

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Sondhauss C.* Uber die Shallschwingungen der Luft in erhitzten Glassrohren und in gedeckten Pfeifen von ungleicher Weite // Poggendorf Annalen der Physik und Chemie. – 1850. – Vol. 79. – P. 1 – 34.
2. *Carter R.L., Feldman K.T., McKinnon C.N.* Applicability of Thermoacoustic Phenomena to MHD Conversion Systems // University of Missouri Engineering Experiment Station, Columbia, Mo. Reprint Number 64, July 1964. Reprinted from Proceeding of the Fifth Symposium on Engineering Aspects of Magneto hydrodynamics, Massachusetts Institute of Technology Cambridge, Mass. April 1 – 2. 1964. P. 67.
3. *Henderson R.L.* (Environmental Test Group, Sandia Laboratory, Albuquerque), Private Communication, June 1965.
4. *Фельдман К.Т., Картер Р.Л.* Исследование колебаний давления, возникающих в газе при подводе тепла // Труды американского общества инженеров – механиков, Теплопередача. – 1970. Сер. С, № 3. – С. 228 – 235.
5. *Гоцуленко В.В.* Математическое моделирование особенностей феномена Рийке / В.В. Гоцуленко // Математическое моделирование, РАН. – 2004. – Т. 16, N 9. – С. 23 – 28.
6. *Гоцуленко В.В.* Тепловое сопротивление как механизм возбуждения автоколебаний / В.В. Гоцуленко, В.Н. Гоцуленко // Сборник научн. трудов Днепродзержинского гос. техн. ун-та. – Д., 2009. – Вып. 1(11). – С. 95 – 100.
7. *Басок Б.И.* Теория феномена Рийке в системе с сосредоточенными параметрами / Б.И. Басок, В.В. Гоцуленко // Акустический вестник. – 2010. – Т. 13, № 3. – С. 3– 8.
8. *Басок Б.И.* Автоколебания в распределенной модели трубы Рийке / Б.И. Басок, В.В. Гоцуленко // Сибирский журнал промышленной математики. – 2011. – Т. XIV, № 4(48). – С. 3 – 13.

Получено 29.12.2011 г.

УДК 536.25

**Авраменко А.А.<sup>1</sup>, Блинов Д.Г.<sup>1</sup>, Кузнецов А.В.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Институт технической теплофизики НАН Украины

<sup>2</sup>Университет штата Северная Каролина, США

### ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ PGD И МПС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МНОГОМЕРНЫХ ЗАДАЧ ТЕПЛОФИЗИКИ

Розглянуто можливість застосування методів PGD і МПС для вирішення багатовимірних задач теплофізики. Показана ефективність і перспективність застосування запропонованого підходу для рівняння Фоккера-Планка та задач течії полімерних рідин.

Рассмотрено применение методов PGD и МПС для решения многомерных задач теплофизики. Показана эффективность и перспективность применения предлагаемого подхода для уравнения Фоккера-Планка и задач течения полимерных жидкостей.

The application of the method of proper generalized decomposition (PGD) and the method of polyargumental systems (MPS) for multidimensional thermal physics problems is considered. The high efficiency of proposed approach for the simulation of the Fokker-Planck equation and flows of polymer liquids is shown.

$a$  – временная базисная функция;  
 $x$  – координата;  
 $q$  – обобщенная координата;

$U$  – неизвестная функция;  
 $\varphi$  – пространственная базисная функция;  
 $\psi$  – функция распределения.

### **Введение**

Рассмотрение ряда современных задач теплофизики основывается на анализе многомерных постановок, включающих в себя кроме обычных пространственно-временных координат, дополнительные, так называемые конфигурационные координаты. Так задачи течения вязкопластичных жидкостей, описание поведения растворов и расплавов полимеров, жидкокристаллических полимеров и т.д. – обычно содержат большое количество дополнительных обобщенных координат. Это связано с тем, что при описании динамики движения полимерных макромолекул не действует концепция сплошной среды и необходимо рассматривать описание движения единичной молекулы или группы молекул, составляющих полимерную цепочку. Для этой цели используют подходы молекулярной динамики, непосредственно моделирующие движение макромолекул, или стохастического осреднения уравнений движения и связанного с этим рассмотрение функции распределения. При этом одними из наиболее часто используемых являются модели, основанные на многомерном уравнении Фоккера-Планка (в дальнейшем ФП) для функции распределения, которое является разумным компромиссом между сложностью и детализированностью модели описания. В отличие от моделей молекулярной динамики, требующих для своего рассмотрения методов типа Монте-Карло значительных (даже на сегодняшний день) компьютерных ресурсов при анализе физически осмысленных, а не модельных задач. Подход, основанный на введении вероятностного описания и приводящий к уравнениям ФП, является реальным в реализации даже для нетривиальных по сложности задач. С другой стороны в отличие от моделей сплошной среды, вводящих в описание феноменологические соотношения и не позволяющих «ухватить» сложную физику поведения среды, уравнение ФП позволяет с помощью введения конфигурационных переменных учесть реальные особенности взаимодействия структурных элементов среды.

