Побудова базисних функцій для методу скінченних елементів у варіаційних задачах міграції домішок

Андрій Козел

Кафедра міжнародної інформації, Національний університет “Львівська політехніка”, УКРАЇНА, м.Львів, вул.С.Бандери, 12, E-mail: a.kozel@polynet.lviv.ua

A problem of solution stabilization for variational problems is considered. There is applied Ermita and Lagrange polynomial basis functions for the method of finite elements. The simulation results of migration from boundary layer are present here. There are implemented a number of stabilized schemes of type GaLS. The results of computational experiments performed for model problems with a large number of Peclet are present here. Is compared all of considered stabilized FEM schemes.

Key words: migration of impurities, the method of least squares, method of finite elements, stabilized scheme.

I. Вступ

Розподіл концентрації шкідливих домішок в нестисливому суцільному середовищі описується параболічним диференціальним рівнянням конвекції-дифузії-реакції.

Задача полягає в тому, щоб

знайти функцію $u = u(x,t)$ *таку, що задовольняє рівнянню*

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left\{ u b_i - \mu_{ij}\frac{\partial u}{\partial x_j}\right\} + \sigma u = f \text{ в } \Omega \times (0,T] \quad , (1)$$

крайовим умовам

$$\begin{cases} u = \hat{u} \text{ на } \Gamma_u \subset \Gamma = \partial\Omega, \\ \left\{ u b_i - \mu_{ij}\dfrac{\partial u}{\partial x_j}\right\}\nu_i - \alpha u = g \text{ на } \Gamma_q = \Gamma \backslash \Gamma_u \end{cases} \quad (2)$$

і початковій умові

$$\mathrm{u}\big|_{t=0} = u_0 \text{ в } \Omega . \quad (3)$$

При великих числах Пекле (*Pe* > 100) параболічне диференціальне рівняння другого порядку з малими коефіцієнтами при старших похідних вироджується в гіперболічне рівняння першого порядку. При певному наборі крайових умов задачі з диференціальними рівняннями такого типу стають сингулярно збуреними та їхні розв’язки містять примежові шари.

В сингулярно збуреній задачі з несамоспряженим оператором схеми МСЕ, побудовані на основі класичного методу Гальоркіна, часто демонструють втрату стійкості й точності наближених розв'язків.

Як наслідок, ми отримуємо наближений розв’язок

$$u_h = u_h^* + e_h \in V_h , \quad (4)$$

який може мати цілком іншу структуру, ніж точний розв’язок вихідної варіаційної задачі міграції домішок

Для подолання згаданих недоліків апроксимацій МСЕ у роботі реалізовано низку стабілізованих схем. Серед них відомі GLS, DWG, SUPG. А також застосовуються базисні функції Лагранжа і Ерміта.

II. Апроксимації Лагранжа і Ерміта

Нехай τ_h — розбиття прямокутної області на скінченні елементи. Тоді на кожному елементі $K \in \tau_h$ розв’язок $u = u(x)$, де $x \in R^n$, будемо апроксимувати простішою в обчисленнях та чисельному інтегруванні функцією

$$u_{h,K} = u_{h,K}(x) = \sum_{i=0}^{N} a_i F_i(x) ,$$

де $F_i(x)$ — відомі, лінійно незалежні функції на скінченому елементі *K*, a_i — шукані параметри.

Функції $F_i(x)$ можуть бути поліномами Чебишева, періодичними лінійними незалежними функціями та ін. В даній роботі обмежимося степеневими функціями, тобто степенями від *x*.

Нехай на скінченому елементі *K* задано систему вузлів $x_i \in K$, $i = 0,...,m$. Для визначення коефіцієнтів a_i необхідно *N+1* умов. Надалі у формулах будемо опускати коефіцієнт *K,* який позначає скінчений елемент.

Нехай $u_{h,K}(x) = u(x)$, а $u(x_i) = u_i$.

Припустимо, що для кожного вузла x_i скінченого елемента відомо значення функції $u = u(x)$ та її похідних до $k_i - 1$-го порядку включно. Зауважимо, що $k_0 + ... + k_m - 1 = N$. Тоді можемо визначити *N+1* умову для знаходження коефіцієнтів a_i .

$$\sum_{i=0}^{N} a_i F_i^{(d-1)}(x_j) = u_i^{(d-1)}, \text{ де } d = 1,...,k_j , \; j = 0,...,m \quad (5)$$

Одержимо систему алгебричних рівнянь:

$FA = Q$.

Матриця F повинна бути невироджена.

Знайдемо вектор вектор *A* за правилом Краммера:

$$a_i = \sum_{j=0}^{N} q_j \frac{(-1)^{i+j} M_{ij}}{\det F} , \quad (6)$$

де M_{ij} — мінор матриці *F*, яккий відповідає елементу F_{ij} .

