



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 41 за 2008 г.



Жуков В.Т., Новикова Н.Д.,
Феодоритова О.Б.

Метод суперэлементов для
расчета слоистых сред

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Метод суперэлементов для расчета слоистых сред // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2008. № 41. 20 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2008-41>

ОРДЕНА ЛЕНИНА ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ
МАТЕМАТИКИ
им. М.В.Келдыша
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

В.Т. Жуков, Н.Д. Новикова, О.Б. Феодоритова

**МЕТОД СУПЕРЭЛЕМЕНТОВ
ДЛЯ РАСЧЕТА СЛОИСТЫХ СРЕД**

Москва, 2008

УДК.519.6

Работа выполнена при финансовой поддержке программы №3.1 Отделения математических наук РАН и программы №14 Президиума РАН.

В.Т.Жуков, Н.Д.Новикова, О.Б.Феодоритова.

Метод суперэлементов для расчета слоистых сред

email: zhukov@kiam.ru, nn@kiam.ru, feodor@kiam.ru

Аннотация

Предложена модификация метода суперэлементов для расчетов слоистых сред, в которых физические свойства существенно меняются в одном направлении. Такие задачи возникают, например, в геофизике, микроэлектронике, материаловедении, исследовании нефтегазовых месторождений. Основные элементы метода приводятся на примере решения трехмерного уравнения теплопроводности. Предлагаемая схема использует метод конечных элементов в однородных ячейках и метод суперэлементов в неоднородных ячейках, пересекаемых тонкими слоями. Приведен способ аппроксимации уравнения на границе области при пересечении границы с ячейками сетки. Возможны обобщения метода для решения различных дифференциальных уравнений, включая случай анизотропных коэффициентов.

Стр. 20, рис. 8, библи. 6 назв.

Ключевые слова: метод конечных суперэлементов, слоистые среды

O.B. Feodoritova, N.D. Novikova, V.T. Zhukov.

A superelement method for computation of layered mediums

Abstract

A modification of the superelement method is proposed for calculation of layered medium when physical properties are greatly varied in one direction. Such problems appear in geophysics, microelectronics, science of materials, researches of oil and gas fields. The main elements of the method are showed for solving the 3D heat-conduction equation. The suggested scheme uses the finite elements in uniform cells and superelements in cells crossed by thin layers. An approach to approximate the equation on a domain boundary when boundary intersects a cell is considered. We suppose that generalization of the approach for solving various differential equations including case of anisotropic coefficients is possible.

20 p., 8 fig., 6 ref.

Keywords: finite superelement method, layered medium

Содержание

1	Введение	3
2	Постановка задачи	5
3	Вычислительная схема	5
3.1	Общее описание	5
3.2	Выбор базиса	7
3.3	Аппроксимация во внутренних узлах	11
3.4	Аппроксимация краевых условий	12
3.5	Обработка усеченных ячеек	13
4	Проверка схемы. Модельные расчеты	15
5	Заключение	20

1 Введение

Метод конечных суперэлементов (МКСЭ) [1] является специальным вариантом метода конечных элементов (МКЭ) и успешно применяется для решения дифференциальных уравнений, описывающих многомасштабные процессы, то есть для решения задач, в которых искомые функции обладают существенно разными характеристиками гладкости в разных частях расчетной области. Примерами таких задач являются задачи расчета ядерных реакторов, конвекции–диффузии, теории упругости. МКСЭ подробно освещен в [2–5]. Подход, практически идентичный МКСЭ, известен в иностранной литературе под названием Residual Free Bubble Method [6] – он активно развивается в последнее десятилетие.

В данной работе предложена модификация метода суперэлементов для расчетов слоистых сред, когда физические свойства существенно меняются в одном направлении. Такие задачи возникают в геофизике, микроэлектронике, материаловедении, исследовании нефте-газовых месторождений. Основные элементы предложенного метода иллюстрируются на примере решения трехмерного уравнения теплопроводности.

Для простоты изложения мы ограничимся прямоугольными сетками. Предлагаемая схема является гибридной – использует метод конечных элементов в регулярных ячейках и метод суперэлементов в нерегулярных ячейках, распадаемых тонкими слоями.

Регулярными назовем ячейки, имеющие правильную геометрическую форму (прямоугольный параллелепипед) и однородный состав, что в данном слу-

чае означает постоянство коэффициента теплопроводности в ячейке. Нерегулярные ячейки отличаются от регулярных либо нестандартной геометрической формой, либо неоднородной физической структурой. Изменение формы ячейки может происходить, например, вблизи границы расчетной области как результат пересечения ячейки с граничной поверхностью. Будем именовать такие ячейки далее усеченными. Мы приведем способ аппроксимации уравнения в таких ячейках.

Особый случай представляют неоднородные ячейки. Например, в случае уравнения теплопроводности ячейки могут содержать тонкие слои, на границах которых коэффициент теплопроводности может меняться во много раз ($\approx 10^3 - 10^5$). Использование стандартного МКЭ для таких ячеек приводит к физически неверным профилям решения. Конечно, такие дефекты исправляются введением подробной сетки, но это может приводить к неприемлемому увеличению размерности сеточной задачи. Мы воспользуемся возможностью, которую предоставляет МКСЭ, и в качестве суперэлементного базиса в неоднородных ячейках возьмем приближенные решения исходного уравнения. Эти решения мы строим конечно-элементным методом на сетке, внутренней для каждой неоднородной ячейки. Структура суперэлемента может быть довольно сложной и подробной, однако это не влияет на размерность сеточной задачи – системы линейных уравнений, возникающей при дискретизации. Решение внутри нерегулярной ячейки может быть восстановлено с помощью построенного базиса, что повышает практическую точность результатов.

В методе суперэлементов [1–4] на границе ячейки сетки задают обычный интерполяционный базис, который продолжают внутрь как решение краевых задач. В дальнейшем такой базис будем называть *стандартным суперэлементным базисом*. Для слоистых структур предлагается использовать на границах ячеек, рассекаемых слоями, кусочно-гладкий базис, который продолжается внутрь таких ячеек как суперэлементный базис, т.е. как решение краевых задач. Если ячейка не пересекается тонким слоем, но содержит мелкомасштабные инородные включения, то в такой ячейке строится стандартный суперэлементный базис. Предлагаемая модификация МКСЭ состоит в выборе базисных функций на границах ячеек – этот базис строится на основе приближенных решений исходного уравнения в предположении, что вдоль поверхностей разрыва коэффициентов решение меняется слабо. Такие базисные функции являются кусочно-гладкими (в простейшем случае – кусочно-линейными) и строятся аналитически или численно решением одномерных уравнений.