Система, описывающая поведение «сложной жидкости», состоит из уравнений движения сплошной среды и уравнения типа ФП, позволяющего определить корреляционные моменты в тензоре напряжений уравнения импульсов. Принципиальные трудности возникают при рассмотрении уравнения ФП, которое представляет собой параболическое уравнение большой размерности. Применение стандартных методов вычислительной математики, типа методов конечных элементов, приводит к необходимости использовать сетки гигантской размерности. Так для задачи, описывающей поведение макромолекулы в виде 8 пружинок и бусинок, требуется 3 пространственных, 1 временная и 24 (по 3 ориентационные координаты на каждую пружину) – всего 28 координат. При числе узлов в каждом направлении 100, это приводит к сетке с числом неизвестных, превышающих предполагаемое число элементарных частиц во Вселенной.

### **Описание метода**

Для преодоления «проклятия размерности» был предложен ряд подходов, таких как циклической редукции (cyclic reduction (PSCR)) [1, 2], разреженных сеток (sparse grids) [3]. Однако, несмотря на значительное сокращение вычислительных затрат, эти методы не могут рассматриваться как полное решение проблемы размерности.

В этой работе рассмотрен новый подход для рассмотрения многомерных задач – метод PGD (proper generalized decomposition), предложенный в [4] и восходящий корнями к известному методу квантовой механики Хартли-Фока. Уже имеется обширная практика применения этого подхода к различным задачам физики [5, 6]. Эффективность его использования позволяет говорить об PGD как новом классе методов решения задач математической физики. Подобный подход применен и в методе МПС, которой был предложен и развит (не так обширно по охвату и общности) группой авторов на несколько десятилетий ранее в приложении к задачам тепломассобмена и упругости [7].

Одной из принципиальных особенностей метода PGD является раздельное рассмотрение временной и пространственной задачи. Это позволяет во многих физических задачах, для которых характерна многомасштабность пространственно-временного описания, преодолеть проблему совместного рассмотрения микро- и макромасштабов. Такая декомпозиция времени и пространства используется в эффективном подходе к задачам структурной динамики – LATIN методе [8].

Метод PGD можно рассматривать как обобщение (что следует из названия) широко используемого в различных разделах физики метода POD (или POD – Galerkin) [9, 10]. Оба эти метода можно отнести к разряду проекционных, их основное отличие от традиционных подходов заключается в корректном выборе пространственного и временного базиса.

В основе метода POD лежит идея определение базиса задачи не априорно, а на основе максимального отражения всей имеющейся информации о физическом процессе. В конечном итоге, метод POD состоит в нахождении пространственного базиса на основе определения собственных функций некоторого интегрального уравнения, составленного на основе процедуры Кархунена-Лоеве [9]. Это интегральное уравнение строится путем аппроксимации корреляционной матрицы, определяемой на основе исследуемого процесса. Получаемый путем анализа корреляционной матрицы процесса пространственный базис задачи, затем используется для составления динамической модели путем применения процедуры проектирования метода Галеркина.

Выбор базиса на основе апостериорных данных (экспериментальных или данных предварительного решения задачи при определенном наборе режимных параметров) является одновременно и недостатком подхода POD-Galerkin. Некоторая несимметричность рассмотрения временной и пространственной части задачи (пространственный базис на основе апостериорных данных, временной – путем

решения динамической задачи) преодолена в методе PGD путем выполнения следующего шага – нахождение пространственного базиса при известном временном и далее применении итерационной процедуры раздельного решения временной и пространственной задач. Фактически по известному из предыдущего шага пространственному базису определяется временной, а по известному временному – пространственный. Такое раздельное рассмотрение временной и пространственных задач (что соответствует концепции LATIN подхода) является для ряда задач принципиальным моментом, позволяющим преодолеть проблему сопряжения микро- и макромасштабов. Например, при рассмотрении диффузионных процессов совместно с быстропротекающими реакциями горения, анализе реакционно-диффузионных моделей в процессах деградации и т.д.

