О предобуславливании итерационных алгоритмов при решении задач электромагнетизма в частотной области*

Д.С. Бутюгин
Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
e-mail: `dm.butyugin@gmail.com`

В работе рассматривается задача моделирования трехмерных электромагнитных полей в частотной области методом конечных элементов. Исследован ряд подходов к построению итерационных алгоритмов и предобуславливателей для них, позволяющих улучшить сходимость итерационных алгоритмов и существенно повысить их эффективность. Проведен ряд численных экспериментов для исследования быстродействия полученных алгоритмов.

Введение

Задача моделирования трехмерных электромагнитных полей в частотной области возникает во многих актуальных приложениях: при исследовании и проектировании различных СВЧ-устройств, при моделировании компонент микроэлектроники, а также в геоэлектроразведке. В работе рассматриваются обобщенные постановки задачи как для электрического поля $\mathbf{E}$, так и для вспомогательных потенциалов $\mathbf{A}$ и V, а также постановка с множителем Лагранжа. Введение иерархических базисных функций высоких порядков для соответствующих конечномерных подпространств пространств H^{rot} и H^1 позволяет получить различные типы матрицы СЛАУ с блочной структурой. Решение таких систем осуществляется итерационными алгоритмами в подпространствах Крылова, рассчитанных на решение комплексных симметричных (неэрмитовых) СЛАУ. Рассмотрен ряд спектрально-эквивалентных предобуславливателей для соответствующих постановок задач. В рамках работы проведено сравнительное экспериментальное исследование быстродействия этих подходов на ряде методических задач, а также затронут вопрос выбора оптимальных параметров данных алгоритмов.

1. Описание математических постановок

Электромагнитное поле в частотной области с гармонической зависимостью от времени при отсутствии внешних электрических объемных зарядов и токов, а также магнитной проводимости может быть описано следующей формой системы уравнений Максвелла:

$$\begin{array}{ll} \nabla \times \mathbf{E} = -i\omega\mu\mathbf{H}, & \nabla \cdot (\varepsilon_r \mathbf{E}) = 0, \\ \nabla \times \mathbf{H} = i\omega\dot{\varepsilon}\mathbf{E}, & \nabla \cdot (\mu_r \mathbf{H}) = 0. \end{array} \tag{1}$$

Здесь $\dot{\varepsilon} = \varepsilon_0\varepsilon_r - i\sigma_e/\omega$, $\mu = \mu_0\mu_r$, i — мнимая единица, $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ — векторы напряженности электрического и магнитного полей соответственно, ω — круговая частота решения, ε_0

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 08-01-00526)

и μ_0 — диэлектрическая и магнитная проницаемости вакуума, ε_r и μ_r — относительная диэлектрическая и магнитная проницаемости среды, а σ_e — электрическая проводимость. Будем полагать, что $\mu_r \equiv const$, а ε_r и σ_e являются кусочно-постоянными.

Решение рассматриваемых уравнений будем искать в ограниченной односвязной области Ω с липшицевой границей $\Gamma = \Gamma_1 \bigcup \Gamma_2$ с внешней нормалью $\mathbf{n}$ к ней, на каждой из частей которой поставлено одно из следующих граничных условий:

$$\mathbf{E} \times \mathbf{n} \ \Big|_{\Gamma_1} = \ \mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}, \qquad \mathbf{H} \times \mathbf{n} \ \Big|_{\Gamma_2} = \ 0, \tag{2}$$

При $\mathbf{E}_0 = 0$ первое условие соответствует идеальному электрическому проводнику, при $\mathbf{E}_0 \neq 0$ — волновому входу, а второе условие — идеальному магнитному проводнику.

