

Решение эллиптической краевой задачи с контрастными коэффициентами многომасштабным методом конечных элементов

Кутищева А.Ю.

Новосибирский государственный технический университет

Введение

Активное развитие многомасштабных методов началось с середины 1990-х годов после выхода работы [10]. Многомасштабные методы численного моделирования являются молодой отраслью вычислительной математики, поэтому исследования в этой области очень актуальны. Многие статьи по данной тематике или носят теоретический характер [10] или посвящены решению модельных задач [1, 9]. Среди приложений можно выделить задачи течения жидкости в пористых средах [3, 7], определения электромагнитных [2], тепловых [4], упругих [12] характеристик композитных материалов, молекулярной динамики [5], гомогенизации кристаллов [8].

Многомасштабные задачи могут быть разделены на два класса:

- определение эффективных характеристик среды [6, 9] (решение обратной задачи),
- решение задачи с микровключениями [10] (оценка решения, учитывающего микроособенности задачи).

Лабораторные и натурные эксперименты показали, что гетерогенная среда в объемах, превышающих одно включение, обладает устойчивыми физическими характеристиками, в общем случае отличающимися от характеристик отдельных компонент.

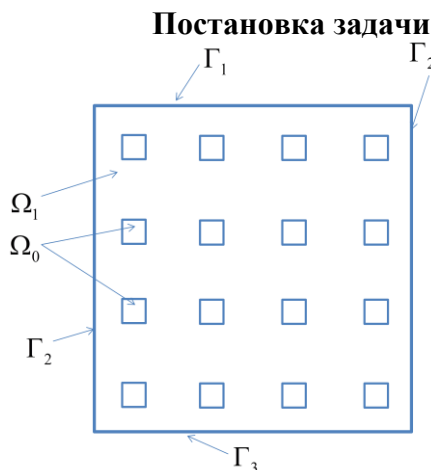
В настоящее время при исследовании физических свойств гетерогенных сред используются многомасштабные конечноэлементные методы [1,5,6,9], построенные на декомпозиции пространства решений на сумму двух подпространств: «грубого», отвечающего за эффективные свойства среды, и «мелкого», позволяющего достаточно точно учесть свойства включений.

Однако до сих пор нет общей теории эффективной среды. Часто сложно исследовать естественные материалы, поэтому на начальном этапе рассматриваются искусственные материалы, свойства и структура которых заранее известны. В качестве гетерогенной среды будем рассматривать материал, состоящий из основной среды и мелкомасштабных включений разной геометрии с контрастными электрическими свойствами.

Все объекты моделирования можно разделить на две группы:

- естественные материалы (например, горные породы),
- искусственные материалы.

Целью работы является исследование методов определения эффективных характеристик многомасштабных сред. В данной работе рассматривается модельная двумерная задача по определению эффективного электрического сопротивления (ρ) или проводимости ($\frac{1}{\rho}$) объекта с контрастными микровключениями. Рассматривается стационарная эллиптическая краевая задача.



Область моделирования, рисунок 1. При этом размеры и количество включений могут меняться.

Решается однородное эллиптическое уравнение:

$$-\operatorname{div} \cdot (\sigma \operatorname{grad} u) = 0, \quad u \in \Omega. \quad (1)$$

Полагаем, что на границах Γ_2 заданы однородные вторые краевые условия; на границах Γ_1, Γ_3 заданы значения потенциалов, т.е. первые краевые условия:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} \right|_{\Gamma_2} = 0, \quad u|_{\Gamma_1} = u_{g_1}, \quad u|_{\Gamma_3} = u_{g_3}. \quad (2)$$

где \vec{n} - единичная внешняя нормаль.

Рисунок 1 – Область моделирования

Электропроводность определяется следующим образом:

$$\sigma(x, y) = \begin{cases} \sigma_0 \frac{1}{\text{Ом}\cdot\text{м}}, & (x, y) \in \Omega_0 \text{ (включение)} \\ \sigma_1 \frac{1}{\text{Ом}\cdot\text{м}}, & (x, y) \in \Omega_1 \text{ (скелет)} \end{cases} \quad (3)$$

Вариационная постановка

Введем следующие гильбертовы пространства:

$$H^1(\Omega) = \{u, v \in L^2(\Omega) : (u(x), v(x)) = \int_{\Omega} u(x)v(x) d\Omega, \forall x \in \Omega\} \quad (4)$$

$$H_0^1(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) : v|_{\partial\Omega} = 0\} \quad (5)$$

Абстрактная вариационная постановка выглядит следующим образом.

