

AMS subject classification: 35B45, 35B27, 47N99

Исследование двухмасштабной модели в пористой среде

Х.Ш. Махато

College of Engineering, University of Georgia, 30602 Athens, USA
E-mails: hsmahato@uga.edu, harishankar.mahato@tu-dortmund.de

Махато Х.Ш. Исследование двухмасштабной модели в пористой среде // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2017. — Т. 20, № 1. — С. 37–46.

В данной статье рассматривается численное моделирование системы уравнений реакции–диффузии для пористой среды. Мы начинаем с задания микроскопической модели, а затем ее усредненной версии (т.е. гомогенизированной или континуальной модели) из предыдущих работ автора. Поскольку с помощью гомогенизации мы получаем макроскопическое описание модели, являющейся микроскопически неоднородной, посредством этого численного моделирования мы показываем, что это макроскопическое описание аппроксимирует микроскопическую модель, содержащую неоднородности и осциллирующие члены в масштабе пор такие, как коэффициенты диффузии.

DOI: 10.15372/SJNM20170104

Ключевые слова: периодическая среда, двухмасштабная модель, усреднение, численное моделирование.

Mahato H.S. Numerical simulations for a two-scale model in a porous medium // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2017. — Vol. 20, № 1. — P. 37–46.

This paper deals with numerical simulations of a system of diffusion-reaction equations in the context of a porous medium. We start by giving a microscopic model and then an upscaled version (i.e., homogenized or continuum model) of it from previous works of the author. Since with the help of homogenization we obtain a macroscopic description of a model which is microscopically heterogeneous, via these numerical simulations we show that this macroscopic description approximates the microscopic model, which contains heterogeneities and oscillating terms at the pore scale, such as diffusion coefficients.

Keywords: periodic medium, two-scale model, averaging, numerical simulations.

1. Введение

В данном пункте проводится численное исследование математической модели. Для иллюстрации ограничимся 2-мерными ситуациями. Все рисунки данной статьи получены автором путем численного моделирования в COMSOL Multiphysics 4.3 а (см. [1]). Для иллюстрации проблемы начнем с моделирования. Как известно, многие задачи физики, химии, биологии и инженерии управляются *уравнениями реакции–диффузии*. Одно из наиболее важных явлений, которые можно объяснить при помощи этих уравнений, — это химический перенос в пористых средах, например в почве, бетоне, резервуаре, горных породах и т.д. [3, 9]. Пусть $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, где $n = 2$, — рассматриваемая перфорированная пористая среда, а $Y := (0, 1)^n \subset \mathbb{R}^n$ — типичная единичная ячейка. Предположим, что

- $Y = Y_s \cup Y_p$, где твердотельная часть Y_s с границей Γ и пористая часть Y_p в Y такие, что $\bar{Y}_s \subset Y$ и $\bar{Y}_s \cap Y_p = \emptyset$;

- Ω состоит из пористого пространства Ω_p и объединения несвязанных твердотельных частей Ω_s таких, что $\Omega := \Omega_p \cup \Omega_s$ и $\Omega_p \cap \bar{\Omega}_s = \emptyset$; Γ^* и $\partial\Omega$ представляют собой объединение границ твердотельных частей и внешней границы Ω ; Ω является периодической (т. е. твердотельные части в Ω распределены периодически) и покрыта конечным объединением ячеек $Y_k := Y + k$, $k \in \mathbb{Z}^n$; $Y_{p_k} := Y_p + k$, $Y_{s_k} := Y_s + k$ и $\Gamma_k := \Gamma + k$, $k \in \mathbb{Z}^n$;
- для масштабного параметра $\varepsilon > 0$ мы обозначим пористое пространство, твердотельные части и объединение границ твердых матриц в Ω как Ω_p^ε , Ω_s^ε и Γ^ε соответственно, и определим их следующим образом: $\Omega_p^\varepsilon := \cup_{k \in \mathbb{Z}^n} \{\varepsilon Y_{p_k} : \varepsilon Y_{p_k} \subset \Omega\}$, $\Omega_s^\varepsilon := \cup_{k \in \mathbb{Z}^n} \{\varepsilon Y_{s_k} : \varepsilon Y_{s_k} \subset \Omega\}$ и $\Gamma^\varepsilon := \cup_{k \in \mathbb{Z}^n} \{\varepsilon \Gamma_k : \varepsilon \Gamma_k \subset \Omega\}$;
- границы $\Gamma, \Gamma^*, \Gamma^\varepsilon, \partial\Omega \in C^2$. Здесь dx и dy обозначают объемные элементы в Ω и Y , а $d\sigma_y$ и $d\sigma_x$ — поверхностные элементы на Γ и Γ^ε соответственно;
- $S := [0, T)$ — временной интервал для $T > 0$; обозначим $\mathbb{R}^+ := \{x \in \mathbb{R} : x > 0\}$, $\mathbb{R}_0^+ := \mathbb{R}^+ \cup \{0\}$, $\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}$ и $\mathbb{N}_0 := \mathbb{N} \cup \{0\}$.

