

# Численная гомогенизация на основе многомасштабного метода КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

М.К. Артемьев

## Введение

В последнее время многомасштабные численные методы становятся очень популярны. Чтобы продемонстрировать это, приведем график (рисунок 1), характеризующий количество статей с фразой «многомасштабное моделирование» в названии за период с 1999 по 2007 год по данным ISI Web of Knowledge <sup>1</sup> [5]. С большой долей вероятности можно утверждать, что к настоящему времени, количество таких статей еще более возросло.

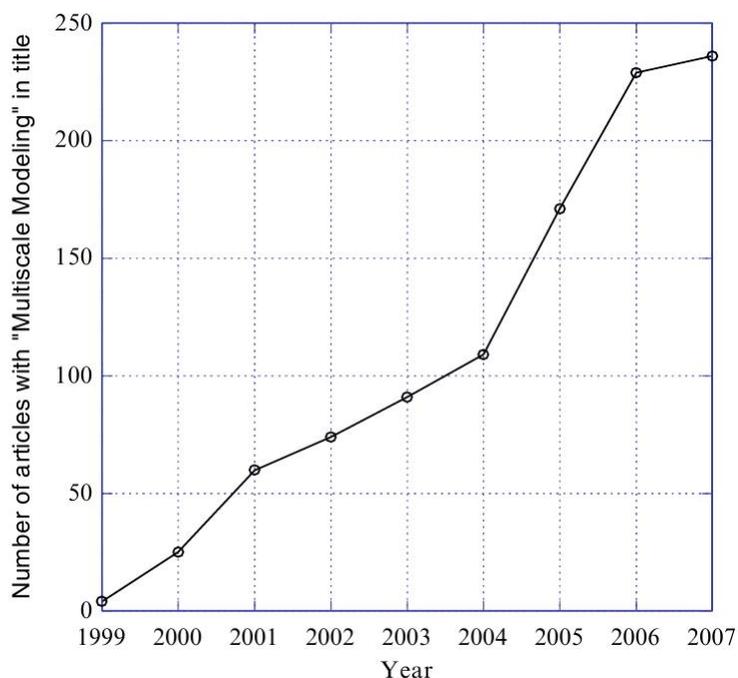


Рис. 1: Количество статей, опубликованных с фразой «многомасштабное моделирование» в названии

Во многом это объясняется усложнением задач геофизики, биологии, материаловедения и других наук. Область моделирования, представляющая ранее только один масштаб объектов, расширяется, охватывая новые масштабы. Так во многих задачах геофизики появляются мельчайшие поры при моделировании течения жидкостей и газов в земной коре, в биологии рассматривают пористую структуру костей, а материаловедение в свете развития нанотехнологий и вовсе нельзя представить в стороне от многомасштабности.

На волне популярности многомасштабных методов широкое распространение получила численная гомогенизация. Чтобы объяснить назначение гомогенизации, рассмотрим абстрактную пластину из композитного материала (рисунок 2), имеющую большое количество мелких включений или пор, контрастных по своим физическим характеристикам (например, по электропроводности) относительно свойств пластины. Во многих реальных случаях полезно знать не все микроскопические особенности проводимости

<sup>1</sup><http://www.isiwebofknowledge.com>

(или другого свойства) данного материала, а лишь его эффективную величину. Процесс получения эффективной характеристики и называется гомогенизацией. И несмотря на то, что эффективную величину часто называют усредненной, гомогенизация не есть осреднение. Численная гомогенизация - технологически сложный процесс, поэтому для его реализации используются самые современные многомасштабные методы.

