

ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека Препринты ИПМ • Препринт № 124 за 2020 г.



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

В.Т. Жуков, О.Б. Феодоритова

Алгоритм расчета физических процессов в высокотемпературных сверхпроводниках

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Жуков В.Т., Феодоритова О.Б. Алгоритм расчета физических процессов в высокотемпературных сверхпроводниках // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2020. № 124. 27 с. <u>https://doi.org/10.20948/prepr-2020-124</u> <u>https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2020-124</u>

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В. Келдыша Российской академии наук

В.Т. Жуков, О.Б. Феодоритова

Алгоритм расчета физических процессов в высокотемпературных сверхпроводниках

УДК 519.63

В.Т. Жуков, О.Б. Феодоритова

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия

Алгоритм расчета физических процессов в высокотемпературных сверхпроводниках

Изложен алгоритм расчета электро- и теплофизических полей в высокотемпературных сверхпроводниках. Для приближенной трехмерной математической модели построен алгоритм решения дифференциальных уравнений, описывающих распределения температуры и электрического потенциала. Основу алгоритма и его компьютерной реализации составляет адаптивный многосеточный метод. Продемонстрирована работоспособность алгоритма на примерах решения анизотропных модельных задач.

Ключевые слова: численное моделирование, высокотемпературный сверхпроводник, многосеточный метод

Victor Timofeevich Zhukov, Olga Borisovna Feodoritova

Algorithm for calculating physical processes in high-temperature superconductors

An algorithm for calculating the electrical and thermal physical fields in hightemperature superconductors is described. For an approximate three-dimensional mathematical model, an algorithm for solving differential equations describing the temperature and electric potential distributions is constructed. The algorithm and its computer implementation are based on the adaptive multigrid method. The performance of the algorithm is demonstrated by examples of solving anisotropic model problems.

Keywords: numerical simulation, high-temperature superconductor, multigrid.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-01-00670

Оглавление

| 3 |
|----|
| 4 |
| 8 |
| |
| |
| |
| 27 |
| |

1. Введение

В [1] изложена математическая модель высокотемпературного сверхпроводника и поставлена нелинейная проблема нахождения пространственного распределения температуры, тока и напряжения с целью численного моделирования мезоструктур монокристаллов висмутсодержащих купратов Bi-2212 для анализа характеристик.

Отсутствие признанной теории, объясняющей феномен высокотемпературной сверхпроводимости, приводит необходимости К планировать численные эксперименты, в которых может быть установлена взаимная связь между структурными параметрами и сверхпроводящими В характеристиками. полупроводниках Bi-2212 сверхпроводящие И диэлектрические слои образуют анизотропную структуру с джозефсоновским механизмом протекания тока сквозь непроводящие участки. Физические явления в сверхпроводниках носят анизотропный и разномасштабный характер, особенности например, формироваться локальные могут В виде токопроводящих горячих каналов. Для описания таких явлений требуется использование детальных трехмерных сеток с числом узлов до $\sim 10^9$. Так как в результате дискретизации и линеаризации исходная задача сводится к многократному решению систем разностных эллиптических уравнений, то естественным выбором численного метода их решения является многосеточный метод.

В качестве расчетного алгоритма нами используется адаптивный многосеточный метод на структурированных декартовых сетках, допускающий простое обобщение на многоблочные конформные сетки. В данной работе представлены вычислительные основы компьютерного кода, предназначенного для решения исходной задачи.

Исследования слоистых джозефсоновских структур проводятся в российских и зарубежных научных центрах. В ИПМ им. М.В. Келдыша такие исследования ведутся пока на стадии выработки численной методики; работа инициирована профессором В.М. Красновым, сотрудником лаборатории

3

экспериментальной физики конденсированных сред Стокгольмского университета, см. [2–4].

2. Математическая модель

Внутри твёрдого тела – прямоугольного параллелепипеда $\Omega = \{(x^1, x^2, x^3): l_{\alpha}^- \le x^{\alpha} \le l_{\alpha}^+, \alpha = 1, 2, 3\}$ – ищутся согласованные стационарные распределения температуры *T* и электрического потенциала φ . Эти распределения ищутся методом установления: решается нестационарная система уравнений

$$c(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot k(T) \ \nabla T + \nabla \phi \cdot \sigma(T) \ \nabla \phi,$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot \sigma \nabla \phi$$
(1)

с контролем установления при больших временах t. В уравнениях (1) k(T) – тензор теплопроводности, c(T) – объёмная теплоёмкость, $\sigma(T)$ – тензор электропроводности. Тензоры k(T) и $\sigma(T)$ будем считать диагональными с элементами κ_{xx} , κ_{yy} , κ_{zz} и σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} соответственно. Эти элементы являются заданными функциями температуры и координат $x = (x^1, x^2, x^3)$. В формулах (1) и далее символом · применительно к векторам будем обозначать скалярное произведение векторов.

Формально мы рассматриваем уравнения в параболическом цилиндре $r = (t, x) \in G = [t_0; t_f] \times \Omega$, $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, где $[t_0; t_f]$ – заданный интервал времени, в данном случае $t_0 = 0$, $t_f = \infty$.

Искомые функции T(r) и $\varphi(r)$ удовлетворяют в любой момент времени $t > t_0$ на границе Г параллелепипеда (на его гранях $x_{\alpha} = l_{\alpha}^{\pm}$, $\alpha = 1, 2, 3$) краевым условиям. Возможны разные сочетания типов краевых условий. Приведем некоторые постановки.

Для температуры на всех границах ставится либо условие Неймана

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0,$$

либо на горизонтальных границах – условие Неймана, а на остальных – условие Дирихле

 $T = T_B$,

это условие моделирует постоянное охлаждение при некоторой заданной температуре T_B , например, $T_B = 100 K$.

Для потенциала ф на вертикальных границах ставится условие Неймана

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$$

а на горизонтальных, верхней и нижней границах поддерживается постоянный потенциал (т.е. заданы условия Дирихле)

$$\varphi = +0.5U_0, \qquad \varphi = -0.5U_0$$
 (2)

с заданным значением U_0 , можно взять $U_0 = 1$ [Вольт].