Зададим требуемую модель в микромасштабе следующим образом:

$$\frac{\partial u_\varepsilon}{\partial t} - \nabla \cdot D \nabla u_\varepsilon = MR(u_\varepsilon) \quad \text{в } (0, T) \times \Omega_p^\varepsilon, \quad (1.1)$$

$$u_\varepsilon(0, x) = u_0(x) \quad \text{в } \Omega_p^\varepsilon, \quad (1.2)$$

$$-D \nabla u_\varepsilon \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{на } (0, T) \times \partial\Omega, \quad (1.3)$$

$$-D \nabla u_\varepsilon \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{на } (0, T) \times \Gamma^\varepsilon. \quad (1.4)$$

Обозначим эту задачу (P_ε) . Здесь $D = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_I)$ — диагональная матрица диффузионных коэффициентов, $u_\varepsilon := (u_{\varepsilon_1}, u_{\varepsilon_2}, \dots, u_{\varepsilon_I})$ — вектор молярных концентраций $I (\in \mathbb{N})$ химических видов, участвующих в $J (\in \mathbb{N})$ реакциях, задаваемых путем

$$\tau_{1j} X_1 + \tau_{2j} X_2 + \dots + \tau_{Ij} X_I \rightleftharpoons \nu_{1j} X_1 + \nu_{2j} X_2 + \dots + \nu_{Ij} X_I, \quad 1 \leq j \leq J, \quad (1.5)$$

где X_i , $1 \leq i \leq I$, — химические виды и стехиометрические коэффициенты $\tau_{ij}, \nu_{ij} \in \mathbb{N}_0$. Зададим стехиометрическую матрицу $M := (s_{ij})_{1 \leq j \leq J, 1 \leq i \leq I}$, где $s_{ij} = \nu_{ij} - \tau_{ij} \quad \forall i, j$. Скорость реакции для i -го вида, согласно кинетике действующих масс, задается следующим образом:

$$\left(MR(u_\varepsilon) \right)_i = \sum_{j=1}^J s_{ij} \left(k_j^f \prod_{\substack{m=1, \\ s_{mj} < 0}}^I (u_{\varepsilon_m})^{-s_{mj}} - k_j^b \prod_{\substack{m=1, \\ s_{mj} > 0}}^I (u_{\varepsilon_m})^{s_{mj}} \right) \quad \forall i = 1, 2, \dots, I, \quad (1.6)$$

где k_j^f и k_j^b — факторы скорости прямой и обратной реакций. Для этой модели мы решаем микрозадачу, задачи ячеек и макрозадачу соответственно. Очевидно, что задача в микромасштабе описывает присутствующие в среде неоднородности, но не может дать общее поведение модели. Численное моделирование приведет к сложному анализу для выявления этих микрон неоднородностей. Размер шага численного моделирования должен быть таким малым, чтобы выявление этих микрон неоднородностей было возможным. Это приведет к большой трате машинного времени. В случае реальных задач, где участвует много параметров, такое численное моделирование, по-видимому, не годится. Поэтому нам потребуется макроскопическое описание модели, которое даст общее поведение среды, без неоднородностей микромасштаба, и поможет выполнить численное моделирование без больших затрат времени. При гомогенизации (т. е. апскейлинге или усреднении)

мы ищем функцию u такую, что $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u_\varepsilon = u$. Однако при апскейлинге математической модели от микро- до макромасштаба необходимо ответить на следующие вопросы:

- существует ли вообще функция u такая, что u_ε сходится к u ;
- если это так, то в каком смысле берется “предел” и какому функциональному пространству принадлежит u ;
- решает ли u некоторую предельную краевую задачу;
- что можно сказать о диффузионных коэффициентах предельной задачи;
- является ли u_ε аппроксимацией u ;
- лучше ли подходят усредненные модели для численного моделирования?