Предложенный метод можно обобщить для решения различных дифференциальных уравнений, включая системы уравнений, анизотропные среды и т.д.

2 Постановка задачи

В трехмерной области Ω достаточно произвольной формы ищется решение $u = u(x, y, z)$ уравнения теплопроводности

$$Lu \equiv -\nabla(\epsilon \nabla u) = f \quad (2.1)$$

при краевых условиях

$$\alpha(x, y, z)u + \beta(x, y, z)\frac{\partial u}{\partial \vec{n}} + \gamma(x, y, z) = 0, \quad (2.2)$$

$$\alpha^2 + \beta^2 > 0, \quad (x, y, z) \in \partial\Omega.$$

Здесь $\partial\Omega$ – граница области Ω , $\epsilon, f, \alpha, \beta, \gamma$ – заданные функции x, y, z , \vec{n} – внешняя нормаль к $\partial\Omega$. Коэффициент теплопроводности $\epsilon(x, y, z)$ может сильно меняться в области Ω . Именно наличие сильных физических неоднородностей и "неправильная" геометрия области определяют сложность расчета.

Будем исходить из слабой формулировки задачи (2.1)–(2.2) и искать решение в пространстве Соболева $H^1(\Omega)$ – пространстве функций, имеющих обобщенные производные первого порядка, интегрируемые с квадратом. При записи слабой формулировки ограничимся для простоты задачей Дирихле при нулевых краевых условиях: ищется функция $u \in H_0^1$ такая, что

$$B(u, v) = (f, v), \quad \forall v \in H_0^1, \quad (2.3)$$

где (\cdot, \cdot) – скалярное произведение в $L_2(\Omega)$, $B(\cdot, \cdot)$ – билинейная форма:

$$B(u, v) = (\epsilon \nabla u, \nabla v); \quad H_0^1 = \{v \in H^1, v = 0 \text{ на } \partial\Omega\}.$$

В качестве аппроксимирующего пространства выбирается типичное для МКЭ пространство кусочно-полиномиальных функций. В стандартном МКЭ оно состоит из кусочно-трилинейных (линейных по каждому аргументу) функций, а в случае МКСЭ строится расширение указанного пространства с помощью введения в некоторых (или во всех) ячейках кусочно-гладкого суперэлементного базиса.

Задача (2.1)–(2.2) выбрана из соображений простоты изложения метода, допускающего более широкое обобщение.

3 Вычислительная схема

3.1 Общее описание

Для решения поставленной задачи строится комбинированная схема: регулярные ячейки обрабатываются стандартным МКЭ, а для нерегулярных выбирается МКСЭ. В качестве стандартных конечных элементов будем использовать

линейные функции, но возможно использование конечных элементов высокого порядка, как это сделано в [4]. Покроем расчетную область Ω сеткой Ω_h . Для простоты ограничимся случаем, когда ячейки сетки – прямоугольные параллелепипеды со сторонами L_x, L_y, L_z . Исключение составляют усеченные ячейки, расположенные вблизи границы. Узлы сетки нумеруются индексами (i, j, k) , в них определены сеточные функции; ячейки нумеруются полуцелыми индексами $(i + 1/2, j + 1/2, k + 1/2)$. Предлагаемая расчетная схема состоит в следующем.

- В каждой ячейке $(i + 1/2, j + 1/2, k + 1/2)$ вводится свой базис, конечно-элементный или суперэлементный. КЭ-базис состоит из 8 функций – по числу узлов сетки, связанных с данной ячейкой. СЭ-базис состоит из девяти функций. Конечно, на самом деле функции СЭ-базиса должны иметь еще индекс – номер типа ячейки. Этот индекс для простоты опускаем. Число разных типов ячеек может быть существенно меньше числа ячеек в расчете. Это важно иметь ввиду, так как расчет СЭ-базиса является достаточно дорогостоящей процедурой.
- Определяется процедура "интерполяции" сеточной функции u_{ijk} , то есть сопоставления ей непрерывной функции $u(x, y, z)$. Эта процедура осуществляется с помощью соответствующего данной ячейке базиса. В случае стандартного МКЭ имеем

$$u(x, y, z) = \sum_{m=1}^8 u_m \varphi_m(x, y, z), \quad (3.1)$$

где базисные функции $\varphi_m(x, y, z)$ – линейные по каждому аргументу и строятся так, что функция $\varphi_m = 1$ в m -ой вершине и $\varphi_m = 0$ в остальных, $m = 1, 2, \dots, 8$. Приведенная интерполяционная формула использует нумерацию, связанную с нумерацией вершин в ячейке (см. Рис. 1).

В случае МКСЭ процедура интерполяции имеет вид

$$u(x, y, z) = \sum_{m=1}^8 u_m \psi_m(x, y, z) + \psi_0, \quad (3.2)$$

где $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_8$ – специальный СЭ-базис (см. п.3.1).

- Используя представление (3.1) или (3.2), "подставим" функцию $u(x, y, z)$ в (2.3), то есть составим дискретные уравнения. В каждом внутреннем узле i, j, k сетки Ω_h разностная схема формально может быть записана в виде 27-точечного разностного уравнения

$$\sum_{\alpha=-1}^1 \sum_{\beta=-1}^1 \sum_{\gamma=-1}^1 C_{ijk}^{\alpha\beta\gamma} u_{i+\alpha, j+\beta, k+\gamma} + F_{ijk} = 0. \quad (3.3)$$

Разностная схема (3.3) дополняется краевыми условиями (см. п.3.3–3.4) и полученная система линейных уравнений решается каким-либо известным методом.

3.2 Выбор базиса

Рассмотрим отдельную ячейку T , узлы которой занумеруем одним индексом (см. Рис. 1).