Определить $u \in V$ такую, что

$$a(u, v) = F(v) \quad \forall v \in V, \quad (6)$$

где V - гильбертово пространство, $a(\cdot, \cdot)$ - непрерывная, коэрцитивная билинейная форма на пространстве V , $F(\cdot)$ - непрерывная линейная форма на V .

Тогда для эллиптической краевой задачи (1) с краевыми условиями (2) вариационная постановка (6) примет вид:

Найти $u \in H_0^1(\Omega) + u_0(\partial\Omega)$ такую, что $\forall v \in H_0^1(\Omega)$ выполняется

$$\int_{\Omega} \sigma(x) \nabla u(x) \nabla v(x) d\Omega = 0 \text{ на } \Omega \quad (7)$$

Рассмотрим разбиение \mathcal{R}^h в области Ω элемент $K \in \mathcal{R}^h$ - прямоугольник со сторонами параллельными осям координат.

Введем пространства

$$V^h(\Omega) = \text{span}\{\phi_i^K : i = 1, \dots, 4; K \in \mathcal{R}^h\} \subset H_0^1(\Omega) \quad (8)$$

$$W^h(\Omega) = \text{span}\{\phi_i^{0,K} : i = 1, \dots, 4; K \in \mathcal{R}^h\} \subset H_0^1(\Omega) \quad (9)$$

Тогда вариационная постановка для однородной эллиптической краевой задачи (1) примет вид:

$$\text{Найти } u \in V^h(\Omega) + u_0(\partial\Omega) \text{ такую, что } \forall v \in W^h(\Omega) \text{ выполняется} \quad (10)$$

$$\int_{\Omega} \sigma(x) \nabla u^h(x) \nabla v^h(x) d\Omega = 0 \text{ на } \Omega$$

Многомасштабный метод конечных элементов

Многомасштабный метод конечных элементов основан на том, что многомасштабная структура решения отражается в локализованных базисных функциях. Эти базисные функции содержат основную многомасштабную информацию и связаны через глобальную формулировку, обеспечивающую верное приближение к решению.

Реализация многомасштабного метода конечных элементов состоит из двух основных этапов:

- Формирование специального многомасштабного базиса.
- Построение общей вариационной формулировки с использованием многомасштабных базисных функций.

Отметим, что формирование специального многомасштабного базиса для каждого макроэлемента происходит независимо. Поэтому на данном этапе можно провести распараллеливание алгоритма, что существенно уменьшает время решения задачи [10, 15].

Общий алгоритм метода выглядит следующим образом:

Выбрать макромасштабную (грубую) сетку, исходя из информации о мелкомасштабных включениях.

Для конечного элемента макромасштабной сетки:

- | Для каждой вершины i супер-элемента K строим
- | “базисную функцию” ϕ_i^K , как решение уравнения:
- | $-\text{div}(\sigma \text{grad } \phi_i^K) = 0$ с краевыми условиями: $\phi_i^K|_{\partial\Omega} = \mu_i$ (11)

Пока не рассмотрим все элементы.

Собрать матрицу жесткости и вектор правой части для макромасштабной сетки.

Решить СЛАУ.

Локальные многомасштабные функции должны обладать следующими свойствами:

- точно учитывать внутреннюю структуру макроэлемента из разбиения \mathfrak{R}_h ,
- обеспечивать гладкость глобальных базисных функций на грубой сетке на границах конечных элементов $K \in \mathfrak{R}_h$.

Чаще всего выделяют два способа построения краевых условий [9,15]:

- линейные: в качестве μ_k из задачи (11) выбирается простая линейная на границе ∂K функция (рисунок 2);
- осциллирующие (рисунок 3): для нахождения μ_k решается дополнительная задача по каждой из границ $\partial\Omega_K$: $L\mu_k = 0$ на $\partial\Omega_K$, $\mu_k|_{\Gamma} = \xi_k$.

