PHƯƠNG PHÁP TẬP MỨC KHÔNG LƯỚI: CƠ SỞ TOÁN HỌC VÀ KHẢ NĂNG ỨNG DỤNG TRONG NGÀNH KỸ THUẬT DẦU KHÍ

Mai Cao Lân[(1)], Trần Công Thành[(2)]
(1)Trường Đại học Bách khoa, ĐHQG-HCM
(2) Đại học Southern Queensland, Australia

1. GIỚI THIỆU

Đa số mô hình toán mô tả một quá trình vật lý thường ở dạng các phương trình vi phân. Đối với bài toán đa biến, ta có các phương trình vi phân riêng phần. Việc tìm nghiệm của những phương trình này nói chung là phức tạp nên thông thường không thể dùng phương pháp giải tích được. Thay vào đó, người ta sử dụng các phương pháp số để tìm nghiệm gần đúng của chúng. Hiện nay các phương pháp số được sử dụng phổ biến gồm có phương pháp sai phân hữu hạn (finite difference method - FDM), phần tử hữu hạn (finite element method - FEM), khối hữu hạn (finite volume method - FVM), v.v…. Xin xem [Tannehill et al. (1997), Chung (2002)] để biết thêm chi tiết. Các phương pháp này được gọi chung là phương pháp rời rạc hóa theo không gian. Đối với các bài toán phụ thuộc thời gian, ta cần thêm công cụ số để rời rạc hóa phương trình vi phân theo biến thời gian. Xin xem [Quarteroni and Valli (1994), Quarteroni et al. (2000)] để biết thêm chi tiết về các phương pháp này.

Nếu như các phương pháp FDM, FEM, FVM, v.v… rời rạc hóa phương trình vi phân trên cơ sở chia nhỏ miền tính toán thành một lưới (mesh) gồm những phần tử ràng buộc lẫn nhau trên lưới theo những nguyên tắc xác định (ta gọi chung các phương pháp này là nhóm phương pháp dựa vào lưới) thì đối với các phương pháp không lưới, miền tính toán được chia thành một tập hữu hạn các điểm rời rạc, có thể bố trí tùy ý (unstructured) và không có bất kỳ mối ràng buộc nào về vị trí tương đối giữa chúng trong quá trình tính toán. Kết quả là các phương pháp không lưới rất thích hợp cho các bài toán có biến dạng lớn (như trong cơ học rạn nứt) hoặc các bài toán có biên di động (như dự đoán quá trình điền khuôn đúc hoặc mô phỏng mặt tiến dầu-nước/khí-dầu trong quá trình bơm ép/thu hồi tăng cường dầu) trong khi đối với các phương pháp dựa vào lưới, việc giải các bài toán này sẽ rất phức tạp (đôi khi làm giảm độ chính xác của lời giải) do phải thường xuyên điều chỉnh lưới bị biến dạng trầm trọng. Có nhiều phương pháp không lưới [Kansa (1990a,b), Aluri (2002)], trong đó có phương pháp Indirect Radial Basis Function Networks (IRBFN) [Mai-Duy and Tran-Cong (2001,2003)] dùng để giải các phương trình vi phân không lệ thuộc thời gian. Phương pháp này gần đây đã được mở rộng để giải các bài toán phụ thuộc thời gian [Mai-Cao and Tran-Cong (2003,2004,2005)].

Các phương pháp số để giải bài toán biên di động đã và đang được các nhà nghiên cứu quan tâm vì tính phức tạp của bản thân các biên di động (moving boundaries). Có hai nhóm phương pháp số được sử dụng cho các bài toán dạng này: Nhóm phương pháp dựa trên lưới di động và nhóm phương pháp sử dụng lưới cố định. Phương pháp Tập mức (level set method) thuộc nhóm phương pháp thứ hai, do Osher and Sethian (1988) đề xuất. Phương pháp này ban đầu được thiết lập để sử dụng với nhóm các phương pháp dựa vào lưới như FDM, FEM, FVM [Sethian (1999), Osher and Fedkiw (2003)]. Trong bài báo này, phương pháp tập mức được triển khai trên nền tảng của phương pháp không lưới IRBFN.

