

На правах рукописи



Кутищева Анастасия Юрьевна

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ
ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ И УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ В ТРЕХМЕРНЫХ
ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕДАХ С ВКЛЮЧЕНИЯМИ

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Автореферат на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск — 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука Сибирского отделения Российской академии наук (ИНГГ СО РАН) и в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Новосибирский государственный технический университет» (НГТУ).

Научный руководитель: доктор технических наук, профессор
Шурина Элла Петровна

Официальные оппоненты: **Рудяк Валерий Яковлевич**,
доктор физико-математических наук, профессор,
НГАСУ (Сибстрин), г. Новосибирск,
профессор кафедры теоретической механики

Есипов Денис Викторович,
кандидат физико-математических наук,
ИВТ СО РАН, г. Новосибирск,
заместитель директора по научной работе

Ведущая организация: Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук», г. Москва

Защита состоится 27 июня 2019 г. В 10:00 часов на заседании диссертационного совета Д 999.141.03 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института динамики систем и теории управления им. В.М. Матросова Сибирского отделения Российской академии наук, Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук, Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики» по адресу 630090, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 6, конференц-зал ИВТ СО РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук, www.ict.nsc.ru/sites/default/files/discouncil/Enlist/Kutischeva_AU_2019/dissertation_kutischeva_au.pdf

Автореферат разослан 19 апреля 2019 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук, доцент



Лебедев А.С.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Объектами исследования являются:

- математические модели трехмерного электростатического поля и упругой деформации гетерогенных объектов с включениями с контрастными физическими характеристиками;
- математические модели, описывающие электрические и прочностные эффективные характеристики гетерогенных сред.

Предмет исследования – модификации вычислительных схем многомасштабных методов конечных элементов для решения задач:

- распределения электрического потенциала в средах с микровключениями различной геометрии, локализации и концентрации,
- квазистационарной упругой разрушающей и неразрушающей деформации гетерогенных сред.

Актуальность темы исследования

Одним из этапов разработки композиционных материалов и изучения нативных сред является математическое моделирование, позволяющее существенно расширить возможности исследователей, а в ряде случаев заменить дорогостоящие лабораторные испытания вычислительными экспериментами. Результаты решения прямых задач моделирования используются в процедурах гомогенизации, которые позволяют определить эффективные характеристики сред до их физической реализации в лабораторных условиях или на производстве.

Предсказательное моделирование для определения эффективных характеристик гетерогенных естественных и искусственных сред может быть выполнено только с привлечением современного математического аппарата, ориентированного на многомасштабные и многофизические задачи.

Цель работы: вычисление эффективного удельного электрического сопротивления и эффективного тензора упругости гетерогенных сред с микровключениями, характерных для горных пород, на базе 3D моделирования задач электростатики и упругой деформации.

Задачи исследования:

1. Для моделирования трехмерного электростатического поля и упругой деформации в расчетных областях с геометрической и физической многомасштабностью разработать вычислительные схемы многомасштабных методов конечных элементов.
2. Разработать численные схемы гомогенизации эффективного удельного электрического сопротивления и эффективного тензора упругости гетерогенных сред.

В соответствии с поставленной целью можно выделить следующие **этапы исследования:**

1. Модифицировать вычислительные схемы многомасштабного метода конечных элементов на тетраэдральных носителях, гетерогенного многомасштабного метода на полиэдральных носителях, расширенного метода конечных элементов на тетраэдральных носителях, разрывного метода Галёркина на полиэдральных носителях, а также модификации указанных методов, для моделирования распределения скалярного потенциала под действием постоянного тока и упругой деформации трехмерного гетерогенного тела.

2. Разработать алгоритм моделирования квазихрупкого разрушения гетерогенного образца, вызванного квазистатическим нагружением.

3. Исследовать эффективность масштабирования разработанных вычислительных схем и алгоритмов.

4. Разработать алгоритмы вычисления эффективного удельного электрического сопротивления и эффективного тензора упругости четвертого ранга гетерогенной среды с микровключениями.

5. Исследовать влияние изменения геометрических и физических характеристик включений, их локализации в образце на эффективные характеристики среды.

Положения, выносимые на защиту:

1. Параллельные вычислительные схемы моделирования распределения скалярного потенциала под действием постоянного тока и упругой разрушающей и неразрушающей деформации трехмерного гетерогенного объекта при квазистатическом внешнем нагружении.

2. Вычислительные схемы расчета эффективного удельного электрического сопротивления и эффективного тензора упругости четвертого ранга трехмерной гетерогенной среды с микровключениями.

3. Программные комплексы, реализующие разработанные и верифицированные вычислительные схемы.

4. Анализ зависимости эффективных характеристик среды от геометрических и физических характеристик включений, их концентрации и локализации в образце.

Соответствие паспорту специальности. В работе присутствуют результаты, соответствующие трем областям исследования паспорта специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» по физико – математическим наукам:

1. Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий.

2. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.

3. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

Научная новизна.

1. Разработаны и исследованы параллельные вычислительные схемы на базе многомасштабного метода конечных элементов на тетраэдральных носителях, гетерогенного многомасштабного метода на полиэдральных носителях, расширенного метода конечных элементов на тетраэдральных носителях, разрывного метода Галёркина на полиэдральных носителях, а также модификации указанных методов, для моделирования распределения скалярного потенциала под действием постоянного тока и упругой деформации трехмерного гетерогенного тела при квазистатическом внешнем нагружении. На каждом уровне иерархии используются неструктурированные адаптивные сеточные разбиения.

2. Разработаны и исследованы алгоритмы вычисления эффективного удельного электрического сопротивления и эффективного тензора упругости четвертого ранга трехмерной гетерогенной среды с микровключениями.

3. Получены зависимости эффективных характеристик (в том числе величины порога перколяции) от геометрических и физических характеристик включений, их локализации в образце.

Личный вклад соискателя заключается в разработке, программной реализации и верификации вычислительных схем. Автор принимал активное участие в формулировке решаемых задач и обосновании применения выбранных стратегий их решения. Все результаты численного моделирования, а также вычисления эффективных характеристик, приведенные в диссертации, получены соискателем лично.

