

Расчет эффективного сопротивления в среде с периодическими включениями многомасштабным методом конечных элементов

М.К. Артемьев

Введение

Все задачи науки и техники по своей природе многомасштабны. Это очевидно, ведь объекты нашего мира имеют размеры от километров до нанометров. Тем не менее для некоторых процессов точное численное моделирование осуществляется на одном масштабе. Это возможно за счет пренебрежения несущественными изменениями процесса на других масштабах. Однако привести задачу к одномасштабной получается не всегда. Существуют процессы, которые сильно изменяются в окрестности мелкомасштабных особенностей среды или других параметров задачи. Это такие процессы как:

- течение жидкости в пористых средах
- распределение теплового, электромагнитного поля в композитных материалах
- турбулентный перенос вещества и др.

В настоящее время многомасштабные задачи стали настолько популярны, что их можно встретить в биологии, химии и медицине. Это способствует появлению новых методов решения многомасштабных задач. На сегодняшний день можно перечислить множество таких методов, самые распространенные из которых представлены ниже:

- вариационные методы [20], [13], [12], [8], [1], [15]
- гетерогенные методы [6], [7]
- upscaling-методы [2]
- методы численной гомогенизации на основе вейвлетов [18], [9]
- обобщенные конечноэлементные методы [14]

История развития многомасштабных методов идет еще со времен да Винчи [11], однако первые математические работы, посвященные решению задач с периодическими мелкомасштабными включениями и перфорированными средами, приходится на 70-е, 80-е годы 20-го века. Тогда были получены важные результаты по теории гомогенизации [4], [19], [16], [17]. Однако первый метод в его современном представлении был предложен еще в 1976 году [20]. Он был назван авторами «методом конечных суперэлементов».

Несмотря на это, активное развитие многомасштабных методов началось лишь с середины 1990-х годов после выхода работы [13]. Многомасштабные методы численного моделирования являются очень молодой отраслью вычислительной математики, поэтому исследования в этой области очень актуальны. Несмотря на большое количество методов, круг задач, которые они решают, невелик. Многие статьи по данной тематике или вовсе носят теоретический характер [13], [7] или посвящены решению модельных задач [12], [1], [15]. Среди приложений можно выделить задачи течения жидкости в пористых средах [5], [2], [8], определения электромагнитных [3], тепловых [9], упругих [18] характеристик композитных материалов, молекулярной динамики [6], гомогенизации кристаллов [10].

Данная работа посвящена решению геофизической задачи, связанной с определением эффективного сопротивления в гетерогенной среде. При этом контрастные включения имеют малые размеры и периодическое расположение.

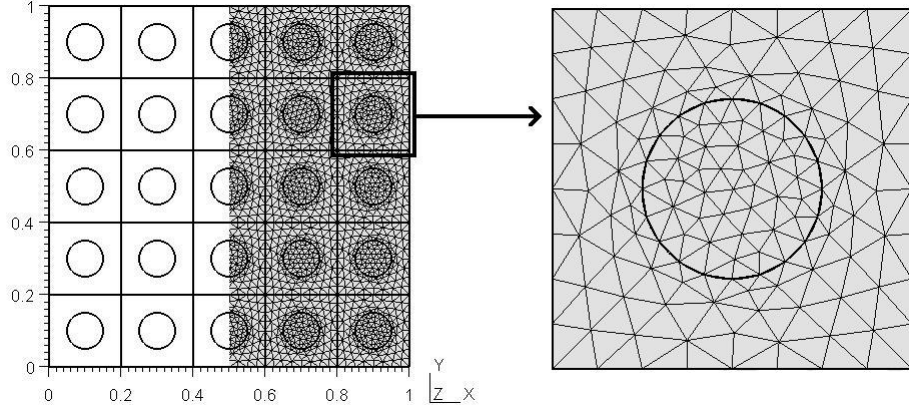


Рис. 1: Пример двумерной расчетной области с триангуляцией

Постановка задачи

Пример расчетной области представлен на рисунке 1. Целью работы является определение эффективного сопротивления среды с мелкомасштабными регулярно расположенными включениями, контрастными по своим физическим свойствам. Для решения используется вариационный метод, а именно многомасштабный метод конечных элементов (МКЭ) [13]. Результаты вычислений сравниваются с решениями, полученными классическим МКЭ. Количество включений для каждого исследования различно и приводится непосредственно в результатах.