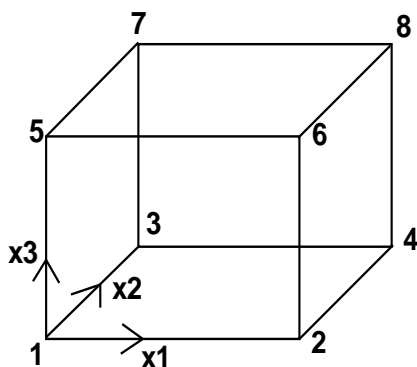


Рис. 1. Локальная нумерация узлов в ячейке сетки

При обработке ячейки вместо глобальных координат (x, y, z) используем локальную систему координат (x_1, x_2, x_3) . Введем в ячейке предбазисную систему функций:

$$\chi(x) = \{\chi_1, \dots, \chi_8\} = \{1, x_1, x_2, x_3, x_1x_2, x_2x_3, x_3x_1, x_1x_2x_3\}. \quad (3.4)$$

Здесь под x понимается точка трехмерного пространства $x = (x_1, x_2, x_3)$.

Вычислим матрицу $A = (a_{nm})$, превращающую базис χ_i в обычный интерполяционный лагранжев базис

$$\varphi_m = \sum_{n=1}^8 a_{nm} \chi_n, \quad m = 1, \dots, 8.$$

Матрица $A = \Phi^{-1}$, где элементы матрицы Φ определяются как $\Phi_{nm} = \chi_m(x_n)$.

Таким образом функции φ_m образуют трилинейный интерполяционный базис в ячейке. Точка m является полюсом функции φ_m , т.е. в этой точке функция равна 1, тогда как в остальных семи узлах, как и на ребрах, их соединяющих, она равна 0.

Базис в суперэлементе состоит из решений (понимаемых в обобщенном смысле) рассматриваемого уравнения $Lu = f$ в ячейке с учетом ее реального

строения. В стандартном МКСЭ, построенном для детального учета инородных включений, эти решения (базисные функции) определяются краевыми значениями, совпадающими с обычным интерполяционным базисом на каждой грани ячейки T . В слоистых структурах характер неоднородностей требует задания на гранях ячеек более сложных функций, например, кусочно-линейных.

Итак, построение базиса в суперэлементе требует решения задач, которые мы назовем "элементарными". Ниже следует формулировка этих задач.

Вводим достаточно подробную сетку T_h в ячейке T с учетом ее внутренней физической структуры. Предполагаем для простоты, что сетка T_h состоит только из регулярных ячеек, т. е. однородных ячеек правильной геометрической формы.

На этой сетке решаем девять (по числу разыскиваемых базисных функций) краевых задач; восемь однородных:

$$L\psi_m = 0, \quad (x, y, z) \in T, \quad (3.5)$$

$$\psi_m = \varphi_m, \quad m = 1, \dots, 8, \quad (x, y, z) \in \partial T,$$

и одну неоднородную задачу:

$$L\psi_0 = f, \quad (x, y, z) \in T, \quad (3.6)$$

$$\psi_0 = 0, \quad (x, y, z) \in \partial T.$$

Здесь в (3.5) краевые значения $\varphi_m(x, y, z)$ на гранях ячейки T либо определяются стандартным конечно-элементным базисом, либо заданы, исходя из характера неоднородностей ячейки T . Конечно, невозможно формализовать задание краевых значений для произвольных неоднородных сред. Но достаточно часто неоднородности имеют слоистую структуру, например, являются тонкими теплоизоляционными или проводящими слоями. Тогда можно построить специальные граничные условия, пример которых приведен в п. 4.

Заметим, что если ячейка обладает какой-либо симметрией, то число задач может быть меньше. Решение элементарных задач (3.5)–(3.6) на сетке T_h основано на стандартном МКЭ, так как аналитическое решение не всегда возможно. Значения базисных функций $\psi_m, m = 0, 1, \dots, 8$ находим в узлах введенной нами локальной суперэлементной сетки T_h .

В каждой ячейке T далее находим билинейные формы $B(\psi_m, \varphi_n)$ и линейные формы (f, φ_n) из (2.3), вычисляя соответствующие интегралы, интегрируя по ячейке T как по сеточной структуре. Суммируя результат по всем восьми ячейкам, окружающим узел (i, j, k) , получим разностное уравнение, аппроксимирующее уравнение (2.3) в узле. Тот факт, что билинейная и линейная

формы вычисляются не по всей расчетной области, а по отдельной ячейке, в дальнейшем будем отмечать как $B^{cell}(\cdot, \cdot)$ и $(\cdot, \cdot)^{cell}$.

Заметим, что все вычисляемые в каждом суперэлементе билинейные формы $B^{cell}(\psi_m, \varphi_n)$ являются линейными комбинациями "элементарных" форм $B^{elem}(\varphi_q, \varphi_p)$, определяемых КЭ-базисом в ячейках локальной сетки T_h . Коэффициенты линейных комбинаций определяются из решения задач (3.5)–(3.6). Элементарные билинейные формы легко выписать в явном виде:

$$B^{elem}(\varphi_q, \varphi_p) = \sum_{r=1}^8 \sum_{t=1}^8 a_{rq} a_{tp} B^{elem}(\chi_r, \chi_t),$$

где a_{rq} , a_{tp} – элементы матрицы перехода от базиса $\{\chi\}$ к лагранжевому базису $\{\varphi\}$. Базис $\{\chi\}$ дан в (3.4) и его функции можно записать в мультииндексной нумерации как

$$\chi_r = x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} x_3^{\alpha_3}, \quad \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 = 0, 1;$$

$$\chi_t = x_1^{\beta_1} x_2^{\beta_2} x_3^{\beta_3}, \quad \beta_1, \beta_2, \beta_3 = 0, 1.$$

Тогда (для ячейки с размерами l_x, l_y, l_z) имеем

$$B^{elem}(\chi_r, \chi_t) = \epsilon l_x l_y l_z \times \left\{ \begin{aligned} & \frac{\alpha_1 \beta_1}{(l_x)^2 (\alpha_1 + \beta_1 + 1) (\alpha_2 + \beta_2 - 1) (\alpha_3 + \beta_3 - 1)} + \\ & \frac{\alpha_2 \beta_2}{(l_y)^2 (\alpha_1 + \beta_1 - 1) (\alpha_2 + \beta_2 + 1) (\alpha_3 + \beta_3 - 1)} + \\ & \frac{\alpha_3 \beta_3}{(l_z)^2 (\alpha_1 + \beta_1 - 1) (\alpha_2 + \beta_2 - 1) (\alpha_3 + \beta_3 + 1)} \end{aligned} \right\}.$$

Мы будем использовать эти формулы и для расчета однородной ячейки основной сетки. Аналогично поступаем с линейными формами $(f, \varphi_n)^{cell}$.

