

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ ИНСТИТУТ  
НЕФТЕГАЗОВОЙ ГЕОЛОГИИ И ГЕОФИЗИКИ ИМ. А.А. ТРОФИМУКА СИБИРСКОГО  
ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

*На правах рукописи*

**КУТИЩЕВА Анастасия Юрьевна**

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

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы  
программ

**ДИССЕРТАЦИЯ**

на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
д.т.н., профессор ШУРИНА Э.П.,

**НОВОСИБИРСК**

2019

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>ОГЛАВЛЕНИЕ</b> .....	<b>2</b>
<b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....	<b>5</b>
<b>Глава 1 ГОМОГЕНИЗАЦИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД</b> .....	<b>12</b>
1.1 Гетерогенные среды .....	12
1.2 Гомогенизация и апскейлинг .....	14
1.3 Процедуры численного моделирования для гетерогенных объектов .	15
Выводы по главе .....	21
<b>Глава 2 МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ СТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ</b> .....	<b>22</b>
2.1 Стационарное электрическое поле .....	22
2.1.1 Эффективное удельное электрического сопротивление .....	23
2.1.2 Перколяция.....	26
2.2 Стационарная изотермическая упругая деформация твердого тела....	26
2.2.1. Эффективный тензор упругости .....	29
2.2.2 Разрушающая деформация (распространение трещин).....	34
Выводы по главе .....	39
<b>Глава 3 МНОГОМАСШТАБНЫЕ МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ</b> .....	<b>40</b>
3.1 Многомасштабный метод конечных элементов .....	40
3.1.1 Многомасштабная вариационная постановка .....	41
3.1.2 Дискретизация области моделирования .....	42
3.1.3 Многомасштабные неполиномиальные функции формы .....	43
3.1.4 Дискретная многомасштабная вариационная постановка.....	50
3.1.5 Ассемблирование системы линейных алгебраических уравнений .....	50
3.1.6 Верификация вычислительных схем многомасштабного метода конечных элементов .....	52
3.2 Гетерогенный многомасштабный метод конечных элементов.....	55
3.2.1 Гетерогенная многомасштабная вариационная постановка.....	55
3.2.2 Дискретизация области моделирования .....	55
3.2.3 Гетерогенные многомасштабные неполиномиальные функции формы.....	58

3.2.4	Дискретная гетерогенная многомасштабная вариационная постановка .....	61
3.2.5.	Ассемблирование системы линейных алгебраических уравнений .....	61
3.2.6	Верификация вычислительных схем гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов .....	62
3.3	Расширенный метод конечных элементов .....	66
3.3.1	Вариационная постановка расширенного метода конечных элементов .....	66
3.3.2	Дискретизация области моделирования .....	67
3.3.3	Дискретная вариационная постановка.....	72
3.3.4	Ассемблирование системы линейных алгебраических уравнений .....	72
3.3.5	Верификация вычислительных схем расширенного метода конечных элементов .....	75
3.4	Модифицированные многомасштабные методы .....	77
3.4.1	Разрывный многомасштабный метод конечных элементов .....	78
3.4.2	Расширенный гетерогенный многомасштабный метод конечных элементов .....	88
	Выводы по главе .....	92
<b>Глава 4</b>	<b>РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ ЭФФЕКТИВНЫХ СВОЙСТВ ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД.....</b>	<b>94</b>
4.1	Эффективное удельное электрическое сопротивление .....	94
4.1.2	Влияние формы включений .....	94
4.1.3	Влияние локализации включений .....	98
4.1.4	Исследования смесей включений с различными электрофизическими характеристиками .....	99
4.1.5	Влияние физико-геометрических свойств среды и включений на порог перколяции .....	100
4.2	Эффективный тензор упругости .....	107
4.2.1	Влияние формы включений .....	107

4.2.2	Влияние способа размещения включений в образце .....	113
4.3	Влияние разрушающей деформации на эффективные свойства среды	116
4.4	Численное моделирование распределения скалярного потенциала в среде под действием двухэлектродной установки постоянного тока .....	118
	Выводы по главе .....	121
<b>Глава 5</b>	<b>ОПИСАНИЕ ПРОГРАММНЫХ КОМПЛЕКСОВ .....</b>	<b>123</b>
5.1	Решение прямой задачи моделирования физических процессов .....	124
5.1.1	Алгоритмы реализуемых многомасштабных методов .....	126
5.1.2	Построение иерархических конечноэлементных сеток .....	132
5.1.3	Масштабируемость алгоритмов многомасштабных методов .....	140
5.1.4	Структура программного комплекса .....	145
5.2	Численная гомогенизация .....	148
5.2.1	Алгоритм вычисления эффективного удельного электрического сопротивления .....	148
5.2.2	Валидация и верификация алгоритма вычисления эффективного удельного электрического сопротивления .....	149
5.2.3	Алгоритм вычисления эффективного тензора упругости .....	152
5.2.4	Верификация алгоритма вычисления эффективного тензора упругости .....	153
5.3	Распространение трещин .....	156
5.3.1	Алгоритм квазихрупкого распространения трещин при упругой деформации твердого тела .....	156
5.3.2	Верификация алгоритма распространения трещин .....	159
	Выводы по главе .....	163
	<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....</b>	<b>164</b>
	<b>СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ .....</b>	<b>166</b>
	<b>ПРИЛОЖЕНИЕ А. СВИДЕТЕЛЬСТВО О ГОСУДАРСТВЕННОЙ РЕГИСТРАЦИИ ПРОГРАММЫ MULTISCALEMESH3D.....</b>	<b>186</b>
	<b>ПРИЛОЖЕНИЕ Б. СВИДЕТЕЛЬСТВО О ГОСУДАРСТВЕННОЙ РЕГИСТРАЦИИ ПРОГРАММЫ EFFECTIVEPROPERTIES3D.....</b>	<b>187</b>

## ВВЕДЕНИЕ

**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 современных 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 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 на базе современных 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 получения 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 и программной реализации модификаций вычислительных схем современных многомасштабных методов для моделирования распределения скалярного потенциала под действием постоянного тока и упругой деформации трехмерного гетерогенного тела при квазистатическом внешнем нагружении. Соискателем выполнен анализ масштабируемости разработанных вычислительных схем. Выполнена разработка и реализация алгоритмов распространения трещин в трехмерном квазихрупком объекте при квазистатическом нагружении. Соискатель принимал активное участие в разработке и верификации алгоритмов вычисления эффективного удельного электрического сопротивления и эффективного тензора упругости четвертого ранга трехмерной гетерогенной среды с микровключениями. 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.

**Методология и методы исследования.** Математической моделью, описывающей распределение электростатического потенциала под действием постоянного тока, является скалярное эллиптическое уравнение с краевыми условиями Дирихле и Неймана. Метод исследования – математическое моделирование современными многомасштабными методами в функциональном пространстве  $H(\text{grad}, \Omega)$ .

Математической моделью, описывающей упругую деформацию твердого тела при квазистатическом внешнем нагружении и при отсутствии внутренних сил, является однородное эллиптическое уравнение с тензорными коэффициентами и краевыми условиями Дирихле и Неймана. Метод исследования – математическое моделирование современными многомасштабными методами в функциональном пространстве  $\mathbf{H}(\text{grad}, \Omega)$ .

Для построения адаптивного симплициального сеточного разбиения используется генератор сеток многофункциональной платформы Salome. Построения полиэдральных адаптивных сеток осуществляется алгоритмами реализованными в программном комплексе.

**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 широкого диапазона физических и геометрических свойств. Разработанные вычислительные схемы расчета эффективного удельного электрического сопротивления и эффективного тензора упругости четвертого ранга позволяют определять эффективные характеристики сложно-построенных сред с высокими концентрациями включений.

**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.

Автор выражает глубокую благодарность научному руководителю д.т.н., профессору Э.П. Шуриной за помощь и поддержку при подготовке диссертации. Автор искренне признателен к.т.н. Н.Б. Иткиной и к.ф.-м.н. Н.В. Штабель, к.т.н. Е.В. Штанько за ценные советы и участие.

## Глава 1 ГОМОГЕНИЗАЦИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД

### 1.1 Гетерогенные среды

Горные породы представляют собой сложные иерархические и многомасштабные структуры, для которые отличаются многообразием геометрических форм и физических свойств. Совокупность данных факторов существенно затрудняет исследования нативных материалов без использования каких-либо идеализаций. Для этого вводятся различные классификации структур и текстур сред, ассоциированные с признаками значимыми для исследователя. В данной работе предлагается следующее структурирование, основанное на классификации горных пород, представленной в [1]:

I) по расположению составных частей в пространстве:

- 1) однородная (изотропная),
- 2) неоднородная (анизотропная):
  - а) плоские (плоскопараллельные),
  - б) слоистые,
  - в) сложно-неоднородные (сетчатые, сложнопятнистые, сложно-слоистые и пр.);

II) по степени и способу заполнения составными частями объема породы:

- 1) плотные (компактные) – включения и неоднородности не идентифицируются как отдельные локальные структуры, а представляют собой единый кластерный массив,
- 2) пористые (пузыристые, кавернозные) – неоднородности имеют замкнутую, гладкую границу,
- 3) трещиноватые – поперечный и продольный размеры неоднородностей существенно отличаются,
- 4) смешанные – в породе представлены неоднородности различных типов и невозможно выделить подобласти преимущественной локализации отдельных видов включений.

Однако, вышеприведенная классификация в полной мере не отображает всей сложности горных пород. Помимо сложной структуры (большинство горных пород являются слоистыми и анизотропными), горные породы могут изменять свои свойства в зависимости от внешних условий, таких как давление, температура и т.д. [2]. Это оказывает большое влияние на требования к исследованиям сред, находящимся на больших глубинах. Например, исследования, проводимые в глубоких скважинах, показали пластичность пород, которые при нормальных условиях свойствами пластичности не обладают [3].

Многие породы показывают физико-механические свойства, сильно различающиеся на разных масштабах. Например, порода может быть высоко проницаема на микромасштабе, благодаря развитой сети микротрещин и каверн, однако на макромасштабе пласт может являться слабопроницаемым или непроницаемым.

Также большое значение имеет подверженность горных пород неравномерным физико-химическим разрушающим воздействиям (например, выветривание), приводящим к изменению, как геометрических, так и физико-химических свойств.

Помимо горных пород (Рисунок 1.1.в) к гетерогенным относят также биологические ткани (Рисунок 1.1.б) и композиционные материалы или композиты (Рисунок 1.1.а), которые широко применяются во многих областях науки и техники [4] таких, как авиационная промышленность, автомобилестроение, добывающая промышленность (в том числе добыча углеводородов) и т.д.

На практике детальный учет приведенных выше структурных и физических особенностей существенно затруднен, однако часто вместо этого достаточно некоторой оценки свойств среды. Такие оценки называют эффективными свойствами или эффективными характеристиками [5], [6]. В зависимости от физики определяющих процессов, а также от геометрических и физико-механических свойств гетерогенной среды эффективные характеристики могут являться, как скалярными величинами (электропроводность, теплопроводность), так и

тензорными (проницаемость, тензор упругости). Процедура получения эффективных характеристик называется *гомогенизацией* [7], [5].

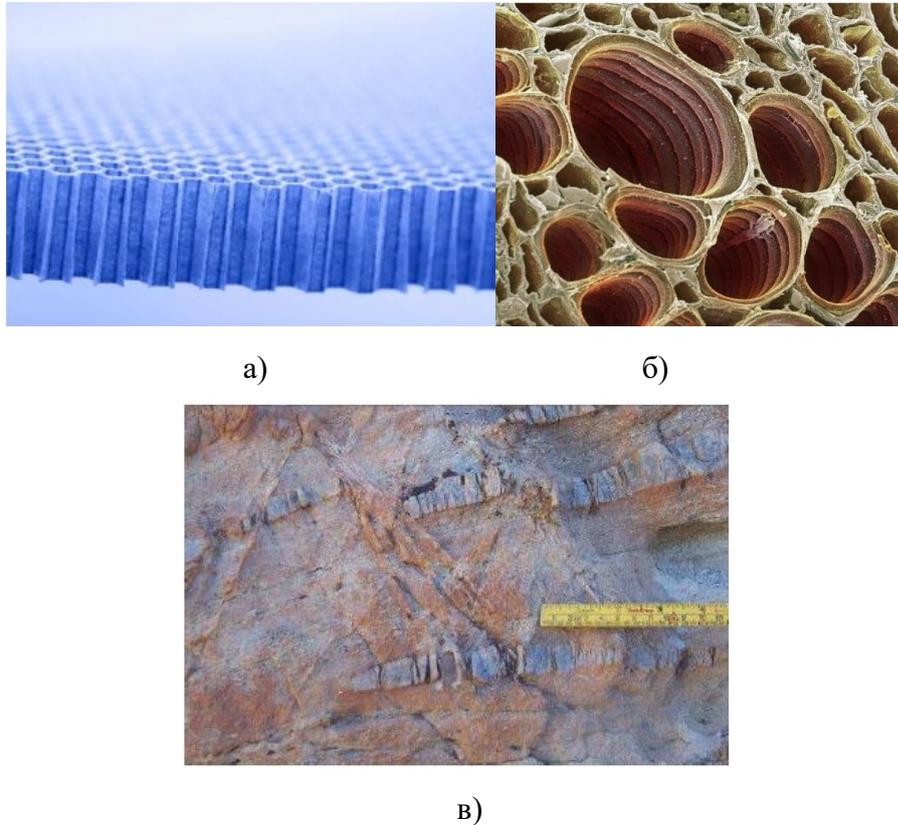


Рисунок 1.1 – Гетерогенные среды: а) – фрагмент композиционного материала<sup>1</sup>; б) – механическая ткань<sup>2</sup>; в) – фрагмент горной породы [8]

## 1.2 Гомогенизация и апскейлинг

Нефтегазоносные пласты – это сложно-слоистые структуры, где каждый из слоёв представлен смесями пород различной фракции и физических свойств, для которых также характерно наличие как магистральных трещин и разломов, так и микротрещиноватости и микропористости [9], [10], [11]. Для моделирования многофизических процессов в таких средах применяется *апскейлинг* (upscaling) или «укрупнение» модели [8].

Существуют различные подходы к построению технологий апскейлинга:

- 1) простое осреднение (averaging techniques) [12];

<sup>1</sup> <http://www.ims.uconn.edu/short-course-advanced-composite-materials/>

<sup>2</sup> <http://fb.ru/article/159450/funksii-i-vidyi-tkaney-biologiya>

- 2) решении серии локальных подзадач с последующей интерполяцией решения на всю область [13], [14];
- 3) многомасштабные методы [15], [16], [17], [18], [19];
- 4) гомогенизация [20], [7], [21], [22].

Среди перечисленных выше, наиболее перспективными являются технологии, использующие многомасштабные методы и процедуры численной гомогенизации [22], что связано с возможностью адаптации таких подходов к особенностям решаемой задачи без редуцирования исходной модели. Математический аппарат данных методов позволяет разрабатывать алгоритмы и вычислительные схемы для решения многофизических задач без введения в модель дополнительных искусственных параметров [23], [24], [25], [26], [27].

Численные методы гомогенизации [22], [28], [29], [30], [31] основаны на моделировании процессов, протекающих в гетерогенных средах, с последующим вычислением эффективных характеристик из полученных распределений полей. Например, алгоритм численной гомогенизации состоит из следующих этапов:

- 1) численное моделирование процессов, протекающих в гетерогенной среде (прямое моделирование),
- 2) вычисление эффективной характеристики по найденным распределениям полей в среде.

### **1.3 Процедуры численного моделирования для гетерогенных объектов**

Численное моделирование процессов в гетерогенных средах, обладающих сложной, физически и геометрически многомасштабной структурой, является ресурсоёмкой задачей. Поэтому активно применяются и разрабатываются различные вычислительные схемы, связанные с редуцированием исходной модели. Одним из способов является замена исходной сложной структуры некоторыми идеализированными объектами, которые состоят из основного материала (матрицы) и включений. Включения могут быть, как одиночными (например, поры,

трещины, волокна, слои и др.), так и формировать кластерные образования сложной структуры.

Стационарные процессы (распределение скалярного потенциала под действием постоянного тока, упругая деформация твердого тела) описываются краевой эллиптической задачей:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla U^\varepsilon(\mathbf{x})) &= F(\mathbf{x}) \text{ на } \Omega, \\ U^\varepsilon(\mathbf{x}) &= u_0 \text{ на } \partial\Omega, \end{aligned} \quad (1.1)$$

где  $A^\varepsilon(\mathbf{x})$  – скалярный или тензорный коэффициент, являющийся характеристикой среды,

$\varepsilon$  – параметр мелкости включений,

$U^\varepsilon(\mathbf{x})$  – искомая функция,

$\Omega \subset R^3$  – область моделирования с мелкомасштабными включениями, порами, трещинами и др.

Для решения задачи (1.1) применяется метод конечных элементов [32]. Однако многомасштабность области  $\Omega$  приводит к существенному росту размерности сеточных разбиений, даже при использовании адаптивных разбиений. Поэтому активно разрабатываются методы, основанные на построении иерархических систем подпространств и идеях локальной гомогенизации. Эти методы образуют обширный класс многомасштабных методов, среди которых выделяют «ранние» и «современные» методы [33], [34], [35], [36], [37], [38], [39], [16], [40].

К «ранним» многомасштабным методам можно отнести методы основанные, на адаптивном измельчении сетки [41], [42], [43], [44], [45], методы декомпозиции области (domain decomposition) [34], [46], [47], [48], многосеточные методы (multigrid method) [33], [49], [50], [51], [52], [53], метод вейвлет-преобразований (wavelet-based methods) [35], [54]. Данные методы успешно применяются для решения задач в биологических средах [55], для моделирования электромагнитных полей [56], [44], газовой динамики [43], для обработки сигналов [57], [58] и

изображений [59]. Существенным недостатком этих методов является необходимость решения полной задачи во всей области моделирования.

Иную идею используют «современные» многомасштабные методы [36], [37], [16], [60], [61], [62], [40], в которых вся область моделирования аппроксимируется «грубыми» блоками, количество, форма и размеры которых определяется геометрическими, топологическими, функциональными и физическими свойствами объектов моделирования.

Таким образом, «современные» многомасштабные методы строятся по следующему общему принципу вариационных методов:

- 1) формирование иерархической системы функциональных подпространств, на которых строится решение;
- 2) согласование решений на каждом из уровней иерархии;
- 3) формирование иерархических геометрических структур (сеток), соответствующих построенным функциональным подпространствам;
- 4) выбор решателей на каждом из уровней иерархии, с учетом геометрических и функциональных особенностей решаемой задачи.

Такой подход позволяет применять многомасштабные методы для решения широкого класса задач, поскольку возможна адаптация метода для каждой конкретной ситуации.

Среди современных многомасштабных методов наиболее общим является **метод разбиения единицы** (Partition of Unity Finite Element Method, PUFEM) [38], [63], [64], который был предложен, как обобщение классических  $h$ -,  $p$ - и  $hp$ - версий метода конечных элементов [45]. Ключевыми особенностями PUFEM являются:

- возможность использования локальных априорных данных о поведении решения в конечноэлементном пространстве, через формирование специальных локальных конечноэлементных подпространств;
- возможность построения конечноэлементных пространств требуемой степени гладкости;

- PUFEM не требует построения сеток в классическом смысле, вместо этого используется разбиения области моделирования на подобласти (элементы) с налеганием, объединение которых совпадает с областью моделирования.

В PUFEM предлагается разделить процедуру межэлементного согласования локальных подпространств и построение локальных конечноэлементных подпространств, обеспечивающих наилучшее приближение к решению краевой задачи. При этом процедуры межэлементного согласования строятся так, чтобы для глобального конечноэлементного пространства выполнялись условия конформности.

На базе PUFEM разработаны различные методы, являющиеся реализациями технологий метода, ориентированные на решение широкого класса задач.

Среди конечноэлементных методов первым методом, реализующим рассмотренную выше многомасштабную идеологию, является **метод конечных суперэлементов Федоренко** [36], [65], [66], [67], используемый для решения трехмерных задач упругости [68], [69], электромагнетизма [70], [71], [72] и др. В качестве элементарных блоков в методе рассматриваются конечные элементы согласованной «грубой» сетки (в терминологии Федоренко – суперэлементы). На каждом суперэлементе из решения рассматриваемой задачи с некоторыми граничными условиями определяются специальные функции формы. Решение во всей области строится, как оболочка таких функций формы. При этом решение предполагается гладким по границам суперэлементов [73], то есть границы не могут пересекаться включениями.

**Обобщенный метод конечных элементов (Generalized FEM)** был предложен [37], [74] для решения задач с быстро осциллирующими коэффициентами. Основной идеей метода является использование специальных локальных функций, отражающих особенности решаемой задачи. В качестве локальных функций формы могут быть использованы, как полиномиальные, так и неполиномиальные функции. Основным отличием от метода конечных суперэлементов является то, что вся область моделирования разбивается на «открытые» макроэлементы, то есть элементы могут быть с налеганием. Данный метод не требует построения классических конформных геометрических сеточных разбиений и относится к классу бессеточных методов. Обобщенный метод

конечных элементов применяется для решения задач распределения тепла [75], волновых процессов [76].

Для решения задач с подвижными внутренними границами, например, для моделирования распространения трещин, в [39] предложен **расширенный метод конечных элементов** (extended finite element method, XFEM). В XFEM предлагается разделить все пространство решений на сумму двух конечноэлементных подпространств: регулярного, учитывающего воздействие внешних сил, и сингулярного, которое позволяет учесть особенности внутренней геометрии области моделирования. При этом регулярное подпространство строится в соответствии с принципами классического метода конечных элементов, то есть в качестве базиса данного подпространства выбираются финитные лагранжевы функции, определенные на конечноэлементном разбиении. Для сингулярного пространства строятся специальные функции формы, наилучшим образом отражающие поведение решения вблизи внутренних границ. Такие функции формы определяются локально в идеологии PUFEM. Таким образом, в данном методе внутренние границы области моделирования могут быть учтены на функциональном уровне, при построении функций формы. Это позволяет строить конечноэлементные разбиения без учета внутренней геометрии. Данный метод успешно применяется для решения задач в неоднородных областях [77], для учета пористых структур [77] и др. Различные модификации XFEM широко применяются для решения двумерных задач разрушающей деформации [78], [79], тогда как на практике наибольший интерес вызывает моделирование трехмерных объектов.

**Многомасштабный метод конечных элементов** (Multiscale finite element method, MsFEM) был предложен в 1997 г. [16] для решения эллиптической краевой задачи с осциллирующими коэффициентами. Основной идеей является, аналогично методу конечных суперэлементов Федоренко, разделение масштабов решения путем введения разбиения на макроэлементы (суперэлементы – в соответствии с терминологией Федоренко Р.П.). На каждом из макроэлементов решаются подзадачи для построения многомасштабных неполиномиальных функций формы, которые формируют конформное глобальное конечноэлементное пространство. Для обеспечения гладкости многомасштабных неполиномиальных функций формы на границах макроэлементов

вводятся специальные краевые условия, которые формируются исходя из специфики решаемой задачи [16], [60]. В наиболее простом случае в качестве краевого условия выбирается известная функция [16], однако в таком случае налагаются дополнительные ограничения на гладкость решения на границах макроэлементов. Другой подход предполагает решение серии дополнительных редуцированных подзадач по границам макроэлементов. Это позволяет решать задачи в областях со сложными кластерными структурами включений.

В [61] предлагается модификация MsFEM – **обобщенный многомасштабный метод конечных элементов** (Generalized multiscale finite element method, GMsFEM). Многомасштабные неполиномиальные функции формы в GMsFEM строятся в области большей, чем макроэлемент, который является носителем этих функций. Вводятся дополнительные функции, выбранные на основе решения задач на собственные значения, которые отражают основное поведение системы. По словам авторов, в этом случае можно тщательно выбрать количество функций и размерность грубого пространства для достижения требуемого уровня точности [80]. Метод используется для решения задач о течении жидкости [81] и др.

В рассмотренных выше многомасштабных методах в качестве макроэлементов могут быть выбраны только элементы простой формы (параллелепипеды и прямоугольники). В некоторых случаях возможно также использование тетраэдральных макроэлементов, однако это приводит к существенному усложнению технологии методов.

**Гетерогенный многомасштабный метод** (Heterogeneous multiscale method, HMM) [62], [40] является общей идеологией для построения алгоритмов и вычислительных схем для решения многомасштабных и многофизических задач. В данном методе пространство решения является иерархическим и содержит два или более уровней, каждое из которых соответствует одному физическому или геометрическому масштабу рассматриваемой задачи. На каждом из уровней иерархии формулируются специальные подзадачи для построения локальных подпространств. Процедуры согласования уровней иерархии выбираются в соответствии со спецификой моделируемых процессов. Это обеспечивает достаточную гибкость и адаптивность метода. Большинство публикаций носит чисто

теоретический характер и рассматривают гетерогенный метод с точки зрения оценок сходимости [82], [83], [84] или рассматривают только двумерную постановку [85], [86].

Существуют различные модификации НММ. Наиболее универсальным из них является гетерогенный многомасштабный метод конечных элементов (FE-НММ) [62], [40], [87], основанный на методе конечных элементов и PUFEM. Также существуют другие модификации НММ: на базе метода конечных объемов (Control volume), конечных разностей (FD-НММ) [88], [89], [90], смешанного метода конечных элементов (Mixed finite element НММ) [91], спектрального метода (FES-НММ) [92], разрывного метода Галёркина (DG- НММ) [93], [94] и др.

### **Выводы по главе**

Моделирование физических процессов в горных породах и композиционных материалах остается нетривиальной задачей даже для современных вычислительных кластеров. 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 эффективными считаются технологии апскейлинга, использующие на каждом из уровней иерархии оценки соответствующих эффективных характеристик, получаемые с в ходе численной гомогенизации.

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

## Глава 2     МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ СТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ

### 2.1 Стационарное электрическое поле

Стационарное электрическое поле описывается следующим уравнением:

$$-\nabla \cdot (\rho^{-1}(\mathbf{x}) \nabla U(\mathbf{x})) = 0, \quad (2.1)$$

где  $\rho^\varepsilon(\mathbf{x})$  – удельное электрическое сопротивление (Ом·м),

$U(\mathbf{x})$  – электрический потенциал (В/м).

Таким образом, краевая задача о распределении скалярного потенциала  $U(\mathbf{x})$  в области  $\Omega \subset R^3$  (Рисунок 2.1), состоящей из матрицы  $\Omega_0$  и включений  $\{\Omega_1, \dots, \Omega_M\}$ , причем  $\forall \Omega_i \subset \Omega, i = \overline{1, M} : |\Omega_i| \ll |\Omega|$ :

$$-\nabla \cdot \left( (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} \nabla U(\mathbf{x}) \right) = F(\mathbf{x}) \text{ на } \Omega, \quad (2.2)$$

$$U(\mathbf{x}) = U_D \text{ на } \Gamma_D, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ на } \Gamma_N, \quad (2.4)$$

$$U^+(\mathbf{x}) = U^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in} \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U^+(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U^-(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (2.6)$$

где  $\rho^\varepsilon(\mathbf{x})$  – удельное электрическое сопротивление (Ом·м),

$\varepsilon = \max_{i=1..M} \dim \Omega_i$  – коэффициент мелкости включений <sup>3</sup> (определяется

геометрическим размером неоднородностей),

$\mathbf{n}$  <sup>4</sup> – внешняя нормаль к рассматриваемой границе,

<sup>3</sup> В данном случае и далее индекс  $\varepsilon$  используется для указания на гетерогенность и многомасштабность объекта, для которого определяются данные физические свойства.

<sup>4</sup> В данном случае и далее жирным шрифтом будут выделяться векторные и тензорные функции и параметры.

$\Gamma_D$  и  $\Gamma_N$  – внешние границы области  $\Omega$ , на которых определены условия Дирихле и Неймана соответственно,

$\Gamma_{in}$  – внутренние границы области  $\Omega$ ,  $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{in}$  – границы области моделирования.

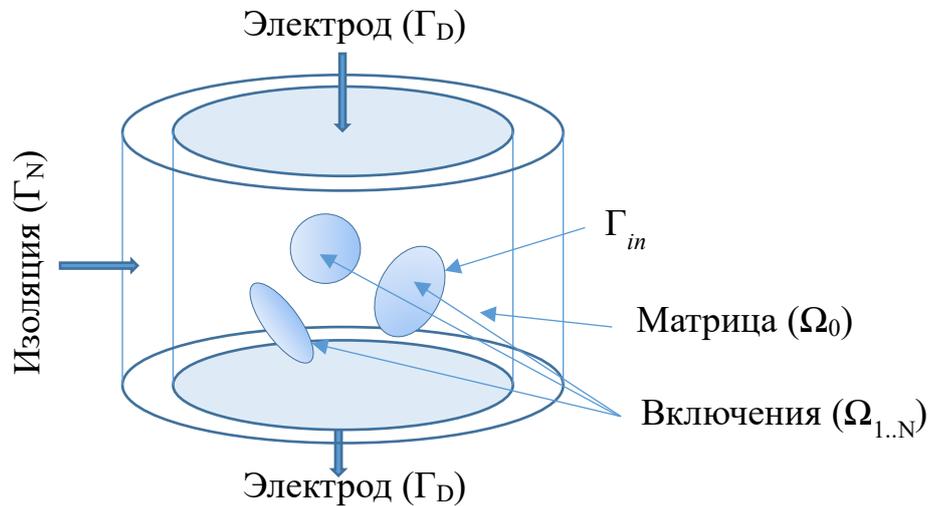


Рисунок 2.1 – Область моделирования

Поскольку область моделирования может быть физически и геометрически многомасштабной, то для решения задачи (2.2) – (2.6) будут применяться многомасштабные методы конечных элементов [16] и гетерогенные многомасштабные методы [62].

### 2.1.1 Эффективное удельное электрического сопротивление

Сложность структуры нативных и искусственных сред накладывает определенные ограничения на использование методов получения эффективных характеристик. Например аналитические оценки [95], [7], [96], основанные на специальных асимптотических усреднениях дифференциальных операторов, применимы исключительно для идеализированных периодических или почти периодических сред. Кроме того, во многих аналитических методах накладывается ограничение на форму включений, концентрацию и контрастность относительно вмещающей среды. Однако поскольку проведение измерений на реальных образцах в лабораторных условиях является трудоемким и дорогостоящим

процессом, аналитические оценки остаются востребованными при решении ряда практических задач.

Одним из первых было предложено приближение Максвелла, основанное на предположении о том, что концентрация включений достаточно мала для того, чтобы можно было пренебречь взаимодействием между включениями. При этом включения распределены не во всем объеме, а сосредоточены в неких небольших объектах. Эти предположения позволяют редуцировать исходную задачу до задачи о распределении полей и токов в среде для случая одиночного включения [97].

Приближение Максвелла позволяет вычислить эффективное УЭС только для сред, содержащих включения определенной формы (эллипсоид, цилиндр, сфера). Эффективное сопротивление среды со сферическими включениями может быть найдено следующим образом:

$$\rho_{eff} = \rho_1 \left[ 1 - 3f \frac{\rho_1 - \rho_0}{\rho_1 + \rho_0 + 2f(\rho_1 - \rho_0)} \right], \quad (2.7)$$

где  $\rho_0$  – удельное электрическое сопротивление вмещающей среды (Ом·м),  
 $\rho_1$  – удельное электрическое сопротивление включений (Ом·м).

Приближение Гарнетта (Максвелла-Гарнетта) приведено в работах [97][98]. Эффективное сопротивление среды со сферическими включениями может быть найдено следующим образом:

$$\rho_{eff} = \rho_1 \left[ 1 - 3f \frac{\rho_1 - \rho_0}{\rho_1 + 2\rho_0 + 2f(\rho_1 - \rho_0)} \right]. \quad (2.8)$$

Формула Бруггемана [99]. Для сферических включений:

$$\rho_{eff} = \rho_1 - 3f \rho_{eff} \frac{\rho_1 - \rho_0}{2\rho_0 + \rho_{eff}}. \quad (2.9)$$

Приближение когерентного потенциала [98]. Для сферических включений:

$$\frac{\rho_1 - \rho_{eff}}{4\rho_1 - \rho_{eff}} = f \rho_{eff} \frac{\rho_1 - \rho_0}{3\rho_1\rho_0 + \rho_{eff}(\rho_1 - \rho_0)}. \quad (2.10)$$

Таблица 2.1 – Особенности и ограничения применения некоторых аналитических оценок эффективного УЭС

Название	Форма включений	Особенности
Приближение Максвелла	Сфера (2.7), эллипсоид, цилиндр	Оценка применима для сред с малыми концентрациями включений.
Приближение Гарнетта (Максвелла-Гарнетта)	Сфера (2.8)	–
Формула Бруггемана	Сфера (2.9)	–
Приближение когерентного потенциала	Сфера (2.10)	–

Оценки (2.7) – (2.10) применимы для сред, содержащих включения простой формы (табл. 2.1), что не позволяет работать со сложными гетерогенными средами. Поэтому для построения вычислительных схем гомогенизации удельного электрического сопротивления неоднородных сред, имеющих контрастные включения, будем использовать алгоритмы современных многомасштабных методов [6], [100], [101].