Вводятся следующие соболевские пространства:

$$H^1 = \left\{ \varphi \in L^2(\Omega) : \nabla\varphi \in \left[L^2(\Omega)\right]^3 \right\}, \qquad H_0^1 = \left\{ \varphi \in H^1 : \varphi\big|_\Gamma = 0 \right\},$$
$$H^{\mathrm{rot}} = \left\{ \boldsymbol{\psi} \in \left[L^2(\Omega)\right]^3 : \nabla \times \boldsymbol{\psi} \in \left[L^2(\Omega)\right]^3 \right\}, \quad H_0^{\mathrm{rot}} = \left\{ \boldsymbol{\psi} \in H^{\mathrm{rot}} : \mathbf{n} \times \boldsymbol{\psi}\big|_\Gamma = 0 \right\}.$$

Вариационная формулировка задачи поиска электрического поля $\mathbf{E}$ в области Ω с краевыми условиями (2) имеет следующий вид (см. [1], [2]). Пусть функция $\mathbf{E}_\Gamma \in H^{\mathrm{rot}}$ удовлетворяет первому краевому условию (называемому еще основным) в (2). Тогда требуется найти $\mathbf{E} \in H_0^{\mathrm{rot}}$ такое, что выполнено

$$\int\limits_\Omega \frac{1}{\mu_r} \left(\nabla \times \mathbf{E}\right) \cdot \left(\nabla \times \boldsymbol{\psi}\right) d\Omega - k_0^2 \int\limits_\Omega \dot{\varepsilon}_r \left(\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\psi}\right) d\Omega = k_0^2 \int\limits_\Omega \dot{\varepsilon}_r \left(\mathbf{E}_\Gamma \cdot \boldsymbol{\psi}\right) d\Omega -$$
$$- \int\limits_\Omega \frac{1}{\mu_r} \left(\nabla \times \mathbf{E}_\Gamma\right) \cdot \left(\nabla \times \boldsymbol{\psi}\right) d\Omega, \quad \forall \boldsymbol{\psi} \in H_0^{\mathrm{rot}}, \tag{3}$$

Здесь и далее предполагаем, что k_0^2 не является максвелловским собственным числом, т.е. данная задача при $\mathbf{E}_\Gamma \equiv 0$ имеет только нулевое решение.

Вопрос существования и единственности решения данной задачи в общем случае является открытым. Тем не менее, в ряде случаев были найдены достаточные условия существования и единственности решения (см. например [1]).

Вариационная формулировка в случае задачи с множителем Лагранжа записывается следующим образом: найти $\mathbf{E} \in H_0^{\mathrm{rot}}$, $p \in H_0^1$, удовлетворяющие соотношениям

$$\int\limits_\Omega \frac{1}{\mu_r} \left(\nabla \times \mathbf{E}\right) \cdot \left(\nabla \times \boldsymbol{\psi}\right) d\Omega - k_0^2 \int\limits_\Omega \dot{\varepsilon}_r \left(\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\psi}\right) d\Omega + \int\limits_\Omega \varepsilon_r \left(\nabla p \cdot \boldsymbol{\psi}\right) d\Omega =$$
$$= k_0^2 \int\limits_\Omega \dot{\varepsilon}_r \left(\mathbf{E}_\Gamma \cdot \boldsymbol{\psi}\right) d\Omega - \int\limits_\Omega \frac{1}{\mu_r} \left(\nabla \times \mathbf{E}_\Gamma\right) \cdot \left(\nabla \times \boldsymbol{\psi}\right) d\Omega, \quad \forall \boldsymbol{\psi} \in H_0^{\mathrm{rot}}, \tag{4}$$

$$\int\limits_\Omega \varepsilon_r \left(\mathbf{E} \cdot \nabla\varphi\right) d\Omega = - \int\limits_\Omega \varepsilon_r \left(\mathbf{E}_\Gamma \cdot \nabla\varphi\right) d\Omega, \quad \forall \varphi \in H_0^1. \tag{5}$$

Рассмотрим теперь постановку задачи для потенциалов. Используются скалярный потенциал V и интегрированный по времени векторный потенциал $\mathbf{A}$, определяемые соотношениями (см. [4])

$$\mathbf{B} = \frac{i}{\omega} \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = \mathbf{A} + \nabla V. \tag{6}$$