Степень достоверности. Достоверность результатов подтверждена стандартными для численных методов процедурами верификации, сравнением с опубликованными результатами и сравнением с результатами, полученными в ходе лабораторных экспериментов, проводимых научным сотрудником ИНГГ СО РАН Голиковым Н.А. на образцах, изготовленных в Институте химии твердого тела механохимии СО РАН Полубояровым В.А. в рамках интеграционного проекта №98 СО РАН. Для верификации разработанных вычислительных схем также применялся классический метод конечных элементов и соответствующие аналитические оценки.

Метод исследования. Для решения эллиптических краевых задач со скалярными и тензорными коэффициентами используются методы численного моделирования, основанные на модификациях многомасштабных методов конечных элементов в функциональных пространствах $H(\text{grad}, \Omega)$ и $\mathbf{H}(\text{grad}, \Omega)$. Вычислительные эксперименты проводились на зарегистрированных программных комплексах.

Значимость работы. Разработанные программные комплексы MultiscaleMech3D и EffectiveProperties3D составляют единую платформу для решения задач электростатики и упругой квазистатической разрушающей и разрушающей деформации твердого тела с разномасштабными включениями в широком диапазоне физических и геометрических свойств. Разработанные вычислительные схемы расчета эффективного удельного электрического сопротивления и эффективного тензора упругости четвертого ранга позволяют проводить процедуру гомогенизации сложных сред.

Апробация результатов. Основные положения диссертации докладывались и были одобрены на следующих конференциях: XV Всероссийская конференция молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям (Тюмень, 2014 г.), Актуальные проблемы геологии нефти и газа Сибири: Материалы Всероссийской научной конференции молодых ученых и студентов, посвящ. 80-летию акад. А.Э. Конторовича (Новосибирск, 2014 г.), Науки о Земле. Современное состояние: Материалы II Всероссийской молодежной научно-практической школы-конференции (Геологический полигон "Шира", республика Хакасия, Россия, 2014 г.), International Conference "Computational and Informational Technologies in Science, Engineering and Education" (CITech-2015) (Almaty, Kazakhstan, 2015), XIIIth International Scientific and Technical Conference «Actual problems of electronic instrument engineering» (Novosibirsk, 2016 г.), VI

Международная научно-практическая конференция «Многоядерные процессоры, параллельное программирование, ПЛИС, системы обработки сигналов» (Барнаул, 2016 г.), XXI Всероссийская конференция и Молодежная школа-конференция, посвящ. памяти К.И. Бабенко «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов для решения задач математической физики» (Дюрсо, 2016), XVII Всероссийская конференция молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям (Новосибирск, 2016 г.), Материалы 54-й Международной научной студенческой конференции (г. Новосибирск, 2016 г.), Математика в современном мире: Международная конференция, посвящ. 60-летию Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН (Новосибирск, 2017 г.), Марчуковские научные чтения - 2017 (Новосибирск, 2017 г.), III Всероссийская (XVIII) молодежная научная конференция (г. Сыктывкар, Республика Коми, 2018 г.), Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов решения задач математической физики, посвящ. памяти К.И. Бабенко: XXII Всероссийская конференция (Дюрсо, 2018 г.), Международная конференция "Вычислительная математика и математическая геофизика", посвящ. 90-летию со дня рождения акад. А.С. Алексеева (г. Новосибирск, 2018 г.).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 23 работы, из них 2 в ведущих научных журналах из списка ВАК (Физическая мезомеханика; Вычислительные технологии), 3 в рецензируемых журналах (Труды XIII международной конференции актуальные проблемы электронного приборостроения АПЭП-2016, Труды XIII международной конференции актуальные проблемы электронного приборостроения АПЭП-2018, Journal of Computational and Applied Mathematics), 18 в сборниках тезисов, трудах и материалах российских и международных конференций. Разработанные для ЭВМ программы MultiscaleMech3D и EffectiveProperties3D прошли процедуру государственной регистрации (№2018613274 и №2017663134, соответственно).

Структура работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы (208 источников) и 2 приложений. Основные результаты работы обобщены в заключении диссертации. Работа изложена на 187 страницах, включая 90 рисунков и 27 таблиц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** представлены объект и предмет диссертационной работы, отражена актуальность, сформулированы цель и задачи, определены основные этапы работы, приведены защищаемые результаты и их научная новизна.

В **первой главе** анализируются методы численного моделирования физических процессов в гетерогенных средах. Моделирование физических процессов в горных породах и композиционных материалах является затратной процедурой с точки зрения вычислительных ресурсов. Это связано не только со структурной сложностью таких сред, но и с многомасштабностью и многофизичностью самих процессов. Существуют различные подходы для построения иерархических редуцированных моделей, основанных на теории эффективной среды (апскейлинг модели). Наиболее результативной технологией апскейлинга считается метод, основанный на последовательной численной оценке эффективных характеристик на каждом из уровней иерархии формируемой модели.

Одним из существенных преимуществ методов численной гомогенизации перед аналитическими оценками является достаточная универсальность подходов, которую обеспечивает математический аппарат многомасштабных методов. Однако, необходимо отметить что, технологические аспекты многомасштабных методов должны быть адаптированы под решаемый класс задач.

Во **второй главе** сформулированы базовые математические модели распределения скалярного потенциала в среде с включениями под действием постоянного тока и квазистационарной изотермической упругой деформации твердого тела с включениями при воздействии внешнего нагружения различных типов.

Краевая задача о распределении скалярного потенциала $U(\mathbf{x})$ в области $\Omega \subset R^3$, состоящей из матрицы Ω_0 и включений $\{\Omega_1, \dots, \Omega_M\}$, причем $\forall \Omega_i \subset \Omega, i = \overline{1, M} : |\Omega_i| \ll |\Omega|$ имеет следующий вид:

$$-\nabla \cdot \left((\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} \nabla U(\mathbf{x}) \right) = F(\mathbf{x}) \text{ на } \Omega, \quad (1)$$

$$U(\mathbf{x}) = U_D \text{ на } \Gamma_D, \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ на } \Gamma_N, \quad (3)$$

$$U^+(\mathbf{x}) = U^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in} \quad (4)$$

$$\frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U^+(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U^-(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (5)$$

где $\rho^\varepsilon(\mathbf{x})$ – удельное электрическое сопротивление (Ом·м), $U(\mathbf{x})$ – электрический потенциал (В/м), $\varepsilon = \max_{i=1..M} \dim \Omega_i$ – коэффициент мелкости включений (определяется геометрическим размером неоднородностей), \mathbf{n}^1 – внешняя нормаль к рассматриваемой границе, Γ_D и Γ_N – внешние границы области Ω , на которых определены условия Дирихле и Неймана соответственно, Γ_{in} – внутренние границы области Ω , $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{in}$ – границы области моделирования.