Определение эффективного удельного электрического сопротивления  $\rho_{eff}$  (Ом·м) гетерогенной среды будем осуществлять следующим образом [100], [101], [31]:

$$\rho_{eff} = \left( \frac{\|\mathbf{J}\|_{L_2}}{\|\nabla U(\mathbf{x})\|_{L_2}} \right)^{-1} = \left( \frac{\sqrt{\int_{\Omega} |\mathbf{J}|^2}}{\sqrt{\int_{\Omega} |\nabla U(\mathbf{x})|^2}} \right)^{-1}, \quad (2.11)$$

где  $\mathbf{J}$  – плотность тока (А/м<sup>2</sup>),

$U(\mathbf{x})$  – электрический потенциал (В/м).

### 2.1.2 Перколяция

Теория перколяции впервые была предложена в 1957 году в работах Бродбента (Broadbent S.K.) и Хаммерсли (Hammersley J.M) [102], как математическая теория для описания физического феномена протекания флюида через случайную среду. Позднее теория была также расширена для описания процессов теплопроводности [103], [104], электропроводности [105], [106] и др. в гетерогенных средах (пористые материалы, смеси проводящих и непроводящих частиц и др.). Таким образом, в общем случае перколяция – это резкое, скачкообразное изменение эффективной характеристики материала при достижении некоторой критической концентрации включений (проводящих подобластей) в матрице [107].

Существуют различные подходы к построению и исследованию перколяционных моделей. Ввиду простоты наиболее часто гетерогенная среда представляется в виде квадратной решетки (двумерной или трехмерной), ячейки которой соответствуют проводящим и непроводящим фрагментам среды [108], [103], [104]. Для решеток решается стохастическая задача о вероятности возникновения непрерывного пути по «проводящим» ячейкам (то есть вероятность наступления перколяционных эффектов в среде). Критическую концентрацию таких ячеек, необходимую для образования путей, называют порогом перколяции ( $\rho_c$ ). Не менее распространенной моделью является в связный граф, в котором наличие/отсутствие ребер между узлами (вершинами графа) означает наличие/отсутствие пути перколяции [102], [109], [110]. В ряде работ помимо порога перколяции в качестве определяющего критерия рассматривается размер перколяционного кластера (percolating cluster), т.е. цепочки связанных фрагментов среды (например, проводящих ячеек в решетке или узлов графа, связанных ребрами и т.д.) [111], [112].

## 2.2 Стационарная изотермическая упругая деформация твердого тела

Уравнение равновесия для деформируемого твердого тела  $\Omega$  имеет вид:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}_{in} = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}, \quad (2.12)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}$  – тензор напряжений (Па),

$\rho$  – плотность тела (кг/м<sup>3</sup>),

$\mathbf{f}_{in}$  – объёмная сила, действующая на тело,

$t$  – время (с).

В стационарном случае и при отсутствии внутренних сил, таких как сила тяжести, уравнение (2.12) преобразуется к:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0. \quad (2.13)$$

Для упругой изотермической деформации твердого тела (Рисунок 2.2) при отсутствии начальных напряжений и деформаций определяющим соотношением является обобщенный закон Гука:

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{D}(\mathbf{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}), \quad (2.14)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \sigma_{ij}(\mathbf{x})$ ,  $i, j = \{x, y, z\}$ , – симметричный тензор напряжений второго ранга (Па),

$\mathbf{D}(\mathbf{x}) = d_{ijkl}(\mathbf{x})$ ,  $i, j, k, p = \{x, y, z\}$ , – симметричный тензор упругости четвертого ранга для анизотропной среды (Н/м),

$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \varepsilon_{kp}(\mathbf{x})$ ,  $k, p = \{x, y, z\}$ , – симметричный тензор деформации второго ранга (м<sup>-1</sup>):

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \nabla_s \mathbf{U}(\mathbf{x}), \quad (2.15)$$

где  $\mathbf{U}(\mathbf{x}) = (u^x(\mathbf{x}), u^y(\mathbf{x}), u^z(\mathbf{x}))^T$  – векторная функция перемещений (м),

$\nabla_s(\cdot)$  – симметричная часть градиента:

$$\nabla_s(\cdot) = \begin{pmatrix} \frac{\partial(\cdot)^x}{\partial x} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial(\cdot)^x}{\partial z} & \frac{\partial(\cdot)^x}{\partial y} \\ 0 & \frac{\partial(\cdot)^y}{\partial y} & 0 & \frac{\partial(\cdot)^y}{\partial z} & 0 & \frac{\partial(\cdot)^y}{\partial x} \\ 0 & 0 & \frac{\partial(\cdot)^z}{\partial z} & \frac{\partial(\cdot)^z}{\partial y} & \frac{\partial(\cdot)^z}{\partial x} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

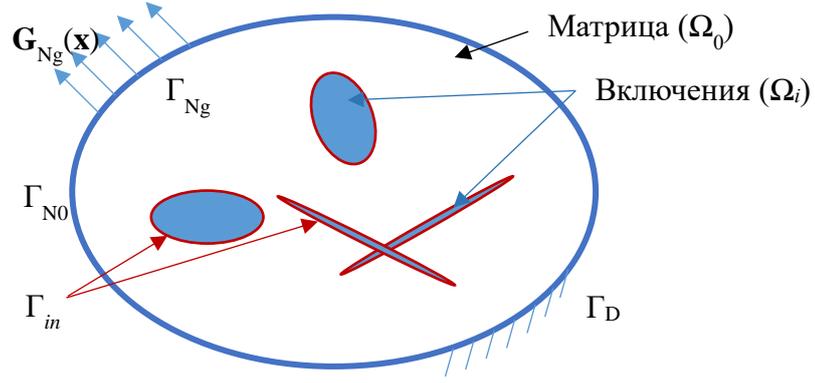


Рисунок 2.2 – Область моделирования и обозначения для задачи упругой деформации твердого тела

С учетом введенных обозначений сформулируем краевую задачу упругой деформации твердого тела в перемещениях в области  $\Omega$  (Рисунок 2.2):

$$-\nabla \cdot (\mathbf{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) : \nabla_s \mathbf{U}(\mathbf{x})) = 0 \text{ на } \Omega, \quad (2.17)$$

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_D \text{ на } \Gamma_D, \quad (2.18)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{G}_{Ng}(x) \text{ на } \Gamma_{Ng}, \quad (2.19)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \text{ на } \Gamma_{N0}, \quad (2.20)$$

$$\mathbf{U}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{U}^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (2.21)$$

$$\mathbf{n}^+ \cdot \boldsymbol{\sigma}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{n}^- \cdot \boldsymbol{\sigma}^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (2.22)$$

где  $\varepsilon = \max_{i=1..M} \dim \Omega_i$  – коэффициент мелкости включений,

$\Omega \subset R^3$  – область моделирования, состоящая из матрицы  $\Omega_0$  и включений  $\Omega_i$ ,

$i = 1..M$ , 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,  $\Gamma_D$  и  $\Gamma_N$  – внешние границы области  $\Omega$ , на которых определены условия Дирихле и Неймана соответственно,

$\Gamma_{in}$  – внутренние границы области  $\Omega$ ,

$\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{in}$  – границы области моделирования.

Для решения краевой задачи (2.17) – (2.22) упругой деформации твердого тела с включениями рассматриваются модификации многомасштабного метода

конечных элементов, гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов [87], расширенного метода конечных элементов [113], [114], [115], [116].

### 2.2.1. Эффективный тензор упругости

Вычислительные процедуры получения эффективного тензора упругости  $\mathbf{D}_{eff}$ , состоят из двух этапов:

- 1) выделение представительного объема,
- 2) вычисление компонент эффективного тензора упругости.

Представительный объем (representative volume element, RVE) – это минимальный объём материала, в котором содержатся «носители» значимых свойств в количестве достаточном для того, чтобы по его свойствам можно было судить о всей среде или о конкретном фрагменте среды [117]. В [118], [119], [120] приведены исследования по выбору представительного объема, однако нельзя выделить однозначных рекомендаций, так как выбор должен быть основан на индивидуальных геометрических и физических особенностях свойств среды, а также на особенностях решаемой задачи. Кроме того, в некоторых ситуациях размер представительного объема ограничивается возможностью построения сеточных дискретизаций для исследуемого объекта и размерами задачи моделирования процессов, протекающих в объекте.

Например, для периодических сред представительным объемом будет являться ячейка периодичности [121], [122]; для горных пород размер ячейки представительного объема зависит от того, как резко изменяются физические свойства исследуемого геологического образования [123]. В [123], [124] предлагается формировать иерархические структуры из представительных объемов с промежуточной локальной гомогенизацией.

Все методы получения эффективных упругих характеристик можно разделить на следующие группы: лабораторные эксперименты, аналитические методы [125] и численная гомогенизация.

Методы Фойгта [126] и Реусса [127] являются наиболее ранними среди аналитических методов для получения упругих модулей пород и композитов. Данные методы основаны на предположении о постоянстве полей деформации (метод Фойгта) и напряжений (метод Реусса) во всем рассматриваемом образце породы или материала. Для среды, компонентами которой являются изотропные материалы метод Фойгта имеет следующий вид:

$$K_{eff}^V = \sum_{i=0}^M f_i K_i, \quad \mu_{eff}^V = \sum_{i=0}^M f_i \mu_i, \quad (2.23)$$

где  $K$  и  $\mu$  – модули всестороннего объемного сжатия и сдвига,

$f_i$  – объемная концентрация  $i$ -й компоненты среды,  $f_i = |\Omega_i|/|\Omega|$ ,

$M$  – число компонент среды  $\Omega$ .

Метод Реусса для сред с изотропными компонентами:

$$K_{eff}^R = \left( \sum_{i=0}^M \frac{f_i}{K_i} \right)^{-1}, \quad \mu_{eff}^R = \left( \sum_{i=0}^M \frac{f_i}{\mu_i} \right)^{-1}, \quad (2.24)$$

Модули упругости, вычисленные по соотношениям методов Фойгта (2.23) и Реусса (2.24), являются верхней и нижней границами для значения эффективных модулей упругости рассматриваемой среды. Верхняя  $E_{eff}^{Up}$  и нижняя  $E_{eff}^{Down}$  границы эффективного модуля Юнга могут быть получены из (2.23) и (2.24) [128]:

$$E_{eff}^{Up} = \left( \frac{1}{3\mu_{eff}^V} + \frac{1}{9K_{eff}^V} \right)^{-1}, \quad E_{eff}^{Down} = \left( \frac{1}{3\mu_{eff}^R} + \frac{1}{9K_{eff}^R} \right)^{-1}. \quad (2.25)$$

Как правило, на практике методы Фойгта и Реусса в чистом виде не рассматриваются, однако данные методы дают приемлемые результаты и могут быть использованы для простой оценки попадания найденной эффективной характеристики в допустимый диапазон [129].

Помимо рассмотренной «вилки» Фойгта-Реусса, рассматриваются более сложные оценки такие, как пределы Хашина–Штрикмана [130], оценки Хашина–Штрикмана–Валпула [131], а также методы вычисления эффективных упругостных характеристик сред: метод Кастера–Токсоза [132], метод самосогласования [133] и др. Такие аналитические подходы могут быть применены для произвольной среды

с низкими объемными концентрациями включений, так как в их основе лежит допущение об отсутствии взаимодействий между отдельными включениями. В ряде работ предлагаются аналитические соотношения для сред специальной структуры (трещиноватых [134], [135], слоистых [136], [137], [138], [139] и др.).

Численные подходы дают возможность исследовать среды с произвольной структурой с минимальными затратами, однако требуют разработки специальных подходов к моделированию процессов, протекающих в таких средах. Наиболее распространены подходы, основанные на конечноэлементных методах решения соответствующих краевых задач [140].

Для вычисления полного эффективного тензора упругости в данной работе применяется метод асимптотического осреднения, предложенный в работах [121], [122]. В данном методе основной идеей является выделение в исследуемом объекте ячеек периодичности. В таком случае компоненты искомого эффективного тензора упругости могут быть представлены в виде некоторой периодической функции. На основе этих предположений формулируются локальные осредненные системы уравнений для задачи упругой деформации твердого тела в каждой из ячеек периодичности. Метод успешно применяется для вычисления эффективных упругостных свойств волокнистых и перфорированных композиционных материалов с периодической структурой [129].

Для вычисления эффективного тензора упругости в средах, не обладающих свойствами периодичности, могут быть применены методы численной гомогенизации, основанные на использовании эквивалентных деформаций и напряжений [141], [142]. Для этого в трехмерном образце  $\Omega^{RVE}$ , 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 (Рисунок 2.3):

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (\mathbf{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) : \nabla_s \mathbf{U}_q) &= 0 \text{ на } \Omega^{RVE}, \\ \mathbf{U}_q|_{\partial\Omega^{RVE}} &= \xi_q(\mathbf{x}), \end{aligned} \tag{2.26}$$

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

$$\xi_q(\mathbf{x}) = (\xi_x^q(\mathbf{x}), \xi_y^q(\mathbf{x}), \xi_z^q(\mathbf{x}))^T, \quad q = \{xx, yy, zz, xy, yz, xz\}.$$

Краевые условия для задачи (2.26) приведены в таблице 2.2, где  $\beta \equiv const$  – регуляризирующий параметр.

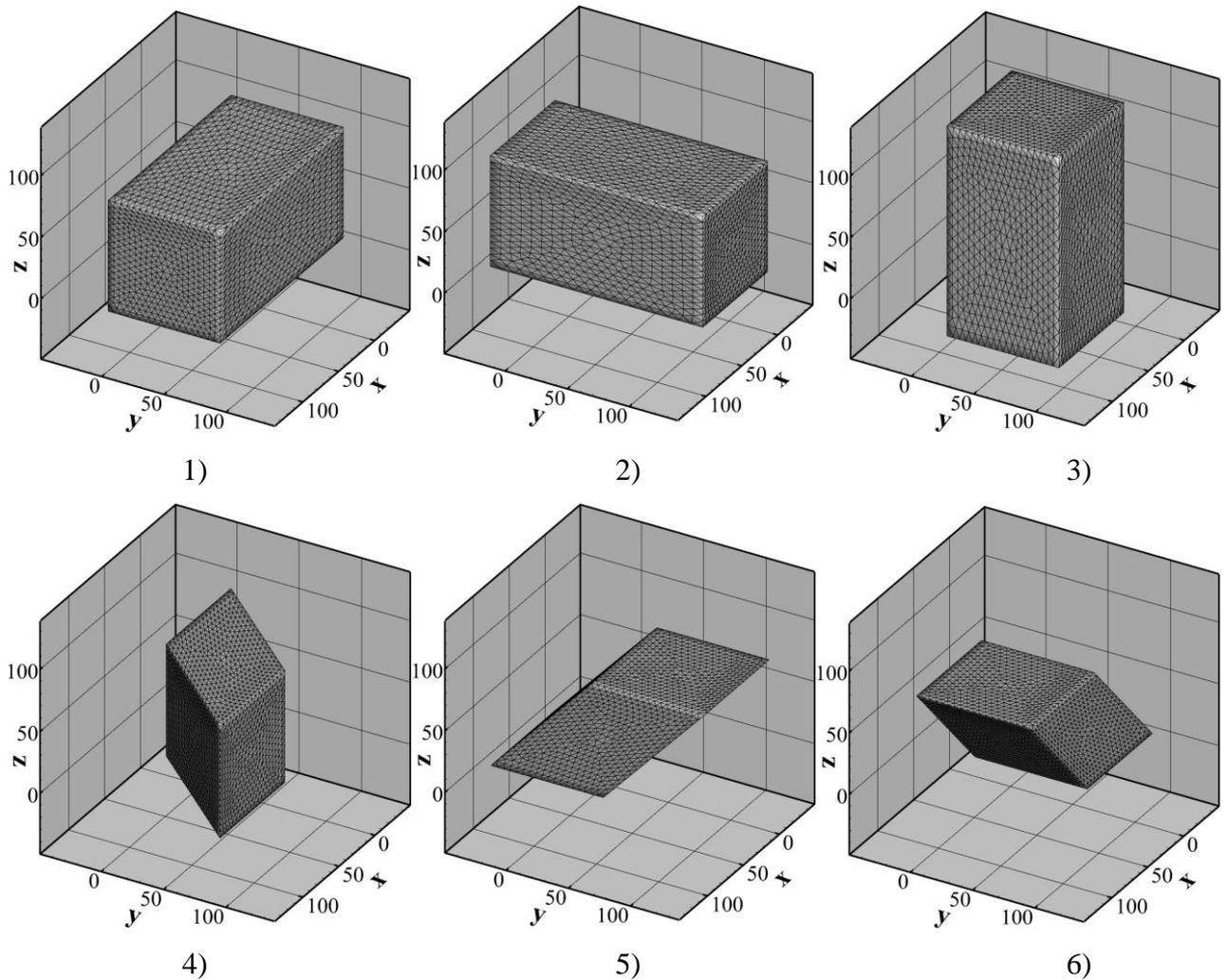


Рисунок 2.3 – Примеры одноосных растяжений и сжатий образцов (нумерация образцов соответствует нумерации краевых условий задачи (2.26) в таблице 2.2)

Таблица 2.2 – Краевые условия для задач получения распределений деформаций и напряжений при одноосных растяжениях и сдвигах

Условное обозначение (q)	$\xi_x^q(\mathbf{x})$	$\xi_y^q(\mathbf{x})$	$\xi_z^q(\mathbf{x})$	Ненулевая компонента тензора $\boldsymbol{\varepsilon}$
xx	$\beta(x - 0.5a)$	0	0	$\varepsilon_{xx} = 2\beta$
yy	0	$\beta(y - 0.5a)$	0	$\varepsilon_{yy} = 2\beta$
zz	0	0	$\beta(z - 0.5a)$	$\varepsilon_{zz} = 2\beta$
xy	$\beta(y - 0.5a)$	0	0	$\varepsilon_{xy} = \beta$
yz	0	$\beta(z - 0.5a)$	0	$\varepsilon_{yz} = \beta$
xz	$\beta(z - 0.5a)$	0	0	$\varepsilon_{xz} = \beta$

Существует несколько подходов для вычисления эффективного тензора упругости по полученным деформациям и напряжениям из решения задач (2.26). Один из них основан на объемном осреднении тензоров деформации и напряжений. В работе [143] данный подход был применен для исследования упругих свойств материала с сотовой структурой в широком диапазоне геометрических и физических свойств. Однако метод объемного осреднения не позволяет учесть влияние сложной структуры гетерогенных сред и взаимодействие отдельных компонент. Для получения эффективных упругих свойств полимеров с включениями в [144] применяется энергетический подход, основанный на равенстве удельной энергии упругой деформации гомогенизированного тела  $\Omega_{eff}^{RVE}$  и исходного гетерогенного объекта  $\Omega^{RVE}$ :

$$W_{eff}(\boldsymbol{\varepsilon}_{eff}) = W(\boldsymbol{\varepsilon}) \quad (2.27)$$

$$\int_{\Omega_{eff}^{RVE}} \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}_{eff} : \mathbf{D}_{eff} : \boldsymbol{\varepsilon}_{eff} d\mathbf{x} = \int_{\Omega^{RVE}} \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{D}^{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon} d\mathbf{x} \quad (2.28)$$

Рассмотрим случай одноосного растяжения гомогенизированного тела  $\Omega_{eff}^{RVE}$  по оси Oх, что соответствует краевой задачи (2.26) с краевыми условиями «xx» из таблицы 2.2. Тензор деформации будет иметь одну ненулевую компоненту, а именно:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{eff}^{(xx)} = \begin{pmatrix} 2\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

Подставим (2.29) в (2.28):

$$4\beta^2 \cdot |\Omega_{eff}^{RVE}| \cdot d_{xxxx}^{eff} = \int_{\Omega^{RVE}} \boldsymbol{\varepsilon}^{(xx)} : \mathbf{D}^\varepsilon : \boldsymbol{\varepsilon}^{(xx)} d\mathbf{x} \quad (2.30)$$

$$d_{xxxx}^{eff} = \frac{1}{4\beta^2 |\Omega_{eff}^{RVE}|} \int_{\Omega^{RVE}} \boldsymbol{\varepsilon}^{(xx)} : \mathbf{D}^\varepsilon : \boldsymbol{\varepsilon}^{(xx)} d\mathbf{x}, \quad (2.31)$$

где  $d_{xxxx}^{eff}$  – компонента эффективного тензора упругости  $\mathbf{D}_{eff}$ ,

$|\Omega_{eff}^{RVE}|$  – объем области  $\Omega_{eff}^{RVE}$ ,

$\boldsymbol{\varepsilon}^{(xx)}$  – тензор деформации, который вычисляется из решения задачи (2.26) с краевыми условиями, соответствующими растяжению по оси  $Ox$  таблицы 2.2.

Аналогичным образом могут быть получены остальные компоненты эффективного тензора упругости:

$$d_{ijkp}^{eff} = \frac{1}{(1 + 3\delta_{ijkp})\beta^2 |\Omega_{eff}^{RVE}|} \int_{\Omega^{RVE}} \boldsymbol{\varepsilon}^{(ij)} : \mathbf{D}^\varepsilon : \boldsymbol{\varepsilon}^{(kp)} d\mathbf{x}, \quad (2.32)$$

где  $\delta_{ijkp}$  – символ Кронекера:

$$\delta_{ijkp} = \begin{cases} 1, & \text{если } \forall q, w \in \{i, j, k, p\} : q = w, \\ 0, & \text{если } \exists q, w \in \{i, j, k, p\} : q \neq w. \end{cases} \quad (2.33)$$

Данный метод является выше 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.

## 2.2.2 Разрушающая деформация (распространение трещин)

Задачи, связанные с моделированием разрушающих деформаций, широко рассматриваются как при разработке искусственных материалов, так и при исследованиях естественных сред. Например, численное моделирование гидроразрыва пласта позволяет делать предварительные технологические выводы

о необходимости проведения дорогостоящих геологических работ на нефтегазовых месторождениях [145], [146], [147], [148], [149], [150].

Выделяют следующие базовые типы разрушений [151]:

- 1) хрупкое разрушение – разрушение, сопровождаемое малыми деформациями (не более 1% – 2%);
- 2) квазихрупкое разрушение – разрушение при малых деформациях тела при формировании в малой окрестности фронта трещины зоны пластической деформации;
- 3) пластическое разрушение – разрушение, сопровождаемое значительными деформациями тела.

Кроме того, разрушающие деформации разделяют по типам нагрузжений: усталостное разрушение, разрушение по ползучести, коррозионное разрушение и др. Рассмотрим квазихрупкое разрушение при постоянной внешней нагрузке (квазистационарная задача [152], [153]):

$$-\nabla \cdot (\mathbf{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) : \nabla_s \mathbf{U}(\mathbf{x})) = 0 \text{ на } \Omega, \quad (2.34)$$

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}_D \text{ на } \Gamma_D, \quad (2.35)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{G}_{Ng}(x) \text{ на } \Gamma_{Ng}, \quad (2.36)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \text{ на } \Gamma_{N0}, \quad (2.37)$$

$$\mathbf{n}^+ \cdot \boldsymbol{\sigma}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{n}^- \cdot \boldsymbol{\sigma}^-(\mathbf{x}) = 0 \text{ на } \Gamma_C \quad (2.38)$$

$$\mathbf{U}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{U}^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (2.39)$$

$$\mathbf{n}^+ \cdot \boldsymbol{\sigma}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{n}^- \cdot \boldsymbol{\sigma}^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (2.40)$$

где  $\Gamma_C$  – внутренняя трещина.

Основным назначением моделирования разрушения сред является предсказание их прочностных характеристик. Существует два основных подхода к оценке прочности материала: классический и неклассический подходы [154]. Классический подход предполагает, что существует две ситуации: тело разрушено и тело не разрушено. То есть разрушение тела происходит мгновенно, при достижении некоторого критического значения напряженно-деформированного

состояния. Критическое значение, как правило, определяется экспериментально. Основной идеей неоклассического подхода является рассмотрение, помимо предельных состояний тела, движения трещин под действием нагружений различных типов. Это позволяет учитывать при моделировании разрушения поведение полей напряжения и деформации вблизи фронта трещины, которые определяются локальными физико-механическими свойствами среды.

В общем случае процесс разрушения тела состоит из двух этапов:

- 1) зарождение трещины;
- 2) распространение трещины.

Критерии начала распространения трещин составляют отдельный раздел механики прочности твердых тел. Чаще всего зарождение трещин рассматривается в контексте усталостного нагружения [155], [156]. В остальных случаях предполагается, что среда имеет исходные дефекты или концентраторы напряжений [157]. В случае хрупкого и квазихрупкого разрушения, предполагается, что рост трещины начнется в точке наибольшего напряжения на разрыв.

Базовыми критериями начала роста трещины являются энергетический критерий Гриффитса [158], основанный на равенстве работы по разрушению и интенсивности освобождающейся упругой энергии при разрыве единичной площади, и силовой критерий Ирвина-Орвана [159], основанный на анализе напряженно-деформированного состояния в вершине трещины. Данные критерии являются эквивалентными, и получены на основе лабораторных экспериментов.

Критерии Гриффитса и Ирвина-Орвана разработаны для хрупких и квазихрупких материалов. Более универсальный критерий предложен Черепановым [160] и Райсом [161] для деформируемого упругопластического двумерного твердого тела. В качестве параметра роста трещины предложен энергетический контурный интеграл или  $J$ -интеграл, который равен интенсивности энергии, освобождающейся при квазистатическом нагружении, и не зависит от выбора пути интегрирования [161]:

$$J^{2D} = \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \int_{\Gamma} \left( W d\tilde{\mathbf{x}}_2 - \mathbf{T} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}_1} d\Gamma \right) \quad (2.41)$$

где  $\Gamma$  – произвольный контур, охватывающий вершину трещины (Рисунок 2.4);

$W = \int_0^{\varepsilon_{ij}} \boldsymbol{\sigma}_{ij} d\varepsilon_{ij}$  – плотность энергии деформации;

$\mathbf{T} = \boldsymbol{\sigma}_{ij} \tilde{\mathbf{n}}_j$  – поверхностный вектор силы (предполагается суммирование по повторяющимся компонентам тензорной записи);

$\tilde{\mathbf{n}}$  – внешняя нормаль к части контура  $d\Gamma$ ;

$\tilde{\mathbf{x}}_1$  и  $\tilde{\mathbf{x}}_2$  – единичные вектора, составляющие локальную ортогональную систему координат так, что начало координат совпадает с вершиной трещины, вектор  $\tilde{\mathbf{x}}_1$  совпадает с направлением трещины, а вектор  $\tilde{\mathbf{x}}_2$  является перпендикулярным трещине (Рисунок 2.4).

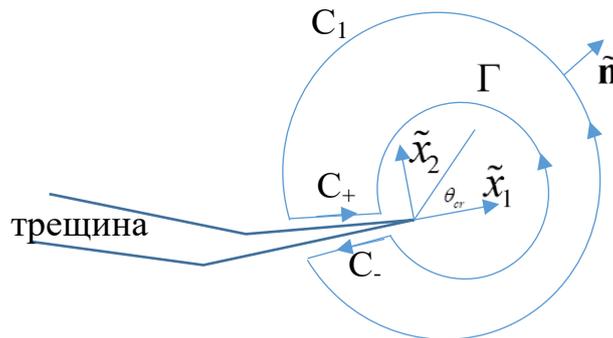


Рисунок 2.4 – Локальная система координат и контур интегрирования для J-интеграла в двумерном случае

Для простоты построения вычислений перейдем от интеграла по замкнутому контуру  $\Gamma$  к интегралу по подобласти  $A$ , ограниченной контуром  $C = C_1 - \Gamma + C_+ + C_-$  [162], по теореме Остроградского-Гаусса (подробное изложение доказательства перехода от интеграла по контуру (2.41) к интегралу по площади представлено в работе [163]):

$$J^{2D} = \int_A \left( \boldsymbol{\sigma} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}_1} - W \tilde{\mathbf{x}}_1 \right) \frac{\partial q}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} dA, \quad (2.42)$$

где  $q$  – гладкая функция равная 1 на  $\Gamma$  и 0 на  $C_1$ .

Аналогичное выражение для J-интеграла может быть получено для трехмерного случая, где в качестве объема интегрирования  $A$  берется подобласть, ограниченная замкнутой поверхностью, охватывающей фронт трещины [162], [164], [163]. В трехмерном случае, для сохранения введенных ранее обозначений, ось  $\tilde{\mathbf{x}}_1$  выбирается лежащей в плоскости трещины, перпендикулярно фронту, тогда ось  $\tilde{\mathbf{x}}_2$  перпендикулярна плоскости трещины, ось  $\tilde{\mathbf{x}}_3$  является касательной к фронту трещины и лежит в плоскости трещины.

Рассмотренные выше критерии позволяют предсказать развитие трещины и выполнить предсказательное моделирование прямолинейного распространения [165]. На практике трещины могут отклоняться от прямолинейного пути, что может зависеть как от локальных физико-механических свойств среды в окрестности фронта трещины, так и от типа внешнего нагружения, обеспечивающего рост трещины. Для учета возможного отклонения направления трещины применяется метод, основанный на J-интеграле [166], [167], а именно: угол отклонения  $\theta_{cr}$  от прямолинейного распространения трещины (Рисунок 2.4) равен:

$$\theta_{cr} = \arctg\left(\frac{J_2}{J_1}\right), \quad (2.43)$$

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

$$J_k = \int_A \left( \boldsymbol{\sigma} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}_k} - W \tilde{\mathbf{x}}_k \right) \frac{\partial q}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} dA, \quad k = \overline{1,2} \quad (2.44)$$

Помимо критерия максимальной энергии [166], [167] для моделирования распространения трещин также применяются: критерий максимального касательного напряжения [168], критерий среднего напряжения [169] и др. Исследования показывают, что все эти методы дают близкие результаты, однако более точно поведение разрушения квазихрупкого материала при нагружениях различного типа отражает критерий максимальной энергии [170].

### **Выводы по главе**

В данной 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. Рассмотрены численные методы, позволяющие на единой вычислительной основе сформировать процедуры получения эффективного удельного электрического сопротивления и эффективных упругостных свойств гетерогенных сред. Приведены основные критерии распространения трещин в образце из твердой породы при разрушающей деформации.

### Глава 3 МНОГОМАСШТАБНЫЕ МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ

#### 3.1 Многомасштабный метод конечных элементов

Многомасштабный метод дает возможность выполнить численное моделирование как скалярных, так и тензорных процессов на основе единых вычислительных схем. Поэтому не нарушая общности вместо краевых задач (2.2) – (2.6) и (2.17) – (2.22) рассмотрим неоднородное эллиптическое уравнение в области  $\Omega \subset R^3$  состоящей из матрицы  $\Omega_0$  и включений  $\{\Omega_1, \dots, \Omega_M\}$ , причем  $\forall \Omega_i \subset \Omega, i = \overline{1, M} : |\Omega_i| \ll |\Omega|$ :

$$-\nabla \cdot (A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla U(\mathbf{x})) = F(\mathbf{x}) \text{ на } \Omega, \quad (3.1)$$

$$U(\mathbf{x}) = U_D \text{ на } \Gamma_D, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial A^\varepsilon(\mathbf{x}) U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = G_N(x) \text{ на } \Gamma_N, \quad (3.3)$$

$$U^+(\mathbf{x}) = U^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial A^\varepsilon(\mathbf{x}) U^+(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial A^\varepsilon(\mathbf{x}) U^-(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \text{ на } \Gamma_{in} \quad (3.5)$$

где  $A^\varepsilon(\mathbf{x})$  – скалярный (например, теплопроводность или электропроводность) или тензорный (например, тензор Гука четвертого ранга) коэффициент среды,

$\varepsilon = \max_{i=1..M} \dim(\Omega_i)$  – коэффициент мелкости включений,

$\mathbf{n}$  – внешняя нормаль к границе,

$\Gamma_D$  и  $\Gamma_N$  – внешние границы области  $\Omega$ , на которых определены условия Дирихле и Неймана соответственно,

$\Gamma_{in}$  – внутренние границы области  $\Omega$ ,  $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{in}$  – границы области моделирования.

