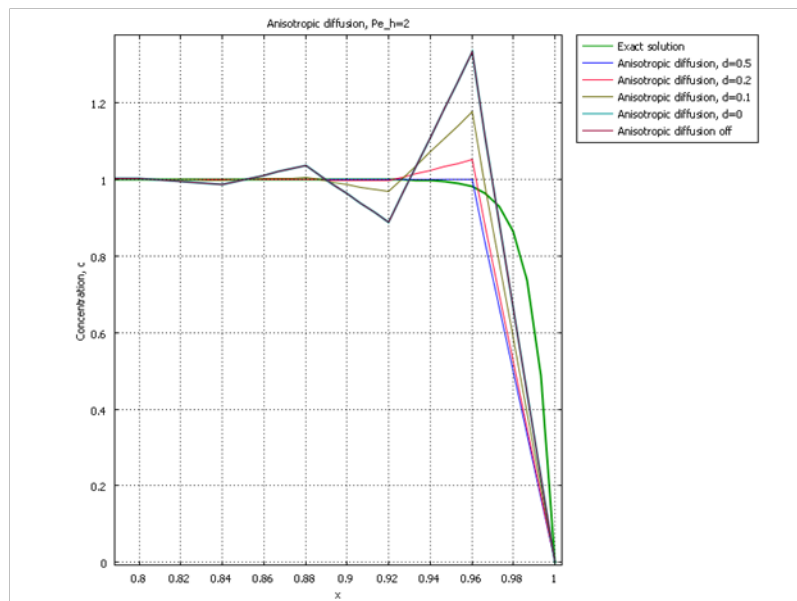


Рис. 5 Решение задачи (15) с помощью анизотропной диффузии

Стабилизация с помощью метода против ветра Петрова-Галеркина.

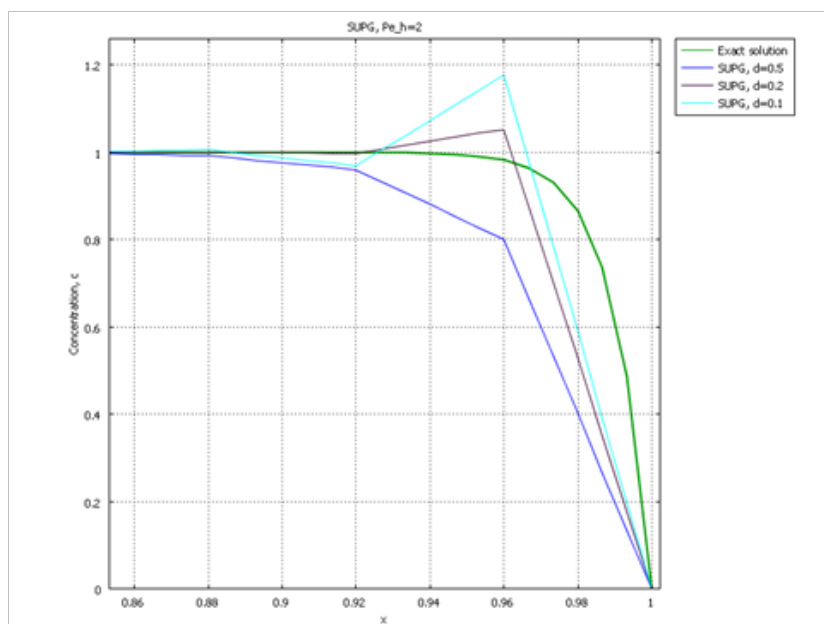


Рис. 6 Решение задачи (15) с помощью схемы против ветра Петрова-Галеркина (SUPG)

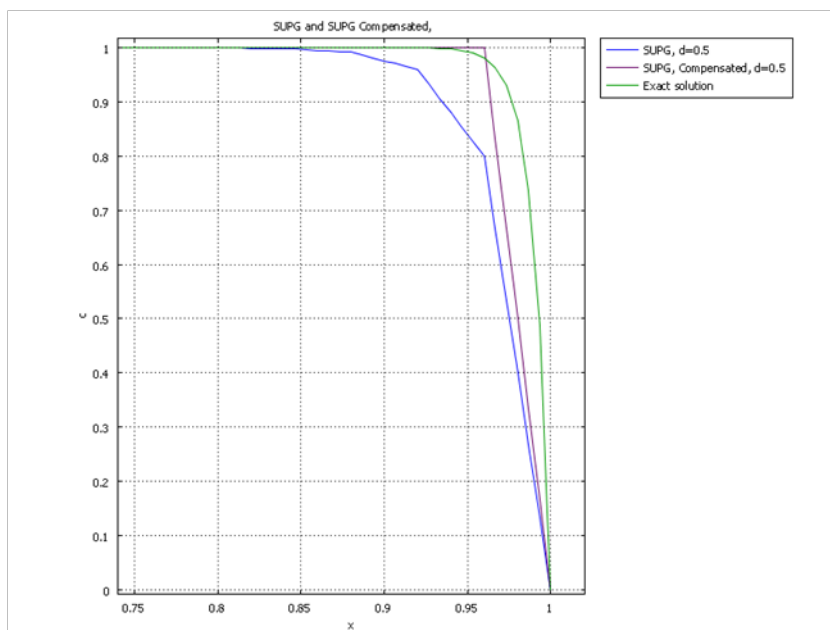


Рис. 7 Решение задачи (15) с помощью схемы против ветра Петрова-Галеркина (SUPG) и SUPG Compensated

1. Тихонов А.И. Самарский А.А. Уравнения математической физики. — М. : Наука, 1977.
2. D. Polyanin A. Handbook of linear partial differential equations for engineers and scientists. — [б.м.] : CRC Press, 2002. — 781 стр. — 1584882999, 9781584882992.
3. COMSOL COMSOL Help Desk // Artificial Diffusion Types.
4. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том VI. Гидродинамика. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2003. — Т. VI : 736 стр.
5. Формалев В. Ф. Ревизников Д.Л. Численные методы. — [б.м.] : ФИЗМАТЛИТ, 2006. — ISBN/ISSN 5-9221-0737-2, 5-9221-0479-9.
6. А.А. Самарский Введение в теорию разностных схем. — М. : Наука, 1971. — 552 стр.
7. Zienkiewicz O. C. Taylor R. L, Nithiarasu P. The finite element method for fluid dynamics. — [б.м.] : Butterworth-Heinemann, 2005. — 435 стр. — 0750663227, 9780750663229.
8. Г.М. Фихтенгольц Курс дифференциального и интегрального исчисления. — Т. 3.
9. В.И. Смирнов Курс высшей математики. — Москва : Наука, 1974. — Т. 2.
10. Donéa J. Huerta A. Finite element methods for flow problems. — [б.м.] : John Wiley and Sons, 2003. — 350 стр. — 0471496669, 9780471496663.