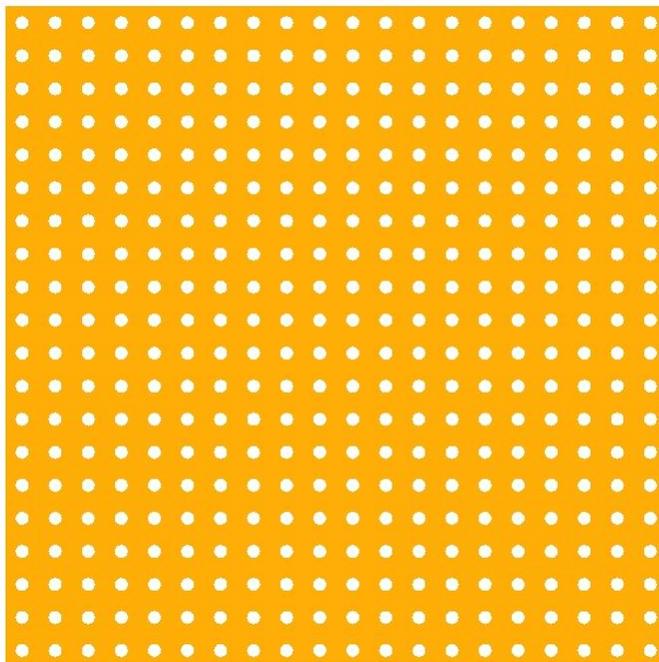


Рис. 2: Пластина из композитного материала

Среди многомасштабных методов наибольшей популярностью пользуются вариационные и гетерогенные методы. К последним относятся методы, предложенные в работах [1], [2], [3]. К вариационным методам относятся:

1. метод конечных суперэлементов [9]
2. многомасштабный метод конечных элементов [4], [6], [7]
3. residual-free bubbles (RFB) [8]
4. streamline upwind / Petrov-Galerkin (SUPG), Galerkin / least-squares (GLS) и другие

В данной работе для проведения численной гомогенизации применяется многомасштабный метод конечных элементов (ММКЭ).

## 1 Постановка задачи и математическая модель

Рассмотрим задачу о распределении электрического потенциала в неоднородной области  $\Omega$ , состоящей из скелета  $\Omega_1$  и пор (микровключений, заполненных флюидом или газом)  $\Omega_2$ ,  $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ , которая описывается эллиптическим уравнением

$$\nabla \cdot (\rho^{-1} \nabla u) = 0 \text{ в } \Omega, \quad (1)$$

где  $u$  — потенциал электрического поля,  $\rho$  — удельное электрическое сопротивление, различное в  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$ .

Обозначим границу расчетной области  $\partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ . На границе  $\Gamma_1$  задано краевое условие Дирихле, которое определяется приложенным к границе электродам. На границе  $\Gamma_2$  задано краевое условие Неймана, которое интерпретируется как условие непротекания тока.

$$u|_{\Gamma_1} = g, \quad (2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_2} = 0. \quad (3)$$

Особенностью данной задачи является регулярное расположение включений следующих форм:

- цилиндрические включения, проходящие через образец среды насквозь;
- сферические включения одинакового диаметра;
- эллипсоидные включения одинакового размера.

Примеры областей с перечисленными включениями приведены на рисунках 3, 4 и 5.

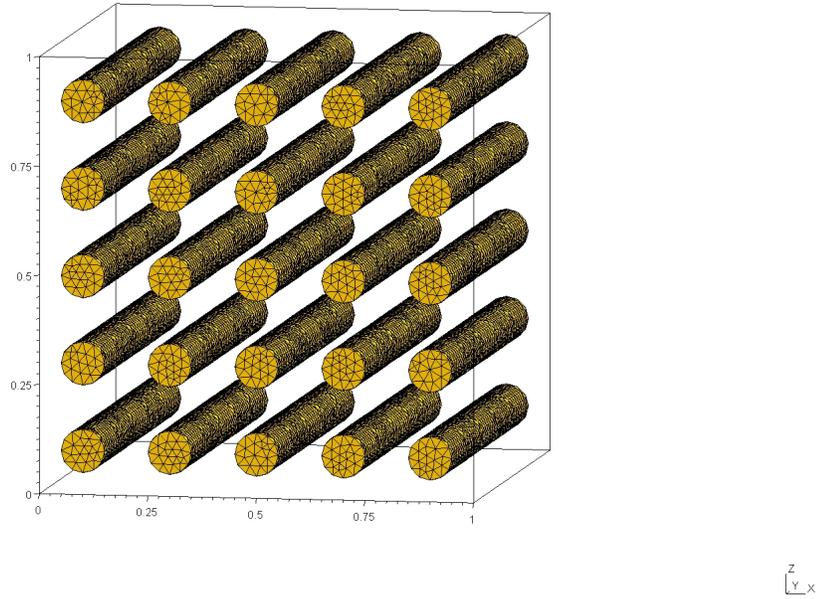


Рис. 3: Среда с цилиндрическими включениями

Поскольку изначально нас интересовала именно численная гомогенизация неоднородной среды, то целью данной работы является не столько решение задачи (1)-(3), сколько определение эффективного удельного сопротивления гетерогенной среды при различной насыщенности проводящими и непроводящими порами. Протекающий в образце полный ток  $I$  определяется численно как интеграл по всей расчетной области от модуля плотности тока:

$$I = \int_{\Omega} |\vec{J}| d\Omega,$$

Плотность тока  $\vec{J}$  (А/м<sup>2</sup>), в свою очередь, вычисляется как

$$\vec{J} = \rho^{-1} \vec{E} = -\rho^{-1} \nabla u,$$

Таким образом, эффективное удельное сопротивление образца определяется по формуле

$$\rho^{eff} = \frac{U}{I},$$

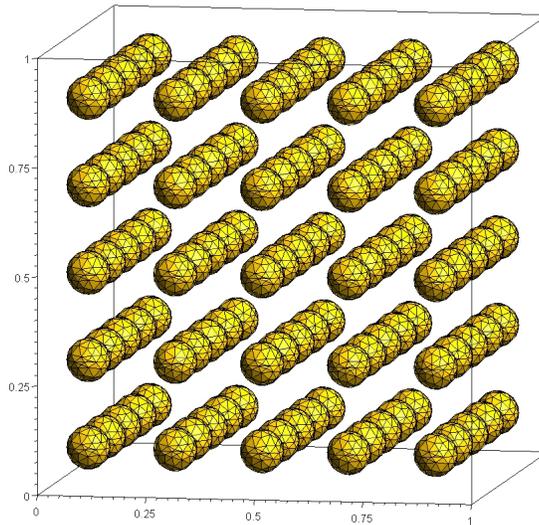


Рис. 4: Среда со сферическими включениями одинакового диаметра

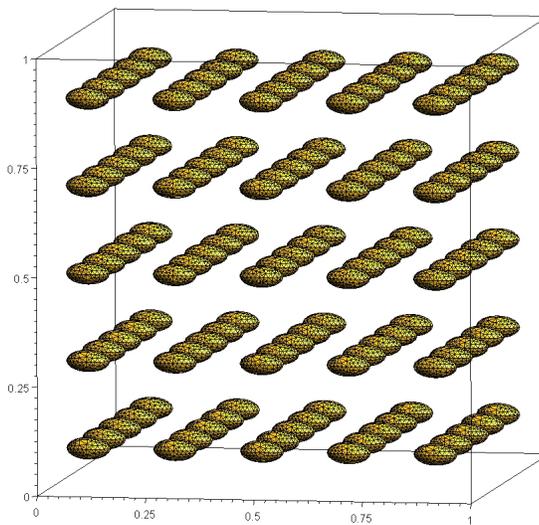


Рис. 5: Среда с эллипсоидными включениями одинакового размера

где  $U$  — известная разность потенциалов, заданных на электродах, приложенных к противоположным граням образца среды.

В работе рассматривается также вопрос о зависимости эффективного сопротивления от количества включений, которое вводится как отношение объема всех включений к объему расчетной области. Эта

величина называется «объемным соотношением» и выражается в процентах:

$$V = \frac{mes(\Omega_2)}{mes(\Omega)} \cdot 100\% \quad (4)$$

## 2 Результаты

В качестве образца среды, на котором проводились измерения, был взят куб со стороной 1 м. Включения имели следующие характеристические размеры:

- диаметр основания цилиндрических включений 0.02 м;
- диаметр сфер 0.02 м;
- большая ось эллипсоидов 0.02 м, малые оси — 0.01 м.

Удельное электрическое сопротивление основной среды принималось равным 1 Ом · м. Количество включений различных типов и соответствующее объемное соотношение приведены в таблицах 1, 2 и 3. На рисунках 6, 7 и 8 приведены результаты вычисления эффективного сопротивления для сред с различным количеством включений всех вышеперечисленных типов.

Количество включений	Объемное соотношение, %
17x17=289	8.179
21x21=441	12.473
25x25=625	17.891
29x29=841	25.141
33x33=1089	32.630
37x37=1369	41.738
41x41=1681	52.216
45x45=2025	62.272

Таблица 1: Цилиндрические включения

Количество включений	Объемное соотношение, %
17x17x17=4913	1.683
21x21x21=9261	3.172
25x25x25=15625	5.350
29x29x29=24389	8.352
33x33x33=35937	12.305
37x37x37=50653	19.514
41x41x41=68921	26.552
45x45x45=91125	36.051

Таблица 2: Сферические включения

## 3 Параллельная реализация

Во многих работах, посвященных многомасштабному методу конечных элементов, отмечается, что алгоритм этого метода обладает фактически параллельной структурой, и поэтому легко может быть приспособлен для вычислений на высокопроизводительных системах.