Область  $\Omega$  гетерогенная и существенно-многомасштабная, поэтому для решения задачи (3.1) – (3.5) применяется многомасштабный метод конечных

элементов (MsFEM) [16]. MsFEM строится на идее поиска решения на сумме двух или более подпространств. Каждое из подпространств отвечает одному из уровней иерархии в соответствии со структурой решаемой задачи. Большинство работ рассматривает двухуровневый геометрический MsFEM [18], [22], [31] для сред с микровключениями, где качестве верхнего уровня иерархии (макроуровень) принимается «грубое» подпространство, отражающее структуру и свойства всей среды в целом без учета включений. Микроуровнем является «мелкое» подпространство, позволяющее с требуемой точностью учитывать микромасштабные особенности среды, поэтому для построения грубого подпространства нет необходимости в разрешении всех мелкомасштабных особенностей среды, вместо этого достаточно выполнить гомогенизацию на микроуровне. В зависимости от физических и топологических особенностей рассматриваемого процесса для формирования каждого из уровней функциональных пространств могут применяться различные методы или «решатели», например, метод конечных элементов [32], метод конечных разностей [171], расширенный метод конечных элементов [172], разрывный метод Галёркина [173] и др.

Для решения краевой задачи (3.1) – (3.5) будем рассматривать модификацию многомасштабного метода конечных элементов для тетраэдральных носителей на микро- и макроуровнях. В качестве решателей на указанных уровнях иерархии используется метод конечных элементов в постановках Галёркина.

### 3.1.1 Многомасштабная вариационная постановка

Введем Гильбертовы подпространства с нормой и скалярным произведением

$$V(\Omega) = \left\{ u, v \in L^2(\Omega) : (u, v) = \int_{\Omega} u \cdot v \, d\Omega, \|u\|^2 = \int_{\Omega} u \cdot u \, d\Omega \right\}, \quad (3.6)$$

$$V_0(\Omega) = \{ u \in V(\Omega) : u = 0 \text{ на } \partial\Omega \}, \quad (3.7)$$

Тогда вариационная постановка для задачи (3.1) – (3.5):

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U \in V_0(\Omega) + U_D(\Gamma_D) \text{ такую, что} \\ \int_{\Omega} \nabla U(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla v(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma_N} G_N(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Gamma + \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Omega, \\ \forall v \in V_0(\Omega) \end{array} \right. \quad (3.8)$$

### 3.1.2 Дискретизация области моделирования

В MsFEM Выбор решателей на каждом из уровней иерархии порождает соответствующую иерархию сеток [16]. Определим в области  $\Omega \subset R^3$  два адаптивных согласованных симплициальных разбиения  $T^H(\Omega)$  и  $T^h(\Omega)$  (Рисунок 3.1), которые удовлетворяют следующим условиям:

$$H = \min_{K \in T^H} \dim(K) : H \ll \varepsilon;$$

$$h = \max_{k \in T^h} \dim(k) : h < \varepsilon;$$

$$\forall K \in T^H(\Omega) \exists k_i \in T^h(\Omega) : \bigcup_i k_i = K, \{k_i\} = T^h_K,$$

где  $T^H(\Omega)$  – грубая сетка, которая строится в  $\Omega$  без учета внутренних границ  $\Gamma_{in}$  ;

$T^h_K$  – мелкая сетка, определенная на геометрическом элементе  $K \in T^H(\Omega)$ ,

учитывающая все мелкомасштабные особенности среды;

$\varepsilon = \max_{i=1..M} \dim(\Omega_i)$  – коэффициент мелкости включений.

В соответствии с принятой терминологией [16], элементы грубой сетки  $T^H(\Omega)$  будем называть *макроэлементами*, а элементы сеток  $T^H(\Omega)$  и  $T^h_K$  – *микроэлементами*.

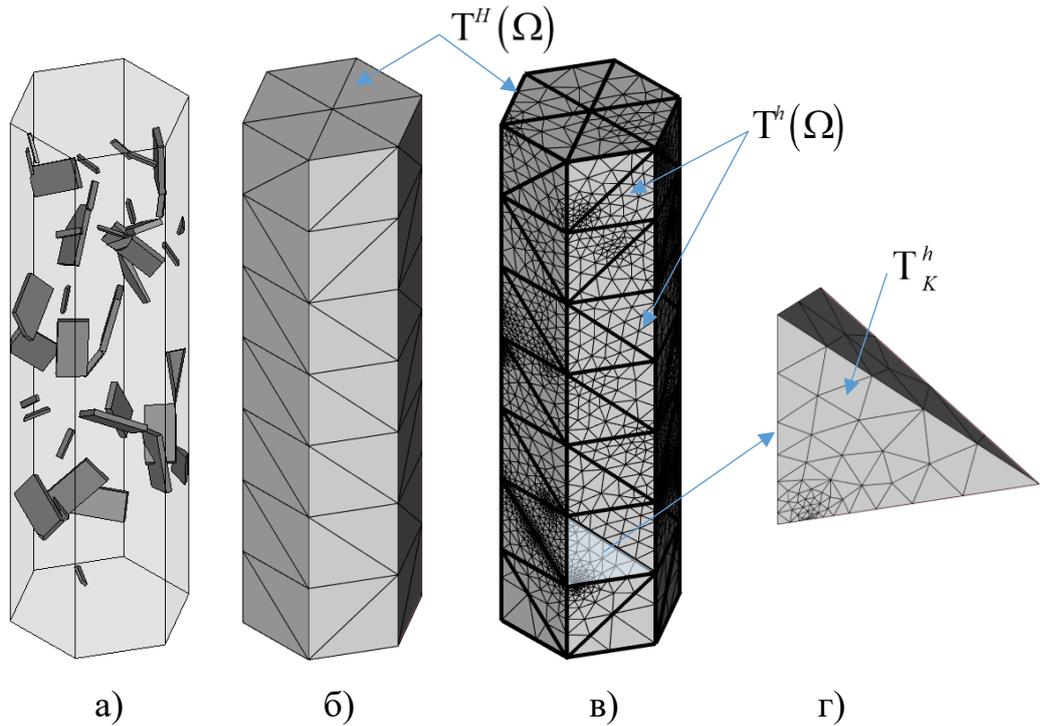


Рисунок 3.1 – Сеточная иерархическая структура для цилиндрического образца с включениями (а – образец; б – грубая сетка  $T^H(\Omega)$ ; в – мелкая сетка  $T^h(\Omega)$ ; г – мелкая сетка  $T_K^h$  на макроэлементе  $K \in T^H(\Omega)$ )

### 3.1.3 Многомасштабные неполиномиальные функции формы

Определим на сеточном разбиении  $T^H(\Omega)$  глобальные многомасштабные неполиномиальные функции формы  $\phi_i^{MsFEM}(\mathbf{x})$ ,  $i = \overline{1, N}$ , ассоциированные с узлами  $x_i$  сетки  $T^H(\Omega)$ . При этом выполняются условия:

- 1) функции  $\phi_i^{MsFEM}(\mathbf{x})$ ,  $i = \overline{1, N}$  в области  $\Omega$  дифференцируемы почти всюду:

$$\exists g(\mathbf{x}): \frac{\partial \phi_i^{MsFEM}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = g(\mathbf{x}) \text{ почти всюду на } \Omega; \quad (3.9)$$

- 2) функции являются финитными:

$$\forall i = \overline{1, N}: \phi_i^{MsFEM}(\mathbf{x}) \neq 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} \in K: K \in T^H(\Omega), \mathbf{x}_i \in K; \quad (3.10)$$

- 3) функции строятся в идеологии метода разбиения единицы [38]:

$$\forall \tilde{\mathbf{x}} \in \Omega: \sum_{i=1}^N \phi_i^{MsFEM}(\tilde{\mathbf{x}}) = 1. \quad (3.11)$$

Глобальные многомасштабные неполиномиальные функции формы могут быть представлены в виде суммы локальных функций, носителями которых являются элементы сетки  $T^H(\Omega)$ :

$$\phi_i^{MsFEM}(\mathbf{x}) = \sum_{K \in T^H} \phi_i^{MsFEM,K}(\mathbf{x}).$$

Такой подход позволяет выполнять построение многомасштабных неполиномиальных функций формы независимо для каждого из элементов грубой сетки  $T^H$  и даёт возможность существенно сократить затраты процессорного времени на решение задачи.

Таким образом, макроэлементом в MsFEM является *тройка*  $\{K, \Phi^{MsFEM}, \Sigma\}$ , где  $K \in T^H(\Omega)$  – геометрический элемент (тетраэдр),  $\Phi^{MsFEM} = span\{\phi_i^{MsFEM,K}, i = \overline{1,4}\}$  – подпространство локальных многомасштабных неполиномиальных функций формы (Рисунок 3.2), определенных на  $K$  и ассоциированных с узлами тетраэдра  $K$ ,  $\dim(\Phi^{MsFEM}) = 4$ ,  $\Sigma$  – подпространство степеней свободы, сопряженное к  $\Phi^{MsFEM}$ ,  $\dim(\Sigma) = 4$ .

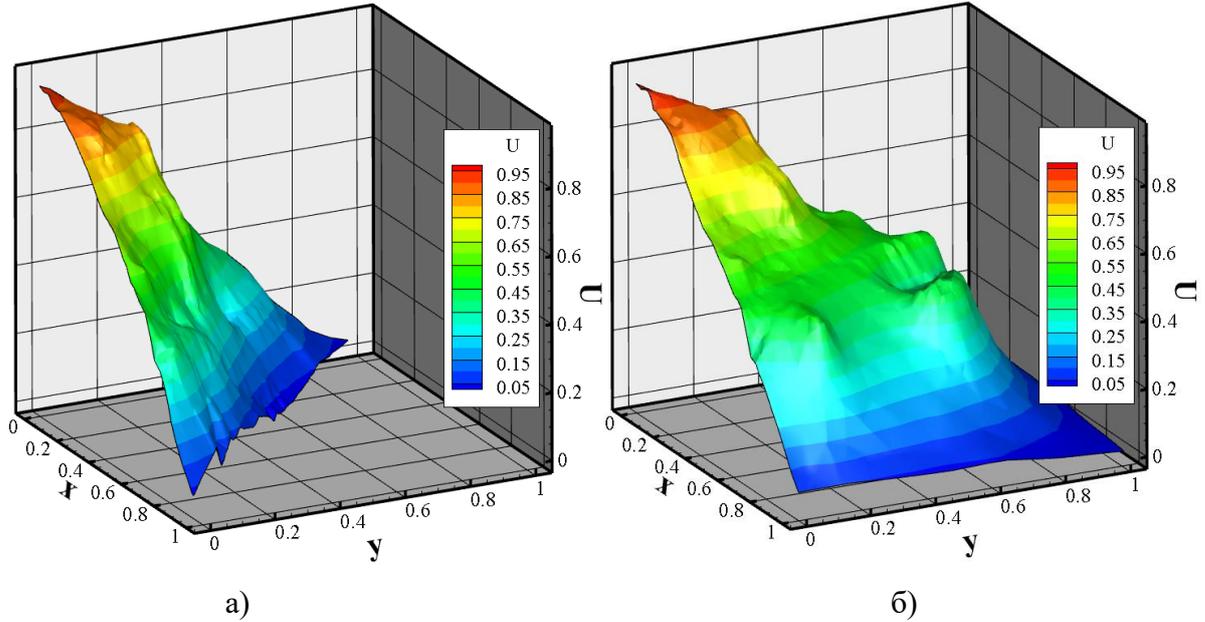


Рисунок 3.2 – Сечения неполиномиальных многомасштабных функций формы, определённых на тетраэдральном макроэлементе (а) и на макроэлементе параллелепипеде (б)

Для построения локальных многомасштабных неполиномиальных функций формы  $\phi_i^{MsFEM,K} \in \Phi^{MsFEM}$  решаются подзадачи на мелкой сетке  $\Gamma_K^h$ :

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla \phi_i^{MsFEM,K}(\mathbf{x})) &= 0 \text{ в } K, \\ \phi_i^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) &= \zeta_i^K(\mathbf{x}) \text{ на } B^K, \end{aligned} \quad (3.12)$$

где  $\zeta_i^K(\mathbf{x})$  – в общем случае неполиномиальная функция, определенная на  $B^K$  и обеспечивающая согласованность локальных функций  $\phi_i^{MsFEM,K}(\mathbf{x})$  на соседних макроэлементах;

$B^K$  – грани  $K$ .

### 3.1.3.1 Согласование локальных многомасштабных неполиномиальных функций формы

При построении локальных многомасштабных функций формы необходимо учитывать следующие требования:

- многомасштабные функции формы должны с требуемой точностью учитывать внутреннюю структуру макроэлемента,

- гладкость глобальных многомасштабных неполиномиальных функции формы на границах макроэлементов должна соответствовать гладкости искомого решения.

Проблема точности решается построением адаптивной симплициальной мелкой сетки  $T^h(\Omega)$ , адекватной рассматриваемой области моделирования и к требованиям, накладываемым предметной областью.

Для обеспечения гладкости глобальных функций  $\phi_i^{MsFEM}(\mathbf{x})$ , краевые условия задачи (3.12) выбираются специальным образом, что позволяет управлять вычислительными схемами многомасштабного метода как с точки зрения точности решения, так и требований к памяти и процессорному времени.

Существуют различные подходы для согласования локальных многомасштабных неполиномиальных функций формы по границам макроэлементов. Разнообразие технологий обусловлено необходимостью «тонкой настройки» метода для решения конкретного класса задач. Для рассматриваемой в данной работе краевой задачи могут быть применены два подхода, предложенных в [16] и названных «линейные краевые условия» (Рисунок 3.3.а) и «осциллирующие краевые условия» (Рисунок 3.3.б).

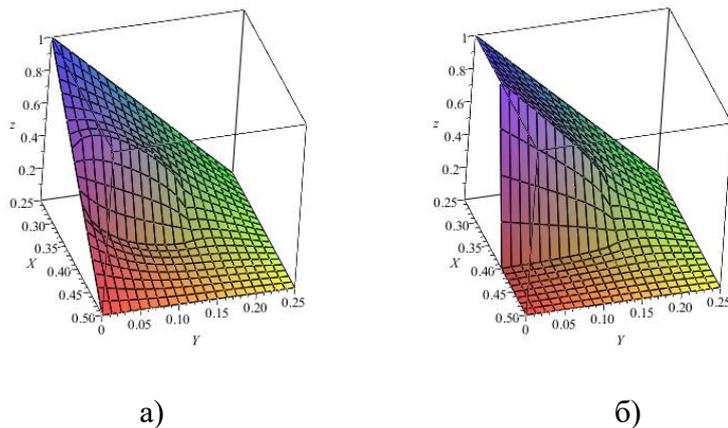


Рисунок 3.3 – Линейные (а) и осциллирующие (б) краевые условия

В первом случае функция  $\zeta_i^K(\mathbf{x})$  выбирается равной некоторой известной функции. Например, для рассматриваемой задачи это может быть линейная функция, равная 1 в вершине макроэлемента, с которым ассоциирована искомая

локальная многомасштабная неполиномиальная функция формы  $\phi_i^{MsFEM,K}(\mathbf{x})$ , и 0 во всех остальных вершинах. Краевые условия такого типа являются наиболее простыми, однако, если решение на границе макроэлемента не обладает требуемой гладкостью (например, границу пересекают включения), то линейные краевые условия не могут быть применены.

Осциллирующие краевые условия основаны на решении иерархической системы подзадач для численного построения неполиномиальных функций  $\zeta_i^K(\mathbf{x})$

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla \zeta_i^K(\mathbf{x})) &= 0 \text{ на } B^K, \\ \zeta_i^K(\mathbf{x}) &= \tau_i^K(\mathbf{x}) \text{ на } E^B, \end{aligned} \quad (3.13)$$

где  $E^B$  – ребра грани  $B^K$ ,

$\tau_i^K(\mathbf{x})$  – неполиномиальная функция, определяемая из решения одномерной задачи:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla \tau_i^K(\mathbf{x})) &= 0 \text{ на } E^B, \\ \tau_i^K(\mathbf{x}) &= \gamma_i^K(\mathbf{x}) \text{ на } N^E, \end{aligned} \quad (3.14)$$

где  $N^E$  – вершины ребра  $E^B$ ,

$\gamma_i^K(\mathbf{x})$  – классическая линейная базисная функция на элементе  $K$ .

Таким образом, в трехмерном случае задача построения осциллирующих краевых условий для эллиптического уравнения (3.12) состоит из двух этапов:

- 1) решение одномерных задач (3.13) на каждом из ребер макроэлемента;
- 2) решение двумерных задач (3.14) на каждой грани макроэлемента.

Осциллирующие краевые условия позволяют точнее линейных условий учитывать мелкомасштабную структуру области моделирования, однако для границ, которые включения не пересекают, возможно успешное применение простых линейных краевых условий. Такой комбинированный подход уменьшает затраты процессорного времени на построение локальных многомасштабных неполиномиальных функций формы.

### 3.1.3.2 Вариационные постановки на микроуровне

В MsFEM для решения задач построения локальных многомасштабных неполиномиальных функций формы (3.12) и задач построения осциллирующих краевых условий (3.13), (3.14) используется классический метод конечных элементов [174].

Определим на макроэлементе  $K \in \mathcal{T}^H(\Omega)$  гильбертовы подпространства  $V_0^{volume}(K)$ ,  $V_0^{face}(B^K)$ ,  $V_0^{edge}(E^B)$  для задач (3.12), (3.13), (3.14) соответственно:

$$V_0^{volume}(K) = \{u \in V(\Omega) : u = 0 \text{ на } B^K\}, \quad (3.15)$$

$$V_0^{face}(B^K) = \{u \in V(\Omega) : u = 0 \text{ на } E^B\}, \quad (3.16)$$

$$V_0^{edge}(E^B) = \{u \in V(\Omega) : u = 0 \text{ на } N^E\}, \quad (3.17)$$

где  $V(\Omega)$  – гильбертово подпространство (3.6),

$B^K$  – грани макроэлемента  $K$ ,

$E^B$  – ребра грани  $B^K$ ,

$N^E$  – вершины ребра  $E^B$ .

Тогда вариационные постановки для задач (3.12) – (3.14) имеют вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } \phi_i^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) \in V_0^{volume}(K) + \zeta_i^K(\mathbf{x}) \text{ такую, что} \\ \int_K \nabla \phi_i^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \tilde{v}(\mathbf{x}) dK = 0, \quad \forall \tilde{v}(\mathbf{x}) \in V_0^{volume}(K), \end{array} \right. \quad (3.18)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } \zeta_i^K(\mathbf{x}) \in V_0^{face}(K) + \tau_i^K(\mathbf{x}) \text{ такую, что} \\ \int_K \nabla \zeta_i^K(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \tilde{v}(\mathbf{x}) dK = 0, \quad \forall \tilde{v}(\mathbf{x}) \in V_0^{face}(B^K), \end{array} \right. \quad (3.19)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } \tau_i^K(\mathbf{x}) \in V_0^{edge}(K) + \gamma_i^K(\mathbf{x}) \text{ такую, что} \\ \int_K \nabla \tau_i^K(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \tilde{v}(\mathbf{x}) dK = 0, \quad \forall \tilde{v}(\mathbf{x}) \in V_0^{edge}(E^B). \end{array} \right. \quad (3.20)$$

### 3.1.3.3 Дискретные вариационные постановки на микроуровне

Рассмотрим адаптивное симплициальное разбиение  $\mathcal{T}_K^h$ , построенное на макроэлементе  $K \in \mathcal{T}^H(\Omega)$  и определим на этом разбиении дискретное гильбертово подпространство

$$V_0^{3D,h}(\Gamma_K^h) = \text{span}\{\varphi_i^{3D}(\mathbf{x}), i = \overline{1, n_{3D}}\}, \quad (3.21)$$

где  $\varphi_i^{3D}(\mathbf{x})$  – квадратичные лагранжевы базисные функции [174], определенные на симплициальной сетке  $\Gamma_K^h$ ,

$n_{3D}$  - число степеней свободы для  $\Gamma_K^h$ .

Тогда дискретная вариационная постановка для задачи построения локальных многомасштабных неполиномиальных функций формы будет иметь вид:

$$\begin{cases} \text{найти } \phi_i^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) \in V_0^{3D,h}(\Gamma_K^h) + \zeta_i^K(\mathbf{x}) \text{ такую, что} \\ \int_K \nabla \phi_i^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \tilde{v}(\mathbf{x}) dK = 0, \quad \forall \tilde{v}(\mathbf{x}) \in V_0^{3D,h}(\Gamma_K^h). \end{cases} \quad (3.22)$$

Для решения задач (3.14) и (3.13) необходимо сформировать соответствующие конечноэлементные сетки из одномерных и двумерных элементов. Наиболее простым способом является выделение требуемых сеток из имеющегося симплициального разбиения  $\Gamma_K^h$ .

С учетом сформированных треугольных сеток  $\Gamma_{B^k}^h$  на гранях макроэлемента  $K$  и одномерных сеток  $\Gamma_{E^b}^h$  на ребрах макроэлемента определим соответствующие им дискретные гильбертовы подпространства:

$$V_0^{2D,h}(\Gamma_{B^k}^h) = \text{span}\{\varphi_i^{2D}(\mathbf{x}), i = \overline{1, n_{2D}}\}, \quad (3.23)$$

$$V_0^{1D,h}(\Gamma_{E^b}^h) = \text{span}\{\varphi_i^{1D}(\mathbf{x}), i = \overline{1, n_{1D}}\}, \quad (3.24)$$

где  $\varphi_i^{2D}(\mathbf{x})$  – классические квадратичные базисные функции на треугольных конечных элементах [174];

$\varphi_i^{1D}(\mathbf{x})$  – квадратичные лагранжевы базисные функции на одномерных конечных элементах [174];

$n_{2D}$  и  $n_{1D}$  – число степеней свободы для  $\Gamma_{B^k}^h$  и  $\Gamma_{E^b}^h$ , соответственно.

Тогда дискретная вариационная постановка для подзадач построения осциллирующих краевых условий будет иметь вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } \zeta_i^K(\mathbf{x}) \in V_0^{2D,h}(\Gamma_{B^K}^h) + \tau_i^K(\mathbf{x}) \text{ такую, что} \\ \int_K \nabla \zeta_i^K(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \tilde{v}(\mathbf{x}) dK = 0, \quad \forall \tilde{v}(\mathbf{x}) \in V_0^{2D,h}(\Gamma_{B^K}^h), \end{array} \right. \quad (3.25)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } \tau_i^K(\mathbf{x}) \in V_0^{1D,h}(\Gamma_{E^B}^h) + \gamma_i^K(\mathbf{x}) \text{ такую, что} \\ \int_K \nabla \tau_i^K(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \tilde{v}(\mathbf{x}) dK = 0, \quad \forall \tilde{v}(\mathbf{x}) \in V_0^{1D,h}(\Gamma_{E^B}^h). \end{array} \right. \quad (3.26)$$

### 3.1.4 Дискретная многомасштабная вариационная постановка

С учетом сформированных сеточной иерархии и соответствующей иерархии подпространств, дискретная вариационная постановка MsFEM формулируется следующим образом

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U^{H,MsFEM}(\mathbf{x}) \in V_0^H(\Gamma^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Gamma^h(\Omega)) + U_D(\Gamma_D) \text{ такое, что} \\ \int_{\Omega} \nabla U^{H,MsFEM}(\mathbf{x}) \cdot A^H(\mathbf{x}) \cdot \nabla v^H(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma_N} G_N v^H(\mathbf{x}) d\Gamma + \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v^H(\mathbf{x}) d\Omega, \\ \forall v^H(\mathbf{x}) \in V_0^H(\Gamma^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Gamma^h(\Omega)), \end{array} \right. \quad (3.27)$$

где  $V_0^H(\Gamma^H(\Omega))$  – дискретное подпространство гильбертова пространства  $V_0(\Omega)$  (3.7), определенное на грубом разбиении  $\Gamma^H(\Omega)$ ;

$V_0^h(\Gamma^h(\Omega)) = \sum_{K \in \Gamma^H} V_0^{3D,h}(\Gamma_K^h)$  – дискретное подпространство гильбертова пространства  $V_0(\Omega)$  (3.7), определенное на мелком разбиении  $\Gamma^h(\Omega)$ ;

$A^H(\mathbf{x})$  – гомогенизированный коэффициент среды.

### 3.1.5 Ассемблирование системы линейных алгебраических уравнений

Система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для дискретной вариационной постановки следующим образом

(3.27) может быть представлена в матричной форме

$$\mathbf{M}\mathbf{q}^H = \mathbf{b}, \quad (3.28)$$

где  $\mathbf{q}^H$  – веса разложения  $U^{H,MsFEM}(\mathbf{x})$  по многомасштабным неполиномиальным функциям формы  $\phi_i^{MsFEM}(\mathbf{x})$ ;

$\mathbf{M}$  и  $\mathbf{b}$  – глобальная матрица и вектор правой части СЛАУ, получаемые ассемблированием локальных матриц  $\mathbf{M}^{K,local}$  и правых частей  $\mathbf{b}^{K,local}$  макроэлементов  $K \in \Gamma^H(\Omega)$ :

$$\left[ \mathbf{M}^{K,local} \right]_{i,j} = \int_K \nabla \phi_i^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi_j^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) dK, \quad (3.29)$$

$$\left[ \mathbf{b}^{K,local} \right]_j = \int_K F(\mathbf{x}) \phi_j^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) dK - \int_{\Gamma_N} G_N(\mathbf{x}) \phi_j^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) d\Gamma \quad (3.30)$$

Поскольку на каждом макроэлементе  $K$  определена симплициальная мелкая сетка  $\Gamma_K^h$  с элементами  $k$ , то:

$$\begin{aligned} \left[ \mathbf{M}^{K,local} \right]_{i,j} &= \sum_{k \in \Gamma_K^h} \int_k \nabla \phi_i^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi_j^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) dk = \\ &= \sum_{k \in \Gamma_K^h} \int_k \nabla \left( \sum_{r=1}^R p_r^{i(K)} \varphi_r^{3D}(\mathbf{x}) \right) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \left( \sum_{r=1}^R p_r^{j(K)} \varphi_r^{3D}(\mathbf{x}) \right) dk, \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_j^{K,local} &= \sum_{k \in \Gamma_K^h} \int_k F(\mathbf{x}) \phi_j^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) dk - \sum_{k \in \Gamma_K^h: k \cap \Gamma_N \neq \emptyset} \int_k G_N(\mathbf{x}) \phi_j^{MsFEM,K}(\mathbf{x}) dk = \\ &= \sum_{k \in \Gamma_K^h} \int_k F(\mathbf{x}) \left( \sum_{r=1}^R p_r^{j(K)} \varphi_r^{3D}(\mathbf{x}) \right) dk - \\ &\quad - \sum_{k \in \Gamma_K^h: k \cap \Gamma_N \neq \emptyset} \int_k G_N(\mathbf{x}) \left( \sum_{r=1}^R p_r^{j(K)} \varphi_r^{3D}(\mathbf{x}) \right) dk, \end{aligned} \quad (3.32)$$

где  $R$  – число степеней свободы, определенных на микроэлементах при решении задачи построения локальных неполиномиальных функций формы (3.12),

$p_r^{j(K)}$ ,  $\varphi_r^{3D}(\mathbf{x})$  – веса разложения и базисные функции, определенные на микроэлементах разбиения  $\Gamma_K^h$ .

Коэффициент  $A^\varepsilon(\mathbf{x})$ , описывающий свойства среды, является кусочно-постоянным и может быть вынесен за знак интеграла в (3.31). В таком случае локальные матрицы  $\mathbf{M}_{ij}^{K,local}$  (3.31) и векторы  $\mathbf{b}_i^{K,local}$  ((3.32) могут быть вычислены аналитически.

### 3.1.6 Верификация вычислительных схем многомасштабного метода конечных элементов

Для верификации вычислительных схем MsFEM на тетраэдральных макроэлементах, рассмотрим краевую эллиптическую задачу распределения скалярного потенциала в трехмерной цилиндрической области с включениями-пластинками (Рисунок 3.4):

$$-\nabla \cdot \left( (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} \nabla U(\mathbf{x}) \right) = 0 \text{ на } \Omega = \Omega_{matrix} \cup \Omega_{incl}, \quad (3.33)$$

$$U(\mathbf{x}) = 0 \text{ на } \Gamma_{down}, U(\mathbf{x}) = 1 \text{ на } \Gamma_{up} \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ на } \Gamma_N, \quad (3.35)$$

$$U^+(\mathbf{x}) = U^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U^+(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U^-(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (3.37)$$

где  $\Omega \subset R^3$  – цилиндрическая область моделирования радиуса  $r = 15$  мм и высоты  $r = 100$  мм;

$\Gamma_{up}$  и  $\Gamma_{down}$  – верхнее и нижнее основания цилиндра  $\Omega$ , соответственно, на которых задана разница потенциалов;

$\Gamma_N$  – заизолированная боковая поверхность цилиндра  $\Omega$ ;

$\Omega_0$  – матрица образца;

$\Omega_1$  – включения-пластинки размеры которых  $10\text{мм} \times 4\text{мм} \times 1\text{мм}$  (всего образец содержит 100 включений, распределенных по равномерному закону, объемная концентрация включений составляет 5.9%);

$\rho^\varepsilon(\mathbf{x})$  – кусочно-постоянная функция, определяющая удельное электрическое сопротивление в области моделирования:

$$\rho^\varepsilon(\mathbf{x}) = \begin{cases} \rho_{matrix} \text{ Ом} \cdot \text{м}, & \mathbf{x} \in \Omega_0 \\ \rho_{incl} \text{ Ом} \cdot \text{м}, & \mathbf{x} \in \Omega_1 \end{cases}, \quad (3.38)$$

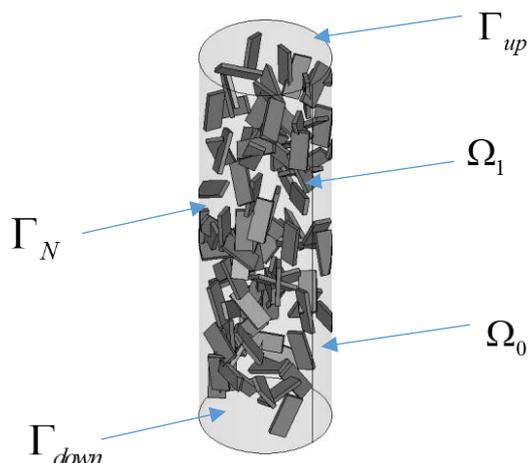


Рисунок 3.4 – Область моделирования  $\Omega$  и обозначения границ области (объемная концентрация включений 5.9%)

СЛАУ решается с фиксированной точностью  $10^{-8}$  методом сопряженных градиентов [175].

Относительную погрешность будем оценивать по формуле:

$$\frac{\|U^h - U\|}{\|U\|} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N (U^h(\mathbf{x}_i) - U(\mathbf{x}_i))^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^N U(\mathbf{x}_i)^2}}, \quad (3.39)$$

где  $N$  – количество рассматриваемых точек,

$U^h$  – полученное решение,

$U$  – точное решение.

Пусть  $\rho_{matrix} = \rho_{incl} = 1$  Ом·м (т.е. цилиндр  $\Omega$  является однородным), тогда задача (3.33) имеет аналитическое решение:

$$U(\mathbf{x}) = U(x, y, z) = \frac{z - z_{min}}{z_{max} - z_{min}}. \quad (3.40)$$

В таблице 3.1 приведены относительные погрешности решения, полученного классическим FEM [176] и MsFEM.

Таблица 3.1 – Сравнение полученных решений и точного решения

	$\frac{\ U_{FEM}^h - U\ }{\ U\ }$	$\frac{\ U_{MsFEM}^h - U\ }{\ U\ }$
В узлах грубого разбиения $T^H(\Omega)$	1,4200E-08	1,0443E-08

Поскольку при  $\rho_{matrix} \neq \rho_{incl} = 1 \text{ Ом} \cdot \text{м}$  задача (3.33) не имеет аналитического решения, то верификацию вычислительных схем MsFEM будем выполнять через сравнение результатов решения с результатами классического FEM на подробной сетке. Пусть  $\rho_{matrix} = 1 \text{ Ом} \cdot \text{м}$  и  $\rho_{incl} = 10^{-5} \text{ Ом} \cdot \text{м}$ . Результаты моделирования приведены на рисунке 3.5 и в таблице 3.2.