Для ряда задач (включая анализ уравнения ФП) разделение на временной базис и пространственный является недостаточным. Необходим следующий шаг в «расчленении» решения – разложение на компоненты и пространственной части решения. В этом случае решение представляется виде

$$U_N(t, x_1, x_2 \dots x_M) = \sum_{i=1}^N a_i(t) \varphi_i^1(x_1) \dots \varphi_i^M(x_M). \quad (1)$$

При этом требуется определить все функции, входящие в (1).

Для удобства дальнейшего изложения далее рассмотрим модельный пример, основанный на многомерном уравнении Пуассона

$$\Delta U = -f(x_1, x_2 \dots x_M). \quad (2)$$

Задача определена в многомерном единичном кубе с нулевыми граничными условиями на гранях куба.

Для стационарной задачи представление (1) можно записать в виде

$$U_N(x_1, x_2 \dots x_M) = \sum_{i=1}^N \prod_{k=1}^M \varphi_i^k(x_k). \quad (3)$$

Спроецировав невязку в уравнении (2) на проекционный базис

$$\int_{\Omega} (\Delta \sum_{i=1}^N \prod_{k=1}^M \varphi_i^k(x_k) + f(x_1, x_2, \dots, x_M)) \cdot \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq p}}^M \varphi_i^k(x_k) \cdot \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq p}}^M dx_k = 0 \quad p = 1, \dots, M \quad (4)$$

и проинтегрировав с учетом нулевых граничных условий по частям, получим  $M$  подсистем ОДУ для определения  $\varphi_i^k$ . Ниже записана одна из подсистем (для определения  $\varphi_i^p \quad i = 1, \dots, N$ ).

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^N \frac{d^2 \varphi_i^p}{dx_p^2} \cdot \int \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq p}}^M \varphi_i^k \cdot \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq p}}^M \varphi_j^k \cdot \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq p}}^M dx_k - \\ & - \sum_{i=1}^N \varphi_i^p \cdot \int \left( \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq p}}^N \frac{d\varphi_i^k}{dx_k} \frac{d\varphi_j^k}{dx_k} \cdot \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq p, l \neq k}}^M \varphi_i^l \varphi_j^l \right) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq p}}^M dx_k = \\ & = \int f(x_1, x_2, \dots, x_M) \cdot \varphi_j^p \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq p}}^M dx_k, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $j = 1, \dots, N$ .

Записанная совокупность подсистем соответствует методу МПС. В методе PGD  $\varphi_i^k$  функции в форме представления (3) находятся последовательным «обогащением» базиса. Сначала для  $i = 1$ , потом  $i = 2$  и т.д. – фактически применяя идеологию метода подпространств Крылова (подробности смотри [4]).

Приведенная формулировка метода была опробована для различных правых частей в уравнении (2)

$$f = \sum_{i=1}^M 2 \cdot \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^M (x_k - 1)^2, \quad f = \sum_{i=1}^M i^2 \cdot \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^M (\sin(k \cdot x_k)) \quad (6)$$

и для различных  $M$  вплоть до двадцати.

Проведенные расчеты показали, что уже 2 итерации алгоритма (4) позволяют получить точное решение. При этом даже для размерности задачи  $M = 20$  требуется незначительные компьютерные ресурсы.

### Решение уравнения Фоккера-Планка

Вернемся к задаче моделирования движения растворов полимеров и связанной с этим задачи решения многомерного уравнения ФП. Как уже отмечалось, в основе многих совре-