Краевая задача упругой изотермической стационарной деформации твердого тела в перемещениях в неоднородной области $\Omega \subset R^3$ имеет вид:

$$-\nabla \cdot (\mathbf{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) : \nabla_s \mathbf{U}(\mathbf{x})) = 0 \text{ на } \Omega, \quad (6)$$

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_D \text{ на } \Gamma_D, \quad (7)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{G}_{Ng}(x) \text{ на } \Gamma_{Ng}, \quad (8)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \text{ на } \Gamma_{N0}, \quad (9)$$

$$\mathbf{U}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{U}^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (10)$$

$$\mathbf{n}^+ \cdot \boldsymbol{\sigma}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{n}^- \cdot \boldsymbol{\sigma}^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (11)$$

¹ В данном случае и далее жирным шрифтом будут выделяться векторные и тензорные функции и параметры.

где $\mathbf{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) = d_{ijkp}(\mathbf{x})$, $i, j, k, p = \{x, y, z\}$, – симметричный тензор упругости четвертого ранга для анизотропной среды (Н/м), $\mathbf{U}(\mathbf{x}) = (u^x(\mathbf{x}), u^y(\mathbf{x}), u^z(\mathbf{x}))^T$ – векторная функция перемещений (м), $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ – тензор напряжений (Па), $\varepsilon = \max_{i=1..M} \dim \Omega_i$ – коэффициент мелкости включений, $\Omega \subset R^3$ – область моделирования, состоящая из матрицы Ω_0 и включений Ω_i , $i = 1..M$, так, что $\bigcup_{i=1}^M \Omega_i = \Omega$ и $\forall i = \overline{1, M} : \dim \Omega_i \ll \dim \Omega$, \mathbf{n} – внешняя нормаль к рассматриваемой границе, Γ_D и Γ_N – внешние границы области Ω , на которых определены условия Дирихле и Неймана соответственно, Γ_{in} – внутренние границы области Ω , $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{in}$ – границы области моделирования.

Поскольку область моделирования может быть физически и геометрически многомасштабной, то для решения задач (1) – (5) и (6) – (11) применяются модификации многомасштабного метода конечных элементов (MsFEM), гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов (FE-HMM), расширенного метода конечных элементов (XFEM), которые позволяют сформировать единую вычислительную платформу для решения многофизических задач.

По вычисленному электрическому потенциалу (1) – (5) выполняется численная гомогенизация удельного электрического сопротивления:

$$\rho_{эфф} = \left(\frac{\|\mathbf{J}\|_{L_2}}{\|\nabla U(\mathbf{x})\|_{L_2}} \right)^{-1} = \left(\frac{\sqrt{\int_{\Omega} |\mathbf{J}|^2}}{\sqrt{\int_{\Omega} |\nabla U(\mathbf{x})|^2}} \right)^{-1}, \quad (12)$$

где $\mathbf{J} = -(\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} \nabla U(\mathbf{x})$ – плотность тока (А/м²), $U(\mathbf{x})$ – электрический потенциал (В/м).

Для вычисления эффективного тензора упругости в трехмерном образце Ω^{RVE} , являющегося представительным объемом для исследуемой среды или материала, формулируются шесть краевых задач упругой деформации твердого тела, которые соответствуют одноосным растяжениям и сдвигам в направлении трех главных осей:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\mathbf{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) : \nabla_s \mathbf{U}_q) &= 0 \text{ на } \Omega^{RVE}, \\ \mathbf{U}_q|_{\partial\Omega^{RVE}} &= \boldsymbol{\xi}_q(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (13)$$

где $\Omega^{RVE} = [0; a]^3$ – представительный объем, который является кубом со стороной a (м), расположенный так, что его ребра параллельны главным осям декартовой системы координат, и одна из вершин совпадает началом координат, \mathbf{U}_q – векторная функция перемещений (м) при условии начальных перемещений $\boldsymbol{\xi}_q(\mathbf{x}) = (\xi_x^q(\mathbf{x}), \xi_y^q(\mathbf{x}), \xi_z^q(\mathbf{x}))^T$, $q = \{xx, yy, zz, xy, yz, xz\}$.

В соответствии с энергетическим подходом, основанном на равенстве удельной энергии упругой деформации гомогенизированного тела Ω_{eff}^{RVE} и исходного гетерогенного объекта Ω^{RVE} , компоненты эффективного тензора упругости могут быть получены следующим образом:

$$d_{ijkp}^{eff} = \frac{1}{(1 + 3\delta_{ijkp})\beta^2 |\Omega_{eff}^{RVE}|} \int_{\Omega^{RVE}} \boldsymbol{\varepsilon}^{(ij)} : \mathbf{D}^\varepsilon : \boldsymbol{\varepsilon}^{(kp)} d\mathbf{x}, \quad (14)$$

где δ_{ijkp} – символ Кронекера:

$$\delta_{ijkp} = \begin{cases} 1, & \text{если } \forall q, w \in \{i, j, k, p\} : q = w, \\ 0, & \text{если } \exists q, w \in \{i, j, k, p\} : q \neq w. \end{cases} \quad (15)$$

Данный метод является наиболее общим и может применяться как для вычисления эффективного тензора упругости сплошных сред, так и для ячеистых структур, волокнистых материалов, естественных материалов с существенной гетерогенностью и др.

Помимо решения стационарных задач, таких как (1) – (5) и (6) – (11), в работе рассматривается квазистационарная задача разрушающей упругой изотермической деформации твердого тела:

$$-\nabla \cdot (\mathbf{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) : \nabla_s \mathbf{U}(\mathbf{x})) = 0 \text{ на } \Omega, \quad (16)$$

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_D \text{ на } \Gamma_D, \quad (17)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{G}_{Ng}(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{Ng}, \quad \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \text{ на } \Gamma_{N0}, \quad (18)$$

$$\mathbf{n}^+ \cdot \boldsymbol{\sigma}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{n}^- \cdot \boldsymbol{\sigma}^-(\mathbf{x}) = 0 \text{ на } \Gamma_C \quad (19)$$

$$\mathbf{U}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{U}^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad \mathbf{n}^+ \cdot \boldsymbol{\sigma}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{n}^- \cdot \boldsymbol{\sigma}^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (20)$$

где Γ_C – внутренняя трещина.