Как уже сказано выше, при расчете суперэлемента в формулировке (3.5)–(3.6) краевые условия на границе ячейки T могут быть более сложными. Например, если ячейка содержит "непроводящие" зоны с очень малым коэффициентом теплопроводности, то использование линейного базиса на ее границе является недостаточным для получения физически правильных решений. Для расчетов слоистых сред, в которых физические свойства существенно меняются в одном направлении, можно построить на границах ячеек специальный базис, который затем будет продолжен внутрь обычным для суперэлемента способом: путем решения последовательности краевых задач (3.5)–(3.6).

Специальный базис на границе ячейки T можно построить, если неоднородности имеют вид тонких слоев, например, рассекающих ячейку T на две части. Для простоты рассмотрим случай, когда теплопроводящая ячейка разделена тонким теплоизоляционным слоем. Пусть этот слой параллелен, например, одной из боковых граней ячейки T , и его толщина много меньше размера ячейки L . Пересечение этого слоя с нижней гранью $ABCD$ ячейки показано на Рис. 2b (этот слой для наглядности изображен достаточно широким).

Рис. 2 демонстрирует отличие базисной функции на грани ячейки в этом случае. Вверху изображена стандартная билинейная базисная функция на грани ячейки, внизу – вид специальной базисной функции, которая является кусочно-линейной, и находится аналитически из условия воспроизведения точного решения одномерного уравнения в ячейке. Мы предполагаем, что коэффициент теплопроводности является кусочно-постоянным и искомая функция меняется только в направлении, перпендикулярном тонкому слою. Расположение слоя в ячейке может быть произвольным.

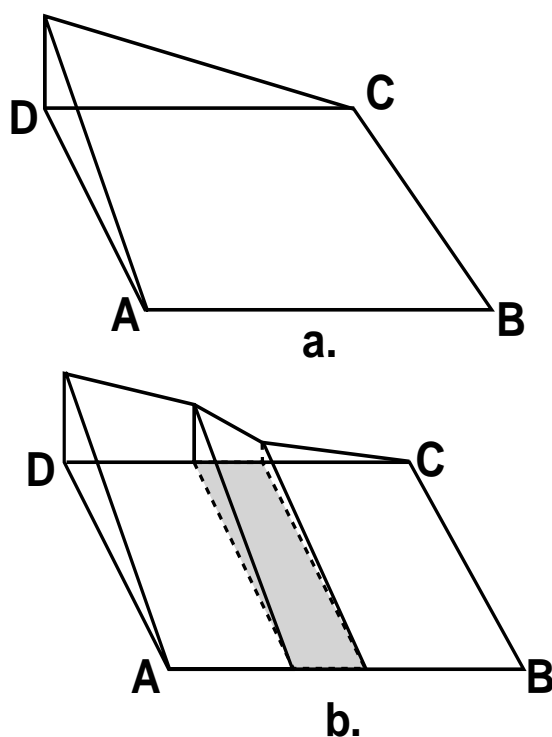


Рис.2. Вид базисной функции на грани ячейки:
 а. стандартный базис; б. специальный базис

Такой вид граничной базисной функции обеспечивает правильное описание поля температур при наличии узкого теплоизоляционного слоя без использования подробной сетки.

Усеченные (геометрически неправильные) ячейки предполагаются для простоты однородными и в них выбирается стандартный КЭ–базис. Обработке усеченных ячеек посвящен раздел 3.5.

Кроме билинейных форм $B^{elem}(\varphi_q, \varphi_p)$, на локальной сетке в суперэлементе вычисляются линейные формы $(f, \varphi_p)^{elem}$, с помощью которых находятся величины $(f, \varphi_n)^{cell}$, относящиеся к ячейкам основной сетки. Если правая часть известна как функция $f = f(x, y, z)$, то $(f, \varphi_p)^{elem}$ могут быть вычислены по какой-либо квадратурной формуле. В случае сеточного задания функции f_{ijk} расчету линейных форм предворяется процедура интерполяции (3.1).

3.3 Аппроксимация во внутренних узлах

Аппроксимационное уравнение во внутреннем узле (i, j, k) основано на слабой формулировке (2.3). К каждой такому узлу (i, j, k) примыкает 8 счетных ячеек, в каждой из которых рассчитаны матрицы билинейных форм $B^{cell}(\psi_m, \varphi_n)$ и линейные формы $(f, \varphi_n)^{cell}$. Эти величины в зависимости от типа ячейки получены либо с помощью конечно-элементного базиса либо с помощью СЭ-базиса. Дальнейший алгоритм составления дискретных уравнений единообразен. Каждая ячейка может быть в одной из 8 ситуаций в зависимости от того, какая вершина ячейки является центральной точкой шаблона. Получаемая разностная схема имеет 27-точечный шаблон, локальная нумерация узлов которого изображена на Рис. 3. Каждая внутренняя ячейка участвует в формировании разностных уравнений в 8 узлах.

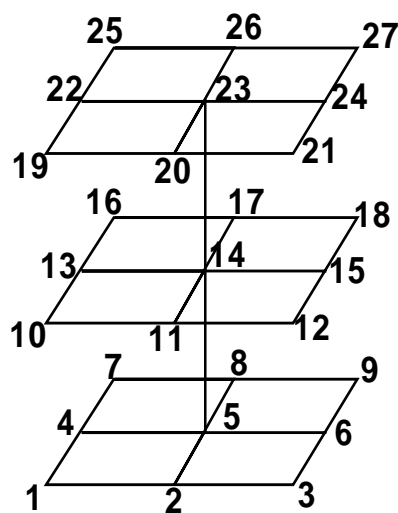


Рис.3. Шаблон разностной схемы в узле 14 с локальной нумерацией узлов

3.4 Аппроксимация краевых условий

Краевое условие задается в виде

$$\alpha(x, y, z)u + \beta(x, y, z) \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} + \gamma(x, y, z) = 0, \quad \alpha^2 + \beta^2 \neq 0,$$

\vec{n} – внешняя нормаль к границе области. Предполагаем, что вся поверхность $\partial\Omega$ аппроксимирована конечным числом плоских многоугольников, на каждом из которых функции α, β, γ считаются постоянными. Случай, когда граничная поверхность пересекает ячейку сетки, рассмотрим в п.3.4, а здесь разберем случай, когда одна из граней ячейки лежит на границе $\partial\Omega$.