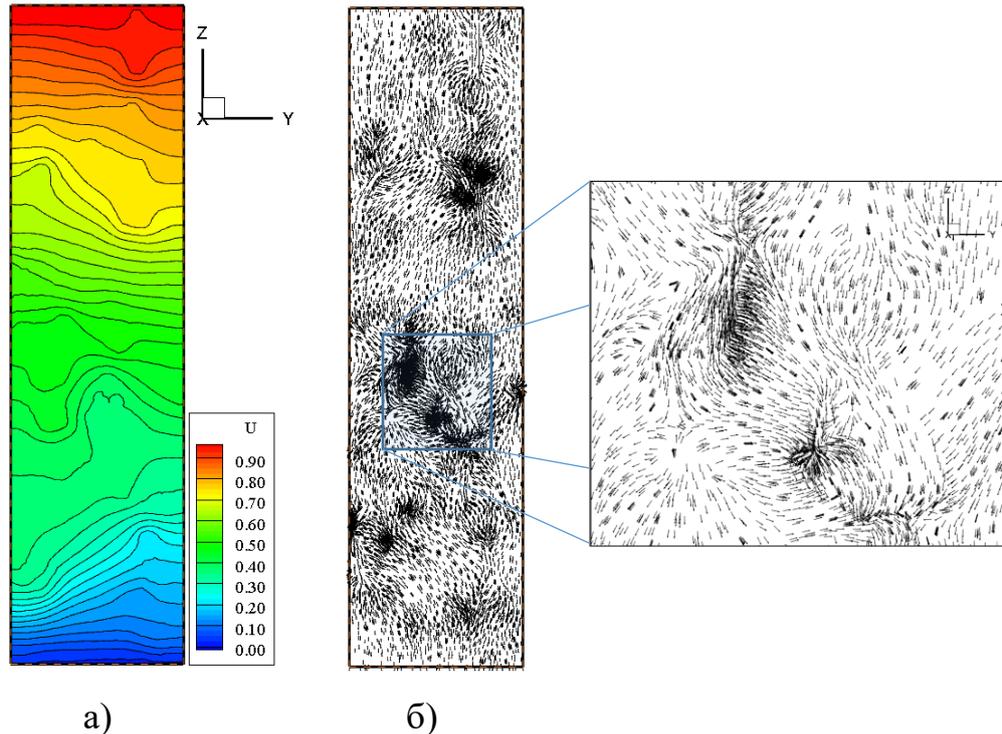


Рисунок 3.5 – Распределение скалярного потенциала (а) и векторного пол плотности тока  $\mathbf{J}$  (б) в сечении, проходящем через ось цилиндра  $\Omega$

Таблица 3.2 – Числовые характеристики решения на измельчающихся сетках

Номер вычислительного эксперимента	Относительная погрешность	Число элементов грубой сетки $T^H(\Omega)$	Число элементов мелкой сетки $T^h(\Omega)$
1	3,63001e-02	201	153171
2	1,62298e-02	201	438342
3	8,62992e-03	201	977336

Из таблицы 3.2. видно, что при дроблении микроэлементной сетки относительная погрешность решения уменьшается, что соответствует теоретическим доказательствам о сходимости метода [22].

## 3.2 Гетерогенный многомасштабный метод конечных элементов

### 3.2.1 Гетерогенная многомасштабная вариационная постановка

С учетом введенных ранее Гильбертовых подпространств (3.6) и (3.7), вариационная постановка для задачи (3.1) для гетерогенного многомасштабного метода имеет вид аналогичный рассмотренной выше вариационной постановке классического многомасштабного метода конечных элементов (3.8), а именно:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U(\mathbf{x}) \in V_0(\Omega) + U_D(\Gamma_D) \text{ такую, что} \\ \int_{\Omega} \nabla U(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{A}^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla v(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma_N} G_N(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Gamma + \\ \quad + \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Omega, \quad \forall v \in V_0(\Omega) \end{array} \right. \quad (3.41)$$

### 3.2.2 Дискретизация области моделирования

Пусть в области  $\Omega \subset R^3$  определено адаптивное согласованное полиэдральное разбиение  $\Pi^H(\Omega)$  (Рисунок 3.6.б). На каждом элементе  $K^p \in \Pi^H(\Omega)$  построено локальное адаптивное согласованное симплициальное разбиение  $\Gamma^h(K^p)$  (Рисунок 3.6.в). Конечноэлементные сетки  $\Pi^H(\Omega)$  и  $\Gamma^h(K^p)$  удовлетворяют условиям:

$$H = \min_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \dim(K^p): H \ll \varepsilon; \quad (3.42)$$

$$h = \max_{k \in \Gamma^h(K^p)} \dim(k): h < \varepsilon; \quad (3.43)$$

где  $\Pi^H(\Omega)$  – *грубая* сетка, которая строится в  $\Omega$  без учета внутренних границ  $\Gamma_{in}$ ;

$\varepsilon = \max_{i=1..M} \dim(\Omega_i)$  – коэффициент мелкости включений;

$\Gamma^h(K^p)$  – *мелкая* сетка, определенная на геометрическом элементе  $K^p \in \Pi^H(\Omega)$ , учитывающая все мелкомасштабные особенности среды.

В соответствии с принятой терминологией для многомасштабных методов, элементы грубой сетки  $\Pi^H(\Omega)$  будем называть *макроэлементами*, а элементы

сеток  $T^h(K^p)$  – микроэлементами, аналогично терминологии вводимой для MsFEM.

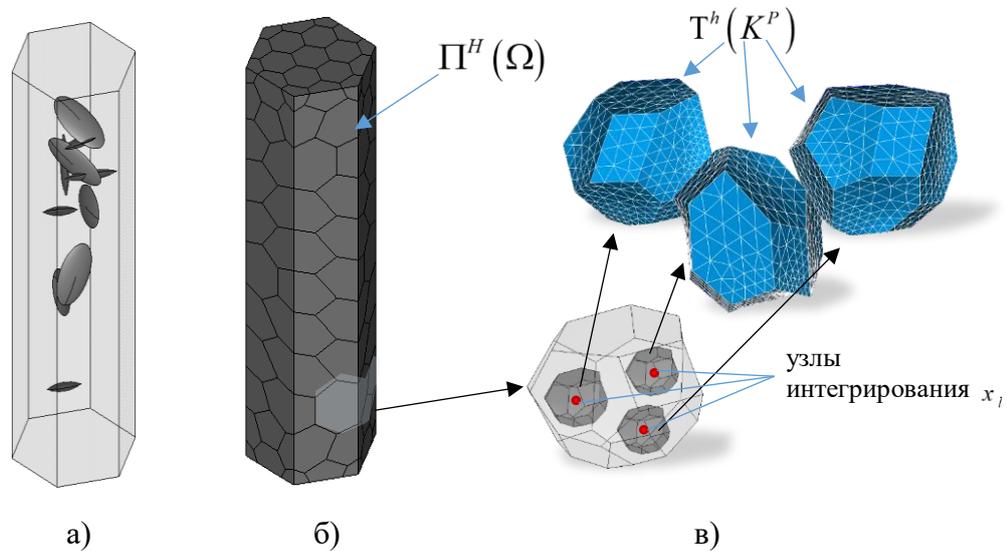


Рисунок 3.6 – Сеточная иерархическая структура для цилиндрического образца с включениями (а – образец; б – грубая сетка  $\Pi^H(\Omega)$ ; в – мелкая сетка  $T^h(K^p)$  на макроэлементе  $K \in \Pi^H(\Omega)$ )

### 3.2.2.1 Численное интегрирование на полиэдре

Определим кубатурную формулу  $\Lambda$  на полиэдре  $K^p$ :

$$\int_{K^p} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{l=1}^{n_K} \omega_l f(\mathbf{x}_l), \quad (3.44)$$

где  $\omega_l$  и  $\mathbf{x}_l \in \Omega$  – 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) пусть полиэдры  $K_1, K_2 \in \Pi^H(\Omega)$  имеют общую грань или ребро (т.е. элементы  $K_1$  и  $K_2$  являются соседними) тогда 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) порядок схем численного интегрирования определяется требуемой гладкостью решения.

На конечных элементах простой формы (на тетраэдрах, параллелепипедах и так далее) сформулированные условия могут быть учтены без дополнительных построений. В случае полиэдральных элементов необходимо ввести дополнительные подразделения макроэлементов-полиэдров на тетраэдры  $\tilde{T}(K^p)$ ,  $\forall K^p \in \Pi^h(\Omega)$  (Рисунок 3.7).

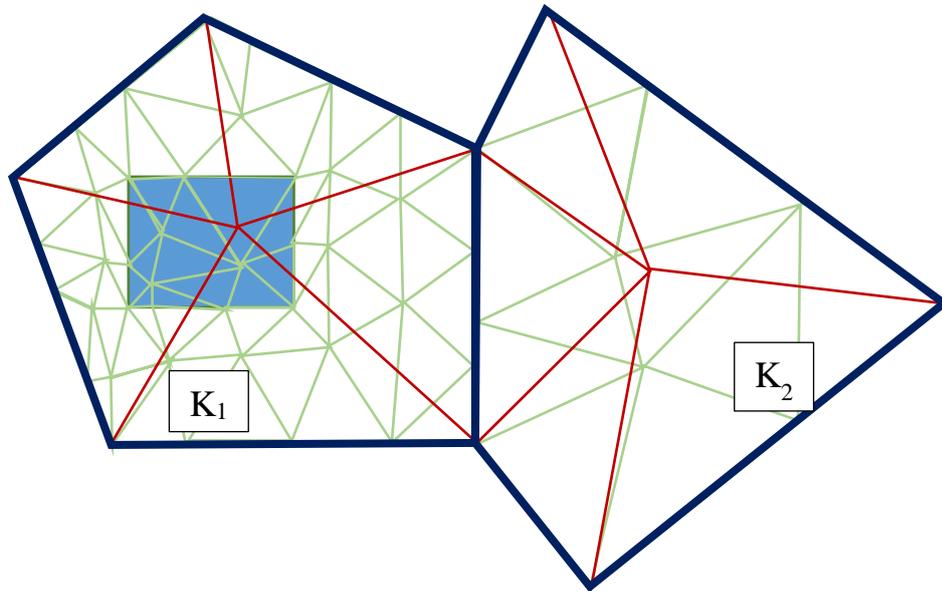


Рисунок 3.7 – Пример разбиений соседних макроэлементов  $K_1$  и  $K_2$  (зеленые линии – несогласованные по границе микроразбиения  $T^h(K_1)$  и  $T^h(K_2)$ ; красные линии – согласованные разбиения макроэлементов для численного интегрирования  $T(K_1)$  и  $T(K_2)$ )

На тетраэдрах построенных подразделениях  $\tilde{T}(K^p)$  для численного интегрирования будем применять кубатурные формулы Гаусса [177]. Тогда формула численного интегрирования (3.44) на полиэдре  $K^p$  примет вид

$$\int_{K^p} f(\mathbf{x}) dx = \sum_{t \in \tilde{T}(K^p)} \int_t f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{t \in \tilde{T}(K^p)} \sum_{l=1}^{n_t} \omega_l f(\mathbf{x}_l), \quad (3.45)$$

где  $t$  – тетраэдр подразделения  $\tilde{T}(K^p)$ , вводимого для интегрирования (Рисунок 3.7),

$n_t$  – число точек интегрирования, определенных на тетраэдре  $t$ .

Таким образом, на каждом полиэдре  $K^p$  определено  $n_k = \dim(\tilde{T}(K^p)) \cdot n_t$  точек численного интегрирования  $\mathbf{x}_i \in R^3$  и соответствующих весов  $\omega_i$ .

### 3.2.3 Гетерогенные многомасштабные неполиномиальные функции формы

Аналогично многомасштабному методу конечных элементов, описанному выше, в гетерогенном многомасштабном методе конечных элементов на сеточном полиэдральном разбиении  $\Pi^H(\Omega)$  определяются глобальные и локальные гетерогенные многомасштабные неполиномиальные функции формы

$$\phi_i^{FE-HMM}(\mathbf{x}) = \sum_{K \in T^H} \phi_i^{FE-HMM,K}(\mathbf{x}), \quad i = \overline{1, N},$$

ассоциированные с вершинами  $\mathbf{X}_i$  сетки

$\Pi^H(\Omega)$  (Рисунок 3.8). Кроме того, для гетерогенных многомасштабных неполиномиальных функций формы  $\phi_i^{FE-HMM}(\mathbf{x})$ ,  $i = \overline{1, N}$ , выполняются условия (3.9) – (3.11).

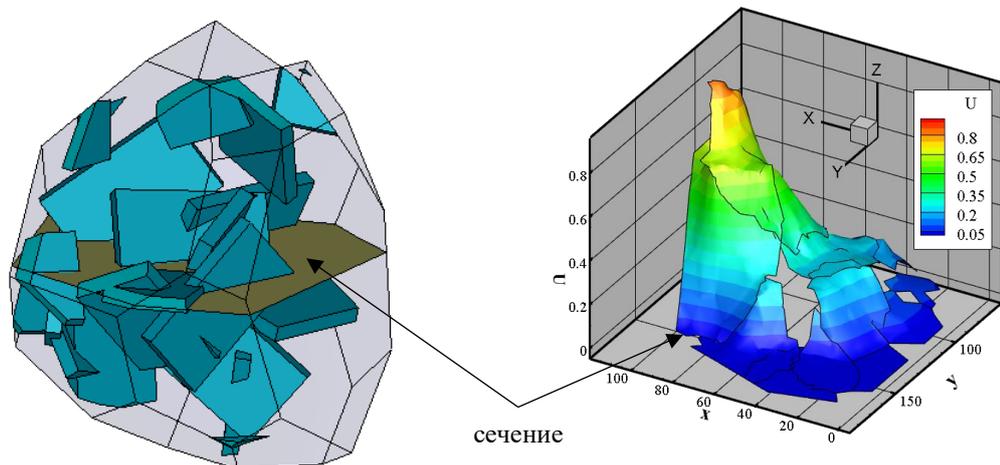


Рисунок 3.8 – Гетерогенная многомасштабная неполиномиальная функции формы, определённая на макроэлементе

Таким образом, с учетом введенной формулы численного интегрирования (3.45), макроэлементом в FE-HMM будем называть *четверку*

$\{K^p, \Phi^{FE-HMM}, \Sigma^{FE-HMM}, \Lambda\}$ , где  $K^p \in \Pi^H(\Omega)$  – геометрический элемент (полиэдр) с  $p$  вершинами,  $\Phi^{FE-HMM} = \{\phi_i^{FE-HMM,K}(\mathbf{x}), i = \overline{1, p}\}$  – пространство гетерогенных многомасштабных неполиномиальных функций формы, определенных на  $K^p$ ,  $\dim(\Phi^{FE-HMM}) = p$ ,  $\Sigma^{FE-HMM}$  – подпространство степеней свободы, сопряженное к  $\Phi$ ,  $\dim(\Sigma^{FE-HMM}) = p$ ,  $\Lambda$  – формула численного интегрирования, определенная на  $K^p$  (3.45).

В отличие от MsFEM в FE-HMM нет необходимости выполнять построение локальных гетерогенных многомасштабных неполиномиальных функций формы на всем макроэлементе, вместо этого достаточно получить значения функций  $\phi_i^{FE-HMM,K}(\mathbf{x})$  в узлах  $\forall \mathbf{x}_l, l = \overline{1, n_K}$ , формулы численного интегрирования  $\Lambda$  (3.45). Для этого вокруг каждого узла численного интегрирования формируется некоторый полиэдр  $I(\mathbf{x}_l), l = \overline{1, n_K}$ , состоящий из элементов симплициального разбиения  $T^h(K^p)$  в соответствии со следующим алгоритмом:

- 1) вокруг каждой точки численного интегрирования  $x_l, l = \overline{1, n_K}$ , опишем сферу  $Sph(x_l) \subset K^p$  с центром в  $\mathbf{x}_l$ ;
- 2) выберем все тетраэдры  $k \in T^h(K^p)$ , принадлежащие сфере  $Sph(\mathbf{x}_l)$ ;
- 3) сформируем полиэдр  $I(x_l) = \{\tilde{k} \in T^h(K^p) : \tilde{k} \in Sph(\mathbf{x}_l)\}$  так, чтобы выполнялось условие  $\mathbf{x}_l \notin I(\mathbf{x}_l)$ .

Локальные гетерогенные многомасштабные неполиномиальные функции представляются в виде линейной комбинации базисных функций пространства, построенного на микроразбиении в окрестности каждой точки интегрирования, а не во всем макроэлементе. Таким образом в FE-HMM, согласование неполиномиальных функций формы на межмакроэлементных границах производится на основании формул численного интегрирования. Такой подход расширяет возможности многомасштабных методов для работы с грубой сеткой,

ячейками которой являются фигуры свободной формы, что приближает FE-НММ к методу виртуальных элементов [178]. Использование носителей свободной формы, а также естественной параллельности алгоритмов, позволяют выполнять численное моделирование в областях, содержащих кластерные образования.

Таким образом для построения локальных гетерогенных многомасштабных неполиномиальных функций формы  $\phi_i^{FE-HMM,K} \in \Phi^{FE-HMM}$  решаются подзадачи на мелкой сетке  $T^h(K^p)$  в полиэдральных подобластях  $I(\mathbf{x}_l)$ ,  $l = \overline{1, n_K}$ :

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla \phi_i^{FE-HMM,K}(\mathbf{x})) &= 0 \text{ в } I(\mathbf{x}_l), \\ \phi_i^K(\mathbf{x}) &= \zeta_i(\mathbf{x}) \text{ на } B, \end{aligned} \quad (3.46)$$

где  $B$  – грани  $I(\mathbf{x}_l)$ ,

$\zeta_i(\mathbf{x})$  – в общем случае неполиномиальная функция, определенная на  $B$ , для построения которой решается краевая задача на ребрах полиэдра  $I(\mathbf{x}_l)$ :

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla \zeta_i(\mathbf{x})) &= 0 \text{ на } B, \\ \zeta_i(\mathbf{x}) &= \tau_i(\mathbf{x}) \text{ на } E, \end{aligned} \quad (3.47)$$

где  $E$  – ребра граней  $B$ ,

$\tau_i(\mathbf{x})$  – неполиномиальная функция, определяемая из решения одномерной задачи:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (A^\varepsilon(x) \nabla \tau_i(\mathbf{x})) &= 0 \text{ на } E, \\ \tau_i(\mathbf{x}) &= \gamma_i(\mathbf{x}) \text{ на } N, \end{aligned} \quad (3.48)$$

где  $N$  – вершины ребер  $E$ ,

$\gamma_i(\mathbf{x})$  – кусочно-линейная функция, определенная на элементе  $K$  так, что  $\gamma_i(\mathbf{x})$  равна 1 в  $i$ -ой вершине полиэдра  $K^p$  и равна 0 во всех остальных вершинах.

Для решения сформулированных иерархических подзадач (3.46) – (3.48) в FE-НММ используется классический метод конечных элементов, аналогично построению неполиномиальных многомасштабных функций формы в MsFEM (п. 3.1.3).

### 3.2.4 Дискретная гетерогенная многомасштабная вариационная постановка

Введем дискретные гильбертовы подпространства:  $V_0^H(\Pi^H(\Omega))$  – дискретное подпространство гильбертова пространства  $V_0(\Omega)$  (3.7), определенное на грубом разбиении  $\Pi^H(\Omega)$ ,  $V_0^h = \sum_{K^p \in \Pi^H} V_0^{3D,h}(\Gamma^h(K^p))$  – дискретное подпространство гильбертова пространства  $V_0(\Omega)$  (3.7), определенное на мелком разбиении  $\Gamma^h(K^p)$ . Тогда дискретная вариационная постановка FE-HMM примет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U^{H,FE-HMM}(\mathbf{x}) \in V_0^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h + U_D(\Gamma_D) \text{ такое, что} \\ \int_{\Omega} \nabla U^{H,FE-HMM}(\mathbf{x}) \cdot A^H(\mathbf{x}) \cdot \nabla v^H(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma_N} G_N v^H(\mathbf{x}) d\Gamma + \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v^H(\mathbf{x}) d\Omega, \\ \forall v^H(\mathbf{x}) \in V_0^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h, \end{array} \right. \quad (3.49)$$

где  $A^H(x)$  – гомогенизированный коэффициент среды.

С учетом формулы численного интегрирования (3.45):

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U^{H,FE-HMM}(\mathbf{x}) \in V_0^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h + U_D(\Gamma_D) \text{ такое, что} \\ \sum_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \sum_{t \in \mathcal{T}(K^p)} \sum_{l=1}^{n_t} \frac{\omega_l}{|I(\mathbf{x}_l)|} \int_{I(\mathbf{x}_l)} \nabla U^{H,FE-HMM}(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla v^H(\mathbf{x}) d\Omega = \\ = \int_{\Gamma_N} G_N v^H(\mathbf{x}) d\Gamma + \sum_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \sum_{t \in \mathcal{T}(K^p)} \sum_{l=1}^{n_t} \frac{\omega_l}{|I(\mathbf{x}_l)|} \int_{I(\mathbf{x}_l)} F(\mathbf{x}) v^H(\mathbf{x}) d\Omega, \\ \forall v^H(\mathbf{x}) \in V_0^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h. \end{array} \right. \quad (3.50)$$

### 3.2.5. Ассемблирование системы линейных алгебраических уравнений

Система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для дискретной вариационной постановки (3.50) в матричной форме

$$\mathbf{M}\mathbf{q}^H = \mathbf{b}, \quad (3.51)$$

где  $\mathbf{q}^H$  – веса разложения  $U^{H,FE-HMM}(\mathbf{x})$  по гетерогенным многомасштабным неполиномиальным функциям формы  $\phi_i^{FE-HMM}(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{M}$  и  $\mathbf{b}$  – глобальная матрица и

вектор правой части СЛАУ, получаемые ассемблированием локальных матриц  $\mathbf{M}^{K,local}$  и правых частей  $\mathbf{b}^{K,local}$  макроэлементов  $K \in \Pi^H(\Omega)$ :

$$\left[ \mathbf{M}^{K,local} \right]_{i,j} = \sum_{t \in \mathbb{T}(K^p)} \sum_{l=1}^{n_t} \frac{\omega_l}{|I(\mathbf{x}_l)|} \int_{I(\mathbf{x}_l)} \nabla \phi_i^{FE-HMM}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{A}^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi_j^{FE-HMM}(\mathbf{x}) d\Omega \quad (3.52)$$

$$\left[ \mathbf{b}^{K,local} \right]_j = \int_{\Gamma_N} G_N \phi_j^{FE-HMM,K}(\mathbf{x}) d\Gamma + \sum_{t \in \mathbb{T}(K^p)} \sum_{l=1}^{n_t} \frac{\omega_l}{|I(\mathbf{x}_l)|} \int_{I(\mathbf{x}_l)} F(\mathbf{x}) \phi_j^{FE-HMM,K}(\mathbf{x}) d\Omega \quad (3.53)$$

### 3.2.6 Верификация вычислительных схем гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов

Аналогично MsFEM в FE-HMM точность решения обеспечивается точностью построения многомасштабных неполиномиальных функций формы. В гетерогенном методе точность решения подзадач построения оценок многомасштабных неполиномиальных функций формы (3.46) – (3.48) определяется мелкостью построенных микроэлементных разбиений  $\mathbb{T}^h(K^p)$  и порядком базисных функций конечноэлементных подпространств, определенных на  $\mathbb{T}^h(K^p)$

Рассмотрим цилиндрический образец из песчаника радиуса  $R=15$  мм и высоты  $H=100$  мм с включениями в форме эллипсоидальных трещин (размеры  $15 \times 8 \times 2$  мм), заполненными нефтью. Включения-трещины (10 шт.) распределены в образце случайным образом (Рисунок 3.9). Объемная концентрация включений составляет 1,7%. Физические свойства матрицы и включений приведены в таблице 3.3.

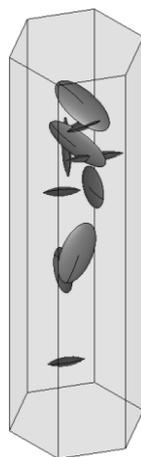


Рисунок 3.9 – Область моделирования

Таблица 3.3 – Физические свойства песчаника и нефти

Материал	Модуль Юнга ( $E$ , Па)	Коэффициент Пуассона ( $\nu$ )	УЭС ( $\rho$ , Ом*м)
Песчаник, пропитанный минерализованной водой	$1,8 \cdot 10^{10}$	0,3	0,3
Нефть	$2,03 \cdot 10^9$	0,5	$10^6$

Сформулируем в данной области задач распределения скалярного потенциала под действием постоянного тока:

$$-\nabla \cdot \left( (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} \nabla U(\mathbf{x}) \right) = 0 \text{ на } \Omega, \quad (3.54)$$

$$U(\mathbf{x}) = 0 \text{ на } \Gamma_{down}, \quad U(\mathbf{x}) = 1 \text{ на } \Gamma_{up}, \quad (3.55)$$

$$\frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ на } \Gamma_N, \quad (3.56)$$

$$U^+(\mathbf{x}) = U^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (3.57)$$

$$\frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U^+(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U^-(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (3.58)$$

и задача упругой деформации твердого тела под воздействием внешнего нагружения:

$$-\nabla \cdot (\mathbf{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) : \nabla_s \mathbf{U}(\mathbf{x})) = 0 \text{ на } \Omega, \quad (3.59)$$

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = (0, 0, 0)^T \text{ на } \Gamma_{down}, \quad \mathbf{U}(\mathbf{x}) = (0, 0, -0.01H)^T \text{ на } \Gamma_{up}, \quad (3.60)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{G}_{Ng}(x) \text{ на } \Gamma_{Ng}, \quad (3.61)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \text{ на } \Gamma_{N0}, \quad (3.62)$$

$$\mathbf{U}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{U}^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (3.63)$$

$$\mathbf{n}^+ \cdot \boldsymbol{\sigma}^+(\mathbf{x}) = \mathbf{n}^- \cdot \boldsymbol{\sigma}^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (3.64)$$

где  $\Gamma_{up}$  и  $\Gamma_{down}$  – нижнее и верхнее основание цилиндра  $\Omega$ , соответственно, на которых задано условие Дирихле ( $\Gamma_D = \Gamma_{up} \cup \Gamma_{down}$ ),

$\Gamma_N$  – внешние границы области  $\Omega$ , на которых определены условия Дирихле и Неймана соответственно,

$\Gamma_{in}$  – внутренние границы области  $\Omega$ ,

$\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{in}$  – границы области моделирования.

Одной из сложностей применения FE-НММ для решения прикладных задач, является необходимость «настройки» метода, а именно требуется выбрать схему интегрирования, которая отвечает гладкости искомого решения, и оптимальный размер области вокруг точек численного интегрирования, в которых будут строиться локальные функции формы. Для исследования влияния вышеназванных факторов на относительную погрешность решения будем рассматривать квадратурные формулы Гаусса с  $p_{integration} = \{1; 4; 5; 11\}$ , где  $p_{integration}$  – число узлов интегрирования в тетраэдрах сетки интегрирования  $\tilde{T}(K^p)$  (Рисунок 3.7). Результаты приведены на рисунке 3.10.

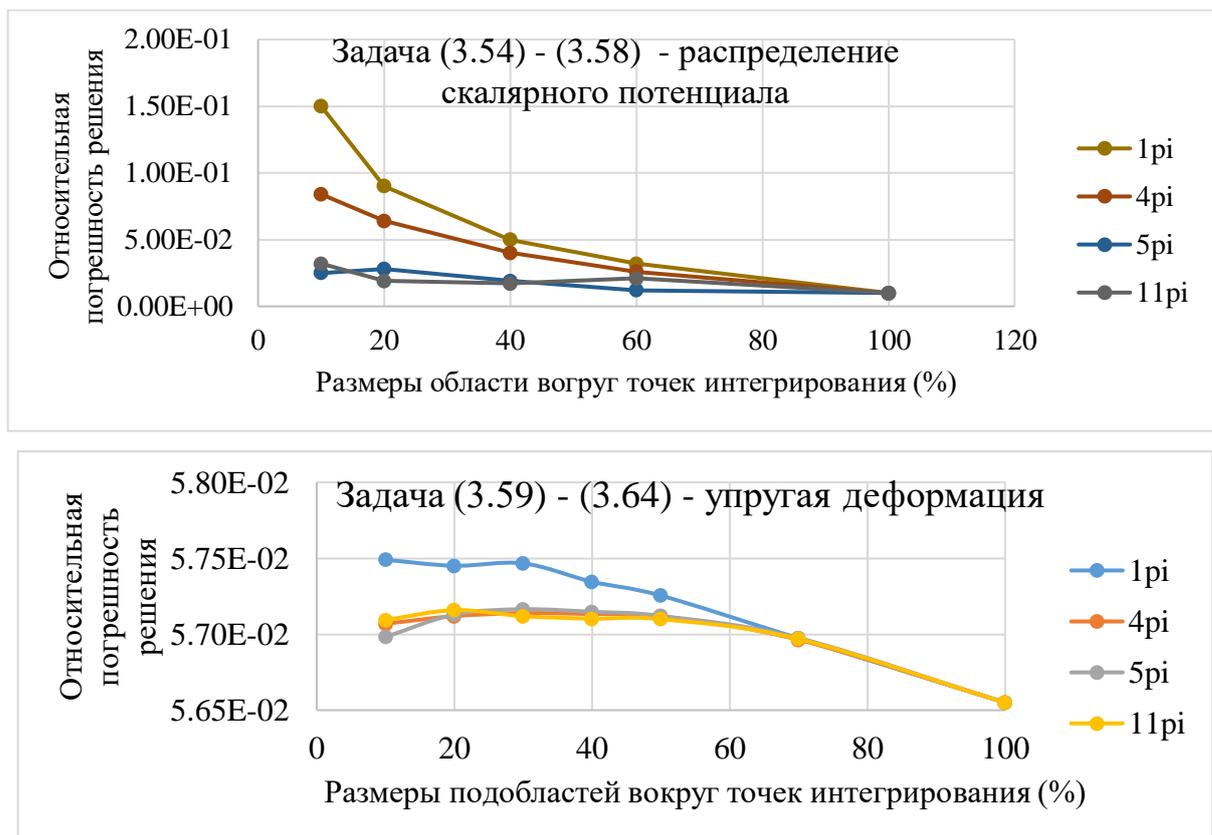


Рисунок 3.10 – Влияние схемы численного интегрирования (1, 4, 5 и 11 точек интегрирования) и размеров области вокруг точек численного интегрирования при построении гетерогенных многомасштабных функций формы на относительную погрешность решения (размеры областей вокруг точек интегрирования указаны в процентах от размера соответствующего макроэлемента)

Результаты вычислительных экспериментов показывают (Рисунок 3.10), что наилучшим выбором с точки зрения точности является использование вычислительных схем на базе кубатурных схем Гаусса с пятью и одиннадцатью точками. Однако применение одиннадцати точечной схемы более затратно с точки зрения требуемого процессорного времени.

### 3.3 Расширенный метод конечных элементов

Расширенный метод конечных элементов (extended finite element method, XFEM) впервые был предложен в работе [39] для задач, решение которых не является гладким во всей области (например, моделирование физических процессов в трещиноватых средах). Основной идеей этого метода является формирование дополнительных локальных обогащающих подпространств для учета таких особенностей на базе метода разбиения единицы (Partition of Unity Finite Element Method, PUFEM) [38], [63], [64]. В зависимости от способа построения обогащающих пространств разработаны различные модификации XFEM. В ранних реализациях XFEM для обогащения использовались точные аналитические решения в малых окрестностях неоднородностей [179], [180], [74]. В [172] представлено обоснование возможности обогащения пространства решения функциями, которые не являются непосредственно точным решением в подобласти, однако формируют базис функционального подпространства, отражающего свойства решения на примере задачи разрушающей деформации твердого тела. Реализация такого подхода позволяет строить адаптивные вычислительные схемы для решения широкого класса задач.

#### 3.3.1 Вариационная постановка расширенного метода конечных элементов

С учетом введенных ранее Гильбертовых подпространств (3.6) и (3.7), вариационная постановка для обобщенной задачи (3.1) для расширенного метода конечных элементов имеет вид аналогичный рассмотренной выше вариационной постановке классического многомасштабного метода конечных элементов (3.8), а именно:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U \in V_0(\Omega) + U_D(\Gamma_D) \text{ такую, что} \\ \int_{\Omega} \nabla U(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla v(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma_N} G_N(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Gamma + \\ \quad + \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Omega, \quad \forall v \in V_0(\Omega). \end{array} \right. \quad (3.65)$$

### 3.3.2 Дискретизация области моделирования

Основной идеей расширенного метода конечных элементов (XFEM) [39] является разделение всего пространства решения на сумму двух подпространств: регулярного – учитывающего внешние силы, которые вызывают деформации, и сингулярного – отражающего внутренние границы области моделирования (например, трещины, поры, включения).

$$S_{XFEM} = S_{regular} + S_{singular} \quad (3.66)$$

Такой подход позволяет учитывать особенности объектов на функциональном уровне при формировании функций формы, а не при построении конечноэлементных сеток. Это дает возможность выполнять моделирование образцов с изменяющейся структурой без перестроения конечноэлементных сеток.

Пусть в области  $\Omega \subset R^3$  определено адаптивное согласованное тетраэдральное разбиение  $T(\Omega)$  (Рисунок 3.11), которое не учитывает внутренние границы  $\Gamma_{in}$  (трещины, поры и т.д.).