Математическая модель

Математическая модель имеет вид

$$\operatorname{div}(\rho^{-1} \operatorname{grad} u) = 0 \text{ в } \Omega, \quad (1)$$

где Ω — двумерная область $x \in [0, 1], y \in [0, 1]$, u — скалярный потенциал электрического поля, ρ — удельное электрическое сопротивление.

На границе области заданы краевые условия

$$\begin{aligned} u|_{y=0} &= -1, \\ u|_{y=1} &= 1, \\ u|_{x=0} &= 0, \\ u|_{x=1} &= 0. \end{aligned}$$

Удельное электрическое сопротивление определяется следующим образом

$$\rho = \begin{cases} \rho_1 & \text{в области без включений,} \\ \rho_2 & \text{в области включений.} \end{cases} \quad (2)$$

Вариационная постановка

Рассмотрим задачу (1) в виде:

$$L_\epsilon u_\epsilon = f \text{ в } \Omega, u_\epsilon = u_\Gamma \text{ на } \partial\Omega, \quad (3)$$

где $L_\epsilon = \operatorname{div} \left(a \left(\frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \right) \operatorname{grad} \right)$ — линейный эллиптический оператор, ϵ — малый параметр, характеризующий размер периодичности включений, $a \left(\frac{\mathbf{x}}{\epsilon} \right) = \rho^{-1}$ — параметр, определяемый соотношением (2).

Введем пространства Соболева $H^{\bar{k}}(\Omega)$ с нормой и соответствующей полунормой

$$\|u\|_{k,\Omega} = \left(\int_{\Omega} \sum_{|\alpha| \leq k} |D^\alpha u|^2 \right)^{1/2}, |u|_{k,\Omega} = \left(\int_{\Omega} \sum_{|\alpha|=k} |D^\alpha u|^2 \right)^{1/2}$$

Пространство $H_0^1(\Omega)$ содержит функции из $H^1(\Omega)$, которые обращаются в ноль на $\partial\Omega$. Вариационная постановка задачи (3) состоит в том, чтобы найти $u \in H_0^1(\Omega)$ такое, что

$$a(u, v) = f(v), \forall v \in H_0^1(\Omega), \quad (4)$$

где

$$a(u, v) = \int_{\Omega} a\left(\frac{\mathbf{x}}{\epsilon}\right) \text{grad}(u) \cdot \text{grad}(v) d\Omega \text{ и } f(v) = \int_{\Omega} f \cdot v d\Omega$$

Рассмотрим разбиение K^h области Ω , где $0 < h \leq 1$ и K — это прямоугольник со сторонами $\leq h$ и параллельными осям координат. В каждом элементе $K \in K^h$ определен набор базисных функций $\{\phi_K^i, i = 1, \dots, 4\}$. Для рассматриваемого многомасштабного метода [13] базисные функции удовлетворяют

$$L_{\epsilon} \phi_K^i = 0 \text{ в } K \in K^h \quad (5)$$

Существует несколько способов определения краевых условий на границе элемента K .

- Самый простой способ — **линейное** граничное условие. Пусть $\mathbf{x}_j \in K (j = 1, \dots, 4)$ — это вершины элемента K . Тогда $\phi_K^i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$.
- В качестве другого краевого условия можно решить эллиптическую задачу меньшей размерности на каждой стороне границы ∂K . То есть

$$L_{\epsilon} \phi_K^i = \mu_j \text{ на } \partial K,$$

где краевое условие μ_j определяется

$$L_{\epsilon} \mu_j = 0$$

и удовлетворяет линейному краевому условию $\mu_j(\mathbf{x}_i) = \delta_{ij}$. В [13] такое краевое условие для ϕ называется **осциллирующим**. Применение такого краевого условия призвано повысить точность вычисления многомасштабных базисных функций и, следовательно, точность решения исходной задачи.

При любом выборе краевого условия базисные функции непрерывны на границах элементов, поэтому рассмотрим пространство

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

Тогда сформулируем дискретную вариационную постановку задачи (4): найти $u^h \in V^h$ такое, что

$$a(u^h, v) = f(v), \forall v \in V^h$$

Дискретизация области

Как было показано в предыдущем разделе, искомая величина u аппроксимируется многомасштабными базисными функциями ϕ . Элемент разбиения $K \in K^h$, на котором определены эти функции, называются, согласно [20], «суперэлементом». Базисные функции, определенные на «суперэлементе», вычисляются в свою очередь в ходе решения дополнительной задачи (5) классическим методом конечных элементов, где для аппроксимации используются линейные базисные функции.