Удобно различать два типа граничных узлов.

1. $\beta = 0, \alpha \neq 0$ означает задание на граничной грани ячейки условия Дирихле. Его реализация очевидна: в граничном узле значение искомой функции задано. В итерационном процессе решения системы линейных уравнений, аппроксимирующих задачу, граничные узлы с условием Дирихле не участвуют и в них сохраняется заданное граничное значение.

2. Пусть $\beta \neq 0$ на одной из граничных граней S_b ячейки. Граничные узлы с условием этого типа в итерациях участвуют наравне с внутренними. В этом случае при расчете граничной ячейки билинейные формы должны быть "поправлены"

$$B(\varphi_q, \varphi_p) := B(\varphi_q, \varphi_p) + C(\varphi_q, \varphi_p),$$

$$C(\varphi_q, \varphi_p) = - \int_{S_b} \epsilon \left(\frac{\alpha \varphi_q + \gamma}{\beta} \right) \varphi_p dS. \quad (3.7)$$

Напомним, что в каждой ячейке искомая функция восполняется с помощью процедуры интерполяции (3.1). При этом базисные функции φ_m линейно комбинируются из функций $\{\chi_n, n = 1, \dots, 8\}$ предбазисной системы (3.4). Таким образом, дополнительные билинейные формы (3.7) являются линейными комбинациями элементарных поверхностных интегралов

$$I_{bound} = \int x_1^{r_1} x_2^{r_2} x_3^{r_3} dS, \quad r_1, r_2, r_3 = 0, 1.$$

Формулы, по которым могут быть вычислены эти поверхностные интегралы, различаются в зависимости от положения грани S_b .

Случай 1 (левая/правая грани), $dS = dx_2 dx_3$:

$$I_{bound} = \begin{cases} 0, & \text{на левой грани, если } r_1 = 1, \\ \frac{L_y L_z}{(r_2 + 1)(r_3 + 1)}, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Случай 2 (нижняя/верхняя грани) , $dS = dx_1 dx_2$:

$$I_{bound} = \begin{cases} 0, & \text{на нижней грани, если } r_3 = 1, \\ \frac{L_x L_y}{(r_1 + 1)(r_2 + 1)}, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Случай 3 (передняя/задняя грани) , $dS = dx_1 dx_3$:

$$I_{bound} = \begin{cases} 0, & \text{на передней грани, если } r_2 = 1, \\ \frac{L_x L_z}{(r_1 + 1)(r_3 + 1)}, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Как уже отмечалось, для граничных узлов второго типа строится аппроксимирующее уравнение по правилу, совпадающему с уже описанным выше для внутренних узлов. Отличия связаны только с количеством ячеек, примыкающих к рассчитываемому узлу. Если узел лежит на поверхности, ограничивающей область расчета, к нему примыкают 4 счетных ячейки. Шаблон схемы в этом случае состоит из 18 точек. Если узел попал на линию пересечения двух граничных плоскостей, количество ячеек уменьшается до двух, шаблон становится 12-точечным. И наконец, для узла, лежащего на пересечении трех плоскостей, коэффициенты схемы вычисляются через билинейные формы только одной ячейки. Шаблон схемы в этом случае – 8-точечный.

3.5 Обработка усеченных ячеек

Теперь рассмотрим случай, когда граничная поверхность пересекает ячейку сетки.

Введем следующие обозначения:

K – регулярная счетная ячейка;

K_{cut} – нерегулярная (геометрически неправильная) ячейка;

V_{cut} – объем той части, которую надо добавить к нерегулярной ячейке до получения геометрически правильной формы. Будем далее для краткости именовать эту часть отсутствующей;

S_{cut} – площадь неправильной грани – фрагмента плоскости, ограничивающей ячейку со стороны отсутствующей части.

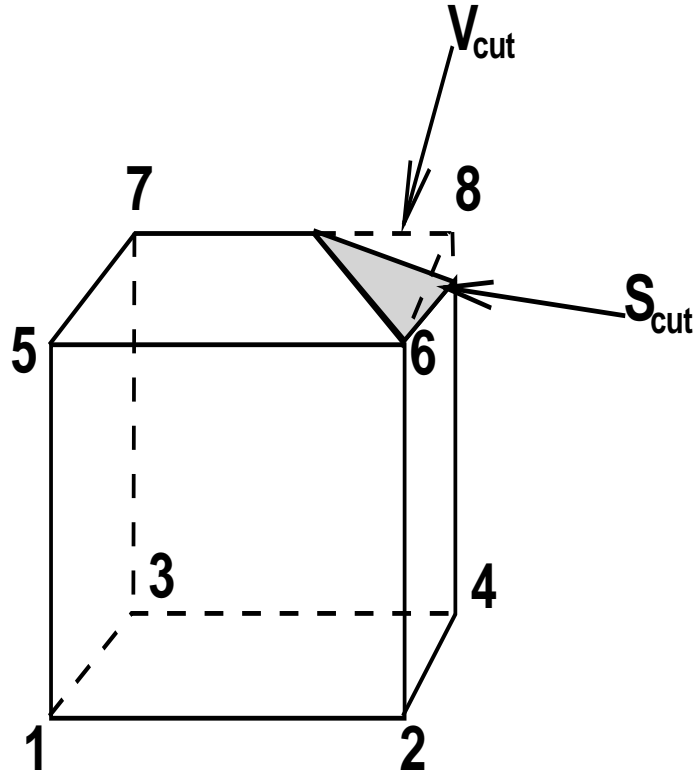


Рис. 4. Пример усеченной ячейки

Итак, решение в нерегулярной ячейке представляем в уже привычном виде

$$u = \sum_{m=1}^8 u_m \varphi_m, \quad m = 1, \dots, 8.$$

Среди узлов есть такие, которые реально в расчетной сетке не присутствуют – на Рис. 4 это узел 8. Мы виртуально дополняем ячейку до регулярной и вводим в рассмотрение дополнительные узлы. Напомним, что результатом обработки каждой ячейки является матрица билинейных форм $B^{cell}(\varphi_m, \varphi_n)$, $m, n = 1, \dots, 8$. Для усеченной ячейки элементы этой матрицы должны быть исправлены по сравнению с общим случаем

$$B^{cell}(\varphi_m, \varphi_n) := B^{cell}(\varphi_m, \varphi_n) - (\epsilon \nabla \varphi_m, \nabla \varphi_n)_{center} V_{cut}.$$