Для ответа на первые три вопроса мы обратимся к предыдущим двум статьям автора (напр., [3, 4]). Однако для ответа на последние три вопроса нам необходимо выполнить численное моделирование, представляющее собой основную суть данной статьи. Начнем с предыдущих результатов автора, полученных в [3, 4] и дающих основу для численных экспериментов настоящей работы. Пусть $p > n + 2$ такое, что $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ и $\theta \in [0, 1]$. Предположим, что $\Xi \in \{\Omega, \Omega_p^\varepsilon\}$. Тогда $L^p(\Xi)$, $H^{1,p}(\Xi)$, $C^\theta(\Xi)$, $(\cdot, \cdot)_{\theta,p}$, $[\cdot, \cdot]_\theta$ и $C_{\text{per}}^\gamma(Y)$ — пространства Лебега, Соболева, Гельдера, реальной интерполяции, комплексной интерполяции и Y -периодических γ раз ($\gamma \in \mathbb{N}$) непрерывно дифференцируемых функций соответственно, имеющие свои стандартные нормы. В частности, $C_{\text{per}}(Y)$ — пространство всех Y -периодических непрерывных функций по y . Пространства Соболева–Бохнера задаются путем $\mathcal{F}_p(\Xi) := \left\{ u \in L^p(S; H^{1,p}(\Xi)) : \frac{du}{dt} \in L^p(S; H^{1,q}(\Xi)^*) \right\} = H^{1,p}(S; H^{1,q}(\Xi)^*) \cap L^p(S; H^{1,p}(\Xi))$ и имеют норму

$$\|u\|_{\mathcal{F}_p(\Xi)} := \|u\|_{L^p(S; H^{1,p}(\Xi))} + \|u\|_{L^p(S; H^{1,q}(\Xi)^*)} + \left\| \frac{du}{dt} \right\|_{L^p(S; H^{1,q}(\Xi)^*)}, \quad (1.7)$$

тогда как норма векторнозначных функциональных пространств определяется как $\| \|u\| \|_{[\mathcal{F}_p(\Xi)]^I} := \left[\sum_{i=1}^I \|u_i\|_{\mathcal{F}_p(\Xi)}^p \right]^{\frac{1}{p}}$. В частности, $\| \|u\| \|_{L^\infty(\Xi)^I} = \max_{1 \leq i \leq I} \|u_i\|_{L^\infty(\Xi)}$. Для других определений функциональных пространств, теорем вложения и задания функциональных пространств для задачи (P_ε) обратитесь к статье [3]. При предположениях теоремы 2.1 из [3] мы получим следующую теорему:

Теорема 1.1 (Теорема существования). *Существует единственное положительное глобальное слабое решение $u_\varepsilon \in \mathcal{F}_p^I(\Omega_p^\varepsilon) \cap L^\infty(S \times \Omega_p^\varepsilon)^I$ задачи (P_ε) и оно удовлетворяет следующей оценке: отт*

$$\sup_{\varepsilon > 0} \left(\| \|u_\varepsilon\| \|_{L^r((0,T); L^r(\Omega_p^\varepsilon))^I} + \| \|u_\varepsilon\| \|_{L^\infty((0,T); L^\infty(\Omega_p^\varepsilon))^I} + \| \|\nabla u_\varepsilon\| \|_{L^2((0,T); L^2(\Omega_p^\varepsilon))^I} \right) \leq C < \infty, \quad (1.8)$$

где r — любое произвольное выбранное большое положительное целое число, постоянная C не зависит от ε , t , u^ε .

Доказательство теоремы 1.1 дано в [3]. Элементами доказательства являются: функция энтропии, теорема фиксированной точки Шефера и теорема 2.5 из [8], основанная на максимальной регулярности дифференциальных операторов. При доказательстве теоремы предполагается, что диффузионные коэффициенты являются положительными постоянными по t и x (точнее $d_1 = d_2 = \dots = d_I = d > 0$). Тем не менее, следует отметить,

что (как давно известно) для систем типа (1.1) с различными диффузионными коэффициентами пока нет результатов относительно существования глобального слабого решения. Хороший обзор результатов можно найти в [7]. Совсем недавно значительная работа по исследованию скоростей реакции конкретного типа была выполнена в [2, 5].

Теперь, используя теорему о продолжении 4.2.1 из [4], оценку (1.8) можно продолжить на все $S \times \Omega$, т. е. 0mm

$$\sup_{\varepsilon > 0} \left(\| \|u_\varepsilon\| \|_{L^r((0,T);L^r(\Omega))^I} + \| \|u_\varepsilon\| \|_{L^\infty((0,T);L^\infty(\Omega))^I} + \| \|\nabla u_\varepsilon\| \|_{L^2((0,T);L^2(\Omega))^I} \right) \leq C < \infty, \quad (1.9)$$

где постоянная C не зависит от ε , t и u_ε . Кроме того, путем простого вычисления мы можем получить $\| \|\chi^\varepsilon \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial t}\| \|_{L^2((0,T);H^{1,2}(\Omega)^*)^I}$. Поэтому, в соответствии с теоремой 2.1 из [6], мы имеем, что u_ε с точностью до подпоследовательности сильно сходится к пределу $u \in L^2(S \times \Omega)^I$.