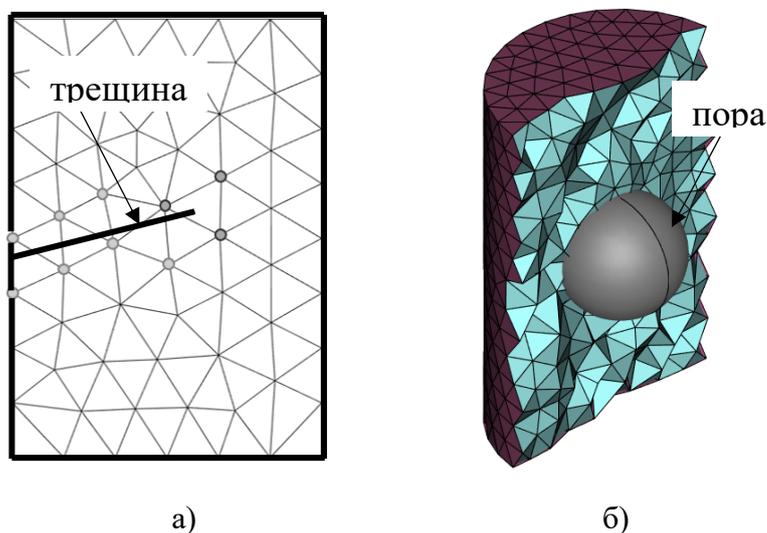


Рисунок 3.11 – Примеры сеток в XFEM (а – двумерная область с трещиной; б – фрагмент сеточного разбиения трехмерной области с порой)

В XFEM вводятся следующие типы элементов [116]:

- $T^{FEM}(\Omega) = T(\Omega) \setminus (T^{XFEM}(\Omega) \cup T^{XFEM-FEM}(\Omega))$  – множество тетраэдров без особенностей;

- $T^{XFEM}(\Omega) = \{K \in T(\Omega) \mid K \cap \Gamma_{in} \neq \emptyset\}$  – множество тетраэдров через которые проходит внутренняя граница  $\Gamma_{in} \subset \mathbf{R}^2$ ;
- $T^{XFEM-FEM}(\Omega) = \{K \in T(\Omega) \mid \exists P \in T(\Omega), P \neq K, K \cap P \in \mathbf{R}^2 \wedge K \cap P \in \mathbf{R}^1\}$  – множество «переходных» элементов.

Таким образом, конечным элементом в XFEM является *тройка*  $\{K, \Phi^{XFEM}, \Sigma^{XFEM}\}$ , где  $K \in T(\Omega)$  – геометрический элемент (тетраэдр),  $\Phi^{XFEM}$  – подпространство локальных функций формы, определенных на  $K$  и ассоциированных с вершинами тетраэдра  $K$ ,  $\dim(\Phi^{XFEM}) = n_K$ ,  $\Sigma^{XFEM}$  – подпространство степеней свободы, сопряженное к  $\Phi^{XFEM}$ ,  $\dim(\Sigma^{XFEM}) = n_K$ . Подпространство локальных функции формы является прямой суммой стандартного подпространства  $\Phi^{Regular}$  лагранжевых базисных функций первого порядка, определенных на тетраэдральных носителях [174], и *обогащающего* подпространства, позволяющего верно учесть геометрические и физические особенности области моделирования внутри конечного элемента (разрывность, сингулярность и т.д.):

$$\Phi^{XFEM} = \Phi^{Regular} \oplus \Phi^{Extended}. \quad (3.67)$$

Структура обогащающего подпространства  $\Phi^{Extended}$  полностью определяется свойствами решения.

### 3.3.2.1 Построение локальных функций формы для задачи упругой деформации

Определим на каждом конечном носителе  $K \in T(\Omega)$  линейные лагранжевы базисные функции

$$\begin{aligned} \varphi_j(\mathbf{x}) &= (\varphi_j^x(\mathbf{x}), \varphi_j^y(\mathbf{x}), \varphi_j^z(\mathbf{x}))^T, \quad \mathbf{x} = (x, y, z)^T \\ \begin{pmatrix} \varphi_1^p(x, y, z) \\ \varphi_2^p(x, y, z) \\ \varphi_3^p(x, y, z) \\ \varphi_4^p(x, y, z) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \\ y_1 & y_2 & y_3 & y_4 \\ z_1 & z_2 & z_3 & z_4 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad \forall p \in \{x, y, z\}, \end{aligned} \quad (3.68)$$

где  $(x_k, y_k, z_k) \in R^3, \forall k = \overline{1,4}$  – координаты вершин тетраэдра  $K$ . Таким образом, для решения задачи упругой деформации, стандартное подпространство локальных функций формы имеет следующий вид:

$$\Phi_K^{Regular} = span\{\varphi_j(\mathbf{x}), j = \overline{1,4}\}. \quad (3.69)$$

Локальные обогащающие подпространства  $\Phi_K^{Extended}$  строятся в идеологии метода разбиения единицы [38] и для конечных элементов из  $T^{XFEM}(\Omega)$  и  $T^{XFEM-FEM}(\Omega)$ , то есть для тех тетраэдров через которые проходят внутренние границы и соседних к ним. Для конечных элементов без особенностей ( $T^{FEM}(\Omega)$ ) пространство  $\Phi_K^{Extended}$  доопределяется нулем. Такой подход позволяет уменьшить размерность дискретной задачи.

Для рассматриваемой задачи упругой деформации пористо-трещиноватого твердого тела (2.17) возможны следующие модификации локальных обогащающих подпространств в зависимости от геометрических и физических свойств неоднородностей:

- 1) учет разрывности решения на границе поры, заполненной воздухом [79]:

$$\begin{aligned} \gamma_j^{pore}(\mathbf{x}) &= \varphi_j(\mathbf{x}) \cdot H^{pore}(\mathbf{x}), j = \overline{1,4}, \\ H^{pore}(\mathbf{x}) &= \begin{cases} 1, \mathbf{x} \in \Omega^+ \\ 0, \mathbf{x} \in \Omega^- \end{cases}, \end{aligned} \quad (3.70)$$

где  $H(\mathbf{x})$  – функция Хэвисайда, определенная на  $\Omega$ ,

$\Omega^-$  – область внутри пор,

$\Omega^+$  – область вне пор (Рисунок 3.12.а).

- 2) учет разрывности решения в трещине, заполненной воздухом [79]:

$$\begin{aligned} \gamma_j^{crack}(\mathbf{x}) &= \varphi_j(\mathbf{x}) \cdot H^{crack}(\mathbf{x}), j = \overline{1,4}, \\ H^{crack}(\mathbf{x}) &= \begin{cases} 1, \mathbf{x} \in \Omega^+ \\ -1, \mathbf{x} \in \Omega^- \end{cases}, \end{aligned} \quad (3.71)$$

где  $\Omega^-$  и  $\Omega^+$  – части области  $\Omega$ , расположенные с разных сторон поверхности, образующей трещину ( $\Omega = \Omega^- \cup \Omega^+$ ) (Рисунок 3.12.б).

3) учет сингулярности решения вблизи фронта трещины [79]:

$$\gamma_{ij}^{front}(\mathbf{x}) = \Phi_j(\mathbf{x}) \cdot f_i(\mathbf{x}), i, j = \overline{1,4}, \quad (3.72)$$

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{x}) &= \sqrt{r} \sin(Q/2), \\ f_2(\mathbf{x}) &= \sqrt{r} \cos(Q/2), \\ f_3(\mathbf{x}) &= \sqrt{r} \sin(Q/2) \sin(Q), \\ f_4(\mathbf{x}) &= \sqrt{r} \cos(Q/2) \sin(Q), \end{aligned} \quad (3.73)$$

где  $r$  – расстояние от точки  $\mathbf{x}$  до фронта трещины,

$Q$  – угол между плоскостью, проходящей через точку  $\mathbf{x}$  и фронт трещины, и плоскостью, соответствующей основному направлению трещины (Рисунок 3.13.а),

$f_i(\mathbf{x}), i = \overline{1,4}$ , – собственные функции оператора Лапласа [181].

Для учета сингулярности решения вблизи фронта трещины также в может применяться векторный подход, предложенный в работе [182], однако исследования показали, что в таком случае существенно ухудшаются свойства сходимости, получаемой СЛАУ [79].

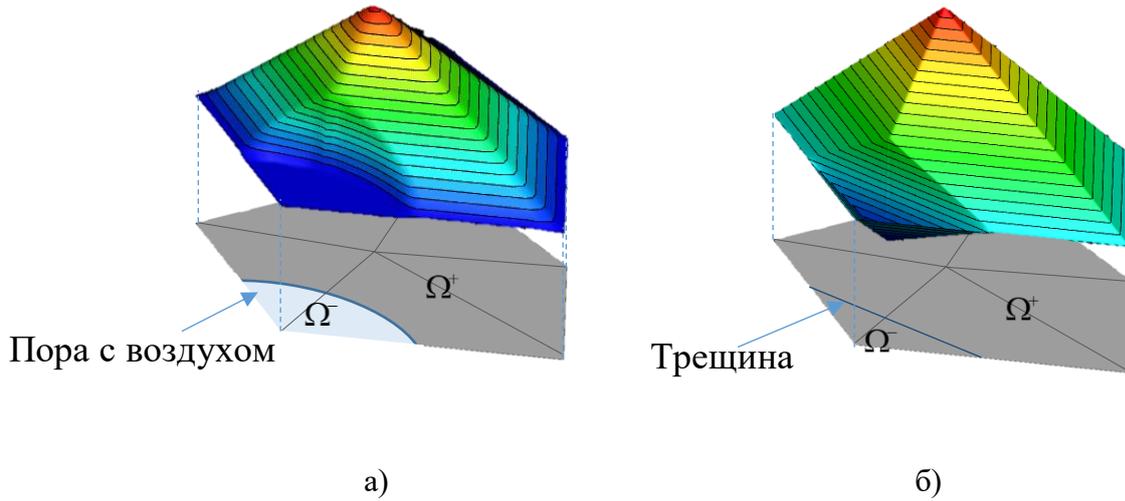


Рисунок 3.12 – Примеры обогащающих функций для решения задачи упругой деформации (а – сечение обогащающей функции для учёта границы поры с воздухом (3.70); б – сечение обогащающей функции для учёта трещины (3.71))

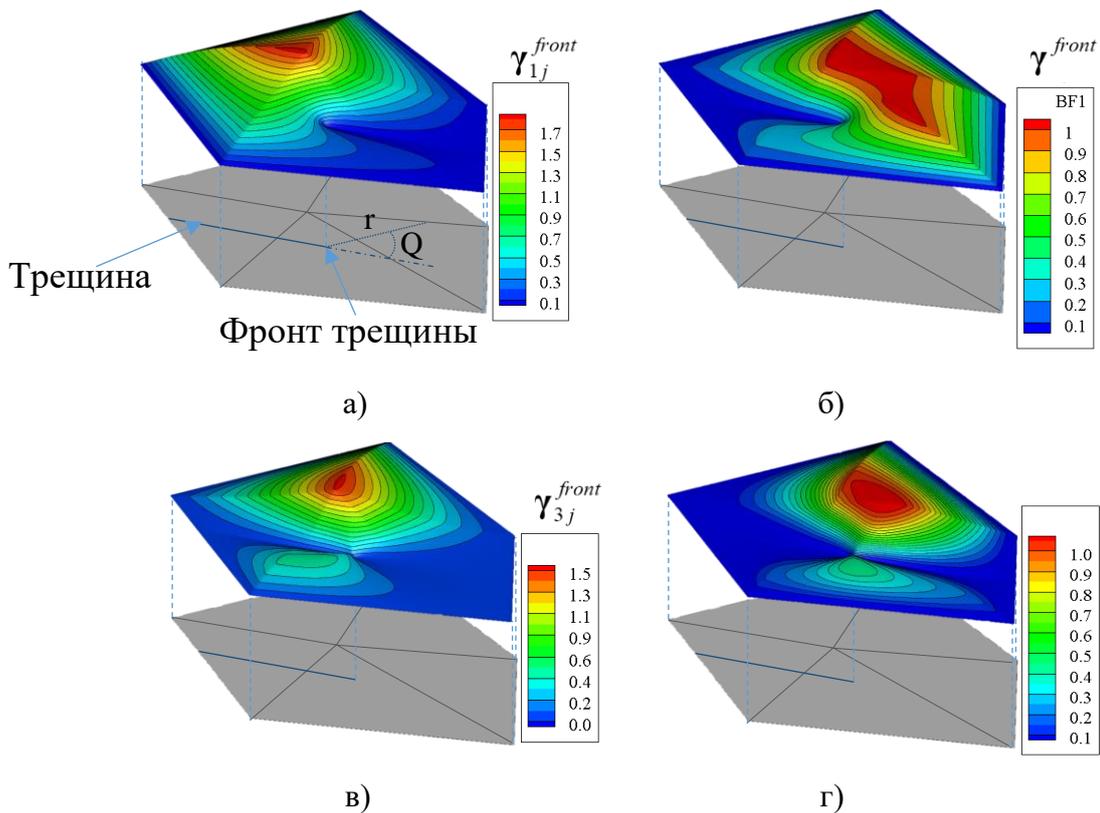


Рисунок 3.13 – Примеры обогащающих функций для решения задачи упругой деформации (а, б, в, г – сечения (перпендикулярны фронту трещины) обогащающих функций для учёта сингулярности решения вблизи фронта трещины (3.72), (3.73))

Таким образом, локальное обогащающее подпространство для элементов из  $\Gamma^{XFEM}(\Omega)$  имеет следующий общий вид:

$$\begin{aligned} \Phi_K^{Extended} = & span\{\gamma_j^{pore}(\mathbf{x}), j = \overline{1,4}\} \oplus span\{\gamma_j^{pore}(\mathbf{x}), j = \overline{1,4}\} \\ & \oplus span\{\gamma_{ij}^{front}(\mathbf{x}), i, j = \overline{1,4}\}. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Для согласования функций формы, определенных на множествах элементов из  $\Gamma^{FEM}(\Omega)$  и  $\Gamma^{XFEM}(\Omega)$ , обогащающие функции (3.70) – (3.73) будем определять только для тех узлов  $j \in K \in \Gamma^{XFEM-FEM}(\Omega)$ , которые принадлежат элементам из  $\Gamma^{XFEM}(\Omega)$  (на рисунке 3.11.а такие узлы отмечены точками). Такой подход обеспечивает геометрическое согласование функций формы и не требует введения дополнительных стабилизаторов в вариационную постановку.

### 3.3.3 Дискретная вариационная постановка

С учетом построенных на  $T(\Omega)$  конечноэлементных подпространств  $\Phi^{Regular}(T(\Omega)) = \bigcup_{K \in T(\Omega)} \Phi_K^{Regular}$  и  $\Phi^{Extended}(T(\Omega)) = \bigcup_{K \in T(\Omega)} \Phi_K^{Extended}$ , являющихся подпространствами гильбертового пространства (3.7), дискретная вариационная постановка для задачи (3.1) имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U^{H,XFEM}(\mathbf{x}) \in \Phi^{Regular}(T(\Omega)) \oplus \Phi^{Extended}(T(\Omega)) + U_D(\Gamma_D) \text{ такое, что} \\ \int_{\Omega} \nabla U^{H,XFEM}(\mathbf{x}) \cdot A^H(\mathbf{x}) \cdot \nabla v^H(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma_N} G_N v^H(\mathbf{x}) d\Gamma + \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v^H(\mathbf{x}) d\Omega, \\ \forall v^H(\mathbf{x}) \in \Phi^{Regular}(T(\Omega)) \oplus \Phi^{Extended}(T(\Omega)). \end{array} \right. \quad (3.75)$$

### 3.3.4 Ассемблирование системы линейных алгебраических уравнений

Система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для дискретной вариационной постановки (3.75) в матричной форме

$$\mathbf{M}\mathbf{q}^H = \mathbf{b}, \quad (3.76)$$

где  $\mathbf{q}^H$  – веса разложения  $U^{H,XFEM}(x)$  по соответствующим функциям формы  $\zeta_j^{XFEM}$  (при решении задачи упругой деформации твердого тела (2.17) функциями формы

являются  $\zeta_j = \left\{ \Phi_j; \gamma_j^{pore}; \gamma_j^{crack}; \gamma_{ij}^{front}, i = \overline{1,4} \right\}$  и зависят от конфигурации области моделирования (3.68), (3.70) – (3.73)),

$\mathbf{M}$  и  $\mathbf{b}$  – глобальная матрица и вектор правой части СЛАУ, получаемые ассемблированием локальных матриц  $\mathbf{M}^{K,local}$  и правых частей  $\mathbf{b}^{K,local}$  конечных элементов  $K \in \Gamma(\Omega)$ :

$$\mathbf{M}_{ij}^{K,local} = \int_K \nabla \zeta_i^{XFEM}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{A}^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \zeta_j^{XFEM}(\mathbf{x}) dK, \quad (3.77)$$

$$\mathbf{b}_j^{K,local} = \int_K F(\mathbf{x}) \zeta_j^{XFEM}(\mathbf{x}) dK - \int_{\Gamma_N} G_N(\mathbf{x}) \zeta_j^{XFEM}(\mathbf{x}) d\Gamma. \quad (3.78)$$

В общем случае функции формы  $\zeta_j^{XFEM}$  являются не линейными и разрывными, что делает невозможным применение классических способов вычисления интегралов (3.77) и (3.78). В каждом из конечных элементов  $K \in \Gamma^{XFEM}(\Omega)$ , содержащих неоднородности, построим дополнительную тетраэдральное подразбиение  $T(K)$  с учетом внутренней геометрической структуры элемента (Рисунок 3.14 и Рисунок 3.15). При этом выполняется линеаризация поверхностей неоднородностей (Рисунок 3.14). Это позволяет существенно снизить вычислительные затраты на построение подсеток интегрирования и их обработки при сохранении требуемой точности решения.

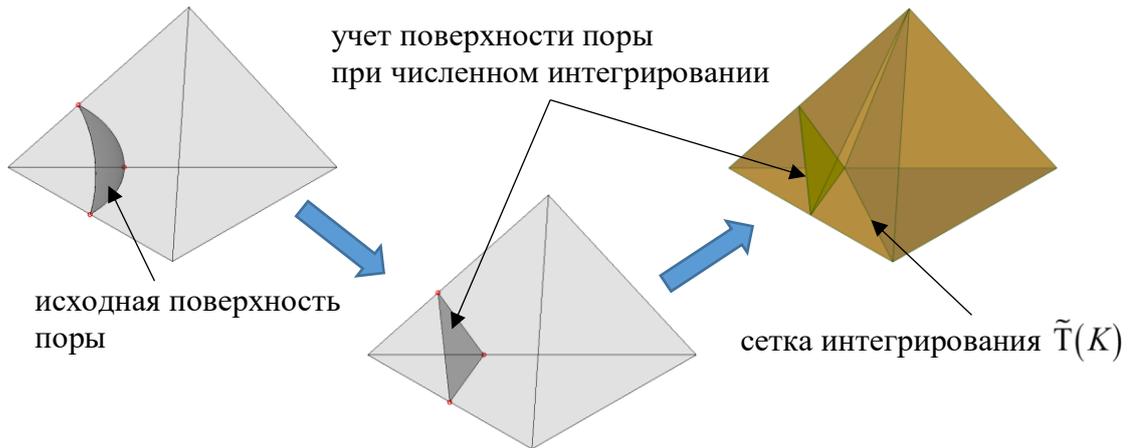


Рисунок 3.14 – Пример учета поверхности поры, пересекающей конечный элемент  $K$ , при построении функций формы и вычислении локальных матриц

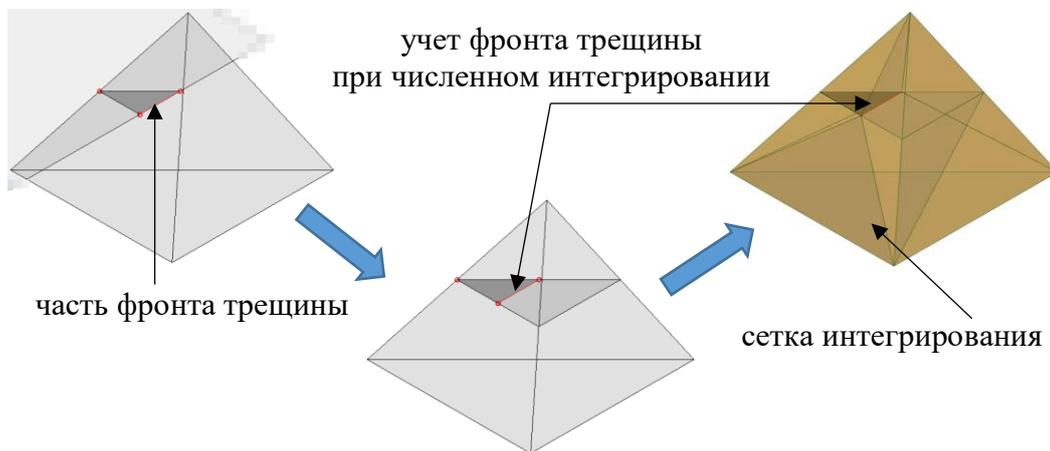


Рисунок 3.15 – Пример учета фронта трещины, пересекающего конечный элемент  $K$ , при построении функций формы и вычислении локальных матриц

Таким образом, локальные матрица (3.77) и вектор (3.78) вычисляется следующим образом:

$$\mathbf{M}_{ij}^{K,local} = \sum_{k \in \mathbb{T}(K)_k} \int \nabla \zeta_i^{XFEM}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{A}^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \zeta_j^{XFEM}(\mathbf{x}) dk, \quad (3.79)$$

$$\mathbf{b}_j^{K,local} = \sum_{k \in \mathbb{T}(K)_k} \int F(\mathbf{x}) \zeta_j^{XFEM}(\mathbf{x}) dk - \sum_{k \in \mathbb{T}(K); k \cap \Gamma_N \neq \emptyset} \int G_N(\mathbf{x}) \zeta_j^{XFEM}(\mathbf{x}) dk. \quad (3.80)$$

### 3.3.5 Верификация вычислительных схем расширенного метода конечных элементов

Для верификации разработанного программного комплекса рассмотрим задачу упругой деформации твердого тела (2.17) (модуль Юнга равен  $3,0 \cdot 10^7$  Па, коэффициент Пуассона 0,3) со сферической порой, заполненной воздухом (трехмерная задача Кирша [183]). Образцом является куб с ребром 200 мм. В центре образца расположена сферическая пора с радиусом 25 мм. Для удобства расположим начало декартовых координат в центре сферы. Образец растягивается в противоположные стороны вдоль оси  $Oz$  с силой  $\mathbf{f} = 1$  Н/м<sup>2</sup>. Тогда ZZ-компонента тензора напряжений при  $Z = 0$  и  $Y = 0$  имеет вид [183]:

$$\sigma_{zz}|_{z=0 \cap y=0} = \sigma_0 \left( 1 + \frac{4-5\nu}{2(7-5\nu)} \left( \frac{a}{r} \right)^3 + \frac{9}{2(7-5\nu)} \left( \frac{a}{r} \right)^5 \right), \quad (3.81)$$

где  $r$  – расстояние до центра сферы,

$a$  – ребро образца,

$\nu$  – коэффициент Пуассона.

Вычислительный эксперимент проводился на нескольких адаптивных тетраэдральных разбиениях (Рисунок 3.16). Размерности рассмотренных конечноэлементных сеток приведены в таблице 3.4. Результаты вычислений представлены на рисунках 3.17, 3.18 и в таблице 3.4. Исследования показали, что для вычислительных схем, реализующих XFEM, на решение задачи требуется меньшее время, чем для FEM при сопоставимой точности. Кроме того, сеточные разбиения для XFEM имеют достаточно простую конфигурацию и могут быть построены быстрее, чем классические адаптивные сетки, учитывающие все внутренние геометрические особенности области моделирования, необходимые для FEM.

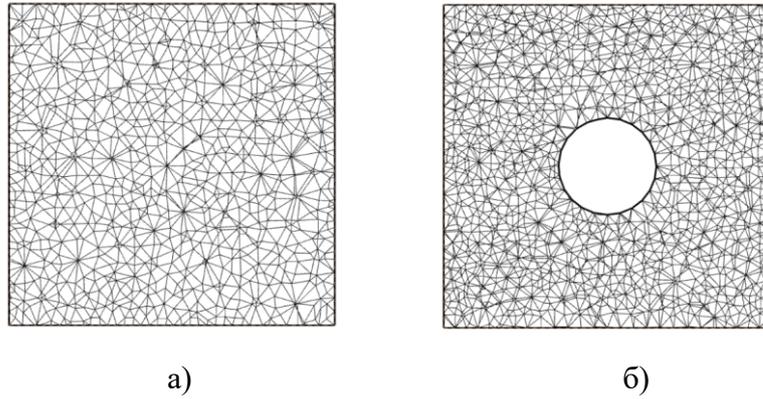
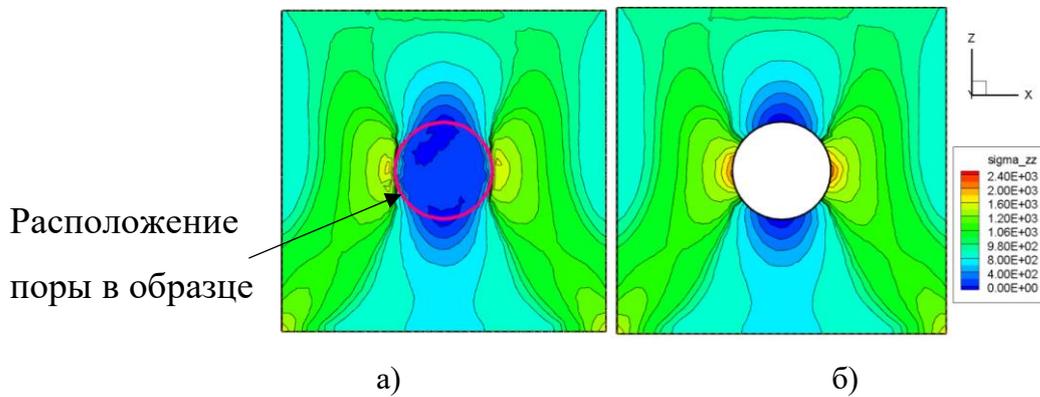


Рисунок 3.16 – Сечение конечноэлементной тетраэдральной сетки, проходящее через центр поры (а – сетка для XFEM; б – сетка для FEM)



Расположение  
поры в образце

Рисунок 3.17 – Распределение  $ZZ$ -компоненты тензора напряжений в сечении, проходящем через центр поры (а – решение, полученное XFEM; б – решение, полученное FEM)

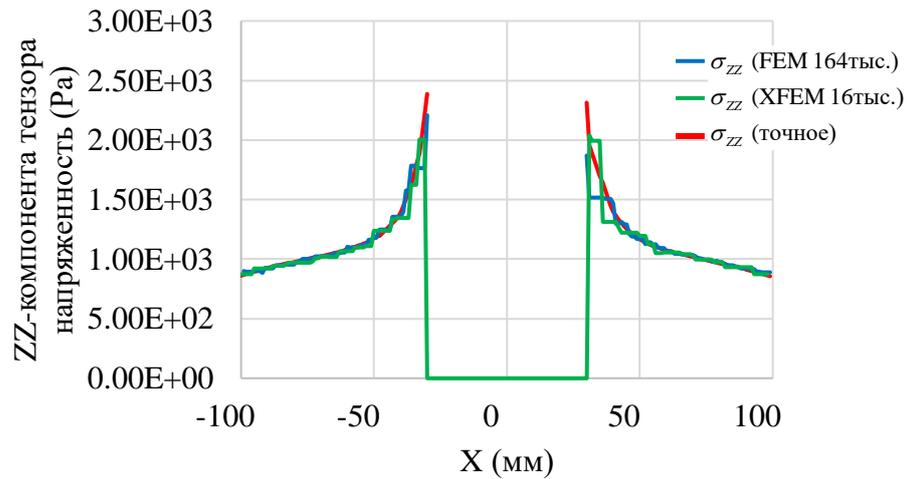


Рисунок 3.18 – Распределение ZZ-компоненты тензора напряжений по линии  $Z=0$ ,  $Y=0$ ,  $X=[-100; 100]$

Таблица 3.4. – Сравнение точности решения задачи упругой деформации твердого тела с порой методами XFEM и FEM

Метод	Количество элементов в сетке	Размерность СЛАУ	Погрешность ( $L_2$ )	Время (с)	
				Сборка	Решение СЛАУ
FEM	21224	13809	8,34E-3	11,9	3,1
	168293	96975	7,51E-3	103,6	21,8
XFEM	907	879	9,89E-3	0,62	0,02
	2556	2214	8,98E-3	1,68	0,08
	17407	12351	8,24E-3	9,73	0,92

### 3.4 Модифицированные многомасштабные методы

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 две такие адаптации 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-HMM).

### 3.4.1 Разрывный многомасштабный метод конечных элементов

В некоторых случаях гетерогенный многомасштабный метод для полиэдральных носителей в классической постановке (п. 3.2) не может быть применим из-за необходимости точного учета поведения решения на межэлементных границах (например, для выполнения численного моделирования процессов в средах с небольшим числом протяженных включений-трещин). Для таких задач предлагается разрывный многомасштабный метод конечных элементов на полиэдральных носителях (DG-MsFEM). Данный метод является обобщением идеологии классического многомасштабного метода конечных элементов (п. 3.1) на случай макроэлементов свободной формы.

В DG-MsFEM аналогично уже рассмотренным методам решение строится на неполиномиальных многомасштабных функциях формы, определенных на полиэдральных носителях, однако для обеспечения условий непрерывности решения на межэлементных границах предлагается использовать на макроуровне разрывный метод Галёркина в форме "внутреннего штрафа" или IP - постановки<sup>5</sup> [95]. Это позволяет использовать несогласованные микроразбиения на соседних элементах. Поскольку в такой постановке решение выполняется локально на каждом макроэлементе, то построенные многомасштабные функции формы удовлетворяют следующим свойствам (что соответствует определению функций формы Partition of Unity [38]):

$$\sum_i^P \phi_i^{K^P, DG-MsFEM}(\mathbf{x}) \equiv 1 \quad \forall \mathbf{x} \in K^P, \quad (3.82)$$

$$\|\phi_i^{K^P, DG-MsFEM}(\mathbf{x})\|_{L(K^P)} \leq C_1 \quad \forall i = \overline{1, P}, \quad C_1 = Const, \quad (3.83)$$

$$\|\nabla \phi_i^{K^P, DG-MsFEM}(\mathbf{x})\|_{L(K^P)} \leq C_2 \quad \forall i = \overline{1, P}, \quad C_2 = Const, \quad (3.84)$$

где  $\phi_i^{K^P, DG-MsFEM}$  – локальная неполиномиальная многомасштабная функция формы, определенная на конечном элементе  $K^P$ .

<sup>5</sup> Постановка "Internal Penalty" не только является адаптируемой для решения целого класса сингулярно - возмущенных задач, но и устойчивой вычислительной схемой при использовании линейных базисных функций на носителе.

### 3.4.1.1 Вариационная постановка

Перейдем от дифференциального уравнения второго порядка (3.1) к системе уравнений первого порядка:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{Q}(\mathbf{x}) = A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla U(\mathbf{x}) \text{ на } \Omega, \\ -\nabla \cdot \mathbf{Q}(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x}) \text{ на } \Omega, \\ U(\mathbf{x}) = U_D \text{ на } \Gamma_D, \\ \frac{\partial A^\varepsilon(\mathbf{x}) U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = G_N(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_N, \\ U^+(\mathbf{x}) = U^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \\ \frac{\partial A^\varepsilon(\mathbf{x}) U^+(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial A^\varepsilon(\mathbf{x}) U^-(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \text{ на } \Gamma_{in}, \end{array} \right. \quad (3.85)$$

где  $A^\varepsilon(\mathbf{x})$  – скалярный (например, теплопроводность или электропроводность) или тензорный (например, тензор Гука четвертого ранга) коэффициент среды,

$\varepsilon = \max_{i=1..M} \dim(\Omega_i)$  – коэффициент мелкости включений,

$\mathbf{n}$  – внешняя нормаль к границе,

$\Gamma_D$  и  $\Gamma_N$  – внешние границы области  $\Omega$ , на которых определены условия Дирихле и Неймана соответственно,

$\Gamma_{in}$  – внутренние границы области  $\Omega$ ,

$\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{in}$  – границы области моделирования.

Рассмотрим согласованное адаптивное нерегулярное разбиение области  $\Pi^H(\Omega)$  на полиэдры  $K^P$ , которые являются макроэлементами. В общем случае DG-MsFEM позволяет использовать несогласованные полиэдральные разбиения, однако это значительно усложняет технологию разработки и реализации программного комплекса. Пусть  $\partial K^P$  – 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  $\Omega$ .