Второе слагаемое в правой части этого соотношения получается в результате применения простейшей квадратурной формулы к интегралу по отсутствующей части. В частности, мы используем формулу средних, выбирая в качестве узла квадратуры центра тяжести отсутствующей части.

Поскольку в рассмотрение введены виртуальные узлы, система получающихся разностных уравнений не будет полной. Для её замыкания используем краевое условие на неправильной грани S_{cut} . Пусть на ней задано соотношение

$$\alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} + \gamma = 0.$$

Тогда замыкающие уравнения имеют вид

$$\sum_{m=1}^8 u_m (\alpha \varphi_m + \beta \frac{\partial \varphi_m}{\partial \vec{n}} + \gamma)_{point} = 0.$$

Число этих уравнений должно совпадать с числом введенных виртуальных узлов. Точки "point", в которых требуется выполнение граничного соотношения, могут быть выбраны достаточно произвольно. Мы предлагаем выбирать центр тяжести неправильной грани ячейки и, если необходимо, то точки пересечения с этой гранью ребер ячейки.

Линейные формы $(f, \varphi_n)^{cell}$ по усеченной ячейке вычисляются достаточно очевидным образом.

4 Проверка схемы. Модельные расчеты

Цель расчетов – проверка работоспособности МКСЭ для расчетов неоднородных ячеек со слоистыми структурами.

Рассмотрим в качестве модельного примера простейшую, но содержательную задачу: теплопроводящий куб, содержащий тонкую пластину–изолятор толщиной H . Для простоты считаем, что пластина параллельна грани куба $x = 0$, а по оси OY , OZ состав куба однородный. Сечение куба плоскостью $y = 0.5$ показано на Рис. 5. Значение $H = 0.25$ взято не очень малым для наглядности рисунков. На гранях куба $y = 0$, $y = 1$, $z = 0$, $z = 1$ задано условие Неймана $\partial u / \partial \vec{n} = 0$; на левой ($x = 0$) и правой ($x = 1$) гранях задана постоянная температура $u = 2$ и $u = 1$ соответственно. Точное решение этой задачи при любых постоянных ε_0 , ε_1 , ε_2 есть функция $u(x, y, z)$, постоянная по y и z и кусочно-линейная по x . Эту функцию нетрудно записать в явном виде. Для наглядности мы ограничимся случаем, когда $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon \gg \varepsilon_0$. Например, можно взять $\varepsilon = 1$ и $\varepsilon_0 = 0.0001$. Тогда левую грань куба можно интерпретировать как "горячую" стенку, а правую – как "холодную". Пластина является теплоизолятором.

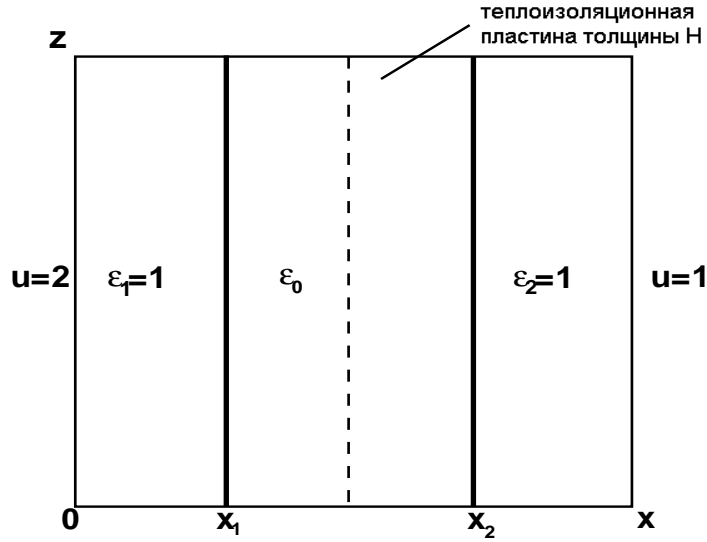


Рис. 5. Теплопроводящая среда с изоляционным слоем. Показано сечение куба плоскостью $y = 0.5$; $H = x_2 - x_1 = 0.25$, $\varepsilon_0 = 0.0001$

Слева от пластины установится практически равномерная температура (точнее, на левом интерфейсе $x = x_1$ точное значение $u_1 = \frac{2 + 3\varepsilon_0/\varepsilon}{1 + 2\varepsilon_0/\varepsilon} \approx 2$), а справа от пластины вещество остается холодным $u \approx 1$ (на правом интерфейсе $x = x_2$ точное значение $u_2 = \frac{1 + 3\varepsilon_0/\varepsilon}{1 + 2\varepsilon_0/\varepsilon} \approx 1$), внутри пластины установится линейный профиль.

С практической точки зрения "точным" решением можно считать непрерывную кусочно-линейную функцию

$$u(x, y, z) = \begin{cases} 2, & 0 \leq x < x_1, \\ \frac{x + x_1 - 2x_2}{x_1 - x_2}, & x_1 \leq x < x_2, \\ 1, & x_2 \leq x \leq 1. \end{cases} \quad (4.1)$$

Мы предполагаем, что число ячеек сетки во всей задаче велико $10^4 \div 10^6$, среди них какая-то часть – композитные ячейки, содержащие инородные включения. Заметим, что если рассматривать куб как модель одной ячейки, то стандартный конечно-элементный интерполянт описывает построенное решение (4.1) физически неверно. Профили решения и интерполянта показаны на Рис. 6.