На рисунке 1 видны две сетки — грубая прямоугольная сетка и мелкая треугольная сетка. Ячейкой прямоугольной сетки является «суперэлемент». В качестве ячеек мелкой сетки были выбраны треугольники в связи с геометрией расчетной области. Включения имеют форму круга, а треугольная сетка наиболее точно учитывает эти особенности.

Результаты

Результатом исследований является зависимость эффективного сопротивления от отношения площади всех включений к площади расчетной области. Увеличение этого отношения при постоянстве диаметра

включения достигается за счет увеличения количества включений. В качестве характеристики включений в исследованиях используется диаметр (в метрах) и удельная электрическая проводимость $\sigma = \rho^{-1}$ (в $(\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$). Электрическая проводимость вмещающей среды в данной работе принята за $1(\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$.

1. Диаметр включений 0.02(м)

Поскольку для такого диаметра включений можно построить мелкую сетку во всей расчетной области, сравним решение, полученное с использованием многомасштабного МКЭ (пунктирная линия на рисунке 3), с решением, найденным с помощью классического МКЭ (сплошная линия на рисунке 3), для величины электрической проводимости включений равной 5 и $0.2(\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$. Количество включений (общее и отдельно по каждой из координат) и отношение площади всех включений к площади расчетной области приведены в таблице 1.

Количество	Занимаемая площадь
5*5=25	7.725e-03
10*10=100	3.090e-02
15*15=225	6.953e-02
20*20=400	1.236e-01
25*25=625	1.941e-01
30*30=900	2.795e-01
35*35=1225	3.805e-01
40*40=1600	4.969e-01
45*45=2025	6.308e-01
49*49=2401	7.480e-01

Таблица 1: Включения диаметром 0.02(м)

Для решения задачи при количестве включений 49*49 классический метод не использовался, что связано с большим размером сетки даже при не очень качественной аппроксимации треугольниками границ круглых включений.

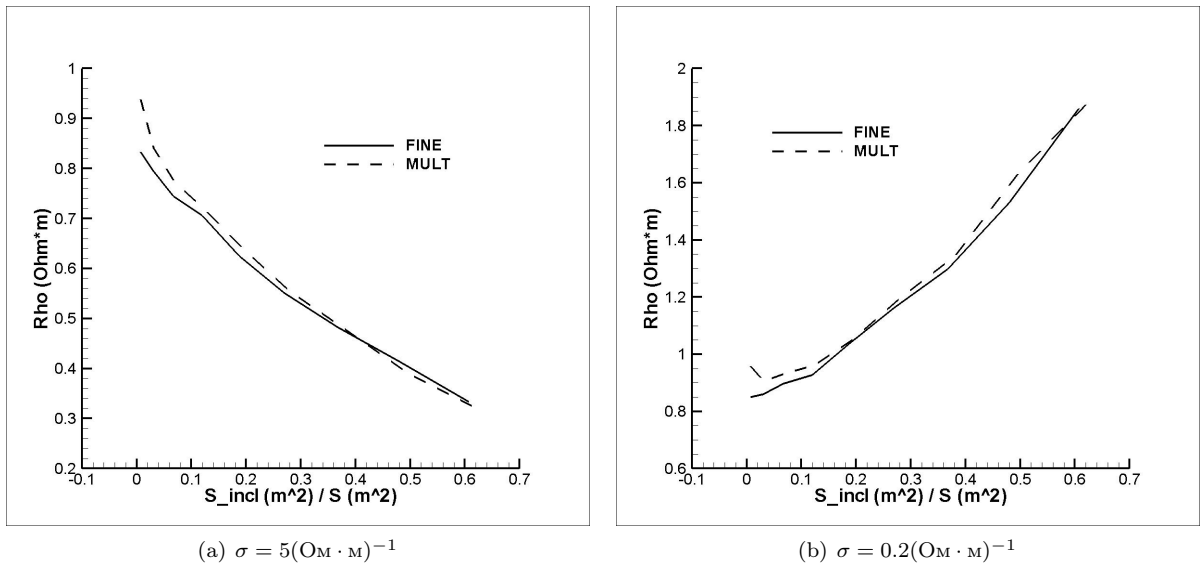


Рис. 2: Сравнение результатов, полученных различными методами, для диаметра включений 0.02(м)