С учетом введенных ранее Гильбертовых подпространств (3.6) и (3.7), вариационная постановка для задачи (3.85) для DG-MsFEM имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U(\mathbf{x}) \in V_0(\Omega) + U_D(\Gamma_D) \text{ и } \mathbf{Q}(\mathbf{x}) \in \mathbf{V}_0(\Omega) \text{ такую, что} \\ \int_{\Omega} \mathbf{Q}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{x}) d\Omega = - \int_{\Omega} A^\varepsilon(\mathbf{x}) U(\mathbf{x}) \nabla \cdot \mathbf{s}(\mathbf{x}) d\Omega + \sum_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \int_{\partial K^p} \hat{u}_K \mathbf{n}_K \cdot \mathbf{s}(\mathbf{x}) d\Gamma, \\ \int_{\Omega} \mathbf{Q}(\mathbf{x}) \cdot \nabla v(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Omega + \sum_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \int_{\partial K^p} \hat{\mathbf{q}}_K \cdot \mathbf{n}_K v(\mathbf{x}) d\Gamma, \\ \forall v(\mathbf{x}) \in V_0(\Omega), \forall \mathbf{s}(\mathbf{x}) \in \mathbf{V}_0(\Omega), \end{array} \right. \quad (3.86)$$

где  $\hat{u}_K$  и  $\hat{\mathbf{q}}_K$  – численные потоки, определяемые по границам макроэлементов;

$\mathbf{V}_0(\Omega)$  – векторное Гильбертово подпространство:

$$\mathbf{V}(\Omega) = \left\{ \mathbf{u}, \mathbf{v} \in [L^2(\Omega)]^3 : (\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} d\Omega, \|u\|^2 = \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} d\Omega \right\}, \quad (3.87)$$

$$\mathbf{V}_0(\Omega) = \{ \mathbf{u} \in \mathbf{V}(\Omega) : \mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ на } \partial\Omega \}, \quad (3.88)$$

#### 3.4.1.2 Дискретная вариационная постановка

На полиэдральном разбиении  $\Pi^H(\Omega)$  введем дискретные подпространства тестовых функций [95]:

$$V^H(\Pi^H(\Omega)) = \{ v \in L^2(\Omega) \mid v|_{\partial K^p} \in P(K^p), \forall K^p \in \Pi^H(\Omega) \} \in W_2^1(K^p), \quad (3.89)$$

$$\mathbf{V}^H(\Pi^H(\Omega)) = \{ \mathbf{s} \in [L^2(\Omega)]^3 \mid \mathbf{s}|_{\partial K^p} \in \mathbf{P}(K^p), \forall K^p \in \Pi^H(\Omega) \} \in W_2^1(K^p), \quad (3.90)$$

где  $P(K^p)$  и  $\mathbf{P}(K^p)$  – в общем случае неполиномиальные функции, определенные на  $\partial K^p$ .

С учетом введенных подпространств (3.89) и (3.90) макроэлементом в DG-MsFEM будем называть *тройку*  $\{K^p, \Phi^{DG-MsFEM}, \Sigma^{DG-MsFEM}\}$ , где  $K^p \in \Pi^H(\Omega)$  – геометрический элемент (полиэдр) с  $p$  вершинами,

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

подпространство локальных многомасштабных неполиномиальных функций

формы<sup>6</sup> (Рисунок 3.19), определенных на  $K^p$  и представимых в виде линейной комбинации по базисным функциям, носителями которых является тетраэдральное адаптивное неравномерное микромасштабное разбиение полиэдра  $K^p$ ,  $\dim(\Phi^{DG-MsFEM}(K^p)) = p$ ,  $\Sigma^{DG-MsFEM}(K^p)$  – подпространство степеней свободы, сопряженное к  $\Phi^{DG-MsFEM}(K^p)$ ,  $\dim(\Sigma^{DG-MsFEM}(K^p)) = p$ .

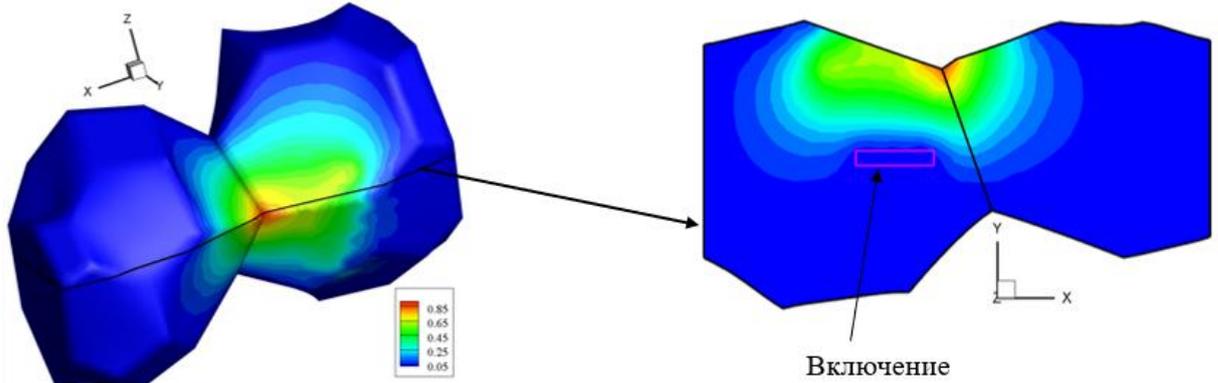


Рисунок 3.19 – Пример локальных многомасштабных неполиномиальных функций формы, носителями которых являются два соседних полиэдра

Для эллиптической краевой задачи (3.85) решение глобальной многомасштабной задачи может быть представлено в виде линейной комбинации неполиномиальных многомасштабных функций формы:

$$U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x}) = \sum_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \sum_{i=1}^p b_i^{K^p} \phi_i^{DG-MsFEM,K}(\mathbf{x}), \quad (3.91)$$

где  $\Pi^H(\Omega)$  – полиэдральное адаптивное согласованное разбиение  $\Omega$ ,

$p$  – число степеней свободы макроэлемента  $K^p$ ,

$\phi_i^{DG-MsFEM,K}(\mathbf{x}) \in V^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Omega)$  – локальная неполиномиальная многомасштабная функция формы, определенная на  $K^p$ .

Таким образом, сформулируем дискретную вариационную постановку для задачи (3.85):

<sup>6</sup> Технология построения неполиномиальных многомасштабных функций формы в DG-MsFEM аналогична рассмотренным выше для MsFEM и FE-HMM.

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{найти } U^{H,DG-MSFEM}(\mathbf{x}) \in V^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Omega) + U_D(\Gamma_D) \text{ и} \\
 \mathbf{Q}^H(\mathbf{x}) \in \mathbf{V}^H(\Pi^H(\Omega)) \text{ такие, что} \\
 \int_{\Omega} \mathbf{Q}^H(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{x}) d\Omega = - \int_{\Omega} A^\varepsilon(\mathbf{x}) U^{H,DG-MSFEM}(\mathbf{x}) \nabla \cdot \mathbf{s}(\mathbf{x}) d\Omega + \\
 \quad + \sum_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \int_{\partial K^p} \hat{u}_K \mathbf{n}_K \cdot \mathbf{s}(\mathbf{x}) d\Gamma, \\
 \int_{\Omega} \mathbf{Q}^H(\mathbf{x}) \cdot \nabla v(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Omega + \sum_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \int_{\partial K^p} \hat{\mathbf{q}}_K \cdot \mathbf{n}_K v(\mathbf{x}) d\Gamma, \\
 \forall v(\mathbf{x}) \in V^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Omega), \forall \mathbf{s}(\mathbf{x}) \in \mathbf{V}^H(\Pi^H(\Omega)).
 \end{array} \right. \quad (3.92)$$

Рассмотрим элемент  $K_1 \in \Pi^H(\Omega)$  и соседний к нему  $K_2 \in \Pi^H(\Omega)$  (соседними элементами здесь и далее будем считать элементы, содержащие хотя бы одну общую грань в трехмерном случае или хотя бы одно общее ребро для двумерной ситуации) и введем обозначения так, как показано на рисунке 3.20. При этом предполагается, что внешняя нормаль элемента  $K_1$  и внутренняя нормаль элемента  $K_2$  к границе  $E_{12}$  совпадают и равны  $\mathbf{n}_{12}$ . И наоборот, внутренняя нормаль  $K_1$  и внешняя нормаль  $K_2$  к границе  $E_{1,2} \in \Gamma_0$  равны  $\mathbf{n}_{21}$ .

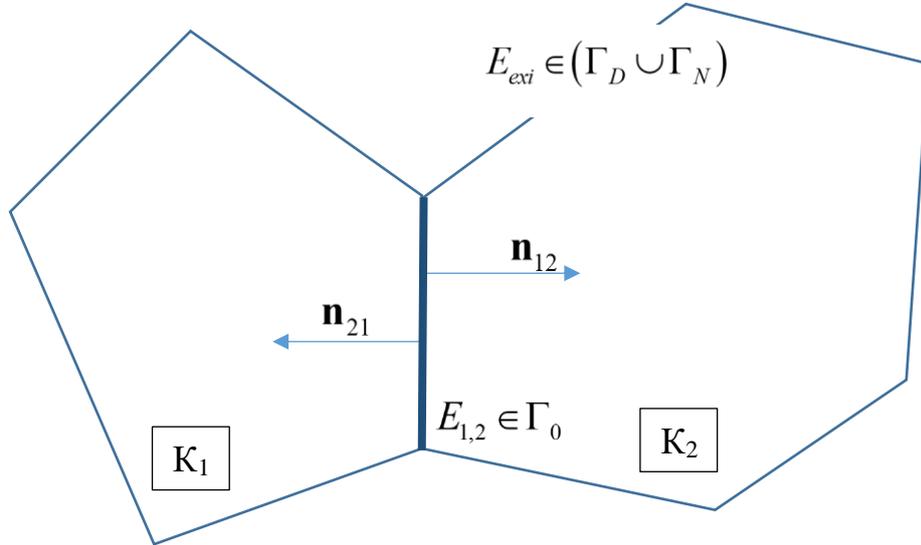


Рисунок 3.20 – Обозначения на общей границе  $E_{12}$  двух полиэдральных элементов

Введем операторы скачка и среднего на границе  $E_{12}$  для тестовых и пробных функций [184]:

$$\{e\} = \frac{1}{2}(e_{K_1} + e_{K_2}) \text{ на } E_{1,2}, \quad (3.93)$$

$$\{e\} = e_{K_1} \text{ на } E_{ext}, \quad (3.94)$$

$$[e] = e_{K_1} n_{12} + e_{K_2} n_{21} \text{ на } E_{1,2}, \quad (3.95)$$

$$[e] = e_{K_1} n_1 \text{ на } E_{ext}. \quad (3.96)$$

С учетом введенных обозначений для скачка и среднего (3.93) – (3.96) и по свойству перехода от суммы потоков по границам макроэлементов к интегралам от скачков и средних [95], для DG-MsFEM общая дискретная вариационная постановка для задачи (3.85) примет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x}) \in V^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Omega) + U_D(\Gamma_D) \text{ такое, что} \\ \int_{\Omega} A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x}) \nabla v(\mathbf{x}) d\Omega + \\ + \int_{\Gamma} A^\varepsilon(\mathbf{x}) \left( [u - U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})] \cdot \{\nabla v(\mathbf{x})\} - \{\mathbf{q}\} \cdot [v(\mathbf{x})] \right) d\Gamma + \\ + \int_{\Gamma_0} A^\varepsilon(\mathbf{x}) \left( \{u - U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})\} \cdot [\nabla v(\mathbf{x})] - [\mathbf{q}] \cdot \{v(\mathbf{x})\} \right) d\Gamma = \\ = \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Omega, \\ \forall v^H \in V^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Omega), \mathbf{x} \in \Omega, \end{array} \right. \quad (3.97)$$

Подставим в (3.97) значения численных потоков  $u$  и  $\mathbf{q}$ , которые отвечают за поведение решения на границах макроэлементов, определяются в соответствии с IP-постановкой [95]:

$$u(\mathbf{x}) = \begin{cases} \{U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})\} + \mathbf{n} \cdot [U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})] & \text{на } \Gamma_0, \\ \mathbf{n} \cdot [U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x}) - U_D] & \text{на } \Gamma_D, \\ U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x}) & \text{на } \Gamma_N, \end{cases} \quad (3.98)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \{\nabla U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})\} - \mu [U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})] & \text{на } \Gamma_0, \\ \nabla U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x}) - \mu [U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x}) - U_D] & \text{на } \Gamma_D, \\ (A^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} G_N(\mathbf{x}) \mathbf{n} & \text{на } \Gamma_N, \end{cases} \quad (3.99)$$

где  $\mu = Const$  – параметр «штрафа», определяемый экспериментально.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x}) \in V^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Omega) + U_D(\Gamma_D) \text{ такое, что} \\ \int_{\Omega} A^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x}) \cdot \nabla v(\mathbf{x}) d\Omega + \\ + \int_{\Gamma_0} A^\varepsilon(\mathbf{x}) \left( [U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})] \cdot \{\nabla v(\mathbf{x})\} - \{\nabla U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})\} \cdot [v(\mathbf{x})] \right) d\Gamma + \\ + \int_{\Gamma} A^\varepsilon(\mathbf{x}) \mu [U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})] \cdot \{v(\mathbf{x})\} d\Gamma - \\ - \int_{\Gamma_D} A^\varepsilon(\mathbf{x}) (U_D \mathbf{n} \cdot \nabla v(\mathbf{x})) d\Gamma - \int_{\Gamma_N} G_N(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Gamma = \\ = \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Omega, \\ \forall v^H \in V^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus V_0^h(\Omega), \mathbf{x} \in \Omega. \end{array} \right. \quad (3.100)$$

### 3.4.1.3 Ассемблирование системы линейных алгебраических уравнений

Система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для дискретной вариационной постановки (3.100) в матричной форме

$$\mathbf{M} \mathbf{q}^H = \mathbf{b}, \quad (3.101)$$

где  $\mathbf{q}^H$  – веса разложения  $U^{H,DG-MsFEM}(\mathbf{x})$  по многомасштабным неполиномиальным функциям формы  $\phi_i^{DG-MsFEM,K}(\mathbf{x})$ ,

$\mathbf{M}$  и  $\mathbf{b}$  – глобальная матрица и вектор правой части СЛАУ, получаемые ассемблированием локальных матриц  $\mathbf{M}^{K,local}$  и правых частей  $\mathbf{b}^{K,local}$  макроэлементов  $K^p \in \Pi^H(\Omega)$ .

В DG-MsFEM глобальная матрица и вектор имеют ярко выраженную блочную структуру. Например, для двух соседних макроэлементов  $A^a \in \Pi^H(\Omega)$  и  $B^b \in \Pi^H(\Omega)$  система (3.101) принимает имеет следующий вид:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}^{A,local} & \mathbf{M}^{A \rightarrow B,local} \\ \mathbf{M}^{B \rightarrow A,local} & \mathbf{M}^{B,local} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \mathbf{q}^A \\ \mathbf{q}^B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}^A \\ \mathbf{b}^B \end{bmatrix}, \quad (3.102)$$

где  $\mathbf{M}^{A \rightarrow B, local}$  и  $\mathbf{M}^{B \rightarrow A, local}$  – матрицы связи между макроэлементами  $A^a \in \Pi^H(\Omega)$  и  $B^b \in \Pi^H(\Omega)$ , причем в рассматриваемой постановке  $\mathbf{M}^{A \rightarrow B, local} \neq \mathbf{M}^{B \rightarrow A, local}$ , что приводит к несимметричности глобальной матрицы СЛАУ  $\mathbf{M}$ .

С учетом неполиномиальных многомасштабных функций формы  $\phi_i^{DG-MSFEM, K}(\mathbf{x})$ , определенных на макроэлементах, выпишем выражения<sup>7</sup> для вычисления элементов СЛАУ (3.102):

$$\begin{aligned} [\mathbf{M}^{A, local}]_{i, j} &= \int_A A^\varepsilon \nabla \phi_j^A \cdot \nabla \phi_i^A dA + \\ &+ \int_{\partial A \setminus \partial \Omega} A^\varepsilon \left( \phi_j^A \nabla \phi_i^A \cdot \mathbf{n} - \frac{1}{2} \nabla \phi_j^A \cdot \mathbf{n} \phi_i^A + \mu \phi_j^A \phi_i^A \right) d\Gamma - \\ &- \int_{\partial A \cap \Gamma_D} A^\varepsilon \left( -\nabla \phi_j^A \cdot \mathbf{n} \phi_i^A + \mu \phi_j^A \phi_i^A \right) d\Gamma, \quad \forall i = \overline{1, a}, \forall j = \overline{1, a}, \end{aligned} \quad (3.103)$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{M}^{A \rightarrow B, local}]_{i, j} &= - \int_{\partial A \setminus \partial \Omega} A^\varepsilon \left( \phi_j^B \nabla \phi_i^A \cdot \mathbf{n} + \frac{1}{2} \nabla \phi_j^B \cdot \mathbf{n} \phi_i^A + \mu \phi_j^B \phi_i^A \right) d\Gamma, \\ \forall i &= \overline{1, a}, \forall j = \overline{1, b}, \end{aligned} \quad (3.104)$$

$$[\mathbf{b}^{A, local}]_i = \int_{\partial A \cap \Gamma_D} A^\varepsilon \left( U_D \nabla \phi_i^A \cdot \mathbf{n} + \mu U_D \phi_i^A \right), \quad \forall i = \overline{1, a}, \quad (3.105)$$

#### 3.4.1.4 Верификация вычислительных схем разрывного многомасштабного метода конечных элементов

Рассмотрим два кубических образца (сторона куба равна 100мм) из песчаника. В первом случае образец является однородным, во втором случае в матрицу образца помещены медные пластинки (размеры  $50 \times 20 \times 2$ мм). Включения-пластинки (10 шт.) распределены в образце случайным образом (Рисунок 3.21). Объемная концентрация включений составляет 2%. Физические свойства матрицы и включений приведены в таблице 3.5.

<sup>7</sup> Для упрощения записи выражений опустим в данном случае некоторые обозначения. А именно, пусть  $\phi_i^{DG-MSFEM, K}(\mathbf{x}) = \phi_i^K$ ,  $A^\varepsilon(\mathbf{x}) = A^\varepsilon$ .

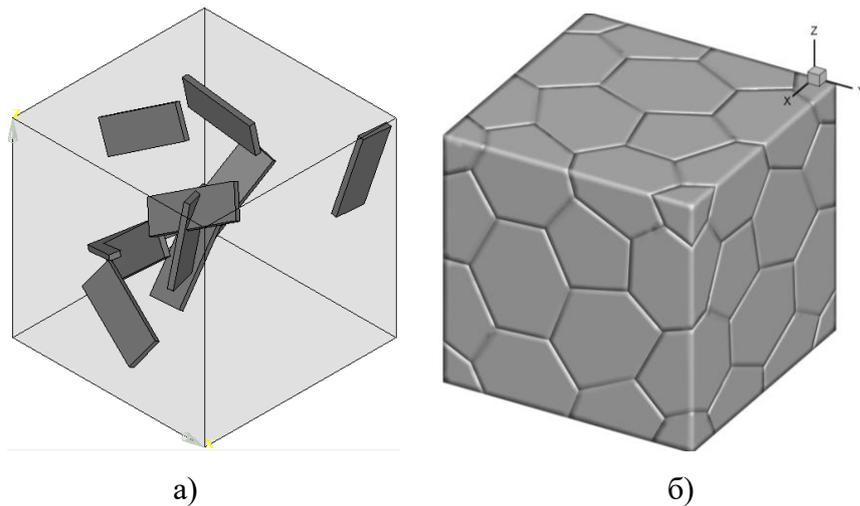


Рисунок 3.21 – Образец с включениями (а) и макроэлементное разбиение области на 50 полиэдров (б)

Таблица 3.5 – Физические свойства песка и меди

Материал	УЭС ( $\rho$ , Ом*м)
Песчаник, пропитанный минерализованной водой	0,3
Медь	$1,8 \cdot 10^8$

Сформулируем в данной области задач распределения скалярного потенциала под действием постоянного тока:

$$-\nabla \cdot \left( (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} \nabla U(\mathbf{x}) \right) = 0 \text{ на } \Omega, \quad (3.106)$$

$$U(\mathbf{x}) = 0 \text{ на } \Gamma_{down}, U(\mathbf{x}) = 1 \text{ на } \Gamma_{up}, \quad (3.107)$$

$$\frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ на } \Gamma_N, \quad (3.108)$$

$$U^+(\mathbf{x}) = U^-(\mathbf{x}) \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (3.109)$$

$$\frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U^+(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial (\rho^\varepsilon(\mathbf{x}))^{-1} U^-(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \text{ на } \Gamma_{in}, \quad (3.110)$$

где  $\Gamma_{up}$  и  $\Gamma_{down}$  – нижнее и верхнее основание куба  $\Omega$ , соответственно, на которых задано условие Дирихле ( $\Gamma_D = \Gamma_{up} \cup \Gamma_{down}$ ),

$\Gamma_N$  – внешние границы области  $\Omega$ , на которых определены условия Дирихле и Неймана соответственно,

$\Gamma_{in}$  – внутренние границы области  $\Omega$ ,

$\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{in}$  – границы области моделирования.

Результаты решения задачи (3.106) методами DG-MsFEM и FE-HMM на макросетке, состоящей из 50 полиэдров, приведённые на рисунках 3.22, 3.23 и в таблице 3.6, показывают хорошее согласование с точным решением и обеспечивают требуемую гладкость решения на границах макроэлементов.

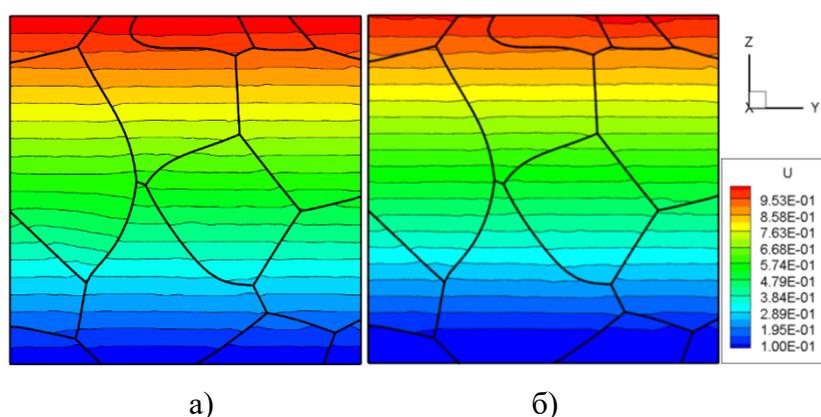


Рисунок 3.22 – Распределение скалярного потенциала в сечении однородной области (а – решение получено FE-HMM; б – решение получено DG-MsFEM)

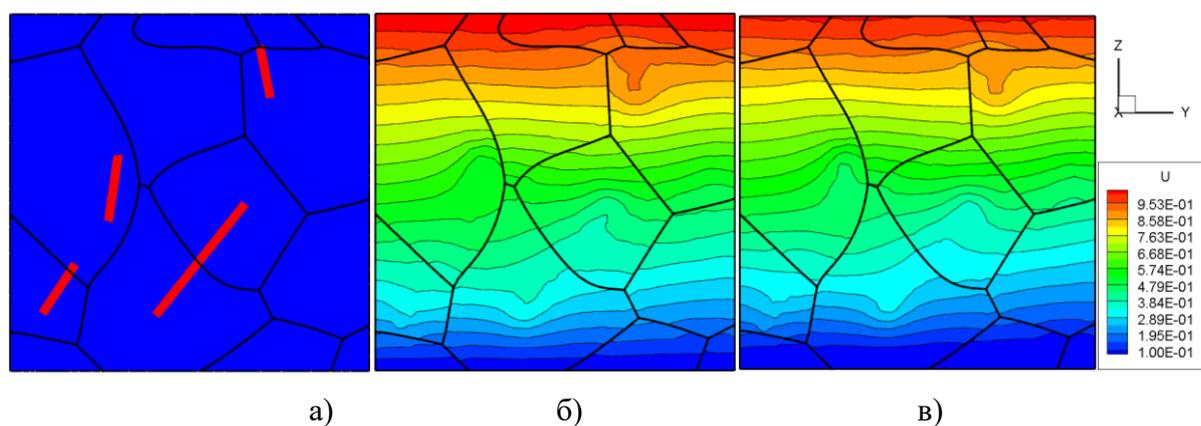


Рисунок 3.23 – Распределение скалярного потенциала в сечении образца с включениями (а – структура образца в сечении; б – решение получено FE-HMM; в – решение получено DG-MsFEM)

Таблица 3.6 – Сравнение полученных решений и точного решения (FEM на мелкой сетки) в узлах грубого разбиения  $\Pi^H(\Omega)$

	$\frac{\ U_{FE-HMM}^H - U\ }{\ U\ }$	$\frac{\ U_{DG-MSFEM}^H - U\ }{\ U\ }$
Однородный образец	5,84E-08	8,71E-08
Образец с включениями-пластинками	6,91E-03	6,60E-03

### 3.4.2 Расширенный гетерогенный многомасштабный метод конечных элементов

Описанный выше расширенный метод конечных элементов (XFEM) успешно применяется для решения задач моделирования с негладким решением, однако, в случае большого числа особенностей (трещин, пор и др.) метод может оказаться неприменим, поскольку существенно возрастет время, требуемое для построения функций формы. Для решения задач в многомасштабных областях предлагается модификация XFEM на базе гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов (FE-HMM).

В отличие от классического гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов, описанного выше в п. 3.2, в XFE-HMM для построения гетерогенных многомасштабных функций формы на полиэдральных носителях предлагается применять расширенный метод конечных элементов, детальное описание которого представлено в п. 3.3.

#### 3.4.2.1 Вариационная постановка

С учетом введенных ранее Гильбертовых подпространств (3.6) и (3.7), вариационная постановка для задачи (3.1) для расширенного гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов имеет вид аналогичный рассмотренной выше вариационной постановке классического гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов (3.41), а именно:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U(\mathbf{x}) \in V_0(\Omega) + U_D(\Gamma_D) \text{ такую, что} \\ \int_{\Omega} \nabla U(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla v(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma_N} G_N(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Gamma + \\ \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) d\Omega, \forall v \in V_0(\Omega) \end{array} \right. \quad (3.111)$$

### 3.4.2.2 Дискретная вариационная постановка

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  $K^p \in \Pi^H(\Omega)$  – геометрический элемент (полиэдр) с  $p$  вершинами,  $\Phi^{XFE-HMM} = \text{span}\{\phi_i^{XFE-HMM,K}(\mathbf{x}), i = \overline{1, p}\}$  – пространство гетерогенных многомасштабных неполиномиальных функций формы, определенных на  $K^p$ ,  $\dim(\Phi^{XFE-HMM}) = p$ ,  $\Sigma^{XFE-HMM}$  – подпространство степеней свободы, сопряженное к  $\Phi^{XFE-HMM}$ ,  $\dim(\Sigma^{XFE-HMM}) = p$ ,  $\Lambda$  – формула численного интегрирования, определенная на  $K^p$  (3.45).

Для определения значений локальных гетерогенных многомасштабных неполиномиальных функций формы  $\phi_i^{XFE-HMM,K}(\mathbf{x})$  в окрестностях точек интегрирования (3.45) построим на каждом из полиэдров тетраэдральное согласованное разбиение  $T^h(K^p)$  в идеологии XFEM (п. 3.3), т.е. без учета особенностей внутренней структуры полиэдров  $K^p$ . Тогда локальные гетерогенные многомасштабные неполиномиальных функций формы могут быть представлены в виде линейной комбинации

$$\phi_i^{XFE-HMM,K}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_K} q_j^K \varphi_j(\mathbf{x}), \quad (3.112)$$

где  $\varphi_j(\mathbf{x})$ ,  $j = \overline{1, n_K}$ , – функции формы конечноэлементного подпространства  $\Phi^{XFEM}(T^h(K^p)) = \Phi^{Regular}(T^h(K^p)) \oplus \Phi^{Extended}(T^h(K^p))$ , построенного в идеологии XFEM (3.67);

$q_j^K$ ,  $j = \overline{1, n_K}$ , – веса разложения, определяемые из решения серии иерархических подзадач (3.46) – (3.48) в каждой из подобластей, сформированных из элементов  $T^h(K^p)$  вокруг точек численного интегрирования (3.45).

С учетом введенных конечноэлементных подпространств дискретная вариационная постановка для задачи (3.1) в расширенном гетерогенном многомасштабном методе конечных элементов:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{найти } U^{H, XFE-HMM}(\mathbf{x}) \in V_0^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus \\ \oplus \left( \bigcup_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \Phi^{XFEM}(T^h(K^p)) \right) + U_D(\Gamma_D) \text{ такое, что} \\ \int_{\Omega} \nabla U^{H, XFE-HMM}(\mathbf{x}) \cdot A^H(\mathbf{x}) \cdot \nabla v^H(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{\Gamma_N} G_N v^H(\mathbf{x}) d\Gamma + \int_{\Omega} F(\mathbf{x}) v^H(\mathbf{x}) d\Omega, \\ \forall v^H(\mathbf{x}) \in V_0^H(\Pi^H(\Omega)) \oplus \left( \bigcup_{K^p \in \Pi^H(\Omega)} \Phi^{XFEM}(T^h(K^p)) \right), \end{array} \right. \quad (3.113)$$

где  $V_0^H(\Pi^H(\Omega))$  – дискретное подпространство гильбертова пространства  $V_0(\Omega)$  (3.7).

### 3.4.2.3 Ассемблирование системы линейных алгебраических уравнений

Система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для дискретной вариационной постановки (3.113) в матричной форме

$$\mathbf{M} \mathbf{q}^H = \mathbf{b}, \quad (3.114)$$

где  $\mathbf{q}^H$  – веса разложения  $U^{H, XFE-HMM}(\mathbf{x})$  по гетерогенным многомасштабным неполиномиальным функциям формы  $\phi_i^{XFE-HMM}(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{M}$  и  $\mathbf{b}$  – глобальная матрица и вектор правой части СЛАУ, получаемые ассемблированием локальных матриц  $\mathbf{M}^{K, local}$  и правых частей  $\mathbf{b}^{K, local}$  макроэлементов  $K \in \Pi^H(\Omega)$ :

$$[\mathbf{M}^{K, local}]_{i,j} = \sum_{t \in T(K^p)} \sum_{l=1}^{n_t} \frac{\omega_l}{|I(\mathbf{x}_l)|} \int_{I(\mathbf{x}_l)} \nabla \phi_i^{XFE-HMM}(\mathbf{x}) \cdot A^\varepsilon(\mathbf{x}) \cdot \nabla \phi_j^{XFE-HMM}(\mathbf{x}) d\Omega \quad (3.115)$$

$$[\mathbf{b}^{K, local}]_j = \int_{\Gamma_N} G_N \phi_j^{XFE-HMM, K}(\mathbf{x}) d\Gamma + \sum_{t \in T(K^p)} \sum_{l=1}^{n_t} \frac{\omega_l}{|I(\mathbf{x}_l)|} \int_{I(\mathbf{x}_l)} F(\mathbf{x}) \phi_j^{XFE-HMM, K}(\mathbf{x}) d\Omega \quad (3.116)$$

Для вычисления интегралов в формулах (3.115) – (3.116) применяются технология численного интегрирования, описанная в п. 3.3.4.

#### 3.4.2.4 Верификация вычислительных схем расширенного гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов

Рассмотрим цилиндрический образец, содержащий 219 трещин с размером осей 4 мм, 3 мм, 1 мм (Рисунок 3.24). Включения распределены во всем объеме образца по равномерному закону. Объемная концентрация включений равна 1.9%.