В начальный момент $t = t_0$ заданы условия

 $\varphi(t_0, x^1, x^2, x^3) = \varphi_0, \qquad T = T_0$

с некоторыми значениями ϕ_0 , T_0 ; например, $T_0 = T_B$, $\phi_0 = 0$. Можно взять линейное распределение потенциала по координате z^3 :

$$\varphi_0 = \frac{U_0}{l_3^+ - l_3^-} \left(z^3 - l_3^+ \right) + \frac{U_0}{2} .$$

Решать независимо уравнение для потенциала и уравнение для температуры нельзя, т.к. в уравнении для потенциала электропроводность $\sigma = \sigma(T)$ существенно зависит от температуры, а в уравнении для температуры источник тепла – интенсивность тепловыделения в единичном объеме $q(T, \phi) = \nabla \phi \cdot \sigma(T) \nabla \phi$ – является нелинейной функцией аргументов T, ϕ и моделирует нагрев вещества электрическим током, текущим в образце. Прозводная по времени в уравнении для потенциала – это применение приема, являющегося некоторым аналогом линеаризации нелинейной задачи.

Компоненты удельного сопротивления [$O_{M} \cdot M$] для модельной задачи $\rho_{xx}, \rho_{yy}, \rho_{zz}$ заданы в виде

$$\rho_{xx} = \rho_{yy} = \rho_0 \exp\left(\frac{300}{150 + T}\right), \quad \rho_0 = 0.3, \quad \rho_{zz} = a_\rho \times \rho_{xx}$$
(3)

с некоторым показателем анизотропии сопротивления a_{ρ} в (3). В комплексном исследовании этот параметр нужно варьировать в диапазоне $a_{\rho} = 10^3 - 10^5$.

Диагональные элементы тензора удельной электропроводности имеют вид

$$\sigma_{xx} = 1/\rho_{xx}, \ \sigma_{yy} = 1/\rho_{yy}, \ \sigma_{zz} = 1/\rho_{zz}, \ [Omega^{-1} \cdot m^{-1}].$$

Компоненты тензора теплопроводности κ_{xx} , κ_{yy} , κ_{zz} , $[Bm \, m^{-1} K^{-1}]$, заданы для модельного случая в виде

$$\kappa_{xx} = \kappa_{yy} = \kappa_0 T , \quad \kappa_0 = 0.1, \quad \kappa_{zz} = \kappa_{xx} / 8 .$$
(4)

Отметим, что коэффициенты теплопроводности к и электрической проводимости σ не являются независимыми. Связь этих коэффициентов в металлах устанавливает закон Видемана – Франца

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \left(\frac{\pi^2}{3}\right) \cdot \left(\frac{k}{e}\right)^2 \cdot T ,$$

где k – постоянная Больцмана, $k = 1,38 \times 10^{-23} \ \text{Дж} / K$, e – заряд электрона, $e = 1,602 \times 10^{-19} \ \text{Кл}$. Взаимная связь электрической проводимости и теплопроводности объясняется тем, что оба эти процесса в металлах в основном обусловлены движением свободных электронов. Для модельной задачи, служащей фактически для отработки численного метода, указанная взаимосвязь может не соблюдаться.

Теплоемкость $[\mathcal{A}\mathcal{H}/(M^{3}K)] = [\kappa c/(c^{2} \cdot M \cdot K)]$ сверхпроводника задана как функция температуры

$$c(T) = c_0 \cdot T^2 \rho, \quad c_0 = 10^{-3}.$$
 (5)

Объемная теплоемкость определяется удельной теплоемкостью c_m , $[\mathcal{A}\mathcal{H}(\kappa z \cdot K)]$ единицы массы и плотностью ρ : $c(T) = c_m(T) \cdot \rho$, для сверхпроводника Bi-2212 можно взять $\rho = 6 \cdot 10^3 \kappa z / M^3$ [5].

Коэффициент температуропроводности определен как

$$\alpha = \frac{\kappa}{\rho C} , \qquad (6)$$

где к, *C*, ρ суть соответственно коэффициент теплопроводности, удельная теплоемкость и плотность, размерность [α] = M^2/c .

Для сверхпроводника Bi-2212 экспериментальная зависимость коэффициента температуропроводности α_{exp} от температуры показана на рис. 1 с приложенным магнитным полем 1,0 Тл и без (обозначены символами • и • соответственно) [6]. На вставке показан тот же график в логарифмическом масштабе.



Рис. 1. Зависимость коэффициента температуропроводности от температуры. Стрелка указывает критическую температуру 85 К, [6]

Следовательно, для температуры в районе T = 100 K можно взять $\alpha_{exp} = 6 \cdot 10^{-7} \ m^2/c$ (что близко к температуропроводности керамического кирпича и оконного стекла при нормальных условиях).

Экспериментальное значение α_{exp} для данной модельной задачи существенно меньше расчетного значения

$$\alpha_{comp} = \frac{\kappa(T)}{c(T)} = \frac{k_0 \cdot T}{c_0 \cdot T^2 \cdot \rho}.$$
(7)

Так как рассматривается стационарная постановка, то это отличие не имеет принципиального значения, см. раздел 3.

Зависимости (3)–(5) носят модельный характер. В окрестности температуры сверхпроводящего перехода реальное поведение электропроводности, теплопроводности и теплоемкости является более сложным.

3. Технология и результаты расчётов

Входные данные и единицы измерения. Обозначим геометрические размеры параллелепипеда как $l_x \approx 2.92$, $l_y \approx 1.68$, $l_z \approx 0.0217$ [$10^{-6} M$]. Потенциал $U_0 = 1$ [B, вольт], [$\kappa c \cdot M^2 c^{-3} \cdot A^{-1}$]. Удельное сопротивление [$OM \cdot M$] = [$\kappa c \cdot M^2 c^{-3} \cdot A^{-2} \cdot M$] = [$\kappa c \cdot M^3 c^{-3} \cdot A^{-2}$], A (ампер) – сила электрического тока в СИ.