2. CƠ SỞ TOÁN HỌC

2.1. Phương pháp Tập mức

Trong phương pháp Tập mức, biên di động Γ(t) của miền $\Omega \subset \Re^2$ được xem là tập mức không (zero) của một hàm ϕ(**x**,t), gọi là hàm tập mức, trong không gian $\Re^3$

$$\Gamma(t) = \{x \in \Re^2 \mid f(x,t) = 0\} \quad (1)$$

Hàm ϕ(**x**,t) có thể chọn tùy ý với điều kiện phải là hàm trơn. Trong [Sethian (1999), Osher and Fedkiw (2003)] , ϕ(**x**,t) được chọn là hàm khoảng cách sao cho

$$f(x,t) = \begin{cases} +d(x,t), x \in \Omega^+ \\ \quad 0 \qquad x \in \Gamma \\ -d(x,t), x \in \Omega^- \end{cases}$$

(2)

trong đó ***d(x,t)*** là khoảng cách từ điểm ***x*** đến biên di động; $\mathbf{\Omega}^+$ và $\mathbf{\Omega}^-$ là miền bên ngoài và bên trong biên tương ứng. Như vậy, trong phương pháp tập mức, đối tượng nghiên cứu là hàm tập mức ϕ(**x**,t) chuyển động với vận tốc "mở rộng" (extended velocity) **V** thay vì là biên Γ(t) di chuyển với tốc độ F [Osher and Sethian (1988)]. Phương trình chuyển động của hàm tập mức tương ứng với dịch chuyển của biên trong trường vận tốc **V** của môi trường xung quanh như sau:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V \cdot \nabla f = 0$$

(3)

Ở một thời điểm bất kỳ, thông tin về biên di động (vị trí, hình dáng, độ cong, v.v…) có thể được tái tạo từ hàm tập mức ϕ(x,t) bằng cách xác định tập hợp các đoạn trên Γ(t) sao cho ϕ(x,t) triệt tiêu.

Do phương trình (3) được giải bằng phương pháp số nên chỉ sau một bước thời gian ϕ(x,t) sẽ không còn là hàm khoảng cách. Vì vậy việc tái thiết lập hàm tập mức thỏa điều kiện (2) là một bước cần thiết và được thực hiện bằng cách tìm lời giải dừng (steady) cho bài toán sau [Sussman et al. (1994)]

$$\frac{\partial f}{\partial t} = S_e(\bar{f})(1 - |\nabla f|)$$

$$f(x, t=0) = \bar{f}(x)$$

(4a)

ở đó S_ε là một hàm trơn sao cho

$$S_e(\bar{f}) = \frac{\bar{f}}{\sqrt{\bar{f}^2 + e^2}}$$

(4b)

với e là khoảng cách ngắn nhất giữa một điểm bất kỳ với các điểm khác trong miền tính toán. Cơ sở lý thuyết cũng như các ứng dụng tiêu biểu của phương pháp này được trình bày chi tiết trong [Sethian (1999), Osher and Fedkiw (2003)].

2.2. Phương pháp Không lưới IRBFN

Xấp xỉ $\hat{u}(x,t)$ của hàm *u(x,t)* có thể được viết ở dạng tổ hợp tuyến tính của N hàm cơ sở

$$u(x,t) \approx \hat{u}(x,t) = \sum_{i=1}^{N} w_i(t) g_i(x) = g^T(x) w(t)$$

(5)

Trong đó $\mathbf{g}(\mathbf{x})=[g_1(\mathbf{x}),g_2(\mathbf{x}),\ldots,g_N(\mathbf{x})]^T$ là tập các hàm cơ sở cho trước; $\mathbf{w}(t)=[w_1(t),\ldots,w_N(t)]^T$ là tập N trọng số cần tìm. Với một tập hợp M điểm trong miền tính toán và giá trị hàm tương ứng tại các điểm đó tại thời điểm t, $\mathbf{U}(t)=[U_1(t), U_2(t),\ldots,U_M(t)]$, bằng cách thay $w(t) = G^{-1}U(t)$ vào phương trình (4), ta có công thức xấp xỉ hàm

$$\hat{u}(x,t) = g^T(x) G^{-1} U(t)$$

(6)