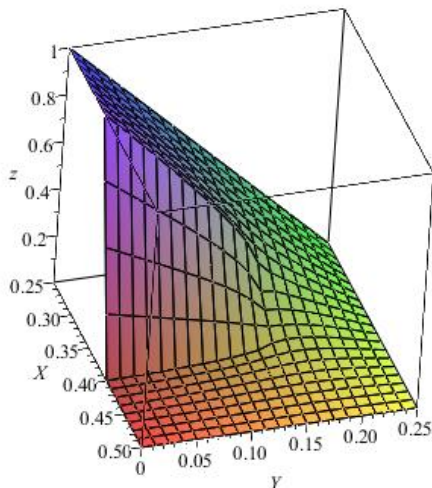


Рисунок 2 – Многомасштабная базисная функция с осциллирующими краевыми условиями (включение проходит через границу макроэлемента).

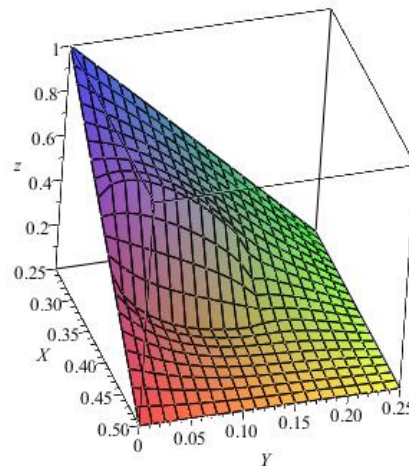


Рисунок 3 – Многомасштабная базисная функция с линейными краевыми условиями (включение не проходит через границу макроэлемента).

Очевидно, что использование линейных краевых условий оправдано лишь в том случае, когда граница макроэлемента не пересекает включения, т.е. проходит через однородную среду, в иных случаях необходимо использовать осциллирующие краевые условия, т.к. они позволяют более точно учесть неоднородность.

Вычисление элементов матрицы СЛАУ

В общем случае для вычисления интегралов в правой части уравнения (10) удобно использовать численное интегрирование, но так как в данном случае в качестве разбиения взяты прямоугольные элементы и используются классические билинейные функции, то элементы матрицы СЛАУ можно вычислить аналитически.

С учетом $u_h = \sum_{i=1}^N u_i \phi_i^{global}$ и конечноэлементного разбиения $\mathfrak{R}_h = \{K\}$ перепишем глобальную постановку в виде системы линейных алгебраических уравнений в матричном виде:

$$A^{global} u = b^{global} \quad (12)$$

Компоненты матрицы и правая часть могут быть определены следующим образом:

$$A_{ij}^{global} = \begin{cases} \sum_K \int_{\Omega_K} \sigma(x) \nabla \phi_i^{global}(x) \cdot \nabla \phi_j^{0,global}(x) d\Omega_K, & x \in \Omega_K, i \in N \setminus N^0 \\ \delta_{ij}, & i \in N^0 \end{cases} \quad (13)$$

$$b_i^{global} = \begin{cases} 0, & i \in N \setminus N^0 \\ u_g(x_i), & i \in N^0 \end{cases}, \quad (14)$$

где N^0 - узлы грубой сетки, в которых заданы первые краевые условия. Под $u_g(x_i)$ будем понимать значение искомой функции на границе области моделирования, где задано первое краевой условие.

Введем матрицу A^{loc} как локальную матрицу, соответствующую конечному элементу $K \in \mathfrak{R}_h$. Для того, чтобы определить локальные функции на элементе введем локальную нумерацию, представленную на рисунке 4.