Точку трехмерного пространства для удобства обозначаем как (x^1, x^2, x^3) , так и (x, y, z). Возьмем в $[t_0 < t] \times \Omega$ сетку $\Omega_{h,\tau} = \Omega_h \times \Omega_{\tau}$, где $\Omega_{\tau} = \{t_j, 0 \le j \le J, t_j = t_f\}$ – сетка по времени с переменными шагами $\tau = t_{j+1} - t_j > 0$. Время завершения расчета задается параметром t_f , который заранее не фиксирован, так как организуется счет на установление с некоторым заданным критерием завершения.

Далее, Ω_h – декартова неравномерная по каждому координатному направлению сетка в параллелепипеде Ω , зависящая от параметра h (шага сетки), характеризующего средний размер ячеек. Обозначим число ячеек по каждому координатному направлению как N_x, N_y, N_z . Узлы сетки Ω_h обозначим как (x_i, y_j, z_k) , а также как (i, j, k), где компоненты мультииндекса принимают значения $i = 0, ..., N_x$, $j = 0, ..., N_y$, $k = 0, ..., N_z$. В узлах сетки Ω_h определены сеточные функции: итерационные приближения *T*, φ к искомым функциям, правая часть, коэффициенты уравнений, невязки и пр.

Дискретную схему строим классическим интегро-интерполяционным методом баланса, интегрируя исходное уравнение по объему дуальной ячейки $[x_{i-1/2}; x_{i+1/2}] \times [y_{j-1/2}; y_{j+1/2}] \times [z_{k-1/2}; z_{k+1/2}]$, ассоциированной с узлом (i, j, k). Эту ячейку для отличия от геометрической ячейки сетки называем ячейкой консервативности. Условимся, что если значение сеточного индекса выходит за границу области его определения, то этот индекс принимает ближайшее значение к предельному. Площади шести граней ячейки консервативности (i, j, k) обозначим как $S_{i+1/2,j,k}, S_{i,j+1/2,k}, S_{i,j,k+1/2}$, а объем ячейки как $V_{i,j,k}$. Скалярное произведение в пространстве сеточных функций U_h , заданных на сетке Ω_h (и обращающихся в нуль на Γ_h в узлах с краевыми условиями Дирихле), определяется как

$$(u,w) = \sum_{i,j,k} u_{i,j,k} W_{i,j,k} V_{i,j,k},$$
(8)

где сумма берется по всем узлам сетки. Норма функций в U_h определяется стандартным образом.

Значения сеточной функции *u* на *j*-ом временном слое t_j обозначим как u_j . Определим на пространстве U_h разностные операторы L_h^T и L_h^{ϕ} , аппроксимирующие со вторым порядком линейные дифференциальные операторы $L^T = -\nabla \cdot \kappa \nabla$ и $L^{\phi} = -\nabla \cdot \sigma \nabla$ на гладких функциях с учетом краевых условий. Входящие в определения этих операторов коээфициенты κ , σ на текущем временном шаге мы считаем известными функциями пространственных координат.

Для конкретности считаем, что L_h^T и L_h^{ϕ} построены с помощью конечнообъемной 7-точечной дискретизации. Эти операторы – самосопряженные с неотрицательными собственными значениями. Основные сведения о спектре простейших эллиптических разностных операторов можно найти в [7]. Предполагаем, что оценки границ спектра $\lambda_{min} \ge 0$ и λ_{max} каждого оператора известны; в ряде случаев они могут быть вычислены [7].

Запишем дифференциально-разностную аппроксимацию исходной задачи (1) в операторной форме (краевые условия учтены при определении операторов и правых частей):

$$c\frac{\partial T}{\partial t} + L_h^T \cdot T = f , \qquad (9)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + L_h^{\varphi} \cdot \varphi = g .$$
⁽¹⁰⁾

Переход со слоя t_j на верхний слой $t_{j+1} = t_j + \tau$ может быть реализован разными способами. Рассмотрим для каждого из уравнений чисто неявную схему

$$\frac{T_{j+1} - T_j}{\tau} + \frac{1}{c} L_h^T \cdot T_{j+1} = \frac{1}{c} f_j, \qquad (11)$$

$$\frac{\varphi_{j+1} - \varphi_j}{\tau} + L_h^{\varphi} \cdot \varphi_{j+1} = g_j.$$
(12)

Правые части в этих уравнениях включают краевые условия Дирихле в приграничных узлах, соседних с граничными узлами Дирихле, а сеточная функция f_j во всех узлах, кроме узлов Дирихле, включает источник

$$q_j = q(T_j, \varphi_j) = \nabla \varphi_j \cdot \sigma(T_j) \, \nabla \varphi_j.$$

Эта неявная схема может быть записана в виде системы двух линейных уравнений

$$(I + \tau \cdot C^{-1}L_h^T)T_{j+1} = T_j + \tau C^{-1}f_j,$$
$$(I + \tau \cdot L_h^{\varphi})\varphi_{j+1} = \varphi_j + \tau g_j,$$

где I – тождественный сеточный оператор, $C = c(T_j)I$. Запишем эту систему в виде двух линейных систем

$$A_h u_h = f_h, \tag{13}$$

$$B_h v_h = g_h, \tag{14}$$

где сеточные операторы $A_h = I + \tau \cdot C^{-1}L_h^T$ и $B_h = I + \tau \cdot L_h^{\phi}$ представляют собой $N \times N$ – матрицы, u_h, v_h – искомые функции, $f_h = T_j + \tau \cdot C^{-1}f_j$, $g_h = \phi_j + \tau \cdot g_j$ – заданные сеточные функции. Размер матриц $N = N_x \times N_y \times N_z$ с учетом краевых условий Дирихле.

Каждое из уравнений (13) и (14) можно на шаге по времени рассматривать и решать по отдельности. Для удобства изложения перепишем эти системы в компактном виде

$$A u = f , (15)$$

где А – самосопряженный положительно определенный оператор.