Для прогнозирования траектории распространения трещины по полученным полям деформации и напряжения (16) – (20) применяется метод, основанный на J-интеграле (интеграл Черепанова-Райса), а именно: угол отклонения θ_{cr} от прямолинейного распространения трещины равен:

$$\theta_{cr} = \arctg \left(\frac{J_2}{J_1} \right), \quad (21)$$

где J_1 и J_2 – интенсивность высвобождения энергии в направлениях $\tilde{\mathbf{x}}_1$ и $\tilde{\mathbf{x}}_2$ соответственно:

$$J_k = \int_A \left(\boldsymbol{\sigma} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}_k} - W \tilde{\mathbf{x}}_k \right) \frac{\partial q}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} dA, \quad k = \overline{1, 2} \quad (22)$$

где $A \subset \Omega$ – подобласть, ограниченная замкнутой поверхностью, охватывающей фронт трещины, q – гладкая функция равная 1 на линии фронта трещины и 0 на внешней (относительно фронта) границе ∂A , $\tilde{\mathbf{x}} = \{\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \tilde{\mathbf{x}}_3\}$ – ортонормированная локальная система координат: ось $\tilde{\mathbf{x}}_1$ принадлежит плоскости трещины и ортогональна фронту, ось $\tilde{\mathbf{x}}_2$ ортогональна плоскости трещины, ось $\tilde{\mathbf{x}}_3$ – касательная к фронту трещины и принадлежит плоскости трещины.

В **третьей главе** рассмотрены особенности формирования функциональных иерархических пространств в следующих методах (Таблица 1): в многомасштабном методе конечных элементов на тетраэдральных носителях (multiscale finite element method, MsFEM), в гетерогенном многомасштабном методе конечных элементов на

полиэдральных носителях (heterogeneous multiscale finite element method, FE-НММ), в расширенном методе конечных элементов на тетраэдральных носителях (extended finite element method, XFEM). А также предложены модификации методов, адаптированные для решения задач с большим числом разномасштабных неоднородностей (Таблица 2): разрывный многомасштабный метод конечных элементов на полиэдральных носителях (discontinuous galerkin multiscale finite element method, DG-МsFEM), расширенный гетерогенный многомасштабный метод на полиэдральных носителях конечных элементов (extended heterogeneous multiscale finite element method, XFE-НММ). Для каждого из методов приведены соответствующие непрерывные и дискретные иерархические вариационные постановки, предложены технологии построения функций формы и сборки матриц для систем линейных алгебраических уравнений. Выполнена верификация соответствующих вычислительных схем.

Таблица 1. Особенности классических многомасштабных методов

	MsFEM	FE-НММ	XFEM
Тип макроэлементов	Тетраэдр	Полиэдр	Тетраэдр
Обеспечение требований непрерывности на межэлементных границах	Поузловая непрерывность на уровне микроэлементной сетки	Формулы численного интегрирования	Функциональная непрерывность макроэлементных функций формы
Область применения	Численное моделирование процессов в сложных средах	Численное моделирование процессов в сложных средах	Решение задач с подвижными внутренними границами
Ограничения	Неприменим для геометрически сложных сред с высокой концентрацией включений	Неприменим для сред с малым количеством включений	Высокая вычислительная сложность для сильно трещиноватых сред

Таблица 2. Особенности модифицированных многомасштабных методов

	DG-МsFEM	XFE-НММ
Тип макроэлементов	Полиэдр	Полиэдр
Обеспечение требований непрерывности на межэлементных границах (макроуровень)	Согласование численных потоков на межэлементных границах	Формулы численного интегрирования на макроуровне
Область применения	Численное моделирование процессов в сложных средах	Численное моделирование процессов в сложных средах с подвижными внутренними границами

В рассматриваемых в данной работе методах физические и топологические особенности решаемых задач определяют требования, предъявляемые к формированию каждого из уровней функциональных пространств, для удовлетворения которых на каждом из уровней иерархии могут использоваться различные методы. В классических методах (MsFEM, FE-НММ, XFEM) на каждом из уровней иерархии применяется классический метод конечных элементов

(скалярный или векторный), адаптированный для решения поставленной задачи. Применимость многомасштабных методов для решения широкого класса прикладных задач обусловлена возможностью адаптации метода к каждой конкретной ситуации с учетом физических и геометрических особенностей. В данной работе предложены модификации классических методов для решения стационарных эллиптических задач в областях с большим числом неоднородностей (пор, трещин и т.д.): разрывный многомасштабный метод конечных элементов (DG-MSFEM) и расширенный гетерогенный многомасштабный метод конечных элементов (XFE-НММ).

Единая вычислительная схема может быть разработана на основе многомасштабных методов для решения как скалярных, так и тензорных задач. Поэтому не нарушая общности вместо краевых задач (1) – (5) и (6) – (11) рассмотрим неоднородное эллиптическое уравнение в области $\Omega \subset R^3$ состоящей из матрицы Ω_0 и включений $\{\Omega_1, \dots, \Omega_M\}$, причем $\forall \Omega_i \subset \Omega, i = \overline{1, M} : |\Omega_i| \ll |\Omega|$:

$$-\nabla \cdot (A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla U(\mathbf{x})) = F(\mathbf{x}) \text{ на } \Omega, \quad (23)$$

$$U(\mathbf{x}) = U_D \text{ на } \Gamma_D, \quad \frac{\partial A^\varepsilon(\mathbf{x}) U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = G_N(x) \text{ на } \Gamma_N, \quad (24)$$

$$U^+(\mathbf{x}) = U^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad \frac{\partial A^\varepsilon(\mathbf{x}) U^+(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial A^\varepsilon(\mathbf{x}) U^-(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (25)$$

где $A^\varepsilon(\mathbf{x})$ – коэффициент, характеризующий физическое свойство среды, $\varepsilon = \max_{i=1..M} \dim(\Omega_i)$ – коэффициент мелкости включений, \mathbf{n} – внешняя нормаль к границе, Γ_D и Γ_N – внешние границы области Ω , на которых определены условия Дирихле и Неймана соответственно, Γ_{in} – внутренние границы области Ω , $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{in}$ – границы области моделирования.