Среднеквадратичное отклонение результата, полученного многомасштабным методом, от точного решения, за которое принимается решение, полученное классическим МКЭ на мелкой сетке, составляет 0.123 и 0.178 для рисунка 2(а) и 2(б) соответственно. Таким образом, можно сделать вывод, что многомасштабное решение довольно близко к точному, ведь наибольшее отклонение наблюдается при малом количестве включений и, следовательно, при малом количестве элементов грубой сетки, на которой определены многомасштабные базисные функции. Это в свою очередь не позволяет точно учитывать

краевое условие Дирихле, заданное на границе расчетной области. С увеличением количества включений растет и количество элементов грубой сетки, что влечет за собой более корректный учет краевого условия и более точное решение. Теперь сравним результаты, полученные для различных значений электрической проводимости включений, и приведем среднеквадратичные отклонения для каждого из них.

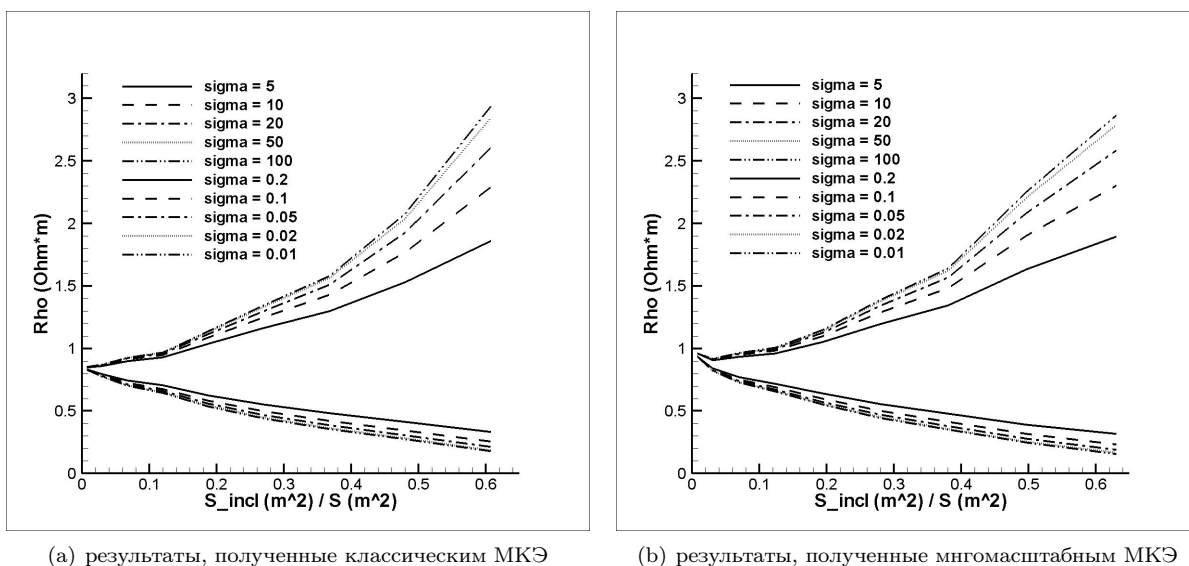


Рис. 3: Эффективное сопротивление при диаметре включений 0.02(м)

Среднеквадратичные отклонения результата, полученного многоскопическим методом, от точного решения для каждого значения электрической проводимости включений приведены в таблице 2.

$\sigma(\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$	0.01	0.02	0.05	0.1	0.2	5	10	20	50	100
Среднеквадр. отклонение	0.24225	0.23438	0.21717	0.19954	0.17769	0.12261	0.12325	0.12351	0.12362	0.12364

Таблица 2: Среднеквадратичные отклонения при диаметре включений 0.02(м)

Из полученных результатов видно, что решение, найденное с использованием многоскопического метода, близко к решению, вычисленному с использованием классического МКЭ. Однако применение классического метода для решения подобных задач не всегда возможно, поскольку при уменьшении диаметра включений сетка становится настолько мелкой, что ресурсы вычислительной машины не в состоянии ее обработать. В этом случае становятся очевидны преимущества многоскопического МКЭ, который позволяет строить мелкую сетку в отдельно взятой ячейке грубой сетки, что значительно экономит оперативную память компьютера, хотя, конечно, зачастую требует большего времени для вычислений.

