

РАСЧЕТ ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ОБРАЗЦА С МИКРОВКЛЮЧЕНИЯМИ

Агафонцев Александр Александрович

Новосибирский государственный технический университет

Введение

Области моделирования для композитных материалов характеризуются более сложной структурой, в которую входят разномасштабные фрагменты. На сегодняшний день существует целый класс методов, которые учитывают влияние мелкого масштаба на больших масштабах, но не требуют разрешения всех мелких особенностей.

На сегодняшний день наиболее распространенными из таких методов являются:

- вариационные методы
 - метод конечных суперэлементов (МКСЭ) [9]
 - многомасштабный метод конечных элементов [5]
 - residual-free bubbles (RFB-метод) [2]
 - Galerkin least squares (GLS) finite element method [6]
- гетерогенные методы [8]
- upscaling-методы [1]
- методы численной гомогенизации на основе вейвлетов [4]
- обобщенные конечноэлементные методы [7]

Сейчас все более широкое применение находит многомасштабный метод конечных элементов (ММКЭ, MsFEM) [5, 3]. Он 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.

1. Многомасштабный метод конечных элементов

ММКЭ характеризуется следующей иерархией моделей:

1. Суперэлемент:
 - 1.1. Математическая модель в суперэлементе.
 - 1.2. Краевые условия на границах суперэлемента.
 - 1.3. Решение 1.1 - 1.2, - многомасштабная базисная функция.
2. Метод Галеркина с использованием многомасштабных базисных функций.

Непрерывность скалярного потенциала обеспечивается согласованностью сеточных разбиений внутри суперэлементов.

Будем рассматривать линейное эллиптическое уравнение

$$Lu = f \text{ в } \Omega, \quad (1)$$

где Ω – область в $R^d, d = 2, 3$. Lu – имеет несколько масштабов, $Lu = -div(\lambda grad u) + \sigma u$ и введем следующие обозначения:

\mathcal{T}_h – грубое разбиение (грубая сетка), K – суперэлемент (макроэлемент), характеризующий грубое разбиение,

φ_i^0 – базисные функции, определенные в узлах грубой сетки \mathcal{T}_h ,

φ_i – многомасштабные базисные функции.

Для поиска многомасштабных базисных функций решается задача:

$$L \varphi_i = 0 \text{ на } K, \varphi_i = \varphi_i^0 \text{ на } \partial K, \forall K \in \mathcal{T}_h, K \subset S_i; \quad (2)$$

То есть, многомасштабные базисные функции совпадают со стандартными базисными функциями метода конечных элементов на границах грубой сетки. Выбор функций φ_i^0 определяется структурой области и делается таким образом, чтобы достаточно точно аппроксимировать решение.

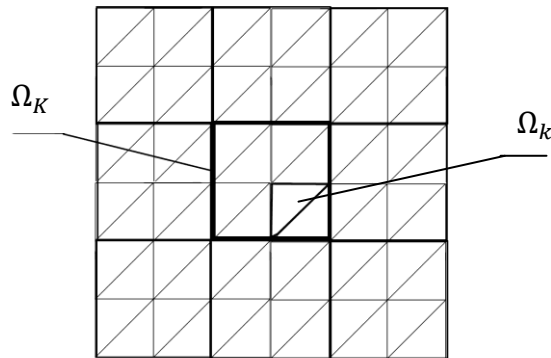


Рисунок 1 – Разбиение области Ω на конечные элементы.