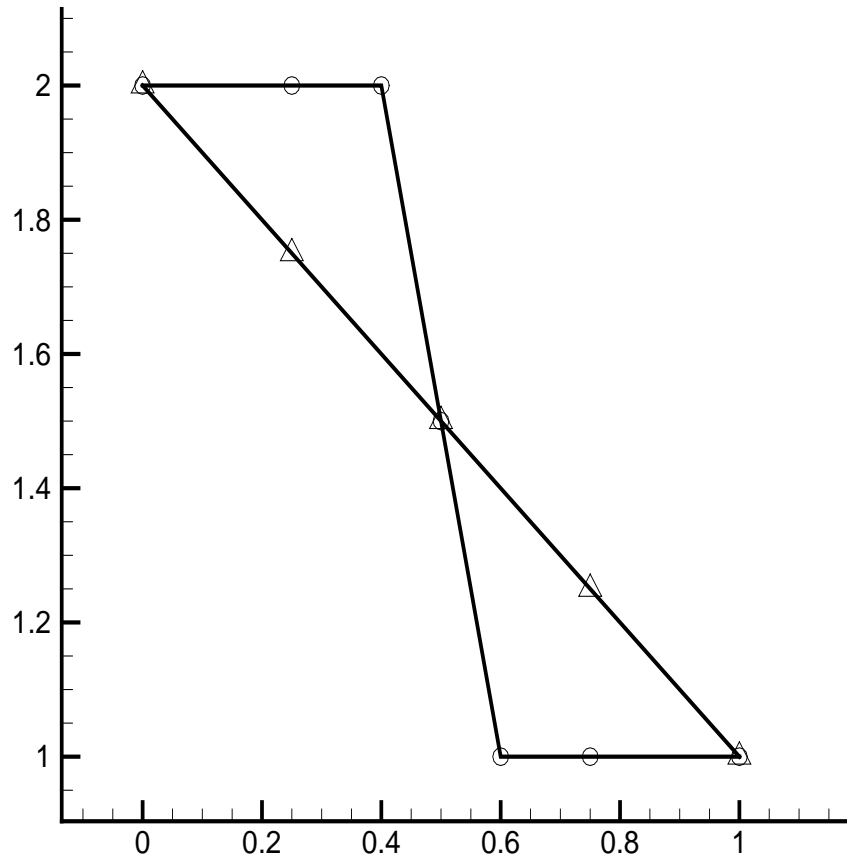


Рис. 6. Профили точного решения ($- \circ -$) и его интерполянта ($-\Delta-$) в предположении, что куб – модель одной ячейки

Такое приближение можно трактовать как прогрев холодной части, несмотря на наличие теплоизоляционной пластины.

Конечно, если ввести сетку, согласованную с разрывами коэффициента ε , то в рассматриваемом случае МКЭ дает точное решение.

Введем для наглядности не слишком подробную сетку и не будем согласовывать ее с разрывами коэффициента ε . Тогда приближенное МКЭ – решение будет недостаточно удовлетворительным (Рис. 7, сетка $4 \times 4 \times 4$). Детальная сетка в этом расчете не нужна, так как мы моделируем ситуацию, когда толщина слоя много меньше шага сетки.

Заметим, что при составлении схемы в этом расчете билинейные формы $B(\varphi_m, \varphi_n)$ вычисляются с учетом композитного состава ячеек, но это не приводит к значительному улучшению.

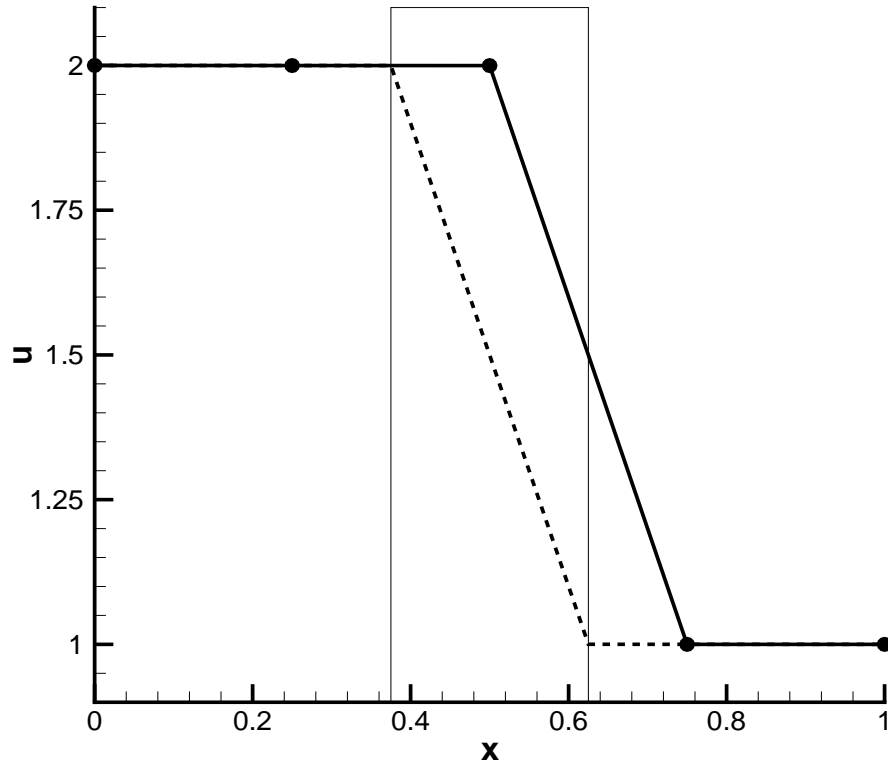


Рис.7. Сетка $4 \times 4 \times 4$, несогласованная с разрывами. Показаны профили по оси x точного решения (пунктирная линия) и МКЭ – решения (жирная линия).