Підставимо розклад (6) в (5), одержимо

$$u(x) = \sum_{i=0}^{N}\sum_{j=0}^{N} q_j \frac{(-1)^{i+j} M_{ij}}{\det F} F_i(x) = \sum_{j=0}^{N} q_j \sum_{i=0}^{N} \frac{(-1)^{i+j} M_{ij}}{\det F} F_i(x)$$

Приймемо через $\varphi_i(x) = \sum_{j=0}^{N} \frac{(-1)^{i+j} M_{ji}}{\det F} F_j(x)$

$$u(x) = \sum_{i=0}^{N} q_i \varphi_i(x).$$

Нехай $F_j = x^j$, тоді

$$\varphi_i(x) = \sum_{j=0}^{N} \frac{(-1)^{i+j} M_{ji}}{\det F} x^j$$

Для інтегрування поліномів для одновимірних задач використаємо формулу

$$\int_K x^j dK = |K| \frac{j!}{(j+1)!}$$

$$\int_K \varphi_i \varphi_k dK = h \int_{[0,1]} \sum_{j=0}^{N} \frac{(-1)^{i+j} M_{ji}}{\det F} x^j \sum_{l=0}^{N} \frac{(-1)^{k+l} M_{lk}}{\det F} x^l dx$$

$$= h \sum_{j=0}^{N} \sum_{l=0}^{N} \frac{(-1)^{i+j} M_{ji}}{\det F} \frac{(-1)^{k+l} M_{lk}}{\det F} \int_0^1 x^l x^j dx =$$

$$= \frac{h}{(\det F)^2} \sum_{j=0}^{N} \sum_{l=0}^{N} (-1)^{i+j+k+l} M_{ji} M_{lk} \frac{(l+j)!}{(l+j+1)!}$$

$$\int_K x^i y^j dK = 2|K| \frac{i!\, j!}{(i+j+2)!}$$ для двовимірного випадку задачі

III. Сумісні стабілізовані схеми

Нехай задано лінійний еліптичний оператор другого порядку

$$Lu := -\mu_{ij} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + b_i \frac{\partial u}{\partial x_i} + \sigma u \quad , \tag{7}$$

Оператор (7) можна розкласти на симетричну та кососиметричну частини:

$$L = L_S + L_K, \tag{8}$$

де

$$L_S u := -\mu_{ij} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sigma u, \tag{9}$$

$$L_K u := b_i \frac{\partial u}{\partial x_i}, \tag{10}$$

Розглянемо наступну схему:

$$\begin{cases} \textit{знайти } u_h \in V_h \quad \textit{таке, що} \\ a(u_h, v_h) + \sum_{K \in \tau_h} \tau_k (Lu - f_h, \xi L_S v_h + L_K v_h)_K = < l, v_h > \quad \forall \ v_h \in V_h. \end{cases}$$

Вибравши параметри ξ наступним чином, одержимо відомі стабілізовані схеми, зокрема при

ξ = 1 одержимо схему GaLS, (Франка-Х'юза-Гульберта).

При $\xi = 0$ — схема SUPG, (Брукса-Х'юза)

При ξ=-1 — схема DWG (Дагласа-Вонга/Гальоркіна),

Ці схеми також строго сумісні.

Параметр τ_K залежить від сіткового числа Пекле, запропонований у вигляді:

$$\tau_k = \frac{h_K}{a\|b\|_{\infty,K}} \gamma(Pe_K),$$

$$\gamma(z) = \begin{cases} z, & 0 \le z < 1, \\ 1, & 1 \le z < +\infty, \end{cases}$$

$$Pe_K = \frac{\|b\|_{\infty,K} h}{\|\mu\|_{\infty,K}}$$ — число Пекле.

Параметр a був підібраний методом поділу відрізка наполовину при досягненні мінімуму оцінювача похибки.

Необхідно зауважити, що параметр a є різним для різних чисел Пекле.

Емпіричним шляхом було визначено, що величина a залежить також від порядку апроксимації розв'язку u_h.

Авторами статті [4] рекомендовано параметр τ_K у вигляді

$$\tau_k = \frac{h_K}{2p\|b\|_{\infty,K}} \gamma(Pe_K^p),$$

$$Pe_K^p = \frac{\|b\|_{\infty,K} h}{2\varepsilon p},$$ де p — порядок апроксимації розв'язку u_h.

тобто параметр $a = 2$

Висновок

В даній роботі розв'язано варіаційну задачу міграції домішок методом скінченних елементів. Для апроксимації базових функцій були використані поліноми Лагранжа та Ерміта до 5-го порядку включно. Розроблений програмний комплекс, який реалізує методи побудови базисних функцій, а також стабілізовані схеми МСЕ типу GLS. Проводиться аналіз ефективності застосування апроксимацій високих порядків у сингулярно-збурених задачах. Наводяться числові результати модельних задач з примежевим і внутрішнім шаром.

References

[1]. Babuška I., Strouboulis T. The finite element method and its reliability. Oxford: Clarendon Press, 2001. 802 p.

[2]. Melenk J.M. hp-finite element method for singular perturbations. Berlin: Springer- Verlag, 2002. 318 p.

[3]. Quarteroni A., Valli A. Numerical approximation of partial differential equations. Berlin: Springer-Verlag, 1993. p.p. 129-295.

[4]. Galeao A.C., Almeida R.C., Malta S.M.C., Loula A.F.D.Finite element analysis of convection dominated reaction-diffusion problems.//ELSEVIER. Applied Numerical Mathematics, 2004., No. 48, pp. 205-222.