Вариационная постановка для уравнения (1):

Найти $u \in u_0 + H_0^1(\Omega)$ такое, что для $\forall v \in H_0^1(\Omega)$ выполняется:

$$\int_{\Omega} \lambda \text{grad} u \text{grad} v \, d\Omega + \int_{\Omega} \sigma u v \, d\Omega = \int_{\Omega} f v \, d\Omega. \quad (3)$$

Подставляя решение в виде $u_h = \sum_i q_i \varphi_i$, получим систему линейных алгебраических уравнений

$$A q_{nodal} = b, \quad (4)$$

где

$$a_{ij} = \sum_K \left(\int_{\Omega_K} \lambda \text{grad} \varphi_i \text{grad} \varphi_j^0 \, d\Omega_K + \int_{\Omega_K} \sigma \varphi_i \varphi_j^0 \, d\Omega_K \right), \quad (5)$$

$$b_i = \int_{\Omega} f \varphi_i^0 \, d\Omega, \quad (6)$$

q – вектор решения в узлах грубой сетки.

2. Модельная задача

Учитывая, что эффективный коэффициент электропроводности определяется на постоянном токе, и представляя напряженность электрического поля в виде градиента электрического потенциала с противоположным знаком, из системы уравнений Максвелла получаем уравнение:

$$-\operatorname{div}(\sigma \operatorname{grad} V) = 0. \quad (7)$$

На рисунке 2 представлен вид расчетной области.

$$\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2, \quad \partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2,$$

Краевые условия: на Γ_1 – условия Дирихле, физически являющиеся значениями потенциала на границе, на Γ_2 – условия непротекания тока, т.е. однородные условия Неймана.

$$\begin{aligned} u|_{\Gamma_1^1} &= u_g^1, u|_{\Gamma_1^2} = u_g^2, \\ \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_2} &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

Грубое разбиение осуществляется на прямоугольниках, мелкое – на треугольниках. Для решения поставленной задачи на обеих сетках воспользуемся линейными функциями, σ – кусочно-постоянная.

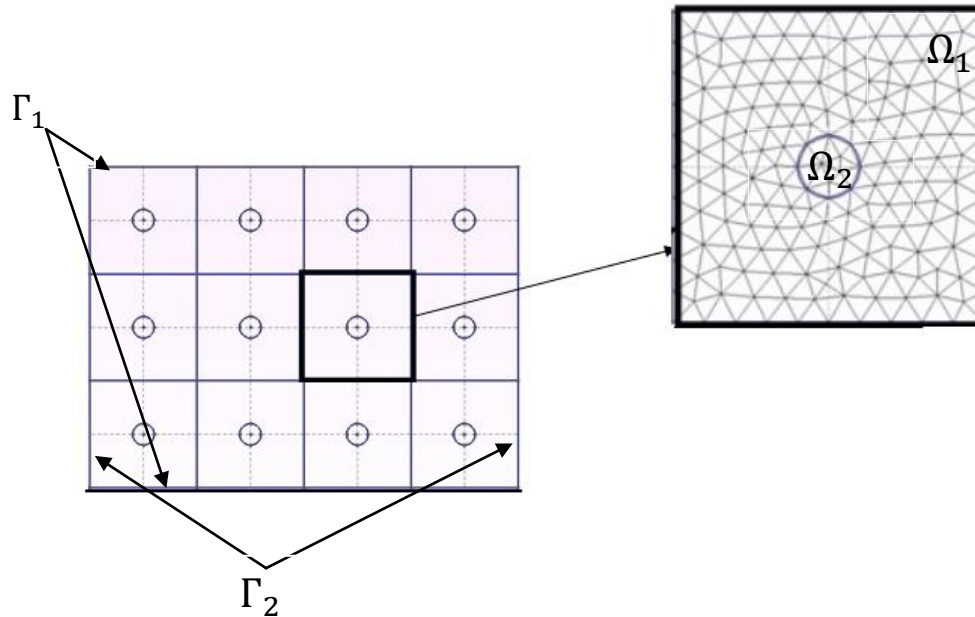


Рисунок 2 – Вид расчетной области. Ω_1 – скелет, Ω_2 - включения.