Разрывный многомасштабный метод конечных элементов (DG-MSFEM) является обобщением классического многомасштабного метода конечных элементов для макроэлементов свободной формы. В DG-MSFEM решение строится на неполиномиальных многомасштабных функциях формы, определенных на полиэдральных носителях. Для обеспечения условий непрерывности решения на межэлементных границах предлагается использовать на макроуровне разрывный метод Галёркина в форме "внутреннего штрафа" или IP - постановки. Это позволяет применять несогласованные микро разбиения на соседних элементах.

Рассмотрим адаптивное разбиение области $\Pi^H(\Omega)$ на полиэдры K^p (p – число вершин), которые являются макроэлементами (Рисунок 1). Пусть ∂K^p – граница полиэдра K^p , $\bigcup_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \partial K^p = \Gamma$ – объединение всех (внешних и внутренних) границ макроэлементов, $\Gamma \setminus (\Gamma_D \cup \Gamma_N) = \Gamma_0$ – объединение границ макроэлементов, которые являются внутренними для области Ω .

На полиэдральном разбиении $\Pi^H(\Omega)$ введем дискретные подпространства тестовых функций:

$$V^H(\Pi^H(\Omega)) = \{v \in L^2(\Omega) \mid v|_{\partial K^p} \in P(K^p), \forall K^p \in \Pi^H(\Omega)\} \in W_2^1(K^p), \quad (26)$$

$$V_0^h(\mathbb{T}^h(K^p)) = \left\{ \tau, \zeta \in L^2(K^p) \mid \tau|_{\partial K^p} = 0, \zeta|_{\partial K^p} = 0, (\tau, \zeta) = \int_{K^p} \tau \zeta dK^p < \infty \right\}, \quad (27)$$

где $P(K^p)$ – в общем случае неполиномиальные функции, определенные на ∂K^p .

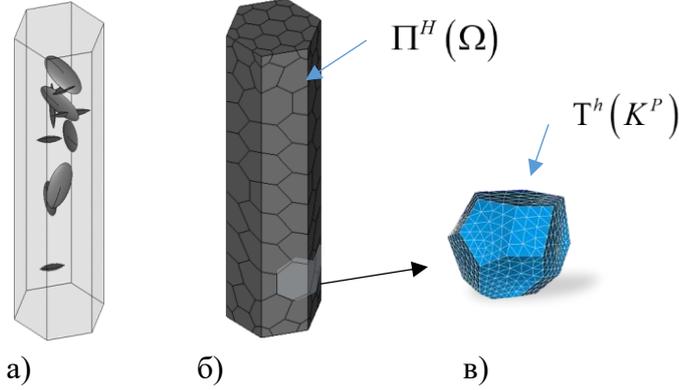


Рисунок 1 – Сеточная иерархическая структура для 3D образца с включениями (а – образец; б – грубая сетка $\Pi^H(\Omega)$; в – мелкая тетраэдральная адаптивная сетка $\mathbb{T}^h(K^p)$ на макроэлементе)

Пусть $\phi_i^{DG-MsFEM, K}(\mathbf{x}), i = \overline{1, p}$ – локальные многомасштабные неполиномиальных функций формы (Рисунок 2), определенные на K^p и представимые в виде линейной комбинации по базисным функциям пространства $V_0^h(\mathbb{T}^h(K^p))$. Тогда подпространство функций формы имеет вид:

$$\Phi^{DG-MsFEM}(K^p) = span\{\phi_i^{DG-MsFEM, K}(\mathbf{x}), i = \overline{1, p}\} \subset V^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Omega), \quad (28)$$

С учетом введенных подпространств (26) – (28) макроэлементом в DG-MsFEM будем называть тройку $\{K^p, \Phi^{DG-MsFEM}, \Sigma^{DG-MsFEM}\}$, где $\Sigma^{DG-MsFEM}(K^p)$ – степени свободы, $\dim(\Sigma^{DG-MsFEM}(K^p)) = p$.

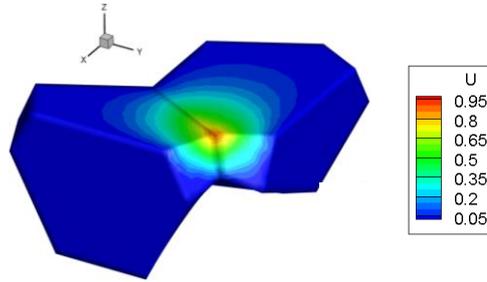


Рисунок 2 – Пример локальных многомасштабных неполиномиальных функций формы для двух соседних полиэдров

Для многомасштабной эллиптической краевой задачи (23) – (25) конечноэлементное решение может быть представлено в виде линейной комбинации неполиномиальных многомасштабных функций формы:

$$U^{H, DG-MsFEM}(\mathbf{x}) = \sum_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \sum_{i=1}^p b_i^{K^p} \phi_i^{DG-MsFEM, K}(\mathbf{x}), \quad (29)$$

Тогда дискретная вариационная постановка DG-MsFEM в форме внутреннего штрафа имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x}) \in V^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Omega) + U_D(\Gamma_D) \text{ такое, что} \\ \int_{\Omega} A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x}) \cdot \nabla v(\mathbf{x}) d\Omega + \\ + \int_{\Gamma_0} A^\varepsilon(\mathbf{x}) \left([U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})] \cdot \{\nabla v(\mathbf{x})\} - \{\nabla U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})\} \cdot [v(\mathbf{x})] \right) d\Gamma + \\ + \int_{\Gamma} A^\varepsilon(\mathbf{x}) \mu [U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})] \cdot \{v(\mathbf{x})\} d\Gamma - \int_{\Gamma_D} A^\varepsilon(\mathbf{x}) (U_D \mathbf{n} \cdot \nabla v(\mathbf{x})) d\Gamma - \int_{\Gamma_N} G_N(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Gamma \\ = \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Omega, \quad \forall v^H \in V^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Omega), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \end{array} \right. \quad (30)$$

где $\mu = Const$ – параметр «штрафа», определяемый экспериментально, $[\cdot]$ и $\{\cdot\}$ – операторы скачка и среднего, определяющие поведение решения на границах макроэлементов.