Trong đó ***G*** là ma trận hệ số được xác định bằng cách áp dụng (5) tại M điểm trong miền tính toán với tập các hàm cơ sở đã cho **g**(**x**). Trong phương trình (6), giá trị hàm tại các điểm nút ***U(t)*** là biến cần tìm. Đạo hàm bậc nhất và bậc hai của hàm u(x,t) được xấp xỉ bằng cách lấy đạo hàm phương trình (6) tương ứng:

$$\hat{u}_{,j}(x,t) = g_{,j}{}^T(x) G^{-1} U(t)$$

(7a)

$$\hat{u}_{,j..l}(x,t) = g_{,j...l}{}^T(x) G^{-1} U(t))$$

(7b)

Nếu như trong phương pháp Kansa (1990a), hàm cơ sở **g**(**x**) trong phương trình (5) được chọn là hàm multiquadrics (MQ) thì trong IRBFN, **g**(**x**) là đạo hàm bậc *k* của hàm multiquadrics hoặc thin plate splines (TPS). Đa số các bài toán trong lĩnh vực Cơ học Chất lỏng Tính toán (Computational Fluid Dynamics - CFD) được giải với k=2. Chi tiết về cở sở lý thuyết của phương pháp IRBFN cũng như ứng dụng của nó để giải các toán phụ thuộc thời gian đã được trình bày trong [Mai-Cao and Tran-Cong (2005)].

Nhược điểm của phương pháp IRBFN nói riêng, và các phương pháp Không lưới nói chung là ma trận hệ số **G** luôn dày đặc trong khi đối với các phương pháp khác như sai phân hữu hạn, phần tử hữu hạn, … thì các ma trận này thường là thưa (sparse). Tuy nhiên do sử dụng các hàm cơ sở bậc cao như multiquadrics hoặc thin plate splines, các phương pháp không lưới có tốc độ hội tụ nhanh nên mật độ điểm cần thiết để giải các bài toán sẽ giảm đáng kể so với các phương pháp truyền thống khác. Trong [Mai-Cao and Tran-Cong (2005)], các bài toán kiểm chứng cho thấy mặc dù với nhược điểm đã nêu, hiệu quả của phương pháp IRBFN vẫn cao hơn nhiều so với một số phương pháp khác khi giải các phương trình đạo hàm riêng phần phụ thuộc thời gian, đặc biệt là khi kết hợp phương pháp này với các phương pháp tích phân thời gian bậc cao như Runge-Kutta bậc 4/5 trong đó độ lớn của bước thời gian ở bước kế tiếp được điều chỉnh dựa vào ước lượng sai số cục bộ ở bước tính hiện thời [Cash and Karp (1990)].

3. PHƯƠNG PHÁP TẬP-MỨC KHÔNG-LƯỚI VÀ CÁC BÀI TOÁN MINH HỌA

Quy trình giải một bài toán biên di chuyển bị động dưới tác dụng của trường vận tốc không đổi bằng phương pháp Tập mức không lưới bao gồm các bước sau:

Bước 1: Xây dựng hàm tập mức ban đầu là hàm khoảng cách thỏa phương trình (2);

Bước 2: Thực hiện dịch chuyển hàm tập mức trong một bước thời gian bằng cách giải phương trình (3);

Bước 3: Tái thiết lập hàm tập mức thỏa phương trình (2) bằng cách tìm lời giải dừng cho phương trình (4a,b). Thông tin về biên di động ở thời điểm đang xét có thể tái tạo bằng giải thuật lấy đường đồng mức zero của hàm $\phi(x,t)$;

Bước 4: Quay lại bước 2 cho bước thời gian kế tiếp hoặc kết thúc quá trình khi thời gian mô phỏng đạt đến giá trị giới hạn cho trước.