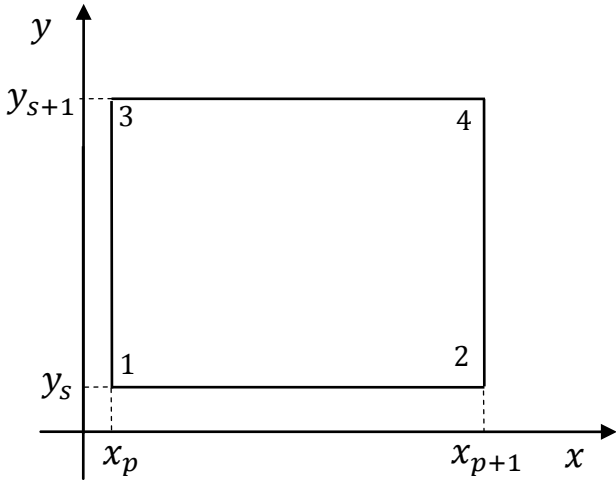


Рисунок 4 – Локальная нумерация

узлов в конечном элементе.

Вычисление элементов матрицы A будем проводить в идеологии двухуровневых методов [11, 13]. Каждая локальная функция $\phi_z^{k,loc}$, $z = \overline{1,4}$, определенная на элементе k мелкого разбиения текущего макроэлемента K может быть представлена в виде линейной комбинации базисных функций, определенных на всем макроэлементе K :

$$\phi_z^{k,loc} = \sum_{l=1}^4 \beta_l^{k,z} \phi_l^{0,K}, \quad z = \overline{1,4}. \quad (16)$$

Тогда и локальная многомасштабная функция ϕ_i может быть определена как

$$\phi_i^K = \sum_{l=1}^4 \gamma_l^i \phi_l^{0,K}, \quad i = \overline{1,4} \quad (17)$$

Для нахождения γ_l^i , $l = \overline{1,4}$ из (17) подставим в (15) представление $\phi_i^K = \sum_{i=1}^{N_K} q_i \phi_i$:

$$A_{ij}^{loc} = \sigma \int_{\Omega_K} \nabla \left\{ \sum_{w=1}^{N_K} q_w^i \phi_w(x) \right\} \cdot \nabla \phi_j^{0,K}(x) d\Omega_K, \quad x \in \Omega_K \quad (18)$$

С учетом мелкого разбиения $\mathfrak{Z}_h^K = \{K_{fine}\}$ на макроэлементе:

$$A_{ij}^{loc} = \sigma \sum_{K_{fine}=1}^{M_K} \int_{\Omega_{K_{fine}}} \nabla \left\{ \sum_{w=1}^{N_K} q_w^i \phi_w(x) \right\} \cdot \nabla \phi_j^{0,K}(x) d\Omega_{K_{fine}}, \quad x \in \Omega_{K_{fine}} \quad (19)$$

где M_K - количество элементов в разбиении \mathfrak{S}_h^K .

Так как на каждом элементе K_{fine} ненулевые только четыре базисные функции, то перепишем соотношение.

$$A_{ij}^{loc} = \sigma \sum_{K_{fine}=1}^{M_K} \int_{\Omega_{K_{fine}}} \nabla \left\{ \sum_{v=1}^4 q_v^{K_{fine},i} \phi_v^{K_{fine},loc}(x) \right\} \cdot \nabla \phi_j^{0,K}(x) d\Omega_{K_{fine}}, \quad x \in \Omega_{K_{fine}} \quad (20)$$

Учитывая представление (16):

$$A_{ij}^{loc} = \sigma \sum_{r=1}^4 \left\{ \left[\sum_{K_{fine}=1}^{M_K} \sum_{v=1}^4 q_v^{K_{fine},i} \beta_r^{K_{fine},v} \right] \int_{\Omega_K} \nabla \phi_r^0(x) \cdot \nabla \phi_j^0(x) d\Omega_K \right\}, \quad x \in \Omega_K \quad (21)$$

Таким образом, получаем соотношение для нахождения $\gamma_l^i, l = \overline{1,4}$ из (17):

$$\gamma_l^i = \sum_{K_{fine}=1}^{M_K} \sum_{v=1}^4 q_v^{K_{fine},i} \beta_l^{K_{fine},v}, \quad l = \overline{1,4}, i = \overline{1,4} \quad (22)$$