Более детально пространственную дискретизацию исходных уравнений изложим на примере линейного дифференциального уравнения:

$$-\sum_{\alpha=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x^{\alpha}} \left(A_{\alpha} \frac{\partial u}{\partial x^{\alpha}} \right) + A_{0} u = f .$$
(16)

Здесь A_0, A_1, A_2, A_3, f – заданные неотрицательные функции координат $(x^1, x^2, x^3) \equiv (x, y, z)$. В дискретной модели коэффициенты A_0, A_1, A_2, A_3 вычисляются в узлах сетки. Для расчетов потоков коэффициенты A_1, A_2, A_3 дополнительно вычисляются на гранях ячеек консервативности $\{i + \frac{1}{2}, j, k\}, \{i, j + \frac{1}{2}, k\}, \{i, j, k + \frac{1}{2}\},$ т.е. на гранях, проходящих через центры геметрических ячеек $[x_i; x_{i+1}] \times [y_j; y_{j+1}] \times [z_k; z_{k+1}]$ сетки и середины ребер; обозначим эти коэффициенты как $A_1^{i+1/2, j, k}, A_2^{i, j+1/2, k}, A_3^{i, j, k+1/2}$ соответственно. Каждый из этих коэффициентов вычисляется как среднее гармоническое соответствующих узловых значений.

Рассмотрим, как проводится дискретизация источника

$$q = \nabla \varphi \cdot \sigma(T) \ \nabla \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \sigma_1 \ \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \cdot \sigma_2 \ \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \cdot \sigma_3 \ \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \tag{17}$$

входящего в правую часть уравнения теплопроводности. Сеточная функция *q* (17) вычисляется во всех узлах, за исключением граничных узлов с условием Дирихле. Рассмотрим для примера дискретизацию первого слагаемого из (17):

$$qx = \frac{\partial \varphi}{\partial x} \cdot \sigma_1 \frac{\partial \varphi}{\partial x}.$$

В узле сетки (i, j, k), внутреннем по индексу i, т.е. при $0 < i < N_x$, имеем

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} \simeq \frac{\varphi(x_{i+1}, y_j, z_k) - \varphi(x_{i-1}, y_j, z_k)}{x_{i+1} - x_{i-1}},$$

$$qx = \sigma_1 \Big(x_i, y_j, z_k \Big) \cdot \left(\frac{\varphi(x_{i+1}, y_j, z_k) - \varphi(x_{i-1}, y_j, z_k)}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right)^2.$$
(18)

В граничных узлах i=0 и $i=N_x$ имеем $\partial \phi/\partial x = 0$ в силу краевого условия. В узлах (0, j, k) и (N_x, j, k) на гранях параллелепипеда слагаемые qy и qz записываются аналогично. На ребрах параллелепипеда, являющихся стыком двух граней с условиями Дирихле и Неймана, приоритет имеет условие Дирихле, т.е. в таком узле правая часть не определяется, так как в узлах Дирихле разностная схема не записывается.

Определим некоторые сеточные характеристики задачи, опираясь на спектральный анализ разностных операторов рассматриваемых краевых задач. При получении оценок мы пользуемся расщеплением по координатным направлениям x^{α} , $\alpha = 1, 2, 3$. Ниже в формулах минимум и максимум берется по всем узлам сетки Ω_h .

Для оператора L_h^T , предполагая, что условие Неймана поставлено только на горизонтальных границах, получим (см. [7])

$$\lambda_{\min}^{T} = 8 \left(\min \kappa_{xx} l_{x}^{-2} + \min \kappa_{yy} l_{y}^{-2} \right) .$$
(19)

Для оператора L_h^{φ} , предполагая, что условие Дирихле поставлено только на горизонтальных границах, получим

$$\lambda_{\min}^{\varphi} = 8\min \sigma(T) \, l_z^{-2}. \tag{20}$$

В качестве оценок верхних границ спектра, с учетом возможной неравномерности шагов сетки h_x , h_y , h_z по координатным направлениям, получаем соответственно

$$\lambda_{\max}^{T} = 4 \left(\max \kappa(T) h_{x}^{-2} + \max \kappa(T) h_{y}^{-2} + \max \kappa(T) h_{z}^{-2} \right) , \qquad (21)$$

$$\lambda_{\max}^{\phi} = 4 \left(\max \, \sigma(T) h_x^{-2} + \max \, \sigma(T) h_y^{-2} + \max \, \sigma(T) h_z^{-2} \right).$$
(22)

Для принятых модельных коэффициентов и сеток 100×100×100 имеем

$$\lambda_{\max}^{T} = 4 \max \kappa(T) \ h_z^{-2} \approx 4 \kappa_0 T_{\max} \ h_z^{-2} \approx 10^{21},$$

и величина λ_{max}^{ϕ} имеет близкий порядок.

Для случая $l_x \approx l_y$ имеем

$$\lambda_{\min}^{T} = \min(8\kappa_{xx}l_{x}^{-2} + 8\kappa_{yy}l_{y}^{-2}),$$

$$\lambda_{\min}^{\phi} = 8 \cdot a_{\rho}^{-1}\rho_{0}^{-1}l_{z}^{-2} .$$

Следовательно, до выхода на квазистационарный режим (т.е. до достижения малых значений норм производных по времени от температуры и стабилизации источника) интегрирование нужно проводить с ограничением на шаг τ , диктуемым уравнением теплопроводности. Определим это ограничение, введя характерный параметр $r_{comp} = \alpha_{comp} \cdot 8 \cdot (l_x^{-2} + l_y^{-2})$, где α_{comp} – коэффициент температуропроводности, см. (7).

Ограничение на шаг τ имеет вид

$$\tau \cdot r_{comp} = \tau \cdot \min \frac{\kappa(T)}{c(T)} \cdot \left(l_x^{-2} + l_y^{-2} \right) < 1.$$

Дополнительно выбор шага τ диктуется соображениями, например, обеспечением не слишком быстрого роста энерговыделения.