При предположениях, подобных тем, которые сделаны в [3], с использованием методов гомогенизации из пункта 4 (в частности, подпункт 4.3) и в соответствии с теоремой 4.11 из [4] показано, что:

Теорема 1.2 (Макрозадача). *Существует единственное $u \in \mathcal{F}_p^I(\Omega) \cap L^\infty(S \times \Omega)^I$, которое удовлетворяет следующей гомогенизированной задаче (P_ε) :*

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot \Upsilon \nabla u = SR(u) \quad \text{в } (0, T) \times \Omega, \quad (1.10)$$

$$-\Upsilon \nabla u \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{на } (0, T) \times \partial\Omega, \quad (1.11)$$

$$u(0, x) = u_0(x) \quad \text{в } \Omega. \quad (1.12)$$

Здесь $\Upsilon = (\beta_{jk})_{1 \leq j, k \leq 2}$ — тензор второго порядка с компонентами

$$\beta_{jk} = \int_{Y_p} \frac{d}{|Y_p|} \left(\delta_{jk} + \frac{\partial a_j}{\partial y_k} \right) dy \quad \text{для } j, k = 1, 2, \quad (1.13)$$

где (a_j) для $j = 1, 2$ является решением задачи для ячеек:

$$-\nabla_y \cdot (D(\nabla_y a_j(y) + e_j)) = 0 \quad \text{для } y \in Y_p, \quad (1.14)$$

$$-D(\nabla_y a_j(y) + e_j) \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{для } y \in \Gamma, \quad (1.15)$$

$$y \mapsto a_j(y) \text{ является } Y\text{-периодическим.} \quad (1.16)$$

Отметим что u_ε сильно сходится (до подпоследовательности) к пределу $u \in L^2(S \times \Omega)^I$, т. е. $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|u_\varepsilon - u\|_{L^2(S \times \Omega)^I} = 0 \iff \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \|u_{\varepsilon_i} - u_i\|_{L^2(S \times \Omega)} = 0$ для всех i .

2. Моделирование

Физическая постановка: рассмотрим область $\Omega := [0, 1.2] \times [0, 1]$ в \mathbb{R}^2 . Пусть $Y = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$ — типичная ячейка с $Y_s := B((0.5, 0.5), 0.15)$ в качестве твердотельного включения¹. Предположим, что в Ω находятся четыре мобильных вида, а именно: A , B , M и N . Эти химические виды диффундируют и реагируют друг с другом (рис. 2.1).

¹Для $r \in \mathbb{R}^n$ $B(r, \varepsilon)$ обозначает открытый шар с центром в r и радиусом ε .

Реакция является обратимой и задается следующим образом:



Со стехиометрическими коэффициентами $-2, -3, 1$ и 2 скорости реакции для каждого вида задаются путем (1.6). Здесь $I = 4$ и $J = 1$.

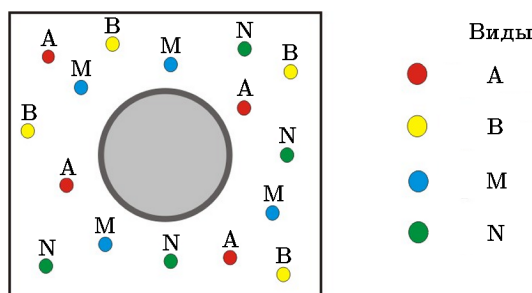


Рис. 2.1. Диффузия–реакция видов А, В, М и N

2.1. Моделирование в микромасштабе

Пусть u_{ε_i} обозначает молярную концентрацию i -го вида для $1 \leq i \leq 4$. Возьмем масштабный параметр $\varepsilon = 0.2$. Кроме того, пусть $D = 1.0, k_j^f = 1.8, k_j^b = 12.2$. Предположим, что вначале $u_{\varepsilon_1}(0, x_1, x_2) = u_1(0, x_1, x_2) = 5x_1, u_{\varepsilon_2}(0, x_1, x_2) = 2(x_1 + 3), u_{\varepsilon_3}(0, x_1, x_2) = 5x_1$ и $u_{\varepsilon_4}(0, x_1, x_2) = 2x_1$.