Так как получили, что матрица A^{loc} состоит из сумм интегралов от произведения градиентов стандартных базисных функций, то удобно воспользоваться уже известными соотношениями для матрицы жесткости [14] (с учетом введенных обозначений на рисунке 4):

$$G_{ij}^{loc} = \sigma \int_{x_p}^{x_{p+1}} \int_{y_s}^{y_{s+1}} \nabla \phi_i^0(x, y) \cdot \nabla \phi_j^0(x, y) dy dx \quad (23)$$

С учетом (23) получаем выражение для вычисления элемента матрицы: $A_{ij}^{loc} = \sum_{l=1}^4 \gamma_l^i \cdot G_{lj}^{loc}$

Результаты моделирования

На рисунке 2 приведено распределение плотности тока и скалярного потенциала в результате моделирования электрического поля в образце (рисунок 1) размером 1×1 м, имеющим 4×4 включений размером 0.15×0.15 м.

Электропроводность основной среды и включений равна $1 \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}}$ и $10^{-3} \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}}$ соответственно.

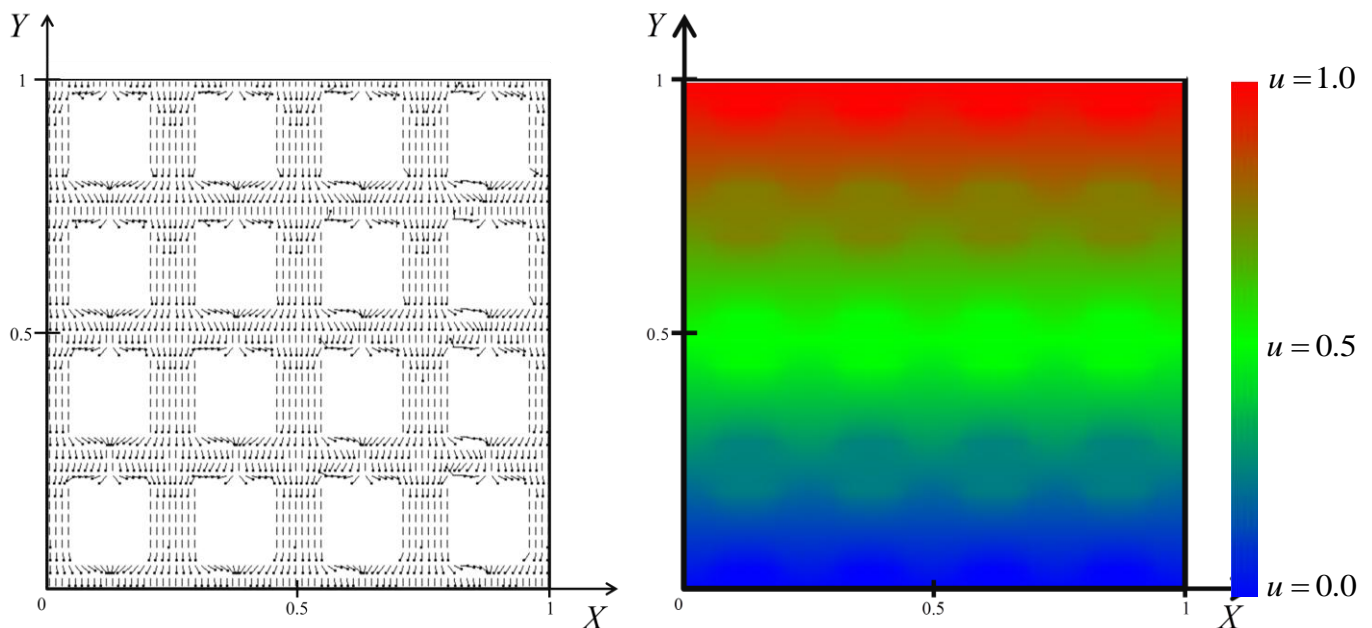


Рисунок 5 – Распределение плотности тока и скалярного потенциала.

Относительная погрешность скалярного потенциала (в евклидовой норме), полученного многомасштабным методом конечных элементов, от точного решения, за которое принимается

решение, полученное классическим МКЭ на мелкой сетке, составляет 8.51E-04. Таким образом, можно сделать вывод о том, что многомасштабное решение достаточно близко к точному.