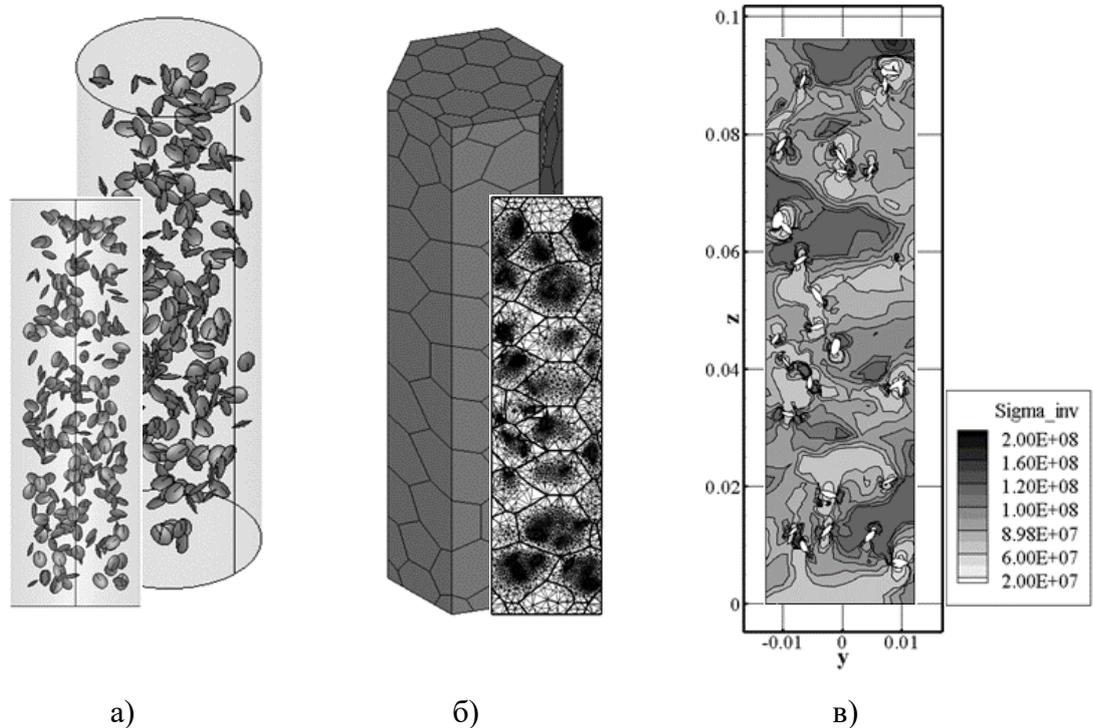


Рисунок 3.24 – Цилиндр с трещинами (а); сеточная иерархическая структура (б) (полиэдральные макроэлементы и мелкая сетка на макроэлементах в сечении) и интенсивность напряжений в сечении  $Y=0$  (в)

Вычислительный эксперимент проводился на иерархическом сеточном разбиении со 109 полиэдральными макроэлементами. Суммарное число тетраэдров на микроуровне 2.549.752 и 450.349 узлов. На рисунке 3.25 приведена Z-компонента вектора перемещений  $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)^T$ .

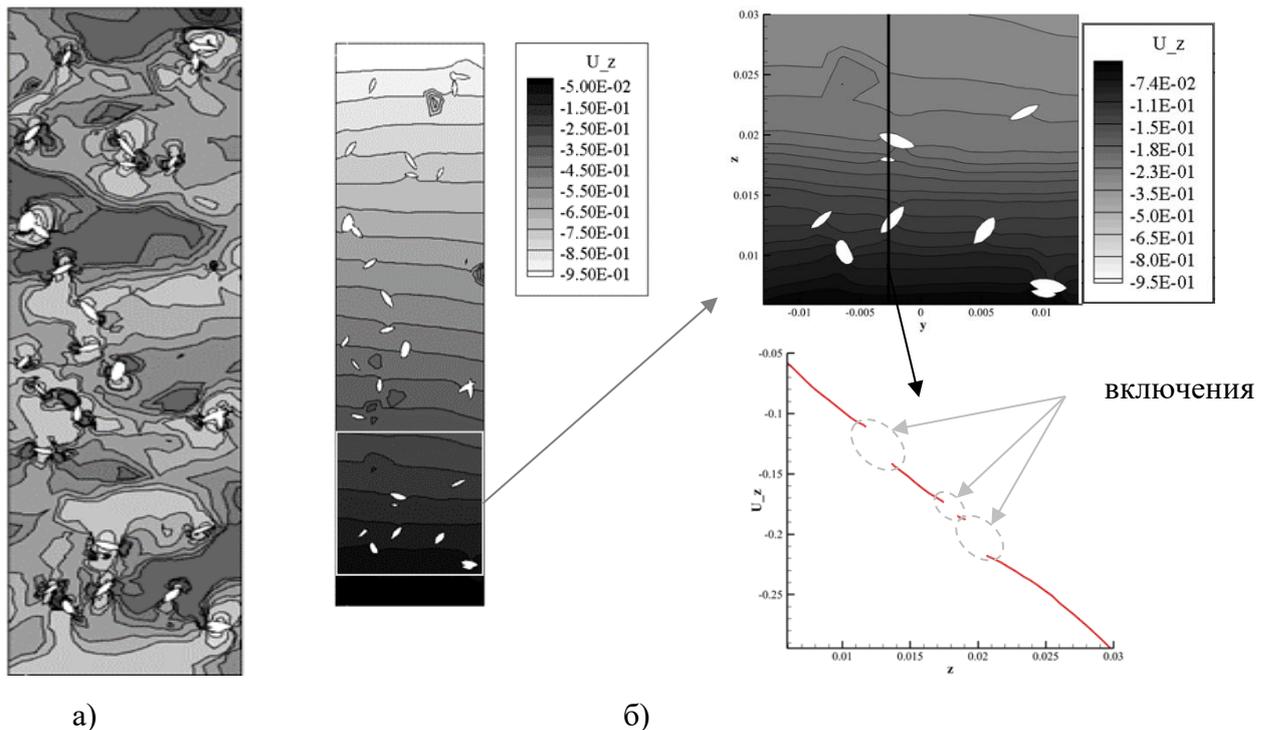


Рисунок 3.25 – Результаты моделирования (а – распределение ZZ-компоненты тензора напряжений в сечении  $X=0$ ; б – Z-компонента вектора перемещений  $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)^T$  в сечении  $X=0$ )

### Выводы по главе

В главе рассмотрены особенности формирования функциональных иерархических пространств в следующих методах: 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-HMM), в расширенном методе конечных элементов на тетраэдральных носителях (extended finite element method, XFEM). А также предложены их модификации, адаптированные для решения задач с большим числом разномасштабных неоднородностей: разрывный многомасштабный метод конечных элементов на полиэдральных носителях (discontinuous galerkin multiscale finite element method, DG-MsFEM), расширенный гетерогенный многомасштабный метод на полиэдральных носителях конечных элементов (extended heterogeneous multiscale finite element method, XFE-HMM).

Для каждого из методов выписаны 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.

## Глава 4 РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ ЭФФЕКТИВНЫХ СВОЙСТВ ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД

### 4.1 Эффективное удельное электрическое сопротивление

Для исследования зависимости удельного электрического сопротивления (УЭС) гетерогенных сред от их физико-геометрических свойств проведена серия вычислительных экспериментов на образцах различной конфигурации. Все вычислительные эксперименты выполнены на суперкомпьютере K100 Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН [185] с помощью программных комплексов MultiscaleMech3D и EffectiveProperties3D, описание которых приведено далее.

#### 4.1.2 Влияние формы включений

##### 4.1.2.1 Равномерное (фиксированное) распределение включений в образце.

Рассмотрим кубические образцы  $90 \times 90 \times 90$  мм (Рисунок 4.1) с включениями, которые расположены равномерно по сетке: 3 слоя по 9 пластинок в каждом. Каждая из пластинок имеет размер  $1 \times 5 \times 20$  мм. В экспериментах 3 и 4 пластинки согнуты под прямым углом (Рисунок 4.1.в и Рисунок 4.1.г). Удельное электрическое сопротивление (УЭС) матрицы  $\rho_{matrix} = 1$  (Ом·м). УЭС включений  $\rho_{incl} \in \{10^3 \text{ (Ом·м)}, 10^{-3} \text{ (Ом·м)}\}$ .

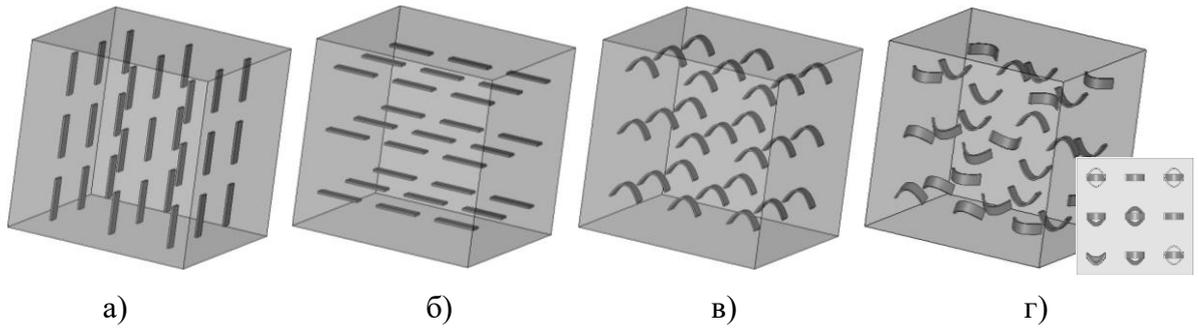


Рисунок 4.1 – Образцы для вычислительных экспериментов с равномерным расположением включений (а – вертикальные пластинки; б – горизонтальные пластинки; в – согнутые горизонтальные пластинки; б – согнутые случайно-ориентированные пластинки)

В таблице 4.2 приведены значения эффективных УЭС ( $\rho_{eff}$ ) для различных конфигураций среды.

Таблица 4.2 – Эффективное УЭС [Ом·м] гетерогенной среды. Сопротивление матрицы  $\rho_{matrix} = 1 \text{ Ом} \cdot \text{м}$ .

№	Описание образца, используемого в эксперименте	Проводящие включения $\rho_{incl} = 10^{-3} \text{ (Ом} \cdot \text{м)}$	Непроводящие включения $\rho_{incl} = 10^{-3} \text{ (Ом} \cdot \text{м)}$
1	Вертикальные пластинки	0,35	1,00
2	Горизонтальные пластинки	0,99	1,04
3	Согнутые пластинки	0,79	1,03
4	Случайно ориентированные согнутые пластинки	0,84	1,02

Из таблицы видно, что наиболее влияние на эффективное УЭС оказывают проводящие включения, помещенные в слабо проводящую матрицу. Образцы с изогнутыми включениями (эксперименты 3 и 4) с точки зрения эффективного УЭС различаются слабо и их эффективные характеристики, расположены между эффективными свойствами образцов с вертикально и горизонтально ориентированными пластинками.

#### 4.1.2.2 Хаотическое (случайное) распределение включений в материале.

Наиболее часто хаотическое распределение включений в образцах может быть описано равномерным законом распределения. Особенно это характерно для образцов горных пород, поэтому рассмотрим цилиндрический образец диаметра 100 мм и высоты 200 мм. Включения-пластинки размеров  $1 \times 5 \times (20 - 40)$  мм распределены в образцах случайно по равномерному закону (Рисунок 4.2). Согнутые пластинки имеют угол изгиба  $90^\circ$ . Сопротивление матрицы  $\rho_{matrix} = 1$  (Ом·м). Сопротивление включений  $\rho_{incl} \in \{10^3 \text{ (Ом·м)}, 10^{-3} \text{ (Ом·м)}\}$ . Результаты вычислительных экспериментов представлены на рисунках 4.2 – 4.4.

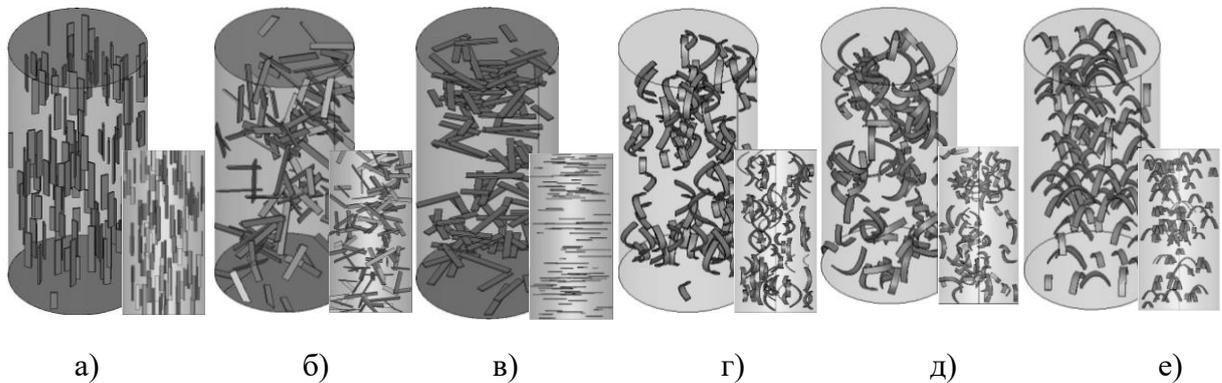
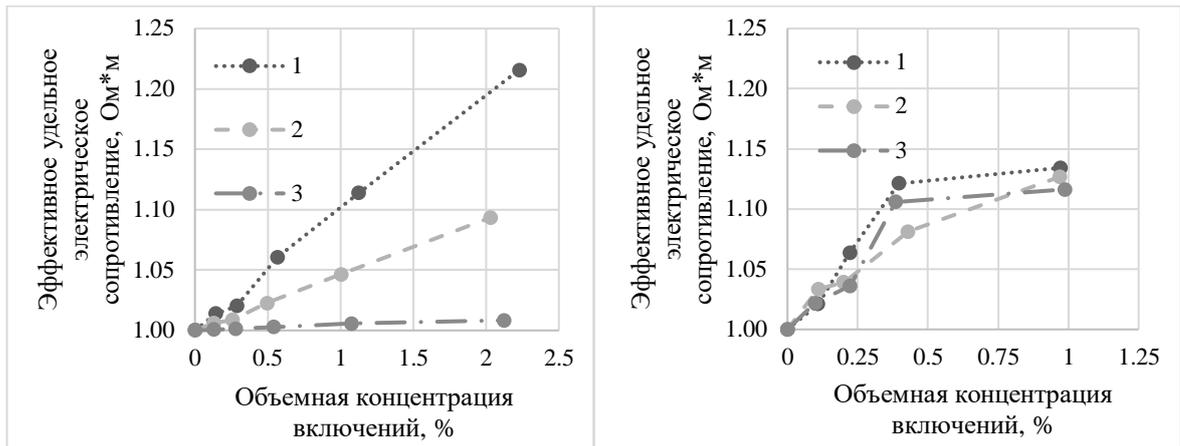


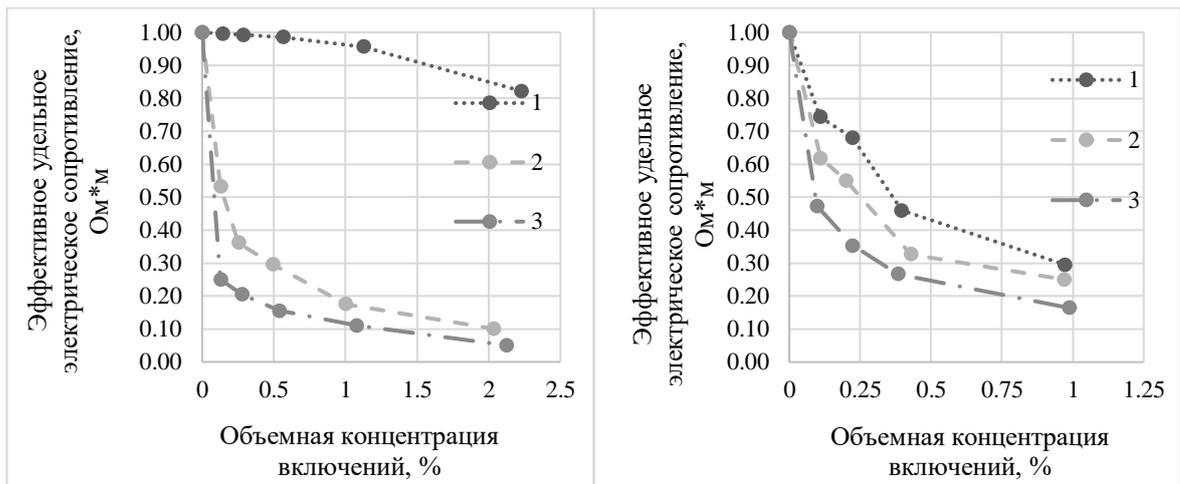
Рисунок 4.2 – Цилиндрические образцы для вычислительных экспериментов (образцы, изображенные на рисунке имеют объемную концентрацию включений 1%) (а – вертикальные пластинки; б – случайно-направленные пластинки; в – горизонтальные пластинки; г – вертикальные согнутые пластинки; д – случайно-направленные согнутые пластинки; е – горизонтальные согнутые пластинки)



а)

б)

Рисунок 4.3 – Изменение эффективного УЭС для непроводящих включений: 1 – горизонтальные включения, 2 – хаотичные включения, 3 – вертикальные (а – пластинки; б – согнутые пластинки)



а)

б)

Рисунок 4.4 – Изменение эффективного УЭС для проводящих включений: 1 – горизонтальные включения, 2 – хаотичные включения, 3 – вертикальные (а – пластинки; б – согнутые пластинки)

Равномерно расположенные пластинки без изгибов оказывают влияние на эффективное УЭС образцов аналогичное случаю структурированных включений (таблица 4.2). То есть наибольшее влияние на эффективное УЭС образца оказывают проводящие пластинки, ориентированные вдоль направления течения тока, что согласуется с результатами лабораторных экспериментов, представленных в работе [186]. Данный эффект сохраняется при изменении

объемной концентрации включений (Рисунок 4.4.а). Эффективное УЭС образцов со случайно-направленными пластинками распложено между эффективными УЭС образцов с предельными конфигурациями (в данном случае это образцы с вертикально и горизонтально ориентированными пластинками). Зависимость эффективного УЭС сред от ориентации изогнутых пластинок имеет более сложный (случайный) характер.

### 4.1.3 Влияние локализации включений

В предыдущем пункте были рассмотрены случаи распределения включений, описываемые наиболее простым законом распределения (равномерным), однако естественные среды часто обладают значительно более сложной структурой. Так, например, пириты [187] часто представлены в виде включений различной формы, сконцентрированных в выделенных объемах (Рисунок 4.5.б). Кроме того, для некоторых образцов характерно постепенное увеличение концентрации включений в одном из направлений (например, осаждение частиц в вязких средах) (Рисунок 4.5.в).

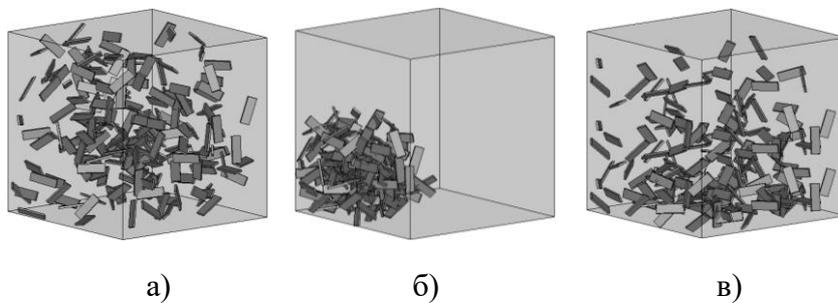


Рисунок 4.5 – Варианты образцов для вычислительных экспериментов (а – включения распределены по равномерному закону во всем объеме (тип I); б – включения распределены по равномерному закону в малой области (тип II); в – осаждение включения (по направлению сверху вниз объемная концентрация включений увеличивается) (тип III))

Для оценки влияния описанных типов локализаций включений (Рисунок 4.5), рассмотрим образцы кубической формы (сторона 100 мм). Включения представлены случайно ориентированными пластинками размеров  $1 \times 5 \times 20$  мм.

Сопротивление матрицы  $\rho_{matrix} = 3,33$  (Ом·м). Сопротивление включений  $\rho_{incl} = 10^{-3}$  (Ом·м).

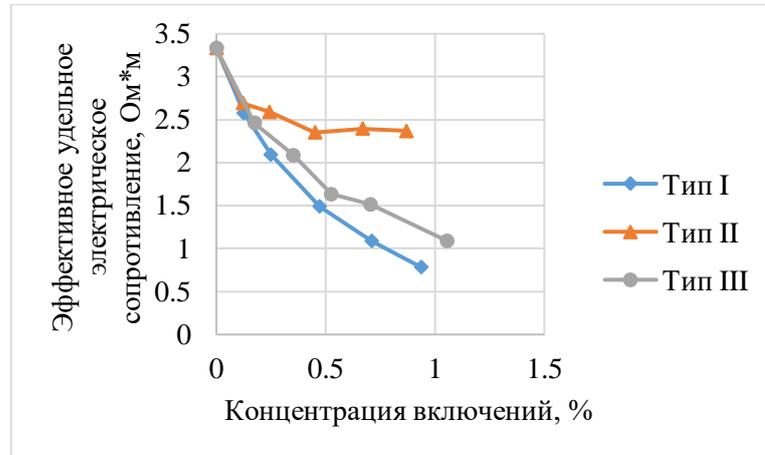


Рисунок 4.6 – Зависимость эффективного УЭС от распределения включений в образце

Замечено, что с ростом объемной концентрации включений увеличивается расхождение эффективного УЭС образцов с равномерным распределением (тип I), и значений эффективных УЭС для образцов сложной конфигурации (тип II, III) (Рисунок 4.6). Так при концентрации в ~1% расхождение составляет 40% и 200% для образцов с «осаждающимися» включениями и сред с включениями, сосредоточенными в малом объеме, соответственно.

#### 4.1.4 Исследования смесей включений с различными электрофизическими характеристиками

Для многих нативных и искусственных сред характерно наличие включений различных типов. Для оценки влияния смеси слабо и сильно проводящих включений на эффективное УЭС среды, рассмотрим образцы цилиндрической формы диаметра 100 мм и высоты 200 мм. Включения представлены случайно ориентированными пластинками размера  $1 \times 5 \times 20$  мм, распределенными в образцах по равномерному закону. Суммарная объемная концентрация включений сохраняется для всех образцов и равна 1,4%. Сопротивление матрицы  $\rho_{matrix} = 1$  (Ом·м). Сопротивление включений:  $\rho_{incl\_1} = 10^{-3}$  (Ом·м) (слабо проводящие включения) и  $\rho_{incl\_2} = 10^{-8}$  (Ом·м) (сильно проводящие включения).

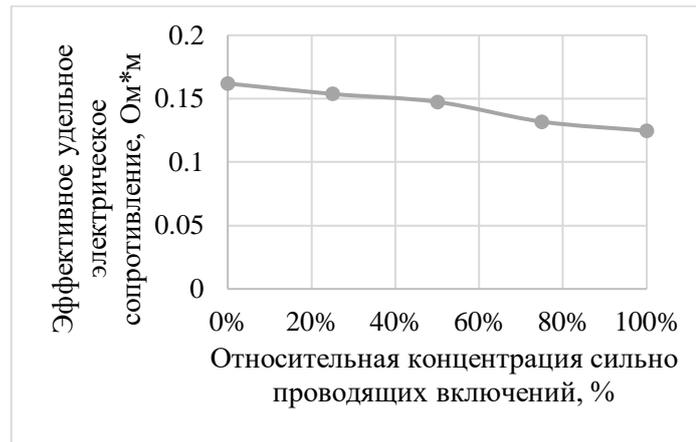


Рисунок 4.7 – Влияние смеси включений на эффективное УЭС (под относительной концентрацией сильно проводящих включений в данном случае будем понимать отношение объемной концентрации сильно проводящих к объемной концентрации слабо проводящих включений)

Из рисунка 4.7 видно, что при малых объемных концентрациях включений изменение соотношения сильно/слабо проводящих включений в образце оказывает влияние на эффективное УЭС в соответствии с теоретическими предположениями.

#### 4.1.5 Влияние физико-геометрических свойств среды и включений на порог перколяции

Для определения порога перколяции (критической объемной концентрации включений  $P_c$  при которой наблюдается скачкообразное изменение эффективного УЭС образца) была проведена серия вычислительных экспериментов для образцов-параллелепипедов  $30 \times 30 \times 100$  мм с включениями различной формы, концентрации, электрофизических свойств (таблица 4.3). УЭС матрицы для всех экспериментов берется равным  $\rho_{matrix} = 1,4$  (Ом·м), что соответствует кварцевому песку, пропитанному раствором NaCl.

Таблица 4.3 – Классификация включений в образцах

№ п/п	Тип включений	УЭС включений $\rho_{incl}$ , Ом*м	Объемная концентрация включений	Размеры включений, мм
1.1	Шарики	$10^{-8}$	10% – 44%	$d = 4,76$
2.1.1	Пластинки	$10^{-1}$	0,7% – 10,5%	$a = 0,3; b = 5; L = 10$
2.1.2		$10^{-2}$		
2.1.3		$10^{-4}$		
2.1.4		$10^{-6}$		
2.1.5		$10^{-8}$		
2.2		$10^{-8}$	1,5% – 13,7%	$a = 0,6; b = 5; L = 10$
2.3		$10^{-8}$	1,4% – 6,6%	$a = 0,3; b = 5; L = 20$
3.1	Деформированные пластинки (изгиб по центру на $90^\circ$ )	$10^{-8}$	1,8% – 7,1%	$a = 0,3; b = 5; L = 10$
3.2		$10^{-8}$	1,3% – 11,9%	$a = 0,6; b = 5; L = 10$
3.3		$10^{-8}$	1,6% – 4,9%	$a = 0,3; b = 5; L = 20$

В образцах включения распределены случайным образом в соответствии с трехмерным равномерным (Рисунок 4.8.а) и экспоненциальным  $Exp(\lambda)$  законами распределения (Рисунок 4.8.б).

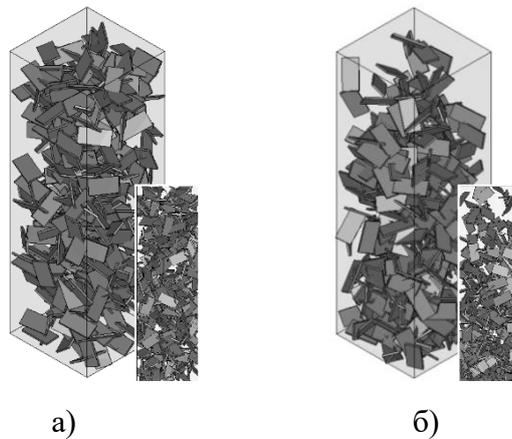


Рисунок 4.8 – Примеры образцов, насыщенных пластинками  $0,6 \times 5 \times 10$  мм (тип 2.2, таблица 4.3) для объемной концентрации 11% (а – равномерное распределение; б – экспоненциальное распределение при  $\lambda = 0,4$ )

#### 4.1.5.1 Влияние электрофизических свойств включений на порог перколяции

На рисунке 4.9. представлены результаты вычислений эффективного УЭС для среды, равномерно насыщенной пластинками  $0,3 \times 5 \times 10$  мм (типы 2.1.1-2.1.5, таблица 4.3), распределенными по равномерному закону (Рисунок 4.8.а). УЭС включений изменяется от  $10^{-1}$  (Ом·м) до  $10^{-8}$  (Ом·м).

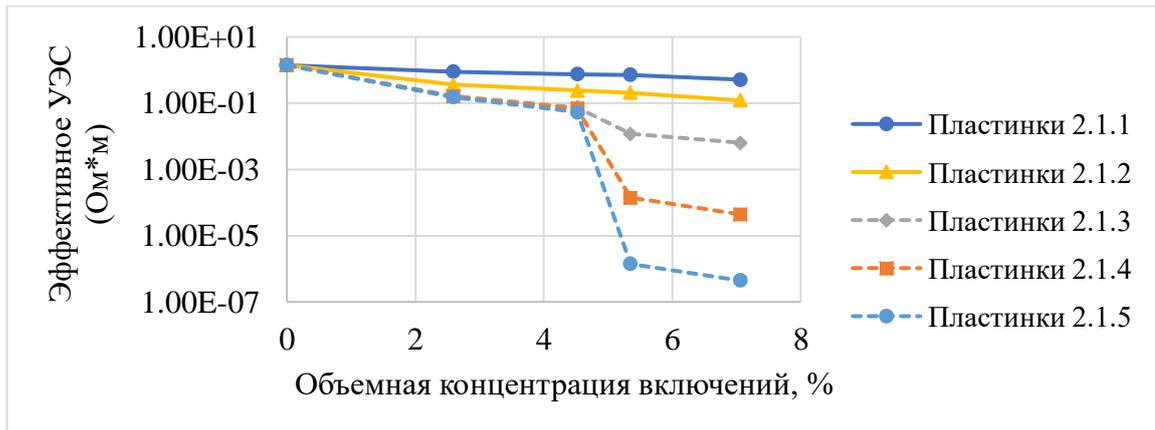


Рисунок 4.9 – Изменение эффективного УЭС при различных сопротивлениях включений

При росте концентрации включений (проводящие пластинки 2.1.3, 2.1.4, 2.1.5), порог перколяции наступает при концентрации включений ~ 5% . В образцах со слабо проводящими частицами (пластинки 2.1.1, 2.1.2) перколяция не наступает. Поэтому все дальнейшие эксперименты будут выполняться при условии высокой контрастности УЭС матрицы и включений.

#### 4.1.5.2 Влияние формы включений на порог перколяции

Исследования гетерогенных материалов показали наличие зависимости эффективного УЭС среды от формы включений даже при небольших концентрациях включений [188]. Рассмотрим ряд образцов с включениями равного объема, но разной площади поверхности: шарики (тип 1.1, Таблица 4.3), пластинки  $0,6 \times 5 \times 10$  мм (тип 2.2, Таблица 4.3) и  $0,3 \times 5 \times 20$  мм (тип 2.3, Таблица 4.3), деформированные пластинки  $0,6 \times 5 \times 10$  мм (тип 3.2, Таблица 4.3) и  $0,3 \times 5 \times 20$  мм (тип 3.3, Таблица 4.3), включения распределены по равномерному закону (Рисунок 4.8.a), УЭС включений  $\rho_{incl} = 10^{-8}$  (Ом·м).

Результаты вычислительных экспериментов (Рисунок 4.10) показали, что для включений сферической формы порог перколяции достигается при концентрации ~40%, тогда как для включений-пластинок перколяция наступает уже при 3,5% - 4,5%. Необходимо отметить, что при равных объемах площади поверхности рассматриваемых включений различаются в 3 раза.

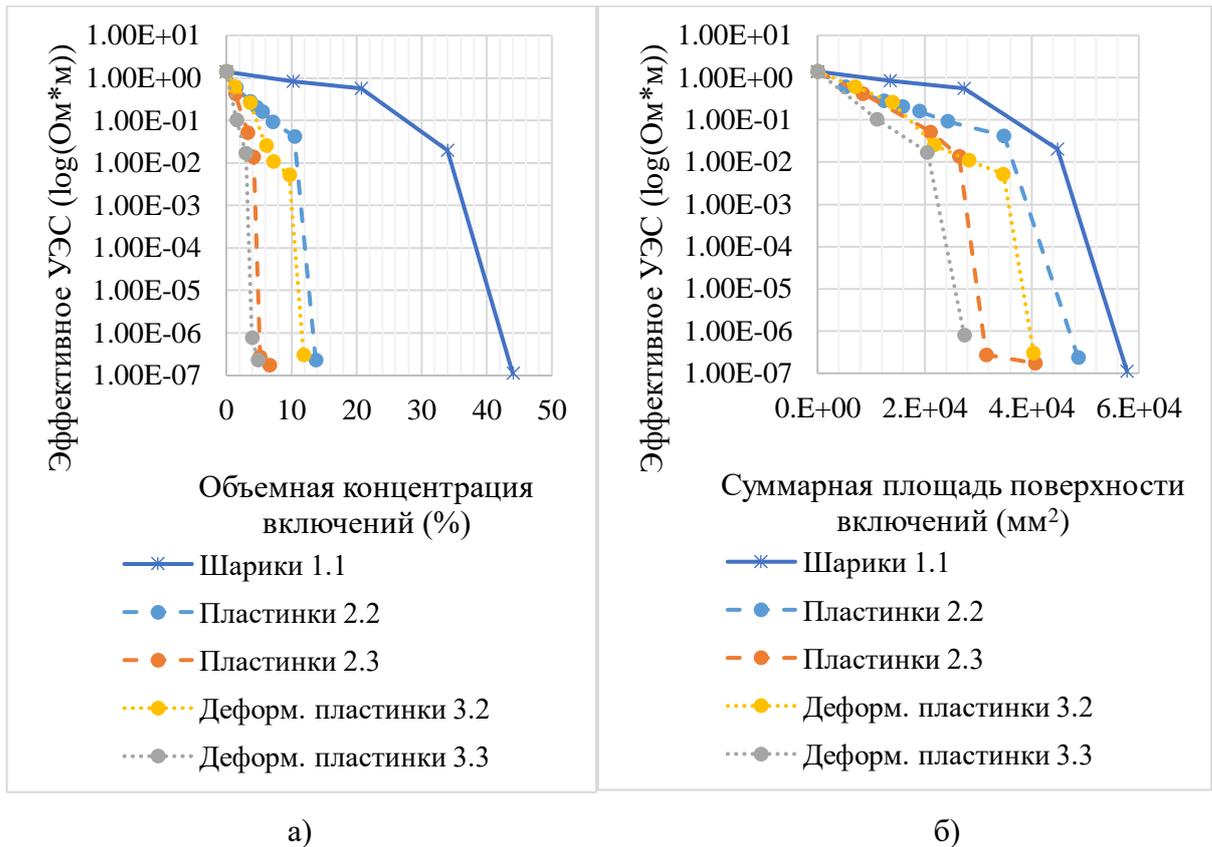


Рисунок 4.10 – Изменение эффективного УЭС среды с увеличением объемной концентрации включений, которые имеют равные объемы, но разную площадь поверхности (а – зависимость эффективного УЭС от объемной концентрации включений; б – зависимость эффективного УЭС от суммарной площади включений)

#### 4.1.5.3 Влияние распределения включений на порог перколяции

Значительная часть естественных и искусственных сред предполагает неравномерное распределение включений в объеме (например, для вязких сред характерно осаживание частиц). Однако при рассмотрении гетерогенных сред с включениями предполагается, что частицы в веществе располагаются равномерно по всему объему [189], [190]. Для оценки влияния модели распределения на порог перколяции, рассмотрим образцы с включениями-пластинками  $0,6 \times 5 \times 10$  мм (тип 2.2, Таблица 4.3), расположенными в соответствии с экспоненциальным законом  $Exp(\lambda)$  так, чтобы плотность распределения увеличивалась от верхней грани к нижней (Рисунок 4.8.б), УЭС включений  $\rho_{incl} = 10^{-8}$  (Ом·м).