Trong bài báo này, các phương trình vi phân ở bước 2 và 3 được giải bằng các lược đồ số dựa trên phương pháp IRBFN mô tả trong [Mai-Cao and Tran-Cong (2005)].

Hai bài toán mô phỏng được trình bày trong mục này nhằm minh họa cho tính hiệu quả và độ chính xác của phương pháp Tập mức Không lưới. Do hai bài toán này không có lời giải giải tích, việc kiểm chứng độ chính xác của các kết quả được thực hiện bằng cách đối chiếu diện tích của bọt ở thời điểm bất kỳ với diện tích của chính nó ở thời điểm ban đầu (tại đó bọt có dạng hình tròn với bán kính cho trước). Đối với bài toán bốn bọt di động trong dòng chảy xoáy, tổng diện tích của cả bốn bọt sẽ được so sánh thay vì diện tích của từng bọt riêng lẽ. Tính hiệu quả của phương pháp được đánh giá dựa vào mức độ phức tạp của giải thuật cho từng bài toán.

3.1. Bài toán bọt xoay tròn

Xét một bọt hình tròn bán kính r=0.15 ban đầu được đặt tại vị trí (0.5,0.7) trong miền chữ nhật [0,1] x [0,1] có trường vận tốc xoáy (u,v) được xác định như sau:

$u=-\sin(\pi x)\cos(\pi y)$

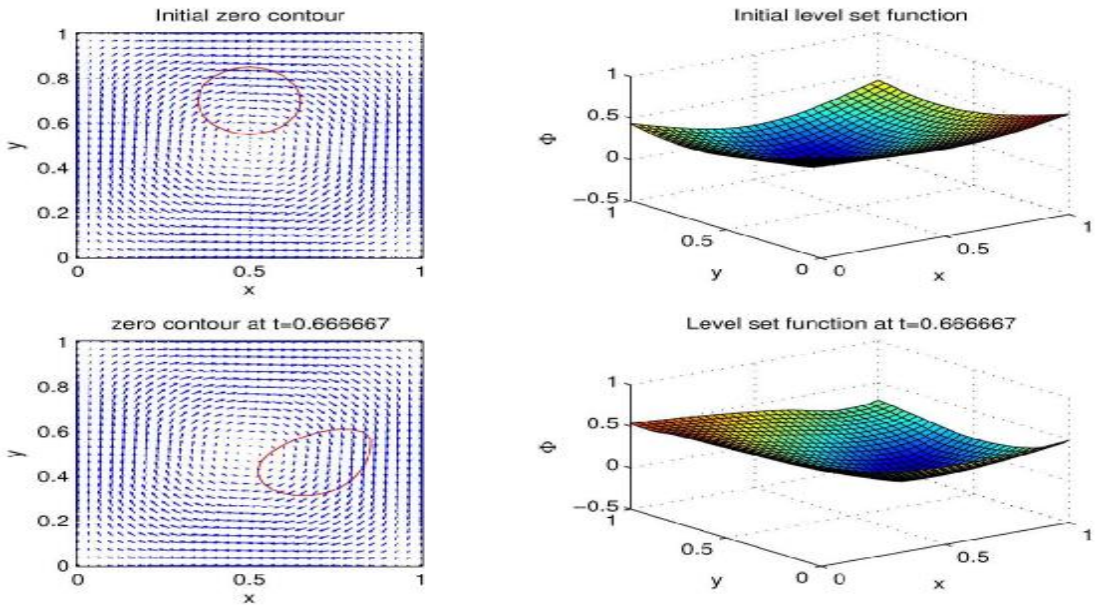
$v=-\cos(\pi x)\sin(\pi y)$

Kết quả mô phỏng ở nhiều thời điểm khác nhau được trình bày trong hình 1. Ở mỗi thời điểm, giải thuật trích đường đồng mức zero của hàm tập mức cho ta biên dạng bọt có dạng đa giác khép kín. Diện tích của hình đa giác này chính là diện tích của bọt ở thời điểm tương ứng. Kết quả tính toán cho thấy tỉ lệ phần trăm thay đổi về diện tích của bọt trong suốt quá trình mô phỏng không vượt quá 2% với mật độ điểm trong miền tính toán là 32 x 32.