Для решения задач в многомасштабных трещиноватых областях предлагается модификация XFEM на базе FE-HMM: **расширенный гетерогенный многомасштабный метод конечных элементов (XFE-HMM)**. В отличие от FE-HMM в XFE-HMM для построения гетерогенных многомасштабных функций формы на полиэдральных носителях предлагается применять XFEM.

Рассмотрим согласованное адаптивное нерегулярное разбиение области $\Pi^H(\Omega)$ на полиэдры K^p . Тогда макроэлементом в XFE-HMM будем называть *четверку* $\{K^p, \Phi^{XFE-HMM}, \Sigma^{XFE-HMM}, \Lambda\}$, где $\Phi^{XFE-HMM} = span\{\phi_i^{XFE-HMM,K}(\mathbf{x}), i = \overline{1,p}\}$ – пространство гетерогенных многомасштабных неполиномиальных функций формы $\phi_i^{XFE-HMM,K}(\mathbf{x})$, определенных на K^p , $\dim(\Phi^{XFE-HMM}) = p$, $\Sigma^{XFE-HMM}$ – степени свободы, $\dim(\Sigma^{XFE-HMM}) = p$, Λ – формула численного интегрирования, определенная на K^p :

$$\int_{K^p} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{l=1}^{n_K} \omega_l f(\mathbf{x}_l), \quad (31)$$

где ω_l и $\mathbf{x}_l \in K^p$ – веса и узлы численного интегрирования соответственно, удовлетворяющие следующим требованиям:

- 1) $\forall \mathbf{x}_l, l = \overline{1, n_K} : \mathbf{x}_l \notin \partial K^p$;
- 2) если полиэдры $K_1, K_2 \in \Pi^H(\Omega)$ имеют общую грань или ребро, то точки численного интегрирования $\forall \mathbf{x}_{l_1} \in K_1, l_1 = \overline{1, n_{K_1}}$, и $\forall \mathbf{x}_{l_2} \in K_2, l_2 = \overline{1, n_{K_2}}$, расположены симметрично относительно общей грани или ребра соответственно;
- 3) выбор схем численного интегрирования определяется гладкостью конечноэлементного решения.

Для определения значений локальных гетерогенных многомасштабных неполиномиальных функций формы $\phi_i^{XFE-HMM,K}(\mathbf{x})$ в подобластях, содержащих точки численного интегрирования (31), на каждом из полиэдров вводится тетраэдральное согласованное разбиение $T^h(K^p)$ в идеологии XFEM, т.е. без учета особенностей внутренней структуры K^p . Тогда локальные гетерогенные многомасштабные

неполиномиальных функций формы могут быть представлены в виде линейной комбинации

$$\phi_i^{XFE-HMM,K}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_K} q_j^K \varphi_j(\mathbf{x}), \quad (32)$$

где $\varphi_j(\mathbf{x})$, $j = \overline{1, n_K}$, – функции формы конечноэлементного подпространства $\Phi^{XFEM}(\Gamma^h(K^p)) = \Phi^{Regular}(\Gamma^h(K^p)) \oplus \Phi^{Extended}(\Gamma^h(K^p))$, построенного в идеологии XFEM; q_j^K , $j = \overline{1, n_K}$, – веса разложения, определяемые из решения серии иерархических подзадач в каждой из подобластей, сформированных из элементов $\Gamma^h(K^p)$ вокруг точек численного интегрирования.

Дискретная вариационная постановка для задачи (23) в XFE-HMM имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U^{H,XFE-HMM}(\mathbf{x}) \in V_0^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus \\ \oplus \left(\bigcup_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \Phi^{XFEM}(\Gamma^h(K^p)) \right) + U_D(\Gamma_D) \text{ такое, что} \\ \int_{\Omega} \nabla U^{H,XFE-HMM}(\mathbf{x}) \cdot A^H(\mathbf{x}) \cdot \nabla v^H(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma_N} G_N v^H(\mathbf{x}) d\Gamma + \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v^H(\mathbf{x}) d\Omega, \\ \forall v^H(\mathbf{x}) \in V_0^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus \left(\bigcup_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \Phi^{XFEM}(\Gamma^h(K^p)) \right), \end{array} \right. \quad (33)$$

где $V_0^H(\Pi^H(\Omega)) = \left\{ \tau, \varsigma \in L^2(\Omega) \mid \tau|_{\partial\Omega} = 0, \varsigma|_{\partial\Omega} = 0, (\tau, \varsigma) = \int_{\Omega} \tau \varsigma d\Omega < \infty \right\}$.

В четвертой главе приведены результаты анализа влияния физических свойств включений и матрицы, концентрации, ориентации и способа размещения включений в образце на эффективный тензор упругости и на эффективное удельное электрическое сопротивление (УЭС).

Электрофизические свойства компонент рассматриваемой среды, их концентрация, ориентация и форма оказывают значительное влияние на эффективное УЭС даже при малых концентрациях, что не позволяет в ряде случаев упрощать рассматриваемую модель как с точки зрения её размерности (переход от 3D к 2D), так и геометрической структуры. В большей степени это проявляется для случая проводящих включений в непроводящей (слабопроводящей) среде. При высоких концентрациях включений было отмечено влияние объемов и поверхностей включений на порог перколяции, а именно:

- в случае насыщения среды слабоконтрастными включениями (отношение УЭС матрицы к УЭС включений меньше 10^2) порог перколяции не достигается (Рисунок 3.а);

- если включения в среде сосредоточены в подобласти, то является недопустимым упрощение модели до равномерного распределения;

- для смеси включений с различными УЭС наблюдаются несколько скачкообразных изменений эффективного УЭС среды (т.е. несколько порогов перколяции) (Рисунок 3.б).