Для исследования зависимости эффективного сопротивления от количества включений рассмотрим образец (рисунок 1) размером $1 \times 1 \text{ м}$, имеющим включения размером $0.05 \times 0.05 \text{ м}$. Электропроводность основной среды и включений равна $1 \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}}$ и $\sigma_0 \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}}$ соответственно. Количество включений (общее и отдельно по каждой из координат) и отношение площади всех включений к площади расчетной области приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Соответствие количества включений и занимаемой площади

Количество включений	Занимаемая площадь, %
4x4=16	4.00
5x5=25	6.25
6x6=36	9.00
7x7=49	12.25
8x8=64	16.00
9x9=81	20.25
10x10=100	25.00
11x11=121	30.25
12x12=144	36.00
13x13=169	42.25
14x14=196	49.00

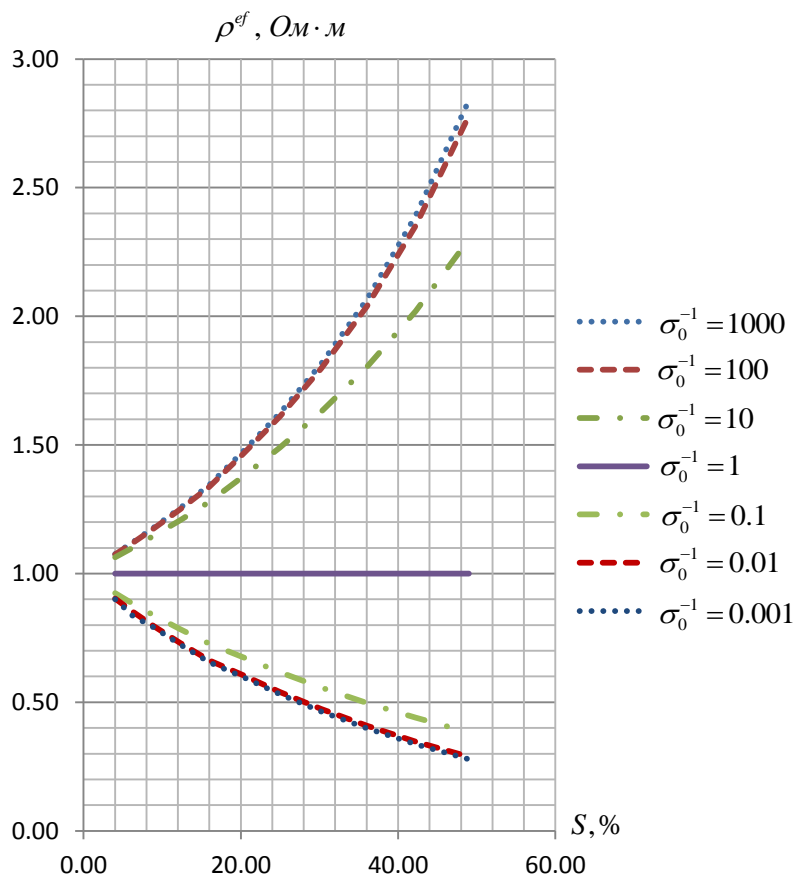


Рисунок 6 – Эффективное сопротивление ρ^{ef} при различных площадях включений S и удельных электрических сопротивлениях.

Из рисунка 6 видно, что результаты моделирования соответствуют физике процесса (при увеличении стехиометрических объемных долей в гетерогенном компакте эффективное сопротивление растет, если включения непроводящие, и уменьшается при проводящих включениях). Подобные результаты были получены и для других регулярных гетерогенных сред [15].

Вычисления производились на параллельной версии алгоритма многомасштабного МКЭ. При этом было отмечено почти линейное возрастание скорости решения задачи относительно увеличения количества ядер, участвующих в вычислениях (таблица 2), что соответствует уже имеющимся результатам [10, 15].

Таблица 2 – Время вычисления (в секундах)

Включения	Площадь включений, %	Количество ядер			
		1	2	4	8
40x40	16	1.28	0.642	0.313	0.215

Заключение

В работе было рассмотрено решение двумерной эллиптической краевой задачи с контрастными коэффициентами многомасштабным методом конечных элементов. Для решения задачи был реализован алгоритм многомасштабного метода конечных элементов [6]. Для проверки результатов задача так же решалась с помощью классического метода конечных элементов [14]. Найденное обоими методами распределение скалярного потенциала практически совпадают (с точностью до 10^{-5}). Однако многомасштабный метод позволяет решать задачи с более мелкими включениями за счет независимого построения сетки в каждом макроэлементе. Это так же позволяет эффективно распараллеливать метод (получено почти линейное ускорение).

Реализованный алгоритм не предполагает периодичности решения или мелкомасштабных включений и может быть использован при моделировании как геометрически неоднородных, так и разномасштабных включений. Для удобства анализа результатов моделирования был реализован визуализатор, позволяющий по полученному решению получить вид распределения скалярного потенциала и векторного поля плотности тока (рисунок 5).

Список литературы

1. Allaire, G. A multiscale finite element method for numerical homogenization / G. Allaire, R. Brizzi // SIAM MMS. – 2005. – 4. – С. 790-812.
2. Banks, H.T. Homogenization of Periodically Varying Coefficients in Electromagnetic Materials / H.T. Banks [и др.] // SAMSI : Technical Report. – 2005. – N2005-2. – С. 1-20.
3. Bochev, P. A Mathematical Framework for Multiscale Science and Engineering: The Variational Multiscale Method and Interscale Transfer Operators / P. Bochev [и др.] // SAND REPORT. – 2004. – 2004-2871. – С. 1-20.
4. Durmaz, S. A numerical study on the effective thermal conductivity of composite materials / S. Durmaz. – IZMIR, 2004. – 240 с.
5. E, W. The heterogeneous multiscale methods / W. E, B. Engquist // Comm. Math. Sci. – 2003. – vol. 1, no. 1. – С. 87-132.
6. Efendiev Y. Multiscale Finite Element Methods : Theory and Applications / Efendiev Y., Hou T. Y. – В. : Springer, 2009. – 241 с.
7. Efendiev, Y. Accurate multiscale finite element methods for two-phase flow simulations / Y. Efendiev, V. Ginting, T. Hou // Journal of Computational Physics. – 2006. – vol. 220, no.1. – С. 155-174.
8. Guenneau, S. Homogenization of 3D finite chiral photonic crystals / S. Guenneau, F. Zolla // Phisica B. – 2007. – vol. 394. – С. 145-147.
9. Hou. T. Y. A Multiscale Finite Element Method for Elliptic Problems in Composite Materials and Porous Media / Hou. T. Y., X.-H. Wu // Journal of computational physics. – 1997. – 134. – С. 169-189.
10. Hou, T. Convergence of a multiscale finite element method for elliptic problems with rapidly oscillating coefficients / T. Hou, X.-H. Wu, Z. Cai // Mathematics of Computation. – 1999. – vol. 68 : no. 227. – С. 913-943.
11. Иткина, Н.Б. Использование многомасштабного метода для моделирования процесса диффузии гетерогенных средах / Н.Б. Иткина, Э.П. Шурина, Ю.И. Шокин. – Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2009. – 10 с.
12. Копысов, С.П. Об одном методе определения эффективных характеристик композитов с помощью вейвлет-преобразования / С.П. Копысов, Ю.А. Сагдеева // Интеллектуальные системы в производстве. – 2007. – номер 1. – С. 49-62.
13. Ольшанский, М.А. Лекции и упражнения по многосеточным методам / М.А. Ольшанский. – М. : Физматлит, 2005. – 168 с.
14. Соловейчик, Ю.Г. Метод конечных элементов для решения скалярных и векторных задач : учеб. пособие / Ю.Г. Соловейчик, М.Э. Рояк, М.Г. Персова. – Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2007. – 896 с.
15. Эпов, М.И. Численная гомогенизация электрических характеристик сред с контрастными мелкомасштабными включениями / М.И. Эпов, Э.П. Шурина, М.К. Артемьев // Доклады академии наук. – 2011. – том 442 : №1. – С. 1-3.