4. Общая схема многосеточного метода

В этом разделе приводятся результаты развития классического многосеточного метода Р.П. Федоренко [8] применительно к поставленной задаче. Пусть система (15) получена как результат сеточной аппроксимации краевой задачи для уравнения (16).

Для решения таких систем обычно используют различные итерационные методы. На эффективность методов влияет размер $N = N_x \times N_y \times N_z$ систем, достигающий часто значений $N \sim 10^9$ и выше в трехмерных задачах, разного рода осложнения, например, анизотропия, характерная и для рассматриваемой задачи (1).Дополнительным фактором, влияющим реальную на эффективность вычислительную алгоритмов, является рост производительности компьютеров, сопровождаемый усложнением ИХ архитектуры, увеличением числа вычислительных элементов ядер, процессоров. Поэтому к алгоритмам и компьютерным кодам предъявляется требование масштабируемости. В практическом смысле ЭТО означает исполнение алгоритма на разном числе вычислительных элементов С сохранением эффективности. Именно поэтому мы формулируем принцип алгоритмической простоты вычислительных процедур, составляющих основу параллельной реализации многосеточного метода решения разностных эллиптических уравнений.

Выбор многосеточного метода в качестве алгоритмической основы решения задачи (11), (12) не случаен. Для эллиптических задач многосеточный метод теоретически оптимален: вычислительная трудоемкость метода растет линейно с ростом числа неизвестных. Реальная его эффективность зависит от реализации основных алгоритмических элементов – операторов межсеточного обмена, сглаживающих операторов и процедуры решения уравнений на самой грубой сетке. В данной работе мы приводим кратко основные ключевые элементы многосеточного метода и более детально останавливаемся на принципе автоматической адаптации в ходе многосеточных итераций. Детальные сведения можно найти в [9–12].

Общий геометрический вид расчетной области (с искажением пропорций для наглядности) представлен на рис. 2. Поэтому для расчетных исследований физических процессов в конструкциях высокотемпературных сверхпроводников мы считаем, что подходящими инструментом будет реализация многосеточного метода на блочно-структурированных сетках.

14



Рис. 2. Упрощенная геометрия объекта расчета

Блочные сетки возникают при декомпозиции сложной расчетной области подобласти. Процедуры конструирования блочных на меньшие сеток оттачивались в течение десятилетий. Блочные сетки с использованием многосеточной технологии применяются В космологии, высокоточных зарубежных кодах. Мы предполагаем, что этап топологической декомпозиции сложной области на блоки произведен. В каждом блоке строится декартова сетка. Полная сетка по границам блоков состыкована, но граница одного блока может примыкать к нескольким соседним блокам, что упрощает процедуру всей декомпозиции и уменьшает общее количество блоков. Идея эффективной реализации многосеточного метода на блочно-структурированных конформных сетках изложена в [13]. Для ее воплощения для решения уравнений (1) мы проводим сначала разработку компьютерного кода для случая одной области.

Ниже мы кратко приводим схему многосеточного алгоритма для параллелепипеда и декартовой сетки в нем, а также делаем акцент на полезных усовершенствованиях, предложенных нами.

Рассмотрим многосеточный алгоритм решения систем линейных уравнений, возникающих при дискретизации эллиптических уравнений. Пусть построена иерархия вложенных сеток. Удобно представить многосеточный метод в двухсеточном преставлении, описав переход с подробной h-сетки на грубую H- сетку. Пусть на подробном уровне записана исходная система уравнений

$$A_h u_h = f_h, (23)$$

а на грубом сеточном уровне построена система уравнений для поправки w_h

$$A_H w_H = g_H.$$

Здесь A_h , A_H – операторы на двух последовательных сеточных уровнях, подробном и грубом. Оператор A_H может быть построен либо дискретизацией на грубой сетке, либо галеркинской процедурой $A_H = RA_h P$. Правая часть g_H является ограничением на грубую сетку невязки $g_h = f_h - A_h u_h$ уравнения (23) на подробной сетке, т.е. $g_H = Rg_h$. Здесь P и R – операторы межсеточных переходов, интерполяции и проектирования, они являются сопряженными, $R = P^*$. В двухсеточном представлении итерирующий оператор этого метода имеет вид

$$Q = S_{p} (I - P A_{H}^{-1} R A_{p}) S_{p}, \qquad (24)$$

где I – тождественный оператор, S_p – оператор сглаживания. Приведенный двухсеточный алгоритм обобщается на произвольное число сеточных уровней с помощью рекурсии. Эффективность алгоритма зависит от многосеточной триады – операторов межсеточных переходов, алгоритма решения уравнений на самой грубой сетке и сглаживающих операторов. Алгоритмические конструкции операторов межсеточных переходов указаны в [9 – 10]. В качестве оператора R нами строится оператор, сопряженный к оператору P с использованием локальных вычислений, без применения операции транспонирования.

Сглаживатели выполняют ключевую роль в многосеточном алгоритме. Конструкция и основные исследования адаптации сглаживателей в ходе многосеточных итераций представлены в [9 - 13]. Число сеточных уровней мы ограничиваем условием $Nc \gg q$, где Nc – размер системы линейных уравнений $A \cdot u = g$ на самой грубой сетке, q – число параллельных процессов. Матрица Aэтой системы является самосопряженной и положительно определенной, поэтому для решения можно применить чебышевский итерационный метод [7]

$$u_{j} = u_{j-1} + \omega_{j}(g - A \cdot u_{j-1}), \quad j = 1, \dots, p$$
 (25)

с оптимальным набором параметров $\{\omega_j\}$; здесь u_0 – начальное приближение, j – номер итерации, а число итераций p выбирается априори из условия достижения заданной относительной точности ε : $||r_p|| < \varepsilon ||r_0||$, где r_0 и $r_p = g - A \cdot u_p$ – начальная и конечная невязки. Число p зависит от точности ε и числа $\eta = \lambda_{min}/\lambda_{max}$ в соответствии с формулой

$$p = p(\varepsilon, \eta) = \ln\left(\varepsilon^{-1} + \sqrt{\varepsilon^{-2} - 1}\right) / \ln\left(\left(1 + \sqrt{\eta}\right) / \left(1 - \sqrt{\eta}\right)\right).$$
(26)

После работы алгоритма (25) для невязки получаем соотношение $r_p = F_p(A)r_0$. Для работы алгоритма нужно задавать границы спектра λ_{\min} , λ_{\max} самосопряженного положительно определенного оператора A, обычно неизвестные. В качестве приближенного значения λ_{\max} мы берем оценку максимального собственного значения по теореме Гершгорина о кругах, а в качестве λ_{\min} – отношение Релея-Ритца или грубую эмпирическую оценку сверху минимального собственного значения, которую затем уточняем в ходе итерационного процесса на основании получаемой апостериорной информации.