Целью данной работы является определение удельного эффективного коэффициента электропроводности гетерогенной среды при различной насыщенности проводящими или непроводящими порами. Протекающий в образце полный ток I определяется численно как интеграл по всей расчетной области от модуля плотности тока:

$$I = \int_{\Omega} |\vec{j}| d\Omega \quad (9)$$

Плотность тока \vec{j} (A/m^2), в свою очередь, вычисляется как

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} = -\sigma \text{grad}(u).$$

Таким образом, эффективный коэффициент электропроводности образца определяется по формуле

$$\sigma^{eff} = \frac{I}{U}, \quad (10)$$

где $U, [V]$ – известная разность потенциалов, заданных на электродах, приложенных к противоположным границам образца среды.

В работе рассматривается также вопрос о зависимости эффективного коэффициента от количества включений, которое вводится как отношение площади всех включений к площади расчетной области. Такая величина называется «объемным» коэффициентом и выражается в процентах:

$$V = \frac{\text{mes}(\Omega_2)}{\text{mes}\Omega} 100\%, \quad (11)$$

где Ω – вся расчетная область, Ω_2 – включения.

3. Результаты

В рамках данной работы проводились исследования на сетках одинаковой размерности, но с разным количеством включений в элементе грубого разбиения и на сетке с хаотично заданными радиусами включений. В работе рассматривается зависимость эффективного коэффициента от количества включений, которое вводится как отношение площади всех включений к площади расчетной области. Для каждого вида сетки рассматривалось решение уравнения (2.13)-(2.14), с различными значениями σ_2 во вкраплениях и с постоянным $\sigma_1 = 1$ ($1/O_m \cdot m$) в скелете. Также был рассмотрен случай, когда σ_1 (скелета) варьировалось, а σ_2 (включений) было постоянным, равным 1 ($1/O_m \cdot m$).

В каждом из вариантов строились специальные базисные функции для элементов грубого разбиения сетки, при этом учитывалась разрывность коэффициента σ .

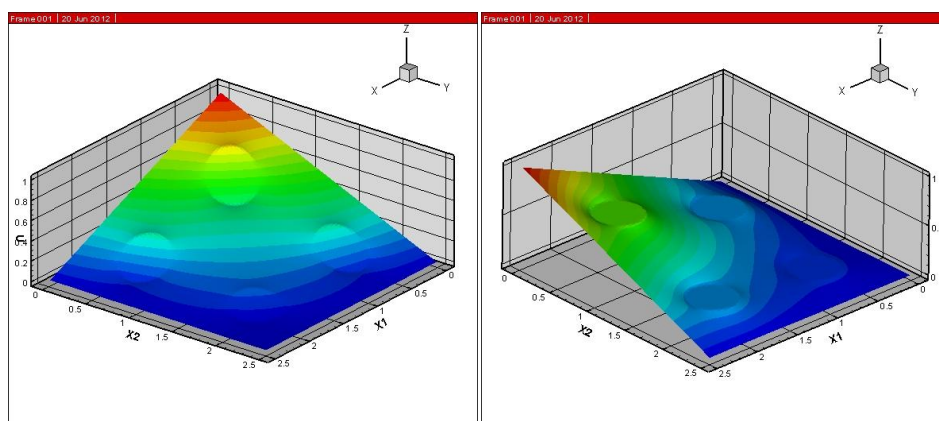


Рисунок 3 – Базисные функции для сетки с четырьмя включениями в макроэлементе и $\sigma_1 = 1$ ($1/O_m \cdot m$), $\sigma_2 = 10^{-4}$ ($1/O_m \cdot m$); $\sigma_1 = 10^{-2}$ ($1/O_m \cdot m$), $\sigma_2 = 1$ ($1/O_m \cdot m$) соответственно слева и справа

Верификация метода производилась следующим образом: решения, полученные ММКЭ и МКЭ сравнивались на одной прямой. На сопоставимых шагах методы дали погрешность одного порядка. Однако, стоит отметить, что в связи с увеличением размерности дискретной задачи, МКЭ весьма существенно проигрывает по времени.