Выберем “грубую сетку” в COMSOL для дискретизации области Ω_p^ε . Триангуляция области Ω_p^ε показана на следующем рисунке:

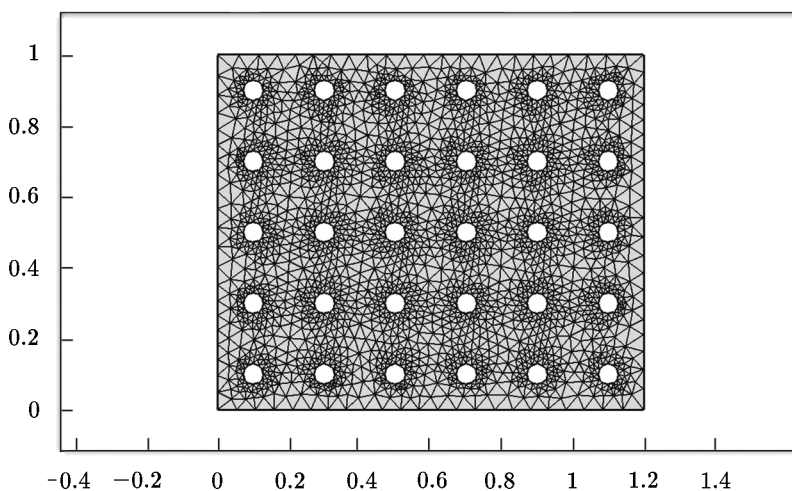


Рис. 2.2. Триангуляция Ω_p^ε для $\varepsilon = 0.2$

Мы решаем систему уравнений диффузии–реакции в микромасштабе для $t = 10$ с. Отметим, что число элементов для сетки — 4930, число степеней свободы — 10640, а время, требуемое для решателя, — 104 секунды. Здесь мы сравниваем решение только для вида А в микро- и макромасштабах, поскольку сравнение решений для остальных видов можно сделать аналогичным образом. Молярные концентрации вида А для $t = 0.25$ с,

$t = 0.35$ с, $t = 3$ с и $t = 10$ с соответственно показаны на следующих рисунках:

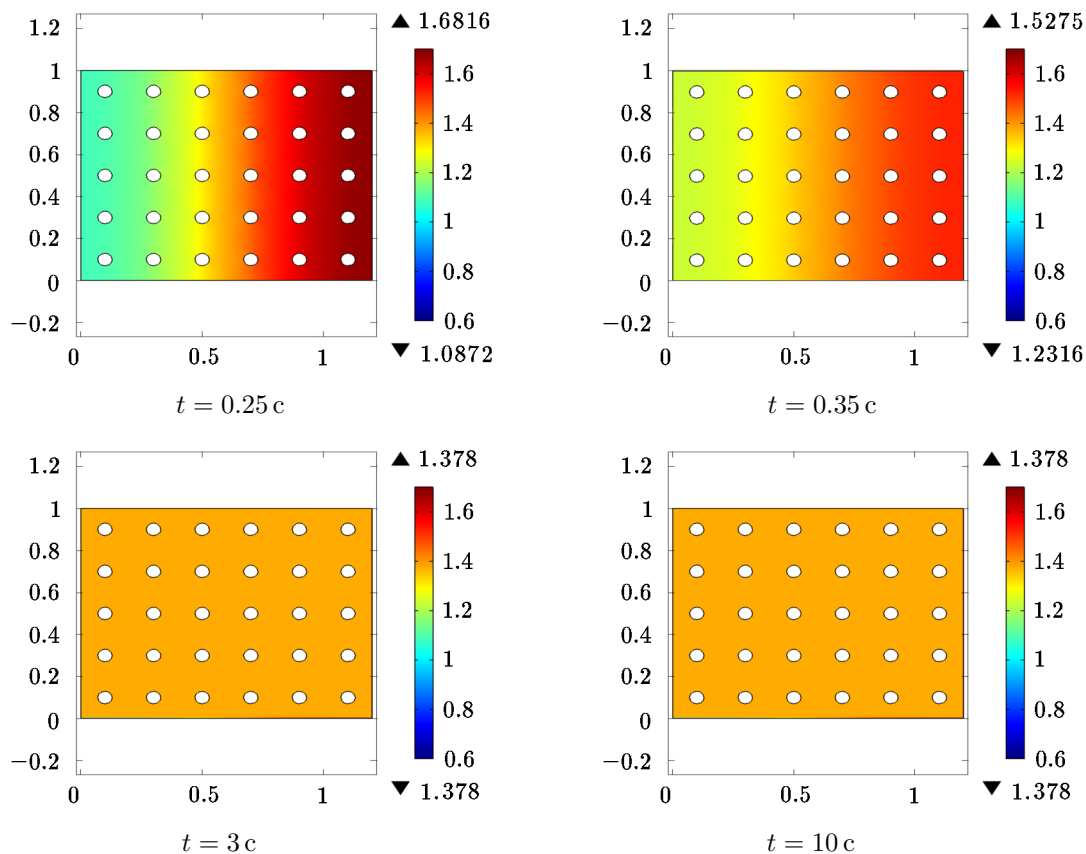


Рис. 2.3. Концентрация вида A в Ω_p^ε в разное время

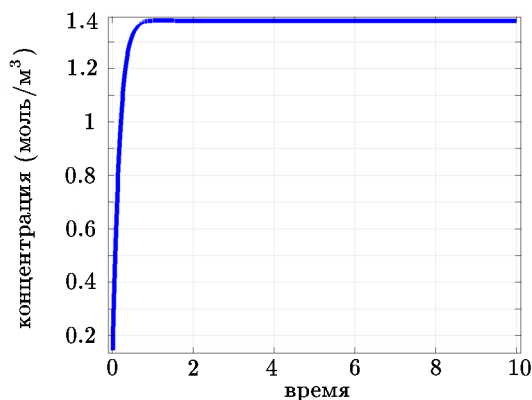


Рис. 2.4. Концентрация вида A в точке $(0,1)$ в Ω_p^ε через 10 секунд

На рис. 2.3 мы видим изменения концентрации вида A в разное время. Со временем концентрация вида A увеличивается и, благодаря обратимости реакции, через $t = 3$ с реакция достигает равновесия. Это также видно на рис. 2.4, где показана концентрация вида A в точке $(0,1)$ в Ω_p^ε . Вычислим эффективный тензор диффузии для вида A . Начнем с решения задач для ячеек (1.14)–(1.16) в Y .

2.2. Решение задач ячеек

Выберем опцию “мелкой сетки” (имеющуюся в COMSOL) для триангуляции ячейки Y , показанной ниже на рис. 2.5.

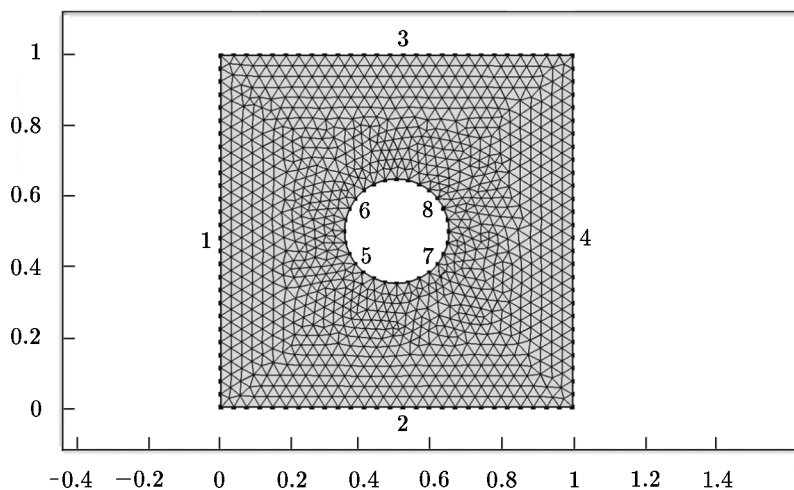


Рис. 2.5. Триангуляция ячейки Y

На следующих рисунках показаны решения задач для ячейки.

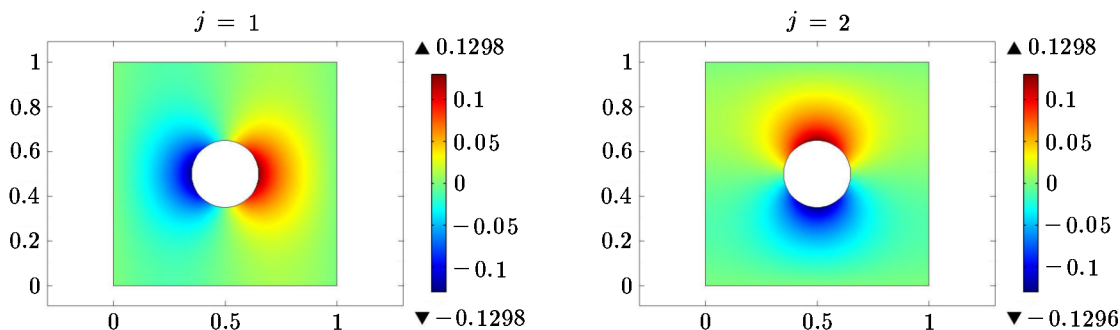


Рис. 2.6. Решение a_j задачи для ячейки при $j = 1, 2$

Используя функцию “производные значения” в COMSOL, вычислим тензор диффузии по формуле (1.13). Таким образом, мы получим

$$P = (p_{jk}) = \begin{bmatrix} 0.93409 & 4.19 \cdot 10^{-7} \\ 4.19 \cdot 10^{-7} & 0.93409 \end{bmatrix}. \tag{2.2}$$

2.3. Моделирование в макромасштабе

Для моделирования макромодели возьмем P из (2.2), $k_j^f = 1.8$, $k_j^b = 12.2$. Первоначально $u_1(0, x_1, x_2) = 5x_1$, $u_2(0, x_1, x_2) = 2(x_1 + 3)$, $u_3(0, x_1, x_2) = 5x_1$ и $u_4(0, x_1, x_2) = 2x_1$. Возьмем “грубую сетку” (в COMSOL) для Ω с 144 элементами. Дискретизация области Ω показана ниже на рис. 2.7.