Нами предложен эффективный адаптивный вариант итерационного уточнения нижней границы спектра. В дальнейшем ниже в тексте под λ_{min} и λ_{max} будем подразумевать точные (обычно неизвестные) нижнюю и верхнюю границы спектра, а под λ_{min}^* и λ_{max}^* – их приближенные оценки. Будем предполагать выполнение соотношений $0 < \lambda_{min} \le \lambda_{max}^* \le \lambda_{max} \le \lambda_{max}^*$, гарантирующих сходимость итерационного метода (25).

Оценку λ_{min}^* уточняем в ходе внешнего итерационного процесса (или цикла адаптации). Обозначим через λ_{min}^* текущее приближенное значение, а через λ_{new}^* – новое приближение к λ_{min} . В качестве начального приближения $\lambda_{min}^* \ge \lambda_{min}$ возьмем отношение Рэлея–Ритца $\lambda_{min}^* = (Av, v)/(v, v)$, взяв в качестве v правую часть исходной линейной системы уравнений. Если заданная точность ε не достигнута, то это значит, что в ходе однократного применения итерирующего оператора $F_p(A)$ к невязке r_0 в результирующей невязке r_p ведущей становится гармоника, отвечающая собственному значению λ_{min} точной границы спектра. Другими словами, для достаточно больших значений степени p основные компоненты ошибки лежат в инвариантном подпространстве, ассоциированном с собственными значениями оператора A, принадлежащими отрезку $[\lambda_{min}, \lambda_{min}^*]$.

Алгоритм адаптации имеет следующий вид. Пусть нам нужно решить линейную систему с заданной точностью ε_{tot} . Зададимся меньшей точностью $\varepsilon_1 < \varepsilon_{tot}$. Типичными значениями могут быть $\varepsilon_1 = 10^{-2}$, $\varepsilon_{tot} = 10^{-10}$, например. На шаге $k \ge 1$ адаптации выполним один шаг чебышевского алгоритма при заданных входных данных λ_{min}^* , λ_{max}^* , ε_1 и получим $\delta = ||r_p|| / ||r_0|| = S(\lambda_{min}^*, \lambda_{max}^*, \varepsilon_1)$, $r_p = F_p(A)r_0$. Здесь $\delta \equiv \delta_k$ – точность, достигнутая в текущем цикле адаптации с номером k, r_0 и r_p – начальная и конечная невязки. Допустим, что $\delta > \varepsilon_1$. Тогда новое приближение находится как единственный корень $F_p(\lambda) = \delta$, т.е. $\lambda_{min}^* = \arg(F_p(\lambda) - \delta = 0)$. Если точность ε_{tot} не достигнута, переходим к новому циклу адаптации с данными $\lambda_{min}^*, \lambda_{max}^*, \varepsilon_1$, выполняя очередной шаг вида (25), определяя степень нужного многочлена Чебышева по формуле (26).

Если на шаге k адаптации достигнута точность $\delta = \delta_k \leq \varepsilon_1$ (это означает, вообще говоря, что оценка λ_{min}^* достаточно точная), мы можем выполнить следующий шаг со старыми данными λ_{min}^* , λ_{max}^* , ε_1 или изменить точность, положив $\varepsilon_1 = \varepsilon_{tot}/(\delta_1 \times \times \delta_k)$. При таком выборе желаемая точность ε_{tot} достигается на следующем шаге адаптации.

Обоснованием сходимости такого степенного метода служит свойство многочленов Чебышева стремительно расти вне отрезка наименьшего уклонения от нуля, т.е. в определенном смысле противоположное свойство по отношению к оптимальному свойству наименьшего уклонения от нуля.

Теперь достаточно заметить, что этот многошаговый алгоритм автоматической адаптации легко встраивается в многосеточный метод, обеспечивая в ходе многосеточных итераций повышение эффективности решения системы линейных уравнений $A \cdot u = g$ на самой грубой сетке за счет уточнения оценки λ_{min}^* в соответствие с [14]. Далее, такой алгоритм адаптации хорошо подходит для построения адаптивного сглаживателя на каждом сеточном уровне.

Рассмотрим фигурирующий в (24) оператор S_p , сглаживатель. Он переводит начальное приближение в «гладкое» приближение, начальную ошибку e_0 в ошибку $e_1 = S_p e_0$. Нами построены два сглаживателя $S_p(A_h)$: первый – операторный многочлен, второй – рациональная функция, конструируемые с помощью многочленов Чебышева. Сглаживатели основаны на явных итерациях и служат для уменьшения начальной невязки на высокочастотном (но неизвестном нам) участке спектра $[\lambda_{\min}^c; \lambda_{\max}]$. Адаптация – это уточнение в ходе многосеточных итераций заранее неизвестной нижней границы λ_{\min}^c высокочастотной части спектра. Адаптация включается автоматически, если на каком-либо сеточном уровне после работы процедуры сглаживания при заданных границах λ_{\min}^c и λ_{\max} для начальной и конечной невязок получено соотношение $\delta = ||r_p||/||r_0|| > \varepsilon_{smooth}$. Это значит, что точность ε_{smooth} сглаживания не достигнута. В этом случае мы уточняем параметры сглаживателей с помощью достаточно простых формул, см. [9, 10].