В этом случае вариационная задача для потенциалов $\mathbf{A}$ и V выглядит следующим образом: найти $\mathbf{A} \in H_0^{\mathrm{rot}}$ и $V \in H_0^1$ такие, что

$$\int_\Omega \frac{1}{\mu_r} (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})\, d\Omega - k_0^2 \int_\Omega \dot{\varepsilon}_r (\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\psi})\, d\Omega - k_0^2 \int_\Omega \dot{\varepsilon}_r (\nabla V \cdot \boldsymbol{\psi})\, d\Omega =$$

$$= k_0^2 \int_\Omega \dot{\varepsilon}_r (\mathbf{E}_\Gamma \cdot \boldsymbol{\psi})\, d\Omega - \int_\Omega \frac{1}{\mu_r} (\nabla \times \mathbf{E}_\Gamma) \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})\, d\Omega, \quad \forall \boldsymbol{\psi} \in H_0^{\mathrm{rot}},$$

$$- k_0^2 \int_\Omega \dot{\varepsilon}_r ((\mathbf{A} + \nabla V) \cdot \nabla \phi)\, d\Omega = k_0^2 \int_\Omega \dot{\varepsilon}_r (\mathbf{E}_\Gamma \cdot \boldsymbol{\psi})\, d\Omega, \quad \forall \phi \in H_0^1 \quad (7)$$

Отметим, что условие калибровки для потенциалов (например, условие $\mathrm{div} A = 0$) не вводится, поэтому решение данной задачи определено с точностью до градиента скалярной функции. Доказана теорема, что задачи (3) и (7) разрешимы или неразрешимы одновременно, при этом каждому решению задачи (3) можно взаимно однозначно сопоставить некоторый класс эквивалентности решений задачи (7) (подробнее см. в [5]).

2. Метод конечных элементов

Для построения аппроксимации будем использовать неструктурированные тетраэдральные сетки в расчетной области. Рассматривается соответствующее разбиение расчетной области Ω на непересекающиеся тетраэдральные элементы $\Omega = \bigcup\limits_k \Omega_k$. В данной работе используются иерархические векторные и скалярные конечные элементы Неделека первого типа [6] различных порядков. Предложенные в [7] конечные элементы являются иерархическими и могут быть представлены в следующем виде. H^1-конформное конечномерное подпространство $\mathcal{V}_l$ пространства H^1 с базисными функциями порядка не выше l записывается как

$$\mathcal{V}_l = \tilde{\mathcal{V}}_1 \oplus \ldots \oplus \tilde{\mathcal{V}}_l, \tag{8}$$

где $\tilde{\mathcal{V}}_i$ — инкрементальные скалярные подпространства с базисными функцями порядка ровно i. Аналогично, конечномерное H^{rot}-конформное подпространство $\mathcal{W}_l$ пространства H^{rot} с базисными функциями порядка не выше l имеет вид

$$\mathcal{W}_l = \tilde{\mathcal{W}}_1 \oplus \ldots \oplus \tilde{\mathcal{W}}_l, \tag{9}$$

где $\tilde{\mathcal{W}}_i$ — инкрементальные векторные подпространства с базисом порядка i, причем

$$\tilde{\mathcal{W}}_1 \;=\; \tilde{\mathcal{A}}_1, \qquad \tilde{\mathcal{W}}_i \;=\; \tilde{\mathcal{A}}_i \oplus \nabla \tilde{\mathcal{V}}_i,\ i > 1, \tag{10}$$

Можно отметить, для $\tilde{\mathcal{W}}_1$ также оказывается возможным построить разбиение вида $\tilde{\mathcal{W}}_1 = \bar{\mathcal{A}} \oplus \nabla \tilde{\mathcal{V}}_1$ при помощи процедуры выделения ко-дерева графа, описанной в [8].