2. Диаметр включений 0.01(м)

Поскольку для такого диаметра построить мелкую сетку при большом количестве включений достаточно проблематично, но возможно, сравним решение, полученное с использованием многоскопического МКЭ (пунктирная линия на рисунке 5), с решением, найденным с помощью классического МКЭ (сплошная линия на рисунке 5), для величины электрической проводимости включений равной 5 и $0.2(\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$. Количество включений (общее и отдельно по каждой из координат) и отношение площади всех включений к площади расчетной области приведены в таблице 3.

Для решения задачи при количестве включений 99×99 классический метод не использовался, что связано с большим размером сетки даже при не очень качественной аппроксимации треугольниками границ круглых включений.

Среднеквадратичное отклонение результата, полученного многоскопическим методом, от точного решения, за которое принимается решение, полученное классическим МКЭ на мелкой сетке, составляет

Количество	Занимаемая площадь
10*10=100	7.725e-03
20*20=400	3.090e-02
30*30=900	6.953e-02
40*40=1600	1.236e-01
50*50=2500	1.941e-01
60*60=3600	2.795e-01
70*70=4900	3.805e-01
80*80=6400	4.969e-01
90*90=8100	6.308e-01
99*99=9801	7.633e-01

Таблица 3: Включения диаметром 0.01(м)

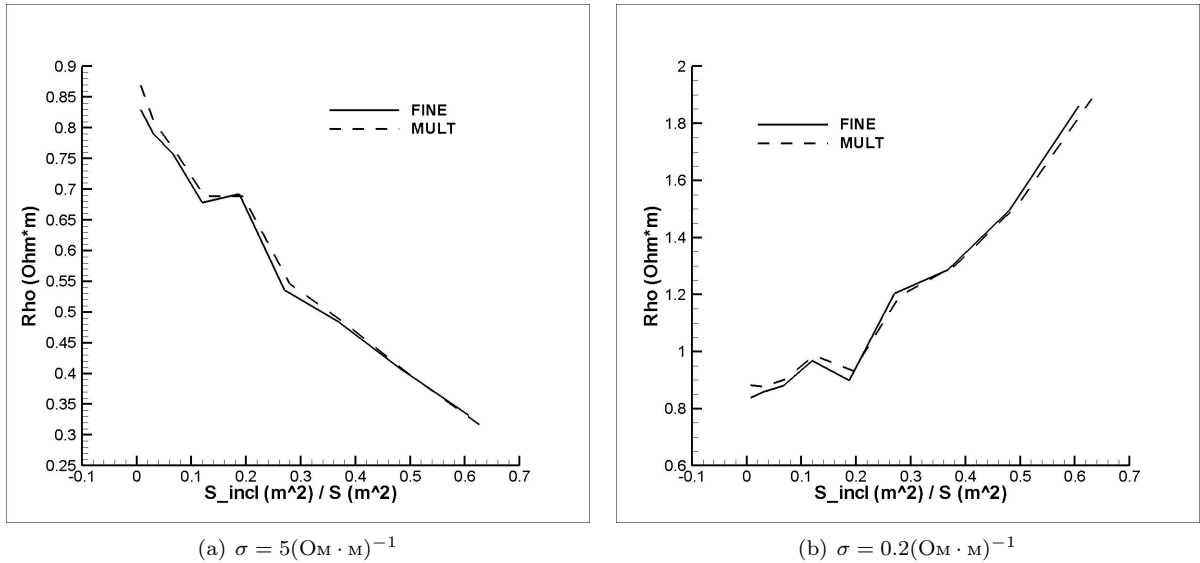


Рис. 4: Сравнение результатов, полученных различными методами, для диаметра включений 0.01(м)

0.052 и 0.075 для рисунка 4(а) и 4(б) соответственно. Мы видим, что отклонение уменьшилось примерно в 2 раза относительно значений, полученных для диаметра включений 0.02(м). Это во многом связано с изначально более мелкой сеткой (10*10) для многомасштабного метода. При такой сетке краевые условия учитываются точнее и, как следствие, среднеквадратичное отклонение падает. Теперь сравним результаты, полученные для различных значений электрической проводимости включений, и приведем среднеквадратичные отклонения для каждого из них.

Среднеквадратичные отклонения результата, полученного многомасштабным методом, от точного решения для каждого значения электрической проводимости включений приведены в таблице 4.