Например, для чебышевского сглаживателя параметры пересчитываются по новой границе λ_{min}^c и известной верхней границе λ_{max} по формуле (26). Для сглаживателя ЛИ-М, построенного на основе схемы интегрирования по времени параболических уравнений [12] нами получена более простая элегантная процедура – достаточно повысить степень оптимального многочлена Чебышева пересчетом по формуле

$$p_{new} = p \sqrt{(\varepsilon^{-1} - 1)/(\delta^{-1} - 1) + 1}$$
.

Получив новые параметры (λ_{\min}^{c} или $p = p_{new}$) на всех сеточных уровнях, мы продолжаем многосеточные итерации с новыми значениями, повторяя при необходимости (т.е. при $\varepsilon_{smooth} < \delta < 1$) процедуру адаптации. Как правило, в расчетах после нескольких (3–5) многосеточных итераций параметры сглаживателей стабилизируются, заданная точность сглаживания s_{smooth} достигается, а асимптотическая скорость сходимости многосеточных итераций становится практически равной ε_{smooth}^{2} .

5. Примеры расчетов

Задача расчета высокотемпературного проводника характеризуется сильной разницей геометрических размеров расчетной области, многократной анизотропией в коэффициентах уравнений, а при сгущении сетки к верхней границе области еще добавляется сеточная анизотропия.

Приведем иллюстрацию работоспособности адаптивного многосеточного метода в условиях анизотропии на примере решения уравнения вида (16) с постоянными сильно различными коэффициентами $A_1 = 10000$, $A_2 = 100$, $A_3 = 1$, $A_0 \equiv 0$ в кубе $\Omega = [0,1]^3$ при краевых условиях Дирихле и с дискретизацией на декартовой сетке с равномерным И неравномерным шагами. Для многосеточного метода сильная анизотропия является трудным случаем. Применение в качестве сглаживателя прогонки, попеременной в трех направлениях, неэффективно – нужна групповая релаксация неизвестных, отвечающих сеточным плоскостям – нужно объединять неизвестные в три группы поочередно – в плоскостях Oxy, Oxz и Oyz, что затрудняет параллельную реализацию. Именно поэтому мы развиваем адаптивный многосеточный метод на основе явно-итерационных схем, применямых для сглаживания и решения уравнений на самой грубой сетке, используем высокопараллельные схемы, работоспособные в анизотропных случаях.

Скорости сходимости многосеточных итераций характеризуем отношением $s = r_n / r_{n-1}$, где r_{n-1} , r_n – сеточные нормы невязок на двух

20

последовательных многосеточных итерациях. Взята сетка $64 \times 64 \times 64$ ячейки, число сеточных уровней – 3, сетки следующих уровней $64 \times 64 \times 64$ и $16 \times 16 \times 16$. В экспериментах брались сетки вплоть до $2048 \times 2048 \times 2048$ ячеек с разным числом уровней и различными параметрами. Но основные выводы проиллюстрируем на данном примере, доступном для повторения на любом компьютере. Фактор сглаживания сначала зададим $\varepsilon_{smooth} = 0.5$. То есть на любом этапе сглаживания мы ставим цель добиться выполнения условия $d = r_{before} / r_{after} < \varepsilon_{smooth}$ для отношения норм невязок до и после сглаживания. Эта цель достигается с помощью адаптивного уточнения границы раздела спектра. Грубосеточные уравнения на самой грубой сетки решаются с относительной точностью $ctol = 10^{-3}$ с помощью чебышевского адаптивного метода [14]. Достижение сходимости многосеточных итераций контролируется по условию $r_m < \varepsilon_{tot} \cdot r_0$ с точностью $\varepsilon_{tot} = 10^{-14}$.

На рис. 3 и 4 в логарифмическом масштабе приведены графики эволюции нормы невязки и скорости сходимости в зависимости от номера многосеточной итерации. На рис. 3 показаны результаты для равномерной кубической сетки, на рис. 4 – для неравномерной сетки, построенной сгущением узлов к верхней границе области по геометрической прогрессии со знаменателем q = 0.9, так что размеры приграничных ячеек в вертикальном направлении равны 0.1 и 10⁻⁴ для нижней и верхней грани единичного куба соответственно. Видим, что графики практически одинаковы, т.е. с адаптация одинаково хорошо отработала для каждого их данных двух случаев. Вычислительные затраты, конечно, различны: время счета при сгущении сетки возрастает на 25%, с 16 с до 21 с. В терминах числа сглаживающих итераций затраты составляют 1100 и 1620 итераций соответственно в совокупности по всем сглаживающим процедурам. Невязка в ходе многосеточных итераций уменьшается от начального значения 10^7 до $\sim 5 \cdot 10^{-8}$. Адаптация включается после второй многосеточной итерации, чтобы продемонстрировать рост невязок на первых двух итерациях.



Рис. 3. Многосеточные итерации на равномерной сетке: сплошная линия – норма невязки, пунктир – скорость сходимости *S*



Рис. 4. Многосеточные итерации на сгущающейся сетке; сплошная линия – норма невязки, пунктир – скорость сходимости *S*

Величина скорости сходимости *s* (пунктирные графики на рис. 3 и 4) стабилизируется на значении *s* = 0.27 в ходе первых 5-7 итераций, что говорит о выходе на асимптотический режим. Ожидаемое теоретическое значение $s = \varepsilon_{smooth}^2 = 0.25$. Может показаться, что факт превышения расчетного значения над теоретическим есть дефект адаптации. Оказывается, ровно наоборот – это косвенное свидетельство торжества принципа адаптации. Действительно, при увеличении точность решения грубосеточных уравнений до *ctol* = 10⁻⁹ величина скорости сходимости *s* стабилизировалась на теоретическом значении $s = \varepsilon_{smooth}^2 = 0.25$. Иными словами, если итерационное приближение лежит в инвариантном подпространстве, отвечающем высокочастотному спектру, то под действием итерирующего оператора *Q*, см. формулу (24), оно из этого инвариантного подпространства не выйдет, а на этом подпространстве выполняется соотношение $||Q|| = ||S_p^2||$.