Таблица 1 – Относительные погрешности ММКЭ и МКЭ для задачи с

$$\sigma_1 = 1 \text{ (1/Ом} \cdot \text{м)}, \sigma_2 = 0,01 \text{ (1/Ом} \cdot \text{м)}$$

	FEM	MsFEM
h	1,32E-03	1,25E-03
h/2	3,74E-04	4,30E-04
h/4	1,53E-04	1,72E-04

Приводимые ниже визуализации результатов позволяют говорить о физичности решения. На рисунке 4(справа) наглядно показано, что линии тока «обходят» непроводящие включения.

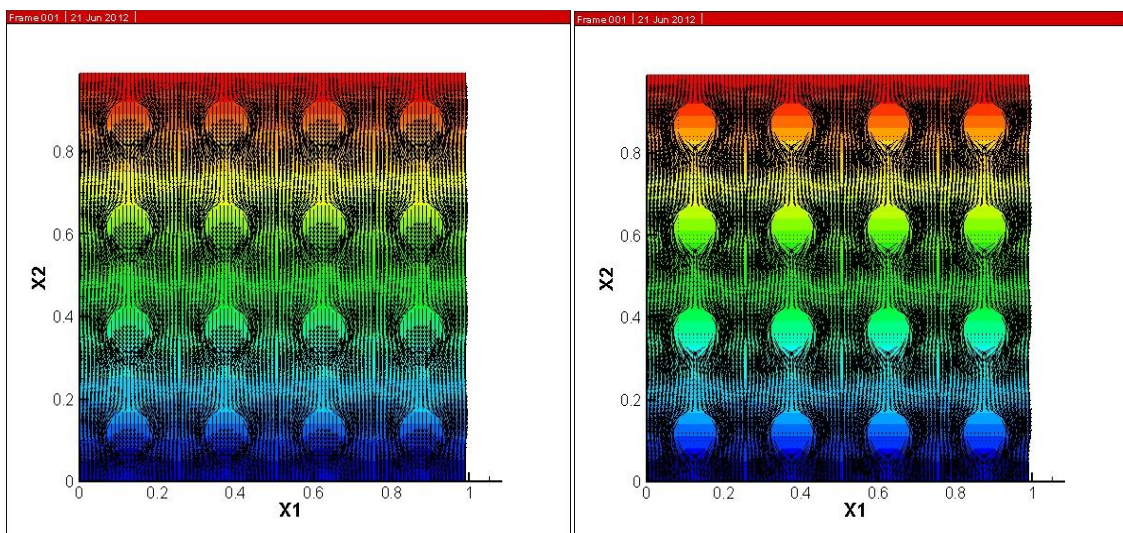


Рисунок 4 – Картины поля \vec{E} и плотности тока при $\sigma_1 = 1 \text{ (1/Ом} \cdot \text{м)}$,
 $\sigma_2 = 0,01 \text{ (1/Ом} \cdot \text{м)}$ и одном включении в макроэлементе

Были рассчитаны эффективные коэффициенты электропроводности каждой из моделей, проведено сравнение с результатами арифметического и объемного (площадного для 2D-области) осреднения.

Таблица 2 – Эффективные коэффициенты для различного числа включений и контрастностей