Подпространства $\mathcal{V}_{l,0}$ и $\mathcal{W}_{l,0}$ с нулевыми следами на границе вводятся естественным образом. Пусть $\boldsymbol{\psi}_i$ и φ_i — базисы пространств $\mathcal{W}_l$ и $\mathcal{V}_l$, соответствующие выбранному порядку l, а $\boldsymbol{\psi}_i^0$ и φ_i^0 — базисы подпространств $\mathcal{W}_{l,0}$ и $\mathcal{V}_{l,0}$ соответственно. Также введем $\boldsymbol{\psi}_i^\Gamma$ — базис подпространства $\mathcal{W}_l \setminus \mathcal{W}_{l,0}$. Обозначим $n = \dim \mathcal{W}_{l,0}$, $m = \dim \mathcal{V}_{l,0}$ и $k =$

$\dim \mathcal{W}_l \setminus \mathcal{W}_{l,0}$. Введем матрицы соответствующих билинейных форм:

$$\begin{aligned} M_{i,j} &= \int\limits_{\Omega} \dot{\varepsilon}_r \boldsymbol{\psi}_j^0 \cdot \boldsymbol{\psi}_i^0 d\Omega, & A_{i,j} &= \int\limits_{\Omega} \frac{1}{\mu_r} \left(\nabla \times \boldsymbol{\psi}_j^0\right) \cdot \left(\nabla \times \boldsymbol{\psi}_i^0\right) d\Omega, \\ L_{i,j} &= \int\limits_{\Omega} \dot{\varepsilon}_r \nabla \varphi_j^0 \cdot \nabla \varphi_i^0 d\Omega, & B_{i,j} &= \int\limits_{\Omega} \dot{\varepsilon}_r \boldsymbol{\psi}_j^0 \cdot \nabla \varphi_i^0 d\Omega, \end{aligned} \tag{11}$$

Приближенное решение задачи (3) ищется в виде $\mathbf{E} = \sum_{j=1}^n u_j \boldsymbol{\psi}_j^0$, тогда

$$\left[A - k_0^2 M\right] u = f, \tag{12}$$

где

$$f_i = \sum_{j=1}^k u_j^\Gamma \int\limits_{\Omega} \left[k_0^2 \dot{\varepsilon}_r \boldsymbol{\psi}_j^\Gamma \cdot \boldsymbol{\psi}_i^0 - \frac{1}{\mu_r} \left(\nabla \times \boldsymbol{\psi}_j^\Gamma\right) \cdot \left(\nabla \times \boldsymbol{\psi}_i^0\right)\right] d\Omega, \tag{13}$$

а u^Γ — вектор коэффициентов разложения функции $\mathbf{E}_\Gamma$ по функциям $\boldsymbol{\psi}_i^\Gamma$.

Рассмотрим теперь формулировку с множителем Лагранжа. Полагая $p = \sum_{j=1}^m p_j \varphi_j^0$, имеем итоговую систему линейный алгебраических уравнений (СЛАУ) вида

$$\begin{bmatrix} A - k_0^2 M & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}, \tag{14}$$

где

$$g_i = -\sum_k u_{\Gamma,k} \int\limits_{\Omega} \varepsilon_r \boldsymbol{\psi}_k^\Gamma \cdot \nabla \varphi_i^0 d\Omega. \tag{15}$$

Аналогично в случае формулировки для потенциалов $\mathbf{A}$ и V, полагая разложение $\mathbf{A} = \sum_{j=1}^n w_j \boldsymbol{\psi}_j^0$ и $V = \sum_{j=1}^m q_j \varphi_j^0$, получаем следующую СЛАУ:

$$\begin{bmatrix} A - k_0^2 M & -k_0^2 B^T \\ -k_0^2 B & -k_0^2 L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w \\ q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}. \tag{16}$$

Отметим, что в общем случае вопросы сходимости и устойчивости получаемых аппроксимаций являются открытыми. Тем не менее, для случая формулировки с множителем Лагранжа в отсутствие электрической проводимости выполнено дискретное inf-sup условие [9], [1]: существует константа $C > 0$ такая, что:

$$\inf_{0 \neq q \in \mathbb{R}^m} \sup_{0 \neq v \in \ker A} \frac{(Bv, q)}{|v|_M |q|_L} \geq C.$$

Отсюда следует, что задача (4)–(5) поставлена корректно и система (14) имеет единственное решение при достаточно малом шаге сетки.