Оснастим теперь каждую композитную ячейку суперэлементным базисом. Рассмотрим сетку $10 \times 10 \times 10$, несогласованную с разрывами. Часть ячеек этой сетки (половина) – однородные и в них мы используем стандартный МКЭ–базис. В неоднородных по составу ячейках строим СЭ–базис. Если строить СЭ–базис в ячейке, используя линейный базис на ее гранях, то результаты по сравнению с предыдущими расчетами улучшаются, но не в достаточной степени. Как отмечено в п. 3.1, на гранях композитной ячейки следует строить специальный базис. Построим такой базис (см. Рис.2b), используя точные решения одномерной задачи. Тогда МКСЭ приводит к физическому правильному профилю приближенного решения: во всех узлах сетки приближенное решение совпадает с точным и более того, с помощью построенного базиса решение точно восстанавливается внутри каждой ячейки (Рис. 8). Отметим, что для построения СЭ–базиса (решения краевых задач (3.5), (3.6)) внутри ячейки строилась внутренняя локальная сетка $4 \times 4 \times 4$, адаптированная к разрыву коэффициента ε , т.е. объем вычислений для расчета суперэлементного базиса был не очень большим. На Рис. 8 показаны: точное решение; стандартное суперэлементное решение (на гранях композитной ячейки строится

стандартный линейный базис); модифицированное суперэлементное решение (на гранях композитных ячеек строится "точный" базис) – это решение совпадает с искомой функцией (в данной задаче она известна) в узлах сетки и любых других точках области.

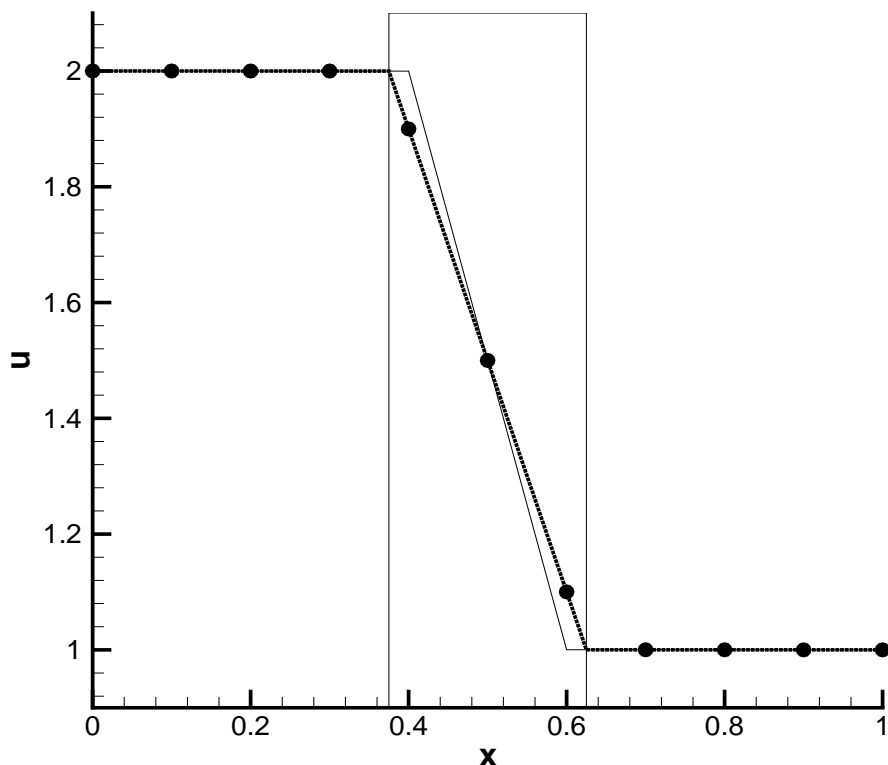


Рис.8. Точное решение – жирная линия, стандартное суперэлементное решение – тонкая линия; модифицированное суперэлементное решение – совпадает с точным и отмечено в узлах ячеек символом ●

В практически важных расчетах размер теплоизоляционной пластины очень мал, и мы предполагаем, что адаптация сетки к таким слоистым средам неосуществима – приводит к сильному росту размерности системы дискретных уравнений, увеличению числа обусловленности.

Были проведены и другие модельные расчеты. Они подтверждают правильность выбранного подхода. Мы ограничились в этой работе демонстрацией метода на самом простом примере, и не представили результатов изучения аппроксимации краевых условий на криволинейных границах области, так как это сторона проблемы прямо не связана с МКСЭ и требует отработки геометрического описания криволинейных границ. В дальнейшем планируется развитие компьютерной программы в сторону универсализации описания геометрии сложных объектов и проведение численных экспериментов для задач, представляющих практический интерес.

5 Заключение

Разработана и на простейшем примере проверена схема, предназначенная для расчетов многомасштабных процессов в слоистых средах, когда физические свойства существенно меняются в одном направлении. В однородных по составу ячейках может использоваться стандартная конечно-элементная аппроксимация, в композитных ячейках – специальная суперэлементная схема. Введение в таких ячейках локальной сетки не приводит к росту размерности системы линейных уравнений относительно неизвестной сеточной функции, определенной на основной сетке. Увеличение вычислительных затрат на нахождение элементов матрицы линейной системы не является препятствием для создания эффективной программы для параллельного компьютера. Экспериментальная программа написана на C++ и может быть использована как основа прикладной программы.

Приведенный вариант метода конечных суперэлементов может быть реализован для сеток с ячейками произвольной формы, дифференциальных уравнений и систем более общего вида.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Л.Г. Страховская, Р.П. Федоренко.* Об одной специальной разностной схеме. В кн. Численные методы механики сплошной среды, т.7, №. 4, Новосибирск. ВЦ СО АН СССР. 1976. с.149–163.
2. *Р.П. Федоренко.* О некоторых задачах и приближенных методах вычислительной механики. // ЖВМ и МФ, 1994, т.34, № 2, с.267–289.
3. *R.P. Fedorenko.* Finite Superelement Method and Multigrid Method in Problems of Elasticity Theory // *Computat. Fluid Dynamics Journal*, vol.5, № 2, pp. 203–212, 1996.
4. *В.Т. Жуков, Н.Д. Новикова, Л.Г. Страховская, Р.П. Федоренко, О.Б. Феодоритова.* Метод конечных суперэлементов в задачах конвекции–диффузии// Препринт, Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, №8, 2001.
5. *В.Т. Жуков, Л.Г. Страховская, Р.П. Федоренко, О.Б. Феодоритова.* Об одном направлении в конструировании разностных схем.// ЖВМ и МФ, 2002, т. 42, № 2, с. 222–234.
6. T.J.R. Hughes. Multiscale phenomena: Green’s function, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods. *Computat. Methods Appl. Mech. Engineering*, 127 (1995), pp. 387–401.