$\sigma(\text{Om} \cdot \text{m})^{-1}$	0.01	0.02	0.05	0.1	0.2	5	10	20	50	100
Среднеквадр. отклонение	0.11205	0.10241	0.08454	0.07552	0.07452	0.05215	0.05440	0.05577	0.05675	0.05711

Таблица 4: Среднеквадратичные отклонения при диаметре включений 0.01(м)

3. Диаметр включений 0.005(м)

При диаметре включений 0.01(м) для достижения отношения площади включений к площади области равного 0.6, необходимо использовать 8100 (90*90) включений. Мелкая сетка, построенная в такой области и учитывающая данные включения, содержит порядка 400 тыс. узлов (396891) и порядка 800 тыс. треугольников (792308). При еще большем уменьшении диаметра включений построить последо-

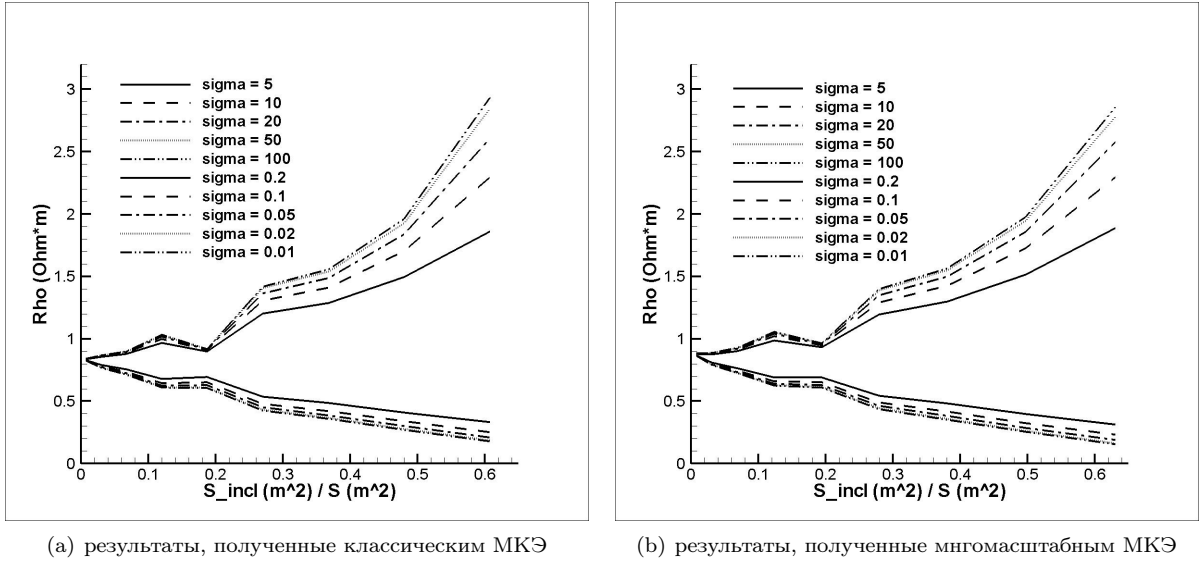


Рис. 5: Эффективное сопротивление при диаметре включений 0.01(м)

вательность сеток с представительным отношением площади включений к площади расчетной области не представляется возможным. Поэтому далее рассмотрим решение данной задачи, найденное только с использованием многомасштабного метода. На рисунках 6(a) и 6(b) представлены значения эффективного сопротивления для включений с электрической проводимостью от 5 до $100(\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$ и от 0.01 до $0.2(\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$ соответственно. Количество включений (общее и отдельно по каждой из координат) и отношение площади всех включений к площади всей расчетной области приведены в таблице 5.

Количество	Занимаемая площадь
20*20=400	7.725e-03
40*40=1600	3.090e-02
60*60=3600	6.953e-02
80*80=6400	1.236e-01
100*100=10000	1.941e-01
120*120=14400	2.795e-01
140*140=19600	3.805e-01
160*160=25600	4.969e-01
180*180=32400	6.308e-01
199*199=39601	7.711e-01

Таблица 5: Включения диаметром 0.005(м)

Получив значения эффективного сопротивления при различных диаметрах включений, мы можем сравнить их между собой для заданной величины электрической проводимости. На рисунках 7(a) и 7(b) представлены полученные графики для значений $\sigma = 5(\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$ и $\sigma = 0.2(\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}$ соответственно.