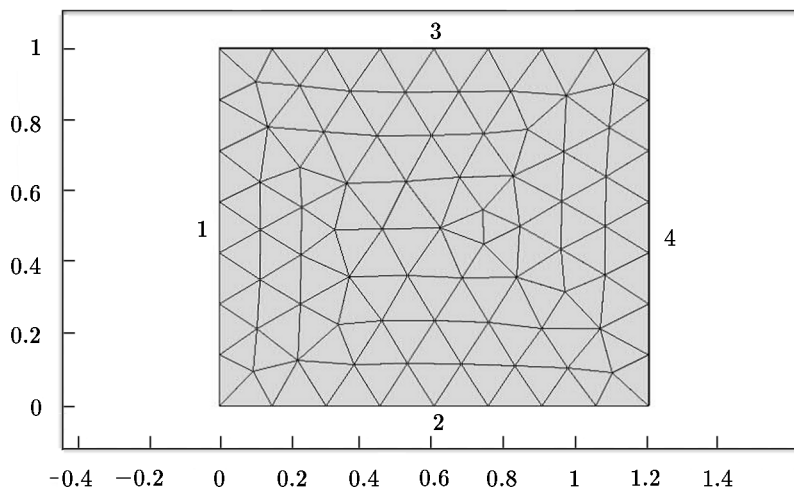


Рис. 2.7. Триангуляция в Ω

Также отметим, что число степеней свободы — 352, а время, требуемое для решателя, равно 11-ти секундам. Численные моделирования показаны на рис. 2.8 и рис. 2.9.