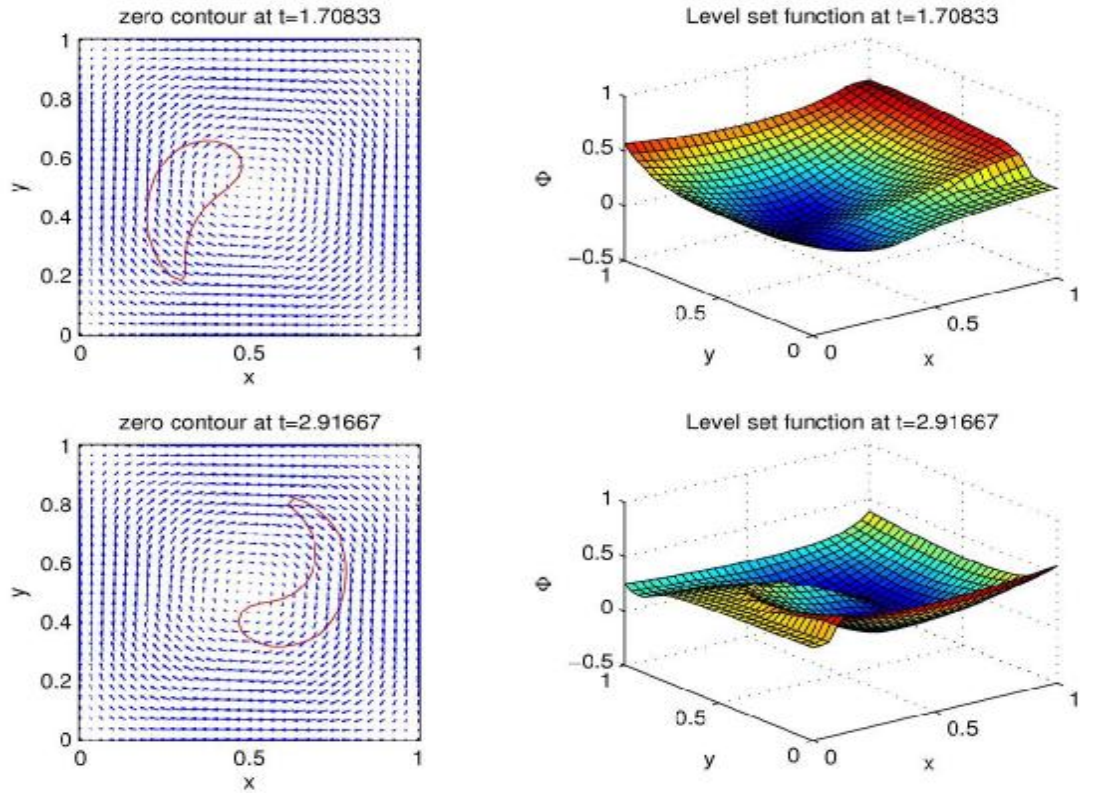
3.2. Bài toán 4 bọt di động trong dòng chảy xoáy