менных моделей таких растворов лежит модельное понятие макромолекулы, которую можно рассматривать как гибкую однородную упругую нить. Одна из наиболее подробных моделей была предложена Флори [11]. В этой модели при изучении равновесных свойств полимерной молекулы учитываются длины химических связей, углы между связями и вращательные изомерные состояния. В модели Крамерса считается, что полимерная цепь состоит из точечных масс или бусинок, соединенных линейно системой жестких стержней. Узлы этой цепи представляют собой не отдельные атомы в остове макромолекулы, а конечные участки молекулярной цепи. Несмотря на свою простоту, эта модель, при дополнительных предположениях о характере взаимодействия частиц цепи со своим окружением, оказалась перспективной и в настоящее время часто используется для описания концентрированных растворов и расплавов, как монодисперсных, так и полидисперсных линейных полимеров. Одной из наиболее часто используемых в гидродинамическом моделировании является нелинейная полимерная модель FENE (finitely extensible nonlinear elastic) [12, 13]. Эта модель, устраняющая необходимость статистического осреднения в каждой точке пространства и по каждой молекуле, способна отразить некоторые важные свойства полимерных растворов – уменьшение трения при движении и т.д., однако неспособна проявить эффекты гистерезиса в поведении полимерных жидкостей.

В модели FENE полимерная цепочка рассматривается на основе модели бусинок-пружинки, в которой взаимодействие с окружающей жидкостью учитывается через бусинки, а локальная сила в молекуле – через жесткость пружинки. Уравнение движения цепочки представляет собой баланс сил сопротивления, жесткости и сил, вызванных броуновским движением. Вводя понятие плотности вероятности для цепочки в случае однородного потока можно записать многомерное уравнение ФП.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} = & \sum_{k=1}^M \frac{\partial}{\partial q_k} \cdot \left( -Kq_k + \frac{1}{2\xi} F(q_k)q_k + \frac{1}{2\xi} \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) - \\ & - \frac{1}{4\xi} \sum_{k=2}^M \left( F(q_{k-1})q_{k-1} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_{k-1} \partial q_k} \right) - \\ & - \frac{1}{4\xi} \sum_{k=1}^{M-1} \left( F(q_{k+1})q_{k+1} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_{k+1} \partial q_k} \right), \end{aligned} \quad (7)$$

где  $q_k = r_{k+1} - r_k$  – обобщенная координата,  $r_k$  – положение  $k$ -бусинки,  $K$  – константа, характеризующая окружающий поток,  $\xi$  – время релаксации. В модели FENE используется модель Россе [11] для свежуюющей силы  $F(q_k)$ . Функция  $\psi$  подчинена условию нормировки

$$\int_{\Omega} \psi(q_1, \dots, q_M, t) \cdot dq = 1, \forall t. \quad (8)$$

Зная функцию распределения, можно на основе соотношения Крамера [11] определить напряжение в полимерной цепочке

$$\tau = \int_{\Omega} \psi(q_1, \dots, q_M) \sum_{k=1}^M F(q_k) q_k^2 dq_1 \dots dq_M - M,$$

где  $\Omega = \{-\sqrt{b}, \sqrt{b}\}$ , (9)

где  $\sqrt{b}$  – максимальное растяжение для каждого сегмента цепи. При  $M = 1$  уравнение (7) можно записать в виде

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial q} \cdot \left( -Kq + \frac{1}{2\xi} F(q) q \psi \right) + \frac{1}{2\xi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2}. \quad (10)$$

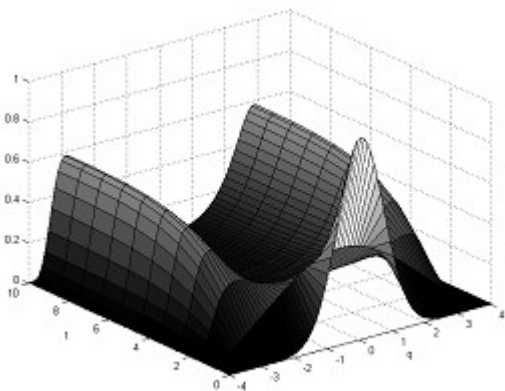


Рис. 1. Функция распределения  $\psi$ .

Для силы связи  $F$  воспользуемся моделью Rouse [12]

$$F(q_k) = \frac{1}{1 - q_k^2 / b}. \quad (11)$$

Представим решение в виде  $\Psi = \psi + \psi_0$ , где  $\psi_0$  – стационарное равновесное решение уравнения (10). Тогда для  $\Psi$  получим уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q} \cdot \left( Kq - \frac{1}{2\xi} F(q) q \Psi \right) - \frac{1}{2\xi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q^2} = \\ = - \frac{\partial}{\partial q} \cdot \left( Kq - \frac{1}{2\xi} F(q) q \psi_0 \right) + \frac{1}{2\xi} \frac{\partial^2 \psi_0}{\partial q^2}. \end{aligned} \quad (12)$$