Закключение

В работе рассмотрено решение двумерной задачи распределения потенциала электрического поля под действием постоянного тока в среде с мелкомасштабными регулярно расположенными включениями, контрастными по своим физическим свойствам. Для решения данной задачи использовался многомасштабный метод конечных элементов [13]. Для относительно крупных включений задача также решалась с использованием классического МКЭ. Рассчитанное обоими методами распределение электрического потенциала и эффективное сопротивление практически совпадают. Однако многомасштабный метод позволяет решать задачи с более мелкими включениями за счет независимого построения сетки в от-

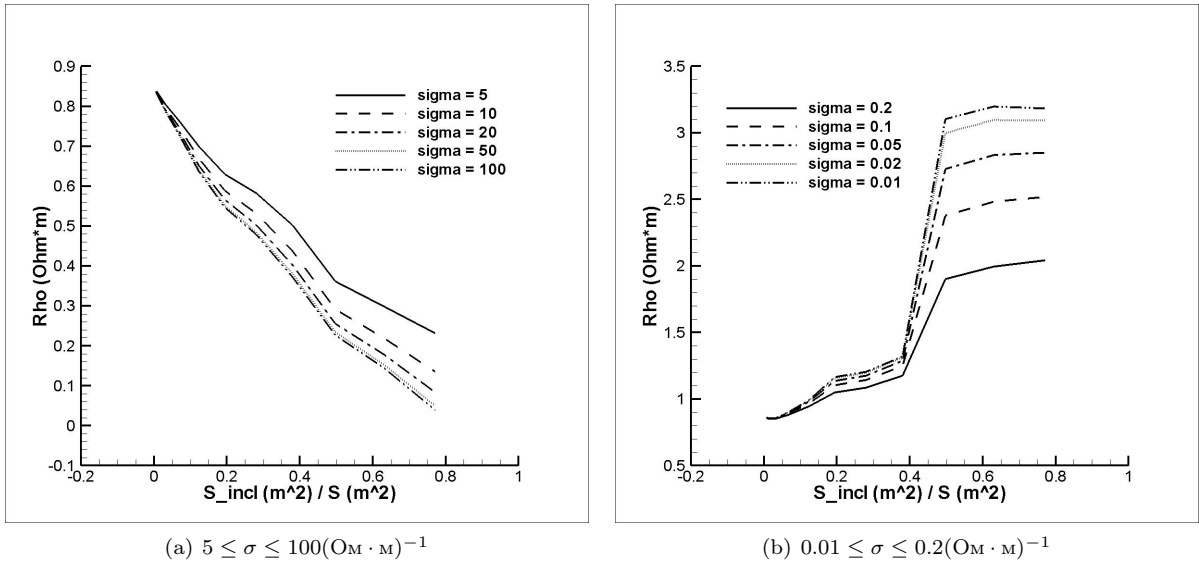


Рис. 6: Эффективное сопротивление для диаметра включений 0.005(м)