Các bọt ban đầu được bố trí ngẫu nhiên như ở hình 2 trong một trường vận tốc xoáy giới hạn trong miền [-1,1] x [-1,1]. Các hình bên trái của hình 2 thể hiện biên di động là đường đồng mức zero (màu xanh dương, trong cùng) ở các thời điểm ban đầu và t=4.1333. Bên phải là hàm tập mức ở các thời điểm tương ứng trên đó biên dạng của 4 bọt di động được gắn vào. Như vậy thay vì theo dõi sự chuyển động và biến dạng của bản thân 4 bọt di động, ta quan sát hàm tập mức di chuyển theo quy luật (3) và trích đường đồng mức zero của nó để có biên dạng của các bọt ở thời điểm cần quan tâm. Kết quả tính toán cho thấy tỉ lệ phần trăm thay đổi về tổng diện tích của 4 bọt trong suốt quá trình mô phỏng không vượt quá 1.2% với mật độ điểm trong miền tính toán là 64 x 64. Trong bài toán minh họa này, sự kết dính và tách rời giữa các bọt được mô phỏng hoàn toàn theo quy trình 4-bước tổng quát mô tả ở trên mà không cần phải xử lý cho từng trường

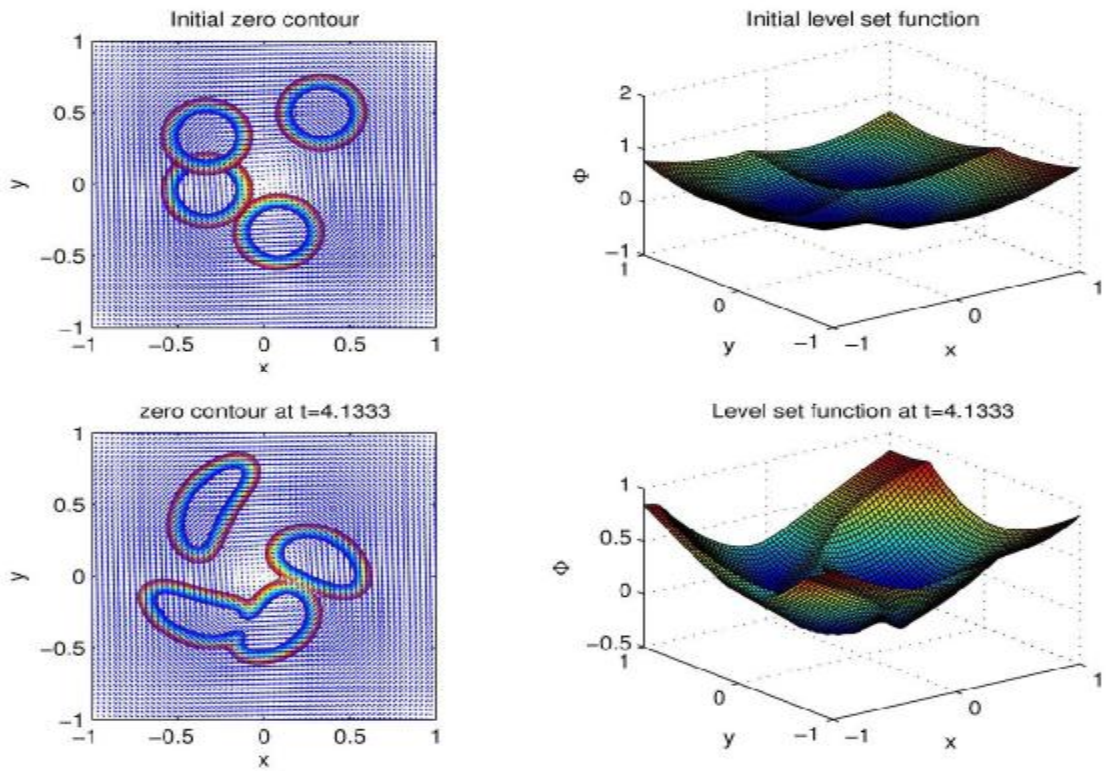
hợp riêng biệt như trong các phương pháp truyền thống khác. Điều này thể hiện tính hiệu quả của phương pháp Tập mức Không lưới khi giải các bài toán biên di động.