В связи с этим, алгоритм ММКЭ был реализован с помощью интерфейса MPI. Исследования параллельной версии ММКЭ проводились на кластере ИВЦ НГУ <sup>2</sup>. Результаты вычисления эффективного

<sup>2</sup><http://www.nusc.ru/>

Количество включений	Объемное соотношение, %
17x17x17=4913	0.46107448900227943
21x21x21=9261	0.86912584751303779
25x25x25=15625	1.4663696550774601
29x29x29=24389	2.2888516913061148
33x33x33=35937	3.3725219797466650
37x37x37=50653	4.7534317543638362
41x41x41=68921	6.4679707048192050
45x45x45=91125	8.5517072115488837

Таблица 3: Эллипсоидные включения

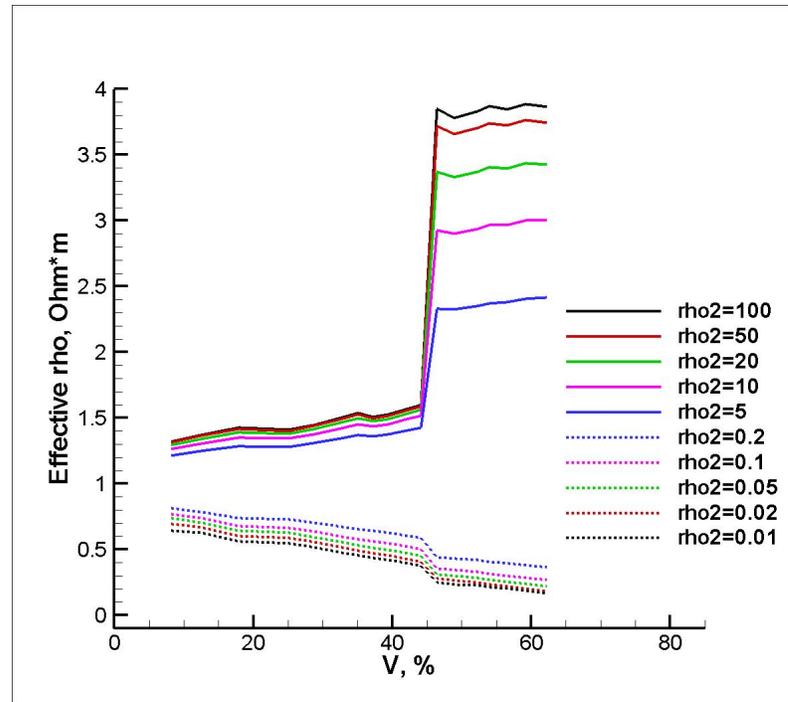


Рис. 6: Эффективное сопротивление среды с цилиндрическими включениями

удельного сопротивления среды со сферическими включениями в количестве 25x25x25 для различного количества ядер приведены в таблице 4. Результаты показывают почти линейный рост скорости вычислений относительно увеличения количества ядер, участвующих в исследовании.

## Заключение

В работе представлены результаты вычисления эффективного удельного электрического сопротивления сред, имеющих контрастные мелкомасштабные включения различной геометрической формы — цилиндрической, сферической и эллипсоидной. При этом в качестве численного метода решения задачи о распределении потенциала в гетерогенной среде выступал многомасштабный метод конечных элементов. Поскольку данный метод имеет естественную параллельную структуру, была показана эффективность его параллельной реализации, осуществленной средствами MPI.