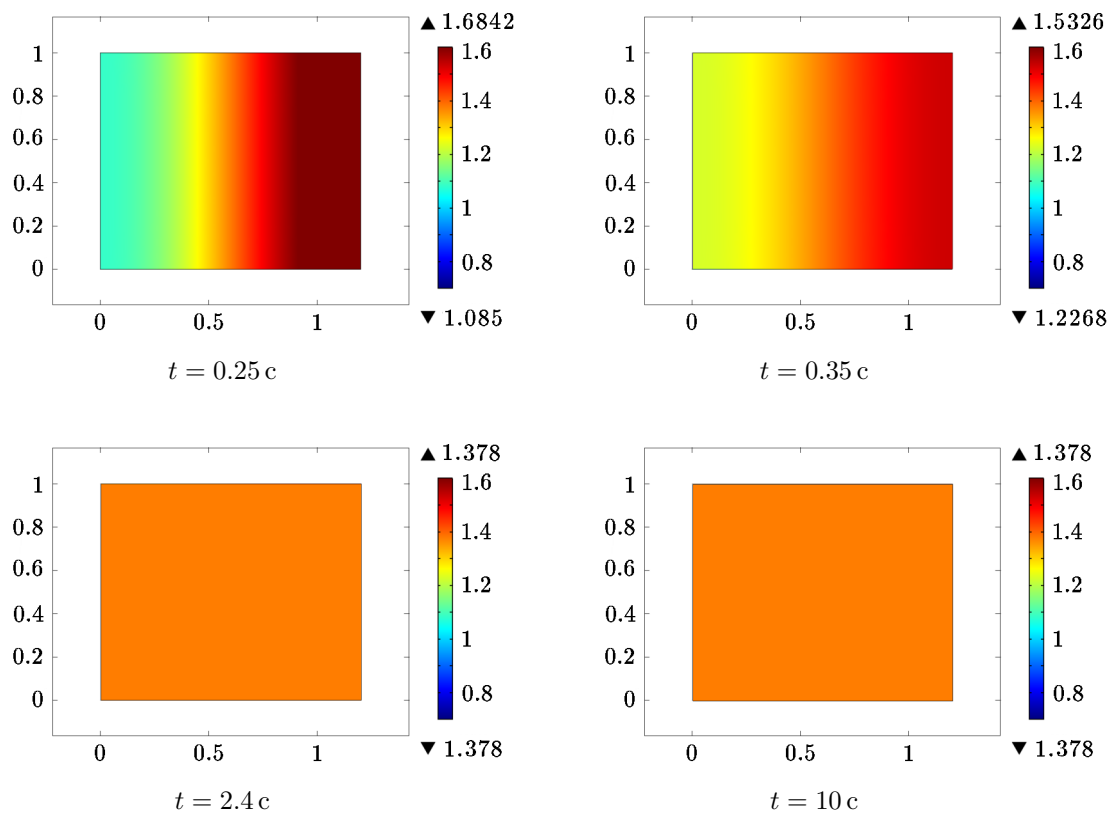


Рис. 2.8. Концентрация вида A в Ω в различных временных масштабах

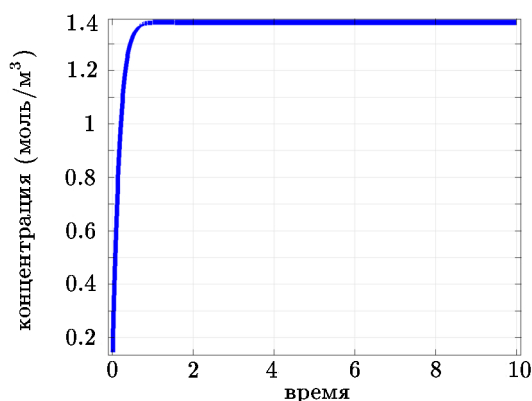


Рис. 2.9. Концентрация вида A в точке $(0,1)$ в Ω через 10 секунд

3. Выводы

Прежде всего отметим, что для одного и того же типа сетки для решателя требуется меньше времени для решения макрозадачи, чем для микрозадачи. Поэтому использование макромоделей более эффективно с точки зрения вычислений. На рис. 2.8 показано, что со временем концентрация вида A увеличивается, а через $t = 2.4$ с (как и ожидалось) реакция достигает равновесия. При сравнении рисунков 2.3 и 2.8 видно, что макро модель (1.10)–(1.12) является хорошей аппроксимацией нашей исходной микрозадачи (1.1)–(1.4). В этом также можно убедиться при сравнении рисунков 2.4 и 2.9. Кроме того, с использованием COMSOL, мы можем вычислить

$$\|u_{\varepsilon_A} - u_A\|_{L^2(S \times \Omega)} = \int_{S \times \Omega} |u_{\varepsilon_A} - u_A|^2 dx dt = 0.432 \cdot 10^{-6},$$

где u_A — концентрация вида A .

Таким образом, макро модель дает нам глобальную информацию (поведение) свойств химического переноса в пористой среде, которая была микроскопически неоднородной. При помощи гомогенизации мы получили математическую модель, не имеющую неоднородностей, которая является аппроксимацией микро модели и требует меньше времени для вычисления. Поэтому методы гомогенизации являются хорошим средством для решения задач подобного типа.

Благодарности. Автор очень признателен Центру индустриальной математики Бременского университета за предоставление прекрасных рабочих условий во время его визита.

Литература

1. Comsol User's Guide. — COMSOL Multiphysics, 2010.
2. **Bothe D., Rolland G.** Global existence for a class of reaction-diffusion systems with mass action kinetics and concentration-dependent diffusivities // Acta Appl. Math. — 2015. — Vol. 139. — P. 25–57.
3. **Mahato H.S., Böhm M.** Global existence and uniqueness for a system of nonlinear multi-species diffusion reaction equations in an $H^{1,p}$ setting // J. Appl. Anal. and Comput. (JAAC). — 2013. — Vol. 3, № 4. — P. 357–376.

4. **Mahato H.S., Böhm M.** Homogenization of a system of semilinear diffusion-reaction equations in an $H^{1,p}$ setting // Electron. J. Diff. Equations (EJDE).— 2013.— Vol. 210.— P. 1–22.
5. **Marion M., Temam R.** Global existence for fully nonlinear reaction-diffusion systems describing multicomponent reactive flows // J. Math. Pure Appl.— 2015.— Vol. 104.— P. 102–138.
6. **Meirmanov A., Zimin R.** Compactness result for periodic structures and its application to the homogenization of a diffusion-convection equation // Electron. J. Diff. Equations (EJDE).— 2011.— Vol. 115.— P. 1–11.
7. **Pierre M.** Global existence in reaction-diffusion systems with control of mass: a survey // Milan J. of Mathematics.— 2010.— Vol. 78, № 2.— P. 417–455.
8. **Prüss J., Schnaubelt R.** Solvability and maximal regularity of parabolic evolution equations with coefficients continuous in time // J. Math. Anal. and Appl.— 2001.— Vol. 256.— P. 405–430.
9. **Rubin J.** Transport of reacting solutes in porous media: Relation between mathematical nature of problem formulation and chemical nature of reactions // Water Resour. Res.— 1983.— Vol. 19, № 5.— P. 1231–1252.

*Поступила в редакцию 24 ноября 2015 г.,
в окончательном варианте 5 июля 2016 г.*