Hình 1. Bài toán bọt xoay tròn



Hình 2. Bài toán bọt xoay tròn (tiếp theo)



Hình 3. Bài toán 4 bọt di động trong dòng chảy xoáy

4. KẾT LUẬN & HƯỚNG PHÁT TRIỂN CỦA ĐỀ TÀI

Phương pháp tập mức không lưới được xây dựng trên cơ sở triển khai phương pháp tập mức trên nền không lưới của phương pháp IRBFN. Qua các bài toán mẫu trình bày trong bài báo, phương pháp mới cho thấy độ chính xác và tính hiệu quả cao của nó khi giải các bài toán phụ thuộc thời gian, trong đó mô hình các bọt di động có thể được mở rộng để mô phỏng chế độ dòng chảy của hỗn hợp dung dịch trong ống khai thác. Đây chính là hướng phát triển của đề tài trong đó có xét tới sự phân chia thành những bọt thứ cấp cũng như sự kết hợp giữa các bọt khí trong quá trình đi từ đáy giếng lên bề mặt. Ngoài ra, các mô hình chất lỏng phi Newton (non-Newtonian fluid) cũng sẽ được xem xét để mô tả ứng xử phức tạp của hỗn hợp dung dịch khai thác.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1]. Atluri, S.N. and Shen, S. *The Meshless Local Petrov-Galerkin (MLPG) Method*, Tech Science Press, Encino, USA (2002).

[2]. Chung, T.J. *Computational Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, UK (2002).

[3]. Kansa, E.J. Multiquadrics, *A Scattered Data Approximation Scheme with Applications to Computational Fluid-Dynamics--I. Surface Approximations and Partial Derivative Estimates*, Computers and Mathematics with Applications 19 (1990a), pp. 27-145.

[4]. Kansa, E.JMultiquadrics, *A Scattered Data Approximation Scheme with Applications to Computational Fluid-Dynamics--II. Solutions to Parabolic, Hyperbolic and Elliptic Partial Differential Equations*, Computers and Mathematics with Applications 19, pp.147-161, (1990)

[5]. Mai-Cao, L. and Tran-Cong, T. *Solving Time-Dependent PDEs with a Meshless IRBFN-based Method. In: Alves, C.J.S. and Chen, C.S. and Leitao, V. (eds):* International Workshop on MeshFree Methods, July 21-23, Lisbon, Portugal (2003)

[6]. Mai-Cao, L. and Tran-Cong, T. *Element-Free Simulation for non-Newtonian Flows. In: Atluri, S.N. and Beskos, D.E. and Polyzos, D. (eds):* International Conference on Computational & Experimental Engineering & Sciences, ICCES, July 26-29, Madeira, Portugal (2004).

[7]. Mai-Cao, L. and Tran-Cong, T. *Meshless IRBFN-Based Method for Transient Problems*, Computer Modeling in Engineering & Sciences 7 (2005), pp. 149-171.

[8]. Mai-Duy, N. and Tran-Cong, T. *Numerical Solution of Differential Equations Using Multiquadric Radial Basis Function Networks*, Neural Networks 14 (2001), pp.185-199.

[9]. Mai-Duy, N. and Tran-Cong, T. *Approximation of Function and its Derivatives Using Radial Basis Function Networks*, Applied Mathematical Modelling 27 (2003), pp. 197-220.

[10]. Osher, S. and Fedkiw, R.: *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*, Springer, New York (2003).

[11]. Osher, S. and Sethian, J.A. *Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed: Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulations*, Journal of Computational Physics 79 (1988), pp. 12-49.

[12]. Quarteroni, A. and Valli, A.: *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*, Springer-Verlag, New York Quarteroni, A. and Sacco, R. and Saleri, F.: Numerical Mathematics, Vol. 37 of Texts in Applied Mathematics, Springer-Verlag, New York (2000).

[13]. Sethian, J.A. Level *Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*, Cambridge University Press, New York (1999).

[14]. Sussman, M. and Smereka, P. and Osher, S.J. *A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow*, Journal of Computational Physics, 114 pp.146-159., (1994)

[15]. Tannehill, J.C. and Anderson, D.A. and Pletcher, R.H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Taylor & Francis,USA (1997).

[16]. Cash, J.R., and Karp, A.H. ACM *Transactions on Mathematical Software*, vol. 16, pp. 201–222, (1990)