3. Итерационное решение СЛАУ

После конечно-элементной аппроксимации вариационной задачи мы получаем систему линейных алгебраических уравнений с комплексной симметричной разреженной матрицей. Общий вид системы в случае формулировок задачи с множителем Лагранжа и формулировки задачи для потенциалов следующий:

$$\begin{bmatrix} A - k_0^2 M & \delta B^T \\ \delta B & \eta L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}. \tag{17}$$

Здесь и далее за u и p обозначены компоненты вектора неизвестных, за f и g — компоненты вектора правой части, а δ и η — некоторые константы. Матрицу данной системы будем обозначать как $\mathcal{K}$. Отметим также, что если воспользоваться альтернативным представлением $\tilde{\mathcal{W}}_1 = \bar{\mathcal{A}} \oplus \nabla\tilde{\mathcal{V}}_1$, то систему (12) также можно свести к виду (17).

Данные системы уравнений можно решать при помощи итерационных методов в подпространствах Крылова, таких как метод сопряженных ортогональных сопряженных направлений (COCG), симметричный метод квазиминимальных невязок (QMRSym), которые ориентированы на решение комплексных симметричных (неэрмитовых) СЛАУ. Помимо этого, в случае отсутствия проводимости среды и действительной матрице СЛАУ можно использовать метод минимальных невязок (MINRES), а в общем случае — метод обобщенных минимальных невязок (GMRES) [10].

Для ускорения сходимости итерационных алгоритмов применялись различные предобуславливатели. Один из использовавшихся вариантов — предобуславливатель последовательной симметричной верхней релаксации (SSOR) в модификации Айзенштата [11]. Второй предлагаемый вариант — предобуславливатель

$$\mathcal{P}_{M,L} = \begin{bmatrix} A + (\beta - k_0^2)M & 0 \\ 0 & \gamma L \end{bmatrix}, \tag{18}$$

с некоторыми константами β и γ. Тогда предобусловленная матрица $\mathcal{P}_{M,L}\mathcal{K}$ будет иметь n собственных чисел вида

$$\lambda_i = \frac{\mu_i - k_0^2}{\mu_i - k_0^2 + \beta}, \tag{19}$$

где μ_i — максвелловские собственные числа дискретной задачи $Av_i = \mu_i M v_i$. Кроме того, матрица будет иметь два дополнительных собственных числа кратности m каждое. Отсюда следует, что если $|\mu_i - k_0^2| > 0$, то при достаточно мелокой сетке $|\lambda_i| > c > 0$ для некоторой константы c, зависящей только от параметров среды и констант δ и η, то есть предобуславливатель является спектрально эквивалентным.

4. Численные эксперименты

Рассматриваются примеры вычисления поля в волноводе с кусочно-однородной средой. В качестве расчетной области был выбран волновод, представляющий собой параллелепипед $\Omega = [0,a] \times [0,b] \times [0,c]$, $a = 72$ см, $b = 34$ см, $c = 200$ см. Граничные условия: при $z = c$ — условие волнового входа $\mathbf{n} \times \mathbf{E} = \mathbf{n} \times \mathbf{E}_0$, где $\mathbf{E}_0 \equiv const$, на остальных границах — условие идеального проводника $\mathbf{E}_0 = \mathbf{0}$. Частота излучения f бралась равной 1 ГГц. В этом случае известно аналитическое решение

$$\mathbf{E} = \mathbf{e}_y \frac{\sin \gamma z}{\sin \gamma c} \cdot e^{-i\omega t},$$

используемое для контроля порядка сходимости конечноэлементных решений.