При следующих граничных и начальных условиях:

$$\Psi(q, 0) = 0 \text{ при } q \in (-\sqrt{b}, \sqrt{b}) \text{ и } \Psi(\pm\sqrt{b}, t) = 0 \text{ при } t \in (0, t_{\max}). \quad (13)$$

Применяя алгоритм (4) было промоделировано решение уравнения (12), для  $K = 1$ ,  $\xi = 1$ ,  $b = 4$ . Результаты расчетов отражены на приведенных ниже рисунках. На рис. 1 отображена функция распределения  $\psi$  при указанных выше параметрах. На рис. 6 приведено установившееся распределение  $\psi$  в зависимости от параметра  $K$ , характеризующего скоростной градиент потока окружающей среды. Следует отметить, увеличение  $K$  приводит к «растяжению» молекулы и смещению «бусинок» в

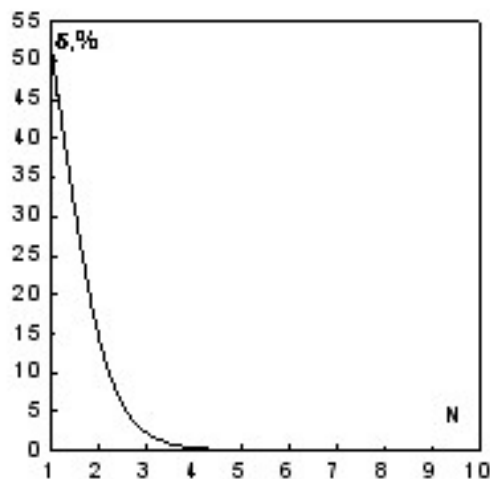
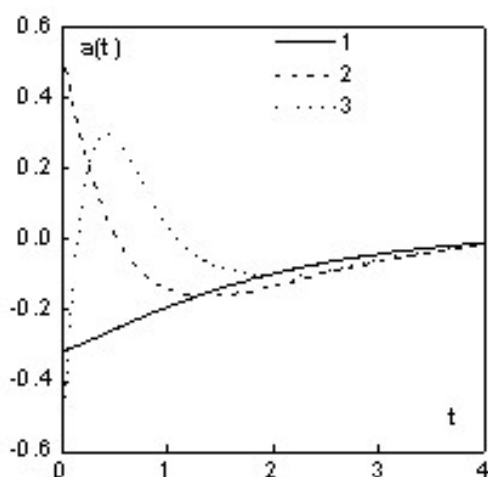
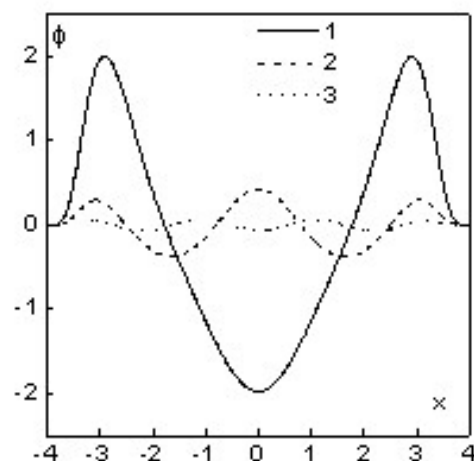


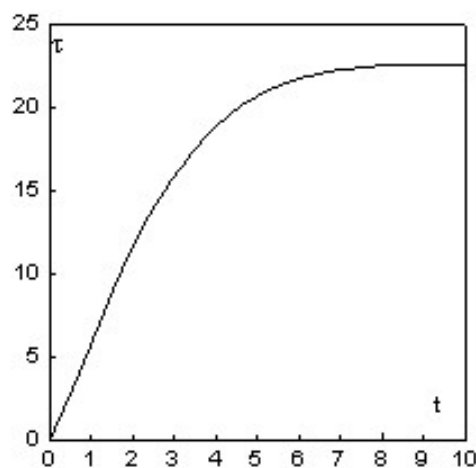
Рис. 2. Зависимость среднеквадратичной погрешности от числа членов  $N$ .