Таблица 3 – Классификация включений-пластинок в образцах

№ п/п	Образец	УЭС включений, Ом*м	Объемная концентрация включений	Размеры включений, мм
1	30×30×100 мм УЭС 1,4 Ом·м	10^{-1}	0,7% – 10,5%	a = 0,3; b = 5; L = 10
2		10^{-2}		
3		10^{-4}		
4		10^{-6}		
5		10^{-8}		
6		10^{-2} и 10^{-8} (в равных долях)		
7		10^{-4} и 10^{-8} (в равных долях)		

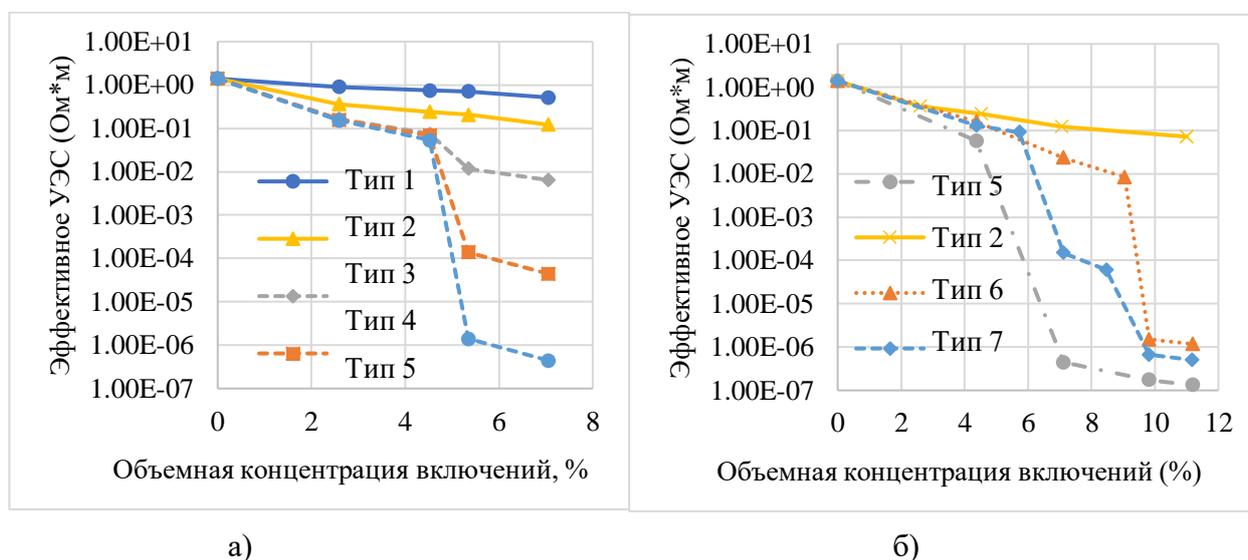


Рисунок 3 – Изменение эффективного УЭС образцов (Таблица 3) с включениями-пластинками при росте их концентрации (а – варьирование УЭС включений; б – смеси включений)

Проведенные исследования влияния физико-геометрических свойств образцов на эффективный тензор упругости не показали значимого различия в компонентах. Но было отмечено, что, при определенных способах размещения включений, образцы имеют устойчивые характеристики упругости базовых типов сред (изотропия, трансверсальная изотропия и др.). При повышении концентрации включений данное соответствие становилось более явным.

Разработанные вычислительные схемы образуют единую платформу, что позволяет вычислять различные эффективные характеристики без дополнительных преобразований. Для исследования влияния разрушающей деформации на эффективный тензор упругости и эффективное УЭС рассмотрим кубические образцы 30×30×30 мм (Рисунок 4) с линзовидными круглыми трещинами, ориентированными случайным образом. Начальный радиус каждой из трещин равен 2 мм, толщина в центре трещины 1 мм. Матрицей образца является песчаник, пропитанный раствором NaCl (модуль Юнга $18 \cdot 10^9$ Па, коэффициент Пуассона 0,3, УЭС 3,33 Ом*м), трещины заполняет нефть (модуль Юнга $2,03 \cdot 10^9$ Па, коэффициент Пуассона 0,5, УЭС $1,2 \cdot 10^6$ Ом*м).

На верхнюю грань образца осуществляется механическое воздействие, направленное по внешней нормали, приводящее к росту трещин. Моделирование распространения трещин осуществляется по алгоритмам, реализованным в программном комплексе MultiscaleMech3D. На каждом из шагов алгоритма производится вычисление эффективного тензора упругости и эффективного УЭС образца. Результаты вычислений приведены на рисунке 5.

Рассмотренное изменение внутренней структуры образца, связанное с его разрушением под действием внешнего механического нагружения, оказывает влияние на эффективные характеристики, пропорциональные увеличению объемной концентрации флюида, заполняющего трещины, что согласуется с результатами, полученными ранее для неразрушающихся сред.

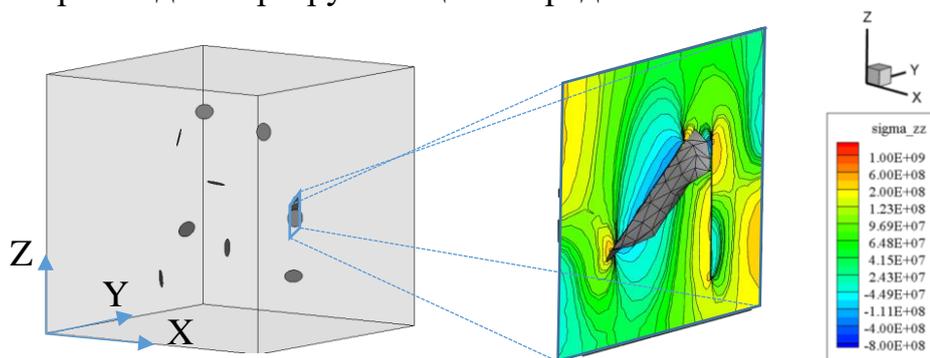


Рисунок 4 – Начальное состояние образца для проведения вычислительных экспериментов с радиальными трещинами и фрагмент распределения компоненты σ_{zz} тензора напряжений