Отметим, что вычислительная работа при таком изменении точности решения грубосеточных уравнений практически не увеливается.

Работу адаптивных чебышевских сглаживателей демонстрирует рис. 5 для случая равномерной сетки. На этом рисунке приведены характеристики подавления ошибки при сглаживании – показаны отношения $d = r_{before} / r_{after}$ норм невязок до и после сглаживания на первом сеточном уровне на этапе предсглаживания de1 (перед сборкой невязки на второй уровень) и на этапе постсглаживания de2 (после интерполяции поправки со второго уровня на первый). Хорошо виден рост невязок на первых нескольких итерациях, адаптация включилась после второй многосеточной итерации, до этого в качестве границы раздела спектра на подробных уровнях бралось значение $\lambda_{max}/6$, обеспечивающее работоспособность в случае изотропных задач.



Рис.5. Работа чебышевских сглаживателей на первом сеточном уровне на этапах пред- и пост-сглаживания

Такое поведение невязок характерно и для второго сеточного уровня. На рис. 6 показано число сглаживающих итераций на первом (сплошная линия) It lev1 и втором (пунктир) It lev2 сеточных уровнях, а также число итераций при решении грубосеточных уравнений (штрих-пунктир) It lev3. При переходе на следующий сеточный уровень число сглаживающих итераций уменьшается вдвое.

Остался вопрос, что произойдет, если выбрать фактор сглаживания ε_{smooth} заметно меньше, чем 0.5. На рис. 7 показан в логарифмическом масштабе процесс сходимости многосеточных итераций на сгущающейся сетке: сплошная линия – эволюция нормы невязки, пунктир – скорость сходимости.



Рис.6. Число сглаживающих итераций на первом и втором сеточных уровнях (сплошная линия и пунктир) и число итераций при грубой сетке (штрих-пунктир)



Рис. 7. Процесс сходимости многосеточных итераций на сгущающейся сетке: сплошная линия – норма невязки, пунктир – скорость сходимости *s*; логарифмический масштаб

Параметры взяты из предыдущего расчета, но взят новый фактор В сглаживатели сглаживания $\varepsilon_{smooth} = 0.1$. этом случае выполняют несвойственные им функции – подавляют одновременно и высокочастотные моды, как следует из сравнения рисунков 4 и 7. Напомним, что сглаживающие чебышевские итерации являются сходящейся процедурой, и при уменьшении ε_{smooth} до заданной точности ε_{tot} после первого шага сглаживания сразу получим результат и остальные сеточные уровни не нужны. В данном конкретном случае сетки со скромными параметрами адаптация вносит новый элемент – экономичность: время счета уменьшается на 25%, уменьшается и суммарное число операций расчета невязок (т.е. матрично-векторных операций). Заметим, что для параллельной реализации важно сокращение числа многосеточных итераций, приводящее к сокращению глобальных операций, к которым относится операция расчет норм невязок.

6. Заключение

Эта работа содержит результаты промежуточного этапа исследований проблемы расчета электро- и теплофизических полей в высокотемпературных сверхпроводниках. Для приближенной математической модели построен алгоритм совместного расчета распределений температуры и электрического потенциала в трехмерной области. Основу алгоритма и его компьютерной адаптивный многосеточный В работе реализации составляет метод. продемонстрирована работоспособность алгоритма на примерах решения анизотропных модельных задач. Намечены пути развития численных алгоритмов до уровня параллельной многосеточной методики, которая подходит для эффективной реализации компьютерного кода на конформных блочно-структурированных сетках с потенциальной масштабируемостью на ультрапараллельных компьютерах с большим количеством процессоров.

Библиографический список

- 1. О численной модели физических процессов в высокотемпературных сверхпроводниках / В.Т.Жуков [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 129. 21 с. URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-129.
- 2. Krasnov V.M. Quantum Cascade Phenomenon in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ Single Crystals // Phys. Rev. Lett. 2006. 97, 257003.
- 3. Krasnov V.M. Non-equilibrium spectroscopy of high-Tc superconductors // J. of Phys.: Conf. Ser. 2009. 150. 052129.
- Krasnov V.M. Temperature dependence of the bulk energy gap in underdoped *Bi*₂*Sr*₂*CaCu*₂*O*_{8+δ}: Evidence for the mean-field superconducting transition // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 79, № 21.
- Wesche R., Fuchs A.M. Design of superconducting current leads. // Cryogenics,V.34, №2, 1994, P.145 – 154. <u>https://doi.org/10.1016/00112275(94)90037-X</u>
- 6. Dorbolo S., Ausloos M. Influence of a low magnetic field on the thermal diffusivity of Bi-2212 // Physical review. B, Condensed matter. 2002, 65(21).
- Самарский А.А, Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978. 592 с.
- 8. Федоренко Р.П. Релаксационный метод решения разностных эллиптических уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1961. Т. 1, № 5. С. 922 927.
- 9. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Многосеточный метод для анизотропных уравнений диффузии на основе адаптации чебышевских сглаживателей // Матем. моделирование. 2014. Т. 26, № 9. С. 126 140.
- Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Многосеточный метод для эллиптических уравнений с анизотропными разрывными коэффициентами. // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2015. Т.55, № 7. С. 1168 – 1182.
- 11. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. О решении эволюционных уравнений многосеточным и явно-итерационным методами // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2015. Т. 55, № 8. С. 1276 1289.
- 12. Жуков В.Т. О явных методах численного интегрирования для параболических уравнений // Матем. моделирование. 2010. Т.22, № 10. С. 127–158.
- 13. Feodoritova O.B., Zhukov V.T. An adaptive multigrid on block-structured grids // J. Phys.: Conf.Ser. 1640012020.2020. doi:10.1088/1742-6596/1640/1/012020
- 14. Жуков В.Т., Новикова Н.Д., Феодоритова О.Б. Адаптивный чебышевский итерационный метод // Матем. моделирование. 2018. Т. 30, № 10.С. 67–85.