*Рис. 3. Характер временных базисных функций: 1, 2, 3 – соответственно первая, вторая и третья.*

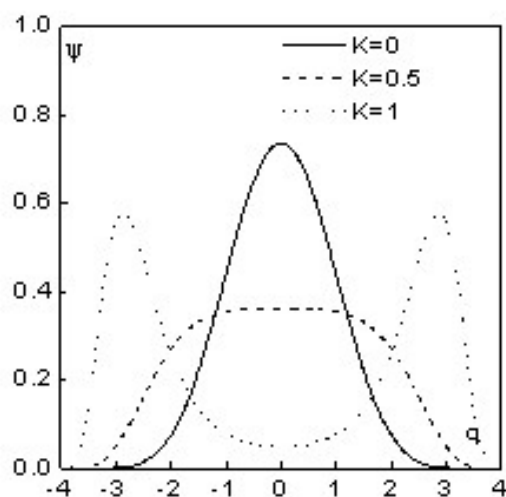


*Рис. 4. Характер пространственных базисных функций: 1, 2, 3 – соответственно первая, вторая и третья.*



*Рис. 5. Касательное напряжение.*

стороны от центра. На рис. 2 приведена зависимость относительной среднеквадратичной погрешности от числа членов в (3). Как видно уже 4-х членов достаточно для получения решения с погрешностью меньше 1 %. На рис. 3 и рис. 4 приведены пространственные и временные базисные функции и наконец, рис. 5 отражает процесс установления касательного напряжения  $\tau$ . Фактически, установившееся значение  $\tau$  является параметром, связывающим уравнения движения макромолекулы (уравнение ФП) и уравнения движения сплошной среды.



*Рис. 6. Функция распределения  $\psi$  в зависимости от  $K$ .*

### *Заключение*

Рассмотренные в статье методы PGD и МПС позволяют решать задачи теплофизики высокой размерности, в том числе такие важные в инженерном плане как моделирование течения растворов полимеров. Эффективное разложение задачи на ряд одномерных подзадач дает возможность кардинально снизить ресурсоемкость решения и решить проблему совместного рассмотрения микро- и макромасштабов в задаче.

Исследования выполнены при финансовой поддержке NATO Collaborative Linkag Grant (CBP, NUKR.CLG 984260).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Kuznetsov Y.A., Matsokin A.M. On partial solution of systems of linear algebraic equations // *Sov. J. Numer. Anal. Math. Model.* – 1989. – Т. 4 (6). – С.453 – 467.
2. Rossi T., Toivanen J. A non-standard cyclic reduction method, its variants and stability // *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* –1999. – Т. 20 (3). – С.628 – 645.
3. Bungartz H.J., Griebel M. Sparse grids // *Acta Numer.* – 2004, Т. 13. – С.1 – 123.
4. Ammar A., Ryckelynck D., Chinesta F., Keunings R. // On the reduction of kinetic theory models related to finitely extensible dumbbells, *J. Non-Newton. Fluid Mech.* – 2006. – Т. 134. – С. 136 – 147.
5. Ammara A., Mokdada B., Chinesta F., Keunings R. A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modelling of complex fluids // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* – 2006. – Т. 139. – С. 153 – 176.
6. Ryckelynck D., Chinesta F., Cueto E., Ammar A. On the a priori model reduction: overview and recent developments, *State Art Rev* // – 2006. – Т. 13 (1). – С. 91 – 128.
7. Прокопов В.Г., Беспалова Е.И., Шеренковский Ю.В. Применение методов полиаргументных систем для решения нелинейных многомерных задач теплопереноса // *Известия ВУЗов, «Энергетика».* – 1986. – № 3, – С. 84 – 89.
8. Ladeveze P., Passieux J.C., Neron D. The LATIN multiscale computational method and the Proper Generalized Decomposition // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering.* –2010. –Т. 199. – С. 1287 – 1296.
9. Sirovich L. Turbulence and the dynamics of coherent structures, Parts I – III // *Quarterly of Applied Mathematics.* – 1987. – Т. 45. – С. 561– 590.
10. Berkooz G., Holmes P., Lumley J.L. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flow // *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1993. – Т. 25. С. 539 – 575.
11. Doi M., Edwards S.F. *The Theory of polymer dynamics.* – Oxford University Press. –1986, – С. 403
12. Chupin L. The FENE model for viscoelastic thin film flows // *Methods and applications of analysis.* – 2009. – Т. 16, № 1. – С. 217 – 262.
13. Larson R.G. *The structure and rheology of complex fluids.* – Oxford University Press, New York. – 1999.

Получено 02.12.2012 г.