В рассматриваемом случае экспоненциальное распределение можно воспринимать, как модель осаживания частиц в вязкой среде. При этом чем больше

параметр  $\lambda$ , тем выше степень локализации (т.е. в нижней части включений больше, чем в верхней);  $\lambda = 0,01$  примерно соответствует равномерному распределению включений в образце. Из рисунка 4.11 следует, что с увеличением  $\lambda$  пороговая концентрация возрастает и при  $\lambda = 0,4$  отличается от равномерного распределения приблизительно в 2 раза. Таким образом, при моделировании материалов, в которых локализация включений достаточно высока необходимо учитывать характер распределения, так как использование модели равномерного распределения вносит значительную погрешность в получаемые результаты.

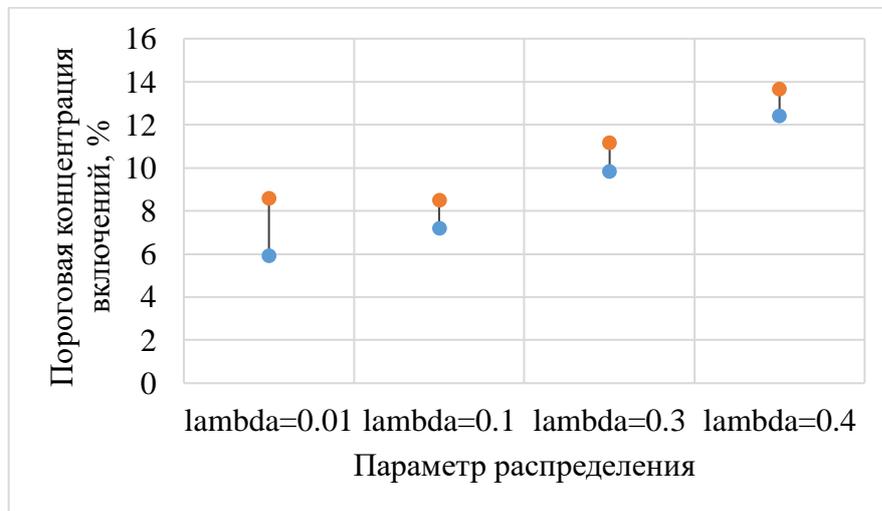


Рисунок 4.11. Пороговые концентрации для различных  $\lambda$

#### 4.1.5.4 Смеси различных включений

Помимо разных типов распределений включений в объеме для многих сред характерны смеси частиц с различной геометрией (Рисунок 4.12.а) и с различными контрастными электрофизическими свойствами (Рисунок 4.12.б).

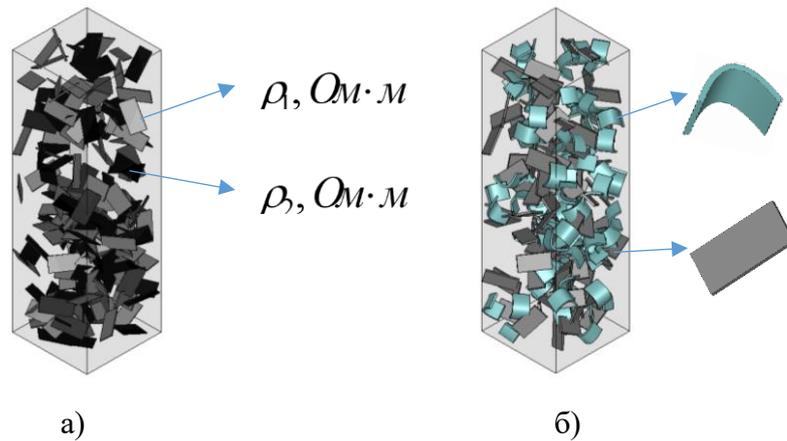


Рисунок 4.12 – Примеры образцов с различными включениями при концентрации 5% (а – частицы с разным УЭС; б – частицы разной геометрии)

#### 4.1.5.4.1 Смесь включений с различными удельными электрическими сопротивлениями

Рассмотрим образцы (Рисунок 4.12.а), насыщенные включениями-пластинками  $0,3 \times 5 \times 10$  мм (тип 2.1, Таблица 4.3), распределенными по равномерному закону. УЭС половины включений  $\rho_1$  (Ом·м), остальные включения имеют УЭС  $\rho_2$  (Ом·м). Определим следующие смеси частиц:

- 1) все включения являются высоко проводящими  $\rho_1 = \rho_2 = 10^{-8}$  (Ом·м) (тип 2.1.5, Таблица 4.3);
- 2) все включения являются слабо проводящими  $\rho_1 = \rho_2 = 10^{-2}$  (Ом·м) (тип 2.1.2, Таблица 4.3);
- 3) смесь слабо- и сильно проводящих частиц  $\rho_1 = 10^{-2}$  (Ом·м) (тип 2.1.2, Таблица 4.3),  $\rho_2 = 10^{-8}$  (Ом·м) (тип 2.1.5, Таблица 4.3);
- 4) смесь сильно проводящих частиц  $\rho_1 = 10^{-6}$  (Ом·м) (тип 2.1.4, Таблица 4.3),  $\rho_2 = 10^{-8}$  (Ом·м) (тип 2.1.5, Таблица 4.3);

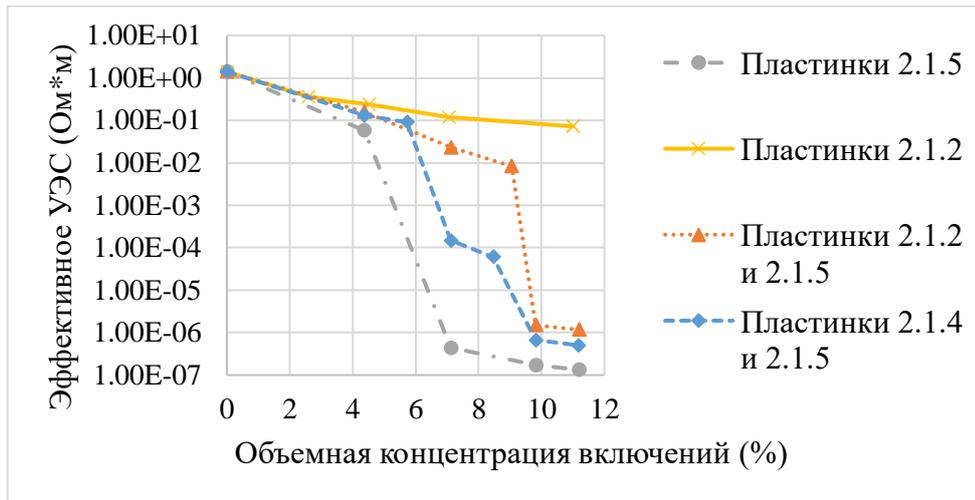


Рисунок 4.13 – Изменение эффективного УЭС для сред со смесями включений с различным УЭС

Проведенные вычислительные эксперименты показали (Рисунок 4.13), что в случае смеси слабо проводящих и сильно проводящих частиц перколяционные пути формируются при достижении критической концентрации сильно проводящими включениями (треугольные маркеры, Рисунок 4.13). Если среда насыщена смесью сильно проводящих включений с разными УЭС, то наблюдается два скачкообразных изменения эффективного УЭС (маркеры-ромбы, Рисунок 4.13).

#### 4.1.5.4.2 Смесь включений различной геометрии

Для исследования смеси включений разной геометрии рассмотрим образцы, насыщенные деформированными и недеформированными пластинками  $0,6 \times 5 \times 10$  мм (типы 3.2 и 2.2, Таблица 4.3) в равных долях. Результаты моделирования (Рисунок 4.14) показали, что использование рассматриваемой смеси незначительно изменяет величину порога перколяции относительно образцов с единообразными включениями.

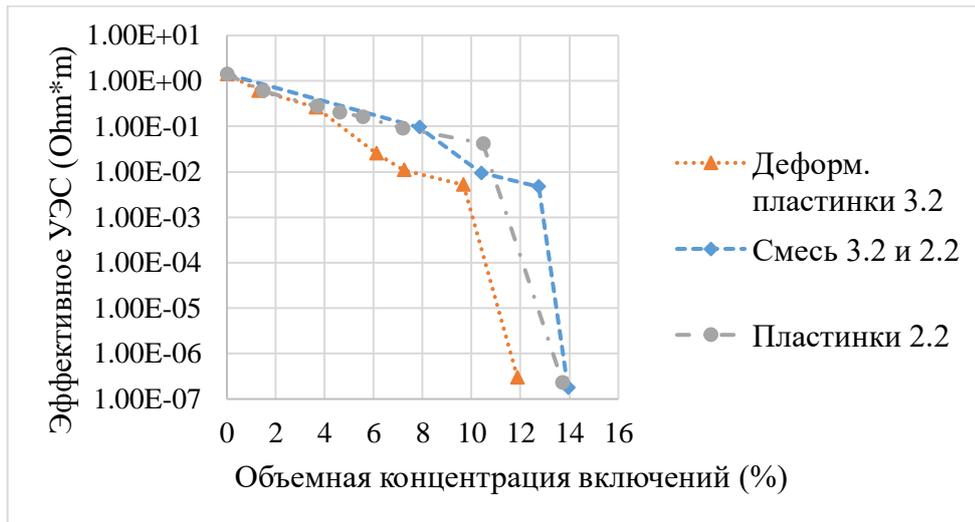


Рисунок 4.14 – Изменение эффективного УЭС для сред со смесями включений различной геометрии

## 4.2 Эффективный тензор упругости

### 4.2.1 Влияние формы включений

4.2.1.1 *Равномерное (фиксированное) распределение эллипсоидальных в образце.*

Рассмотрим кубические образцы  $90 \times 90 \times 90$  мм (Рисунок 4.15) для исследования влияния геометрии и ориентации включений на эффективный тензор упругости. Во всех образцах включения расположены равномерно по сетке: 3 слоя по 9 включений (эллипсоидальные трещины) в каждом. В экспериментах 1 – 3 размеры включений  $25 \times 10 \times 2$  мм (Рисунок 4.15), что соответствует объёмной концентрации включений 0,8%. В экспериментах 4-6 размеры включений  $25 \times 10 \times 8$  мм (объёмной концентрации включений 3,2%), расположение включений в образце аналогично размещению трещин в экспериментах 1 – 3 (Рисунок 4.15). Свойства матрицы (глинистый сланец) и включений (кварц) приведены в таблице 4.4.

Таблица 4.4 – Модуль Юнга и коэффициент Пуассона глинистого сланца и кварца

Материал	Модуль Юнга ( $E$ , Па)	Коэффициент Пуассона ( $\nu$ )
глинистый сланец	$7 \cdot 10^8$	0,3
кварц	$6,667 \cdot 10^{10}$	0,07



Таблица 4.5 – Вычисленные значения эффективных тензоров упругости для образцов из песчаника с кварцевыми включениями, расположенными регулярно

№ Образца	Расположение включений	Эффективный тензор упругости четвертого ранга в нотации Фойгта ( $\mathbf{D}_{eff}$ )
1	горизонтальные включения $25 \times 10 \times 2$ мм (Рисунок 4.15.а)	$\begin{matrix} 1,05e+09 & 4,10e+08 & 4,07e+08 & 6,21e+04 & 3,14e+03 & -5,11e+02 \\ 4,10e+08 & 9,75e+08 & 4,08e+08 & 7,55e+03 & 9,06e+02 & 1,99e+02 \\ 4,07e+08 & 4,08e+08 & 9,51e+08 & -1,27e+03 & -5,50e+01 & -1,71e+01 \\ 6,21e+04 & 7,55e+03 & -1,27e+03 & 2,72e+08 & 2,20e+03 & 3,34e+02 \\ 3,14e+03 & 9,06e+02 & -5,50e+01 & 2,20e+03 & 2,72e+08 & -1,91e+01 \\ -5,11e+02 & 1,99e+02 & -1,71e+01 & 3,34e+02 & -1,91e+01 & 2,88e+08 \end{matrix}$
2	вертикальные включения $25 \times 10 \times 2$ мм (Рисунок 4.15.б)	$\begin{matrix} 9,51e+08 & 4,08e+08 & 4,07e+08 & -2,10e+03 & 1,89e+01 & 1,03e+02 \\ 4,08e+08 & 9,75e+08 & 4,10e+08 & 6,39e+03 & -6,24e+03 & -3,10e+04 \\ 4,07e+08 & 4,10e+08 & 1,05e+09 & -9,16e+02 & -1,82e+04 & 1,02e+04 \\ -2,10e+03 & 6,39e+03 & -9,16e+02 & 2,36e+08 & -2,37e+04 & -6,02e+03 \\ 1,89e+01 & -6,24e+03 & -1,82e+04 & -2,37e+04 & 3,45e+08 & -1,53e+04 \\ 1,03e+02 & -3,10e+04 & 1,02e+04 & -6,02e+03 & -1,53e+04 & 3,95e+08 \end{matrix}$
3	случайно-ориентированные включения $25 \times 10 \times 2$ мм (Рисунок 4.15.в)	$\begin{matrix} 9,81e+08 & 4,09e+08 & 4,09e+08 & 1,40e+06 & -2,21e+06 & 1,39e+05 \\ 4,09e+08 & 9,89e+08 & 4,09e+08 & -1,55e+05 & 4,91e+04 & 3,67e+05 \\ 4,09e+08 & 4,09e+08 & 9,87e+08 & 4,03e+04 & -1,36e+05 & 1,50e+05 \\ 1,40e+06 & -1,55e+05 & 4,03e+04 & 3,02e+08 & 1,17e+05 & -1,39e+05 \\ -2,21e+06 & 4,91e+04 & -1,36e+05 & 1,17e+05 & 3,03e+08 & -9,58e+05 \\ 1,39e+05 & 3,67e+05 & 1,50e+05 & -1,39e+05 & -9,58e+05 & 3,04e+08 \end{matrix}$
4	горизонтальные включения $25 \times 10 \times 8$ мм (Рисунок 4.15.а)	$\begin{matrix} 1,10e+09 & 4,21e+08 & 4,21e+08 & 4,11e+04 & -4,67e+03 & -5,04e+03 \\ 4,21e+08 & 9,97e+08 & 4,20e+08 & -3,53e+03 & -4,75e+03 & -5,69e+03 \\ 4,21e+08 & 4,20e+08 & 9,88e+08 & -2,88e+03 & -3,38e+03 & -1,72e+03 \\ 4,11e+04 & -3,53e+03 & -2,88e+03 & 2,92e+08 & 4,08e+02 & 1,83e+03 \\ -4,67e+03 & -4,75e+03 & -3,38e+03 & 4,08e+02 & 2,89e+08 & 8,58e+02 \\ -5,04e+03 & -5,69e+03 & -1,72e+03 & 1,83e+03 & 8,58e+02 & 2,96e+08 \end{matrix}$
5	вертикальные включения $25 \times 10 \times 8$ мм (Рисунок 4.15.б)	$\begin{matrix} 9,87e+08 & 4,20e+08 & 4,21e+08 & 1,31e+03 & 1,08e+04 & -7,75e+02 \\ 4,20e+08 & 9,97e+08 & 4,21e+08 & -4,19e+03 & 1,75e+04 & -2,50e+04 \\ 4,21e+08 & 4,21e+08 & 1,10e+09 & 1,35e+04 & -3,29e+04 & -4,12e+02 \\ 1,31e+03 & -4,19e+03 & 1,35e+04 & 3,80e+08 & -3,32e+04 & 7,37e+03 \\ 1,08e+04 & 1,75e+04 & -3,29e+04 & -3,32e+04 & 3,90e+08 & -7,09e+03 \\ -7,75e+02 & -2,50e+04 & -4,12e+02 & 7,37e+03 & -7,09e+03 & 3,02e+08 \end{matrix}$
6	случайно-ориентированные включения $25 \times 10 \times 8$ мм (Рисунок 4.15.в)	$\begin{matrix} 1,02e+09 & 4,20e+08 & 4,20e+08 & -1,01e+06 & -2,22e+06 & 2,26e+05 \\ 4,20e+08 & 1,03e+09 & 4,20e+08 & -7,21e+04 & -1,25e+05 & -6,57e+05 \\ 4,20e+08 & 4,20e+08 & 1,03e+09 & 1,96e+05 & 2,69e+05 & -2,82e+05 \\ -1,01e+06 & -7,21e+04 & 1,96e+05 & 3,23e+08 & -7,30e+05 & -1,96e+05 \\ -2,22e+06 & -1,25e+05 & 2,69e+05 & -7,30e+05 & 3,24e+08 & -3,45e+05 \\ 2,26e+05 & -6,57e+05 & -2,82e+05 & -1,96e+05 & -3,45e+05 & 3,26e+08 \end{matrix}$

Для рассматриваемых малых концентраций не наблюдается значительного изменения упругостных свойств образцов при изменении длины трещин, однако заметно влияние ориентации трещин в образцах. Например, образцы со случайно-ориентированными трещинами показывают свойства изотропных материалов

(эксперименты №3 и №6), а образцы с ориентированными включениями обеспечивают эффективные свойства образцов близкие к трансверсальной изотропии относительно оси, вдоль которой ориентированы трещины.

#### 4.2.1.2 Равномерное (фиксированное) распределение включений-пластинок в образце.

Для исследования влияния изменения размеров включений в материале на эффективный тензор упругости рассмотрим кубические образцы  $30 \times 30 \times 30$  мм (Рисунок 4.16). Во всех образцах включения расположены так, как показано на рисунке 4.16. В эксперименте 1 размеры включений  $8 \times 4 \times 2$  мм (Рисунок 4.16.а). В эксперименте 2 размеры включений  $8 \times 4 \times 1$  мм (Рисунок 4.16.б). Объёмная концентрация включений во всех экспериментах сохраняется и равна 17,1%. Свойства матрицы (глинистый сланец) и включений (кварц) приведены в таблице 4.6.

Таблица 4.6 – Модуль Юнга и коэффициент Пуассона глинистого сланца и кварца

Материал	Модуль Юнга ( $E$ , Па)	Коэффициент Пуассона ( $\nu$ )
Глинистый сланец	$7 \cdot 10^8$	0,3
Кварц	$6,667 \cdot 10^{10}$	0,07

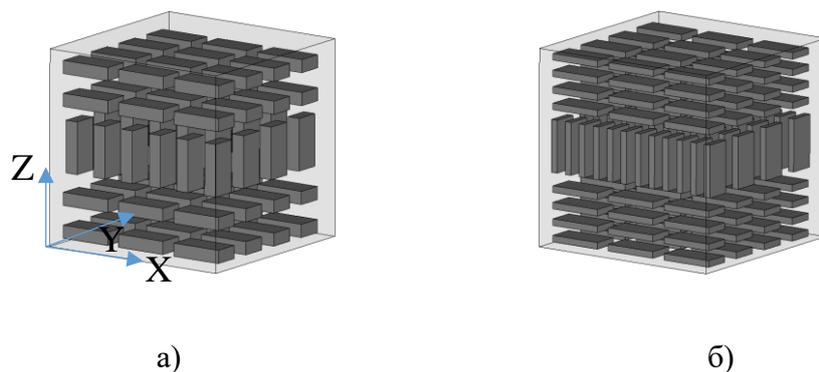


Рисунок 4.16. Образцы для проведения вычислительных экспериментов

В таблице 4.7 приведены вычисленные значения эффективных тензоров упругости для образцов, описанных выше. Цветом выделены элементы тензора упругости  $\mathbf{D}_{eff}$ , которые являются ненулевыми в случае изотропной среды.

Таблица 4.7 – Вычисленные значения эффективных тензоров упругости для образцов из песчаника с кварцевыми включениями, расположенными регулярно

№ Образца	Тип включений	Эффективный тензор упругости четвертого ранга в нотации Фойгта ( $D_{eff}$ )
1	8 × 4 × 2 мм (Рисунок 4.19.а)	$1,23e+09$ $1,05e+08$ $9,81e+07$ $5,95e+04$ $1,42e+05$ $-3,40e+04$ $1,05e+08$ $1,09e+09$ $9,88e+07$ $5,30e+04$ $-1,52e+04$ $-1,50e+05$ $9,81e+07$ $9,88e+07$ $1,07e+09$ $7,57e+03$ $3,92e+04$ $1,62e+04$ $5,95e+04$ $5,30e+04$ $7,57e+03$ $4,82e+08$ $-7,42e+04$ $2,60e+04$ $1,42e+05$ $-1,52e+04$ $3,92e+04$ $-7,42e+04$ $4,80e+08$ $1,26e+04$ $-3,40e+04$ $-1,50e+05$ $1,62e+04$ $2,60e+04$ $1,26e+04$ $5,00e+08$
2	8 × 4 × 1 мм (Рисунок 4.19.б)	$1,30e+09$ $1,12e+08$ $9,02e+07$ $1,11e+05$ $1,31e+04$ $8,67e+03$ $1,12e+08$ $1,19e+09$ $9,24e+07$ $9,42e+04$ $-6,08e+04$ $-7,24e+04$ $9,02e+07$ $9,24e+07$ $1,08e+09$ $5,03e+04$ $-8,32e+03$ $-2,08e+04$ $1,11e+05$ $9,42e+04$ $5,03e+04$ $4,83e+08$ $-4,59e+03$ $1,25e+03$ $1,31e+04$ $-6,08e+04$ $-8,32e+03$ $-4,59e+03$ $4,78e+08$ $9,99e+04$ $8,67e+03$ $-7,24e+04$ $-2,08e+04$ $1,25e+03$ $9,99e+04$ $5,29e+08$

Для рассмотренной концентрации и свойств компонент среды изменение размеров включений приводит к незначительному изменению значений компонент эффективного тензора упругости (не более 10%).

#### 4.2.1.3 Хаотическое (случайное) распределение включений-трещин в образце

Для исследования влияния формы включений в материале на эффективный тензор упругости рассмотрим кубические образцы 30 × 30 × 30 мм (Рисунок 4.20), в которых включения размещены по всему объему по равномерному закону распределения. Во всех экспериментах размеры включений 10 × 2 × 0,25 мм. В образцах первой группы включения не имеют дефектов (Рисунок 4.17.а), в экспериментах второй группы включения изогнуты под углом 90° (Рисунок 4.17.б). Объёмная концентрация включений варьируется от 1,8% до 5,4%. Свойства матрицы (глинистый сланец) и включений (кварц) приведены в таблице 4.8.

Таблица 4.8 – Модуль Юнга и коэффициент Пуассона глинистого сланца и кварца

Материал	Модуль Юнга ( $E$ , Па)	Коэффициент Пуассона ( $\nu$ )
Глинистый сланец	$7 \cdot 10^8$	0,3
Кварц	$6,667 \cdot 10^{10}$	0,07

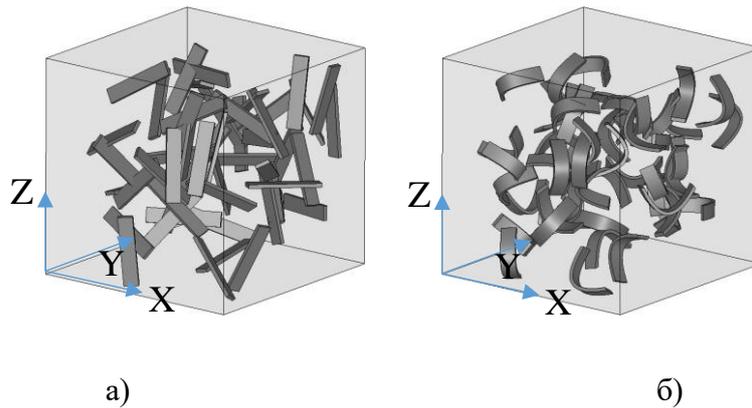


Рисунок 4.17 – Образцы с включениями, распределенными по равномерному закону (а – трещины без дефектов, б – трещины, изогнутые под углом  $90^\circ$ )

Для анализа результатов на графике (Рисунок 4.18) представлены зависимости главных компонент эффективного тензора упругости от объемной концентрации, поскольку данные компоненты являются наиболее информативными. По рисунку 4.18 видно, что для рассматриваемых концентраций и конфигураций образцов упругостные свойства приближаются к свойствам изотропных материалов [191], особенно в случае насыщения образцов изогнутыми включениями.

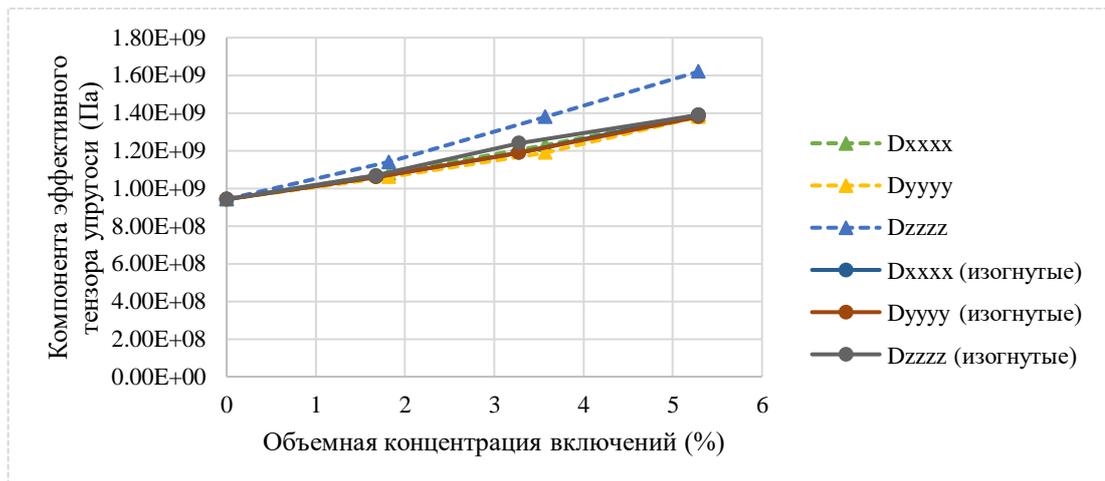


Рисунок 4.18 – Зависимость компонент эффективного тензора упругости от объемной концентрации включений в образцах с вертикальными включениями и в образцах с включениями со случайным углом поворота

## 4.2.2 Влияние способа размещения включений в образце

4.2.2.1 *Равномерное (фиксированное) распределение включений-трещин в образце.*

Для исследования влияния взаимной ориентации включений в материале на эффективный тензор упругости рассмотрим кубические образцы  $30 \times 30 \times 30$  мм (Рисунок 4.19). Во всех образцах включения расположены равномерно в 3 слоя по 3 включения (эллипсоидальные трещины) в каждом. В экспериментах 1 – 2 размеры включений  $28 \times 8 \times 1$  мм (Рисунок 4.19), что соответствует объёмной концентрации включений 6,4%. Свойства матрицы (глинистый сланец) и включений (кварц) приведены в таблице 4.9.

Таблица 4.9 – Модуль Юнга и коэффициент Пуассона глинистого сланца и кварца

Материал	Модуль Юнга ( $E$ , Па)	Коэффициент Пуассона ( $\nu$ )
Глинистый сланец	$7 \cdot 10^8$	0,3
Кварц	$6,667 \cdot 10^{10}$	0,07

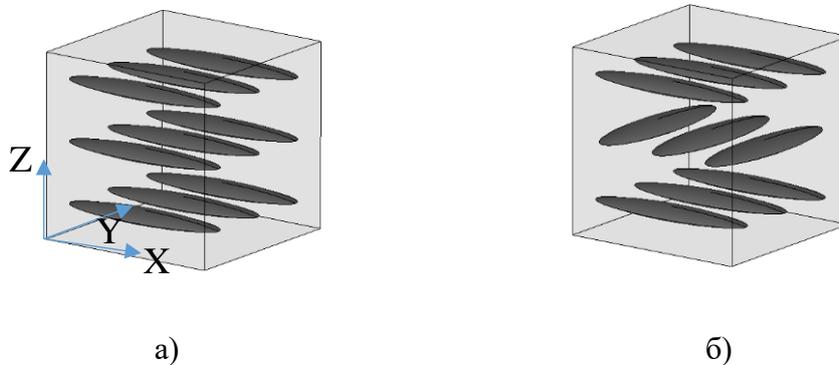


Рисунок 4.19 – Образцы для проведения вычислительных экспериментов с эллипсоидальными трещинами перпендикулярными оси OZ (а – все включения параллельны оси OX (образец №1); б – один слой включений параллелен оси OY, два слоя включений параллельны оси OX (образец №2))

В таблице 4.10 приведены вычисленные значения эффективных тензоров упругости для образцов, описанных выше. Цветом выделены элементы тензора упругости  $\mathbf{D}_{eff}$ , которые являются ненулевыми в случае изотропной среды.

Таблица 4.10 – Вычисленные значения эффективных тензоров упругости для образцов из песчаника с кварцевыми включениями, расположенными регулярно

№ Образца	Расположение включений	Эффективный тензор упругости четвертого ранга в нотации Фойгта ( $D_{eff}$ )
1	все включения параллельны оси ОХ (Рисунок 4.19.а)	1,05e+09 1,03e+08 8,61e+07 6,16e+04 1,46e+04 -9,35e+03
		1,03e+08 9,01e+08 8,88e+07 1,15e+04 7,21e+03 -5,13e+04
		8,61e+07 8,88e+07 7,67e+08 2,10e+03 -8,07e+02 4,00e+03
		6,16e+04 1,15e+04 2,10e+03 3,44e+08 -1,69e+04 9,83e+03
		1,46e+04 7,21e+03 -8,07e+02 -1,69e+04 3,42e+08 6,04e+02
		-9,35e+03 -5,13e+04 4,00e+03 9,83e+03 6,04e+02 4,11e+08
2	один слой включений параллелен оси ОУ, два слоя включений параллельны оси ОХ (Рисунок 4.19.б)	1,00e+09 1,03e+08 8,75e+07 -1,00e+05 1,63e+04 7,32e+03
		1,03e+08 9,51e+08 8,83e+07 -1,19e+05 5,50e+03 2,17e+04
		8,75e+07 8,83e+07 7,66e+08 8,66e+03 -5,26e+03 -3,01e+03
		-1,00e+05 -1,19e+05 8,66e+03 3,44e+08 1,90e+04 6,41e+03
		1,63e+04 5,50e+03 -5,26e+03 1,90e+04 3,43e+08 3,96e+02
		7,32e+03 2,17e+04 -3,01e+03 6,41e+03 3,96e+02 4,27e+08

Рассмотренное изменение внутренней структуры образцов, при сохранении физических свойств компонент и геометрии включений-трещин, не показало значимого изменения в значениях эффективного тензора упругости.

#### 4.2.2.2 Хаотическое (случайное) распределение включений-трещин в образце.

Для исследования влияния упорядочивания включений в материале вдоль одной из главных осей на эффективный тензор упругости рассмотрим кубические образцы  $30 \times 30 \times 30$  мм (Рисунок 4.20), в которых включения размещены по всему объему по равномерному закону распределения. Во всех экспериментах размеры включений  $10 \times 2 \times 0,25$  мм. В образцах первой группы включения размещены в образцах вертикально (Рисунок 4.20.а), в экспериментах второй группы угол поворота включений определялся случайно по равномерному закону распределения (Рисунок 4.20.б). Объемная концентрация включений варьируется от 1,8% до 5,4%. Свойства матрицы (глинистый сланец) и включений (кварц) приведены в таблице 4.11.

Таблица 4.11 – Модуль Юнга и коэффициент Пуассона глинистого сланца и кварца

Материал	Модуль Юнга ( $E$ , Па)	Коэффициент Пуассона ( $\nu$ )
Глинистый сланец	$7 \cdot 10^8$	0,3
Кварц	$6,667 \cdot 10^{10}$	0,07