Для построения сетки расчетная область делилась по каждому из измерений на некоторое число шагов, и получающиеся параллелепипеды делились на тетраэдры. В данном тестовом наборе использовались следующие квазиравномерные разбиения сетки: $4 \times 2 \times 12$, $8 \times 4 \times 20$, $14 \times 6 \times 40$ и $28 \times 14 \times 80$.

В таблице в качестве примера приведены результаты тестирования решателя при различных значениях $\beta = \gamma^{-1}$ на задаче в формулировке с множителем Лагранжа. В качестве решателя использовался PMINRES с предобуславливателем $\mathcal{P}_{M,L}^{-1}$, для обращения матриц $A+(\beta-k_0^2)M$ и L использовался PCOCG с предобуславливателем SSOR в модификации Айзенштата (параметры релаксации были выбраны равными 1 для первой матрицы и 1.6 — для второй). Критерий остановки итераций — уменьшение нормы невязки в ε раз: $|r|<\varepsilon|f|$, $r=f-Au$. Для внешних итераций $\varepsilon=10^{-7}$, для внутренних — $\varepsilon=10^{-8}$. В таблице указаны максимальная относительная ошибка электрического поля в барицентрах тертаэдров δE, число внешних итераций $N_{\mathcal{K}}$ и общее время работы t в секундах.

Сетка	δE	$\beta=1.0$		$\beta=0.1$		$\beta=0.01$	
		$N_{\mathcal{K}}$	t''	$N_{\mathcal{K}}$	t''	$N_{\mathcal{K}}$	t''
1, $l=1$	1.0E-01	69	0.04	38	0.02	17	0.02
2, $l=1$	5.7E-02	106	0.4	45	0.3	18	0.2
3, $l=1$	3.3E-02	122	3.2	45	2	18	2.1
4, $l=1$	1.5E-02	130	59	45	47	17	52
1, $l=2$	1.3E-02	95	1.8	41	0.5	17	0.2
2, $l=2$	4.7E-03	119	22	44	6.5	17	3.9
3, $l=2$	1.2E-03	130	148	45	47	18	44

Т а б л и ц а 1. Формулировка с множителем Лагранжа, использование $\mathcal{P}_{M,L}$

Список литературы

[1] Monk P. Finite element methods for Maxwell's equations. Oxford University Press, 2003.

[2] Соловейчик Ю. Г., Рояк М. Э., Персова М. Г. Метод конечных элементов для решения скалярных и векторных задач. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2007.

[3] Greif C., Schötzau D. Preconditioners for the discretized time-harmonic Maxwell equations in mixed form // Numer. Linear Algebra Appl. 2007. Vol. 14. Pp. 281–297.

[4] Dyczij-Edlinger R., Biro O. A joint vector and scalar potential formulation for driven high frequency problems using hybrid edge and nodal finite elements // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 1996. Vol. 44, No 1. Pp. 15–23.

[5] Бутюгин Д. С. О решении комплексного уравнения Гельмгольца в смешанной постановке для задач электромагнетизма // Труды конференции молодых ученых. 2009. Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН. С. 22–33.

[6] Nédélec J. C. Mixed finite elements in $\mathbb{R}^3$ // Numer. Math. 1980. Vol. 35, No 3. Pp. 315–341.

[7] Ingelström P. A new set of $H(curl)$-conforming hierarchical basis functions for tetrahedral meshes // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 2006. Vol. 54, No 1. Pp. 106–114.

[8] Albanese R., Rubinacci G. Magnetostatic field computations in terms of two-component vector potentials // International Journal for Numerical Methods. 1990. Vol. 29. Pp. 515–532.

[9] Hiptmair R. Finite elements in computational electromagnetism // Acta Numerica. 2002. Pp. 237–339.

[10] Greenbaum A. Iterative Methods For Solving Linear Systems. SIAM, 1997.

[11] Ильин В. П. Методы и технологии конечных элементов. Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2007.