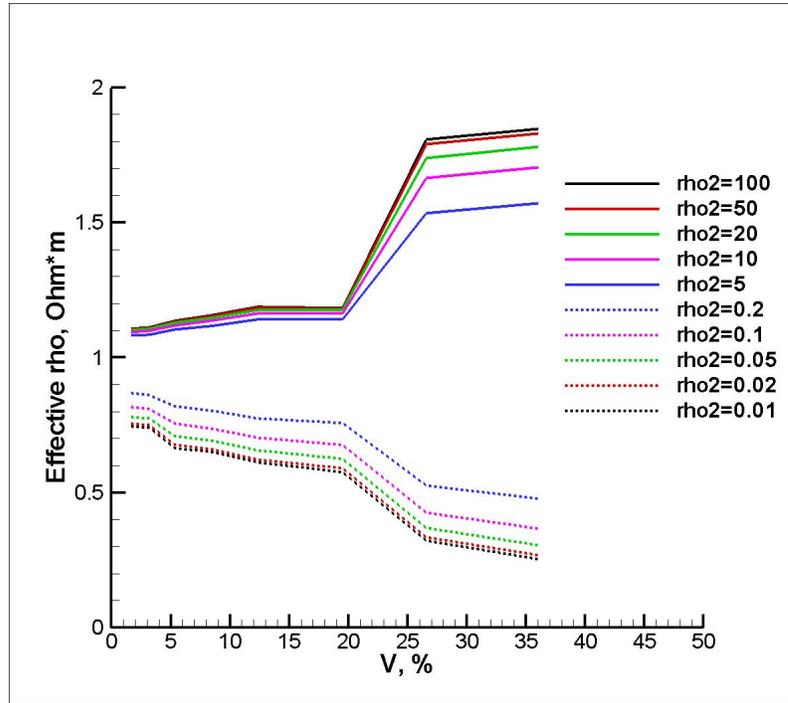


Рис. 7: Эффективное сопротивление среды со сферическими включениями

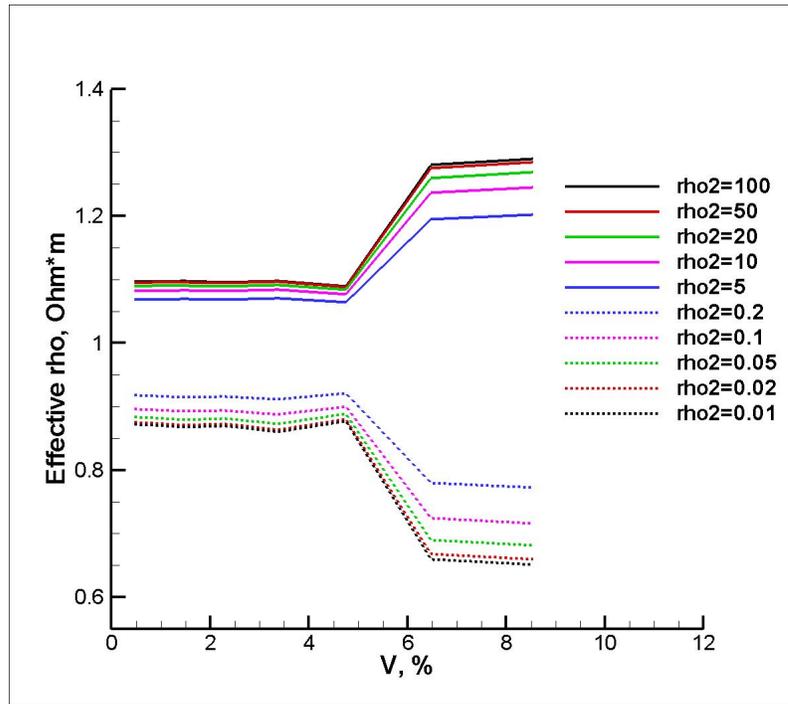


Рис. 8: Эффективное сопротивление среды с эллипсоидными включениями

Включения	Количество ядер				
	4	8	16	32	64
Сферы	798.2	349.9	168.4	64.9	32.1

Таблица 4: Время вычислений (в секундах)

## Список литературы

- [1] A. Abdulle The Finite Element Heterogeneous Multiscale Method: a computational strategy for multiscale PDEs, *Math. Sci. Appl.*, vol. 31, pp. 133-181, 2009
- [2] W. E, B. Engquist The heterogeneous multiscale methods, *Comm. Math. Sci.*, vol. 1, no. 1, pp. 87-132, 2003
- [3] 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
- [4] Y. Efendiev, T. Hou Multiscale finite element methods: theory and applications, Springer, 2009
- [5] 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
- [6] 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
- [7] T.Y. 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, 1999
- [8] 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>
- [9] Л.Г. Страховская, Р.П. Федоренко Об одной специальной разностной схеме // *Численные методы механики сплошной среды*, Новосибирск, т. 7, н. 4, 1976