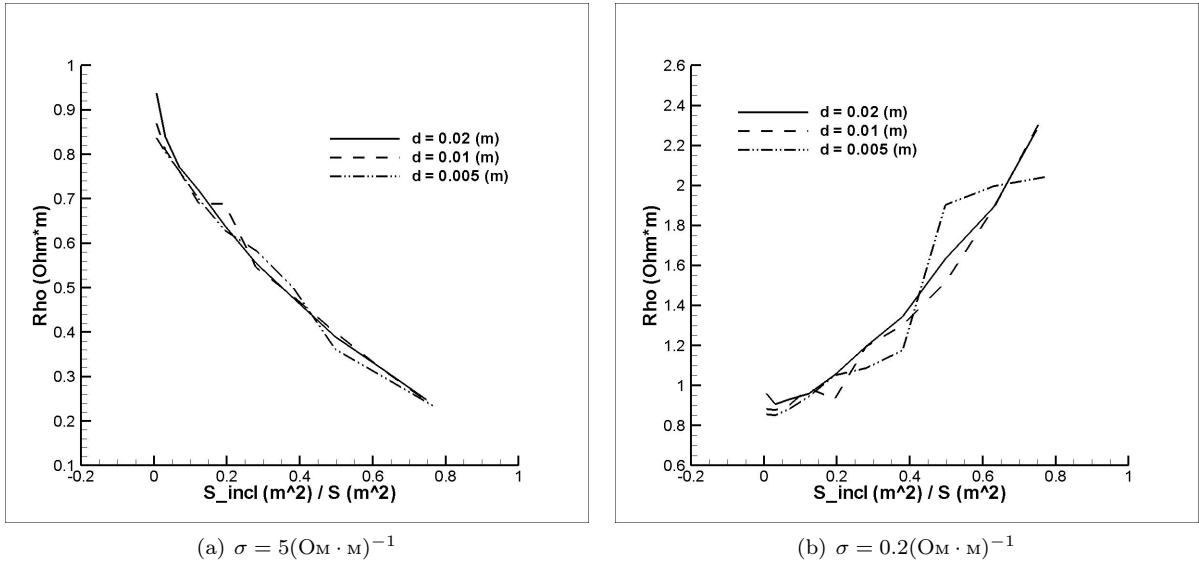


Рис. 7: Эффективное сопротивление при различных диаметрах

дельно взятом «суперэлементе». Этот факт также открывает широкие возможности распараллеливания алгоритма, которое исследуется в настоящее время.

Список литературы

- [1] G. Allaire, R. Brizzi A multiscale finite element method for numerical homogenization, SIAM MMS 4, pp. 790-812, 2005
- [2] T. Arbogast Numerical subgrid upscaling of two-phase flow in porous media, Lecture Notes in Physics, pp. 1-15, 1999
- [3] H.T. Banks, V.A. Bokil, D. Cioranescu, N.L. Gibson, G. Grisco, B. Miara Homogenization of Periodically Varying Coefficients in Electromagnetic Materials, SAMSI, Technical Report N2005-2, 2005
- [4] A. Bensoussan, J.L. Lions, G. Papanicolaou Asymptotic analysis for periodic structures, North-Holland, 1978

- [5] P. Bochev, M. Christon, S.S. Collis, R. Lehoucq, J. Shadid, A. Slepoy, G. Wagner A Mathematical Framework for Multiscale Science and Engineering: The Variational Multiscale Method and Interscale Transfer Operators, SAND REPORT, SAND2004-2871, 2004
- [6] W. E, B. Engquist The heterogeneous multiscale methods, *Comm. Math. Sci.*, vol. 1, no. 1, pp. 87-132, 2003
- [7] W. E, P. Ming, P. Zhang Analysis of the heterogeneous multiscale method for elliptic homogenization problems, *J. Am. Math. Soc.*, vol. 18, pp. 121-156, 2003
- [8] Y. Efendiev, V. Ginting, T. Hou, R. Ewing Accurate multiscale finite element methods for two-phase flow simulations, *Journal of Computational Physics*, vol. 220, no. 1, pp. 155-174, 2006
- [9] 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
- [10] S. Guenneau, F. Zolla Homogenization of 3D finite chiral photonic crystals, *Physica B*, vol. 394, pp. 145-147, 2007
- [11] M.F. Horstemeyer Multiscale Modeling: A Review // Practical Aspects of Computational Chemistry Methods: Concepts and Applications / J. Leszczynski, M.K. Shukla, Springer, pp. 87-135, 2009
- [12] T. Hou, X.-H. Wu A Multiscale Finite Element Method for Elliptic Problems in Composite Materials and Porous Media, *Journal of computational physics*, vol. 134, pp. 169-189, 1997
- [13] 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
- [14] A.-M. Matache, Ch. Schwab Two-Scale FEM for Homogenization Problems, *Seminar for Applied Mathematics*, Zurich, 2001
- [15] G. Sangalli Capturing small scales in elliptic problems using a residual-free bubbles finite element method, <http://www.siam.org/journals/mms/x-x/41140.html>
- [16] Н.С. Бахвалов, Г.П. Панасенко, А.Л. Штарас Метод осреднения для уравнений с частными производными и его применения, *Дифференциальные уравнения с частными производными - 5, Итоги науки и техн. Сер. Современ. пробл. мат. Фундам. направления*, 34, ВИНТИ, М., 1988, стр. 215-241
- [17] В.В. Жиков, С.М. Козлов, О.А. Олейник Усреднение дифференциальных операторов, М.: Физико-математическая литература, 1993
- [18] С.П. Копысов, Ю.А. Сагдеева Об одном методе определения эффективных упругих характеристик композитов с помощью вейвлет-преобразования // *Интеллектуальные системы в производстве*, номер 1, стр. 49-62, 2007
- [19] Э. Санчес-Паленсия Неоднородные среды и теория колебаний, пер. с англ. В.В. Жикова под ред. О.А. Олейник, М.: Мир, 1984
- [20] Л.Г. Страховская, Р.П. Федоренко Об одной специальной разностной схеме // *Численные методы механики сплошной среды*, Новосибирск, т. 7, н. 4, 1976