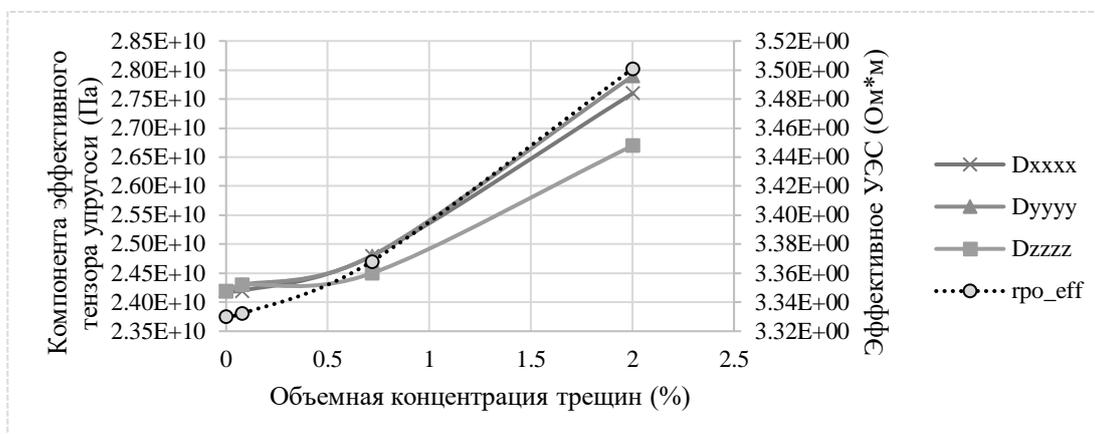


Рисунок 5 – Изменение главных компонент эффективного тензора упругости и эффективного УЭС при разрушении образца

В пятой главе рассмотрены структурные части разработанных программных комплексов, реализующих параллельные вычислительные схемы численной гомогенизации (Рисунок 6): MultiscaleMech3D и EffectiveProperties3D. Рассмотрены особенности технологии таких процедур, как построение полиэдральной сетки на основе тетраэдрального разбиения, формирование иерархических сеточных структур, моделирование процесса распространения трещин. Выполнено распараллеливание алгоритмов многомасштабных методов для нескольких моделей организации распределения вычислительных ресурсов между подзадачами. Выполнена валидация вычислительных схем получения эффективного УЭС и эффективного тензора упругости, а также распространения трещин в твердом теле.



Рисунок 6 – Базовая структура программных комплексов

Все программные комплексы реализованы на языке C++ и адаптированы для работы, как на персональных компьютерах, так и на гибридных вычислительных кластерах.

В приложениях А и Б приведены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ: MultiscaleMech3D и EffectiveProperties3D, соответственно.

В **Заключении** сформулированы основные результаты работы:

1. Разработаны и реализованы параллельные вычислительные алгоритмы на базе многомасштабных методов конечных элементов и их модификаций для решения задач распределения электрического потенциала в средах с микровключениями различной геометрии, локализации и концентрации и квазистационарной упругой разрушающей и неразрушающей деформации гетерогенных сред при условии квазихрупкого разрушения. Определены границы применимости многомасштабных методов и разработаны их модификации для моделирования геофизических полей в существенно гетерогенных средах.

2. Для расчета эффективных характеристик (эффективное удельное электрическое сопротивление и эффективный тензор упругости) разработаны и реализованы численные алгоритмы, основанные на решении трехмерной прямой задачи о распределении физических полей в образце. Результаты вычислительных экспериментов отклоняются от лабораторных измерений и аналитических оценок не более чем на 5-8%.

3. Все алгоритмы и вычислительные схемы реализованы на языках программирования C++ и C# в программных комплексах MultiscaleMech3D и

EffectiveProperties3D, адаптированных для работы как на персональных компьютерах, так и на вычислительных кластерах. Выполнено распараллеливание основных алгоритмов, которое показало, что ускорение при увеличении числа процессоров близко к линейному при использовании динамической модели распределения подзадач.

4. В результате расчетов, выполненных в разработанных программных комплексах, получены следующие основные результаты:

- при исследовании эффективного УЭС образцов со слабоконтрастными включениями перколяция не наблюдается;
- если включения в среде сосредоточены в подобласти, то упрощение модели до объемного равномерного распределения неоднородностей вносит ошибку в вычисленное значение эффективного УЭС до 200%;
- для образцов со смесью включений с различными УЭС наблюдаются несколько скачкообразных изменений эффективного УЭС среды (т.е. несколько порогов перколяции);
- исследования эффективного тензора упругости показали, что варьирование преимущественной ориентации включений относительно главных осей изменяет свойства образца в соответствии с известными базовыми типами сред (изотропия, трансверсальная изотропия и др.).

Таким образом, получено, что физические свойства включений и матрицы, концентрация, ориентация и способ размещения включений в образце оказывают существенное влияние на эффективный тензор упругости и на эффективное удельное электрическое сопротивление, что не допускает редуцирования математических моделей при численном моделировании.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в рецензируемых научных журналах из перечня ВАК

1. Шурина Э.П., Эпов М.И., Кутищева А.Ю. Численное моделирование порогов перколяции коэффициентов электропроводности // Вычислительные технологии. - 2017. - Т. 22. - № 3. - С. 3-15
2. Epov M.I., Shurina E.P., Kutischeva A.Yu. Computation of effective resistivity in materials with microinclusions by a heterogeneous multiscale finite element method // Physical Mesomechanics. - 2017. - Vol. 20. - № 4. - P. 407-416

Свидетельства о государственной регистрации программы

3. Шурина Э.П., Кутищева А.Ю. «MultiscaleMech3D» / Свидетельство №2018616279
4. Кутищева А.Ю. «EffectiveProperties3D» / Свидетельство №2017663134

Публикации в рецензируемых изданиях

5. Шурина Э.П., Кутищева А.Ю. Численное моделирование деформации твердого тела под действием внешнего и внутреннего давления // Актуальные проблемы электронного приборостроения: Труды XIII международной научно-технической конференции (АПЭП - 2016) (г. Новосибирск, 3-6 октября, 2016 г.): В 12 т. - Новосибирск, 2016. - Т. 8. - С. 232-235. - CD-ROM

6. Shurina E.P., Kutischeva A.Y. Numerical Determination of the Effective Elasticity Tensor of an Heterogeneous Solid // 14th International Scientific - Technical Conference on Actual Problems of Electronic Instrument Engineering (APEIE-2018) - 44894: Proceedings. - Novosibirsk, 2018. - Vol. 1. - № Part 4. - P. 294-297
7. Epov M.I., Shurina E.P., Itkina N.B., Kutischeva A.U., Markov S.I. Finite element modeling of a multi-physics poro-elastic problem in multiscale media // Journal of Computational and Applied Mathematics. - 2019. - Vol.352. - P.1-22