вкл. на макроэл.	объемное соотношение	контрастность		N	радиус	эфф. коэфф.	алг. оср.	объемное оср.	
		σ_1	σ_2					значение	Δ , %
1 вкл	12,57%	1,00E+00	1,00E-01	16	0,05	0,829126313	0,55000	0,886903	6,97
	12,57%	1,00E+00	1,00E-02	16	0,05	0,802998962	0,50500	0,875593	9,04
	12,57%	1,00E+00	1,00E-03	16	0,05	0,800270829	0,50050	0,874462	9,27
	12,57%	1,00E-01	1,00E+00	16	0,05	0,125314391	0,55000	0,213097	70,05
	28,27%	1,00E+00	1,00E-04	16	0,075	0,606386357	0,50005	0,717285	18,29
	50,27%	1,00E+00	1,00E-04	16	0,1	0,375938370	0,50005	0,497395	32,31
4 вкл	12,57%	1,00E+00	1,00E-01	64	0,025	0,829076388	0,55000	0,886903	6,97
	12,57%	1,00E+00	1,00E-02	64	0,025	0,802559154	0,50500	0,875593	9,10
	12,57%	1,00E+00	1,00E-03	64	0,025	0,799783381	0,50050	0,874462	9,34
	12,57%	1,00E-01	1,00E+00	64	0,025	0,124943427	0,55000	0,213097	70,56
	18,10%	1,00E+00	1,00E-04	64	0,03	0,720424450	0,50005	0,819062	13,69
	32,17%	1,00E+00	1,00E-04	64	0,04	0,535945186	0,50005	0,678333	26,57
	50,27%	1,00E+00	1,00E-04	64	0,05	0,353747330	0,50005	0,497395	40,61
1 вкл	16,87%	1,00E+00	1,00E-04	16	хаот	0,744006899	0,50005	0,831313	11,73
1 вкл	16,87%	1,00E-01	1,00E+00	16	хаот	0,137696107	0,55000	0,251833	82,89

Заклучение.

Был разработан и реализован алгоритм определения эффективного коэффициента электропроводности для 2D-среды с микровключениями.

Для определения эффективного коэффициента была разработана и реализована вычислительная схема на основе многомасштабного метода конечных элементов [3] с использованием специальным образом построенных многомасштабных базисных функций. В качестве грубой сетки использовались прямоугольные элементы, в качестве мелкой – треугольные. Было произведено сравнение МКЭ и ММКЭ. На сопоставимых шагах методы дали погрешность одного порядка. Проведенные численные эксперименты для рассмотренных контрастностей позволяют сделать вывод о физичности решения.

Полученные для разных контрастностей, количества и размера включений эффективные коэффициенты сравнивались с результатами алгебраического и объемного осреднения, в зависимости от числа микровключений осредненные и эффективные коэффициенты имеют различающиеся значения.

Список литературы

- [1] T. Arbogast. Numerical subgrid upscaling of two-phase flow in porous media, Lecture Notes in Physics, 1999. – pp. 1-15.
- [2] F.Brezzi, L.P.Franca, A.Russo. Further consideration on residual-free bubbles for advective-diffusive equation. – Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 1998. – pp.25-33.
- [3] Efendiev, Y.R. Multiscale finite element methods. Theory and application / Y.R. Efendiev, T.Y. Hou. – New York : Springer, 2009. – 234 p.

- [4] A.C. Gilbert. A Comparison of Multiresolution and Classical One-dimensional Homogenization Schemes. – Applied and Computational Harmonic Analysis, vol. 5, no. 1, pp. 1-35.
- [5] T. Hou, X.-H. Wu, Z. Cai Convergence of a multiscale finite element method for elliptic problems with rapidly oscillating coefficients. – Mathematics of Computation, vol. 68, no. 227, pp. 913 – 943.
- [6] T.J.R. Hughes, L.P. Franca, and G.M. Hilbert. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VIII. The Galerkin/least squares method for advective-diffusive equations. – Comput. Methods Appl.Mech.Engrg., 1989, pp 173-189.
- [7] A.-M. Matache, Ch. Schwab Two-Scale FEM for Homogenization Problems. – Zurich: Seminar for Applied Mathematics, 2001.
- [8] W. E, P. Ming, P. Zhang Analysis of the heterogeneous multiscale method for elliptic homogenization problems. – J. Am. Math. Soc., vol. 18, 2003, pp. 121-156.
- [9] Л.Г.Страховская, Р.П. Федоренко. Об одной специальной разностной схеме. //Численные методы механики сплошной среды, Новосибирск, т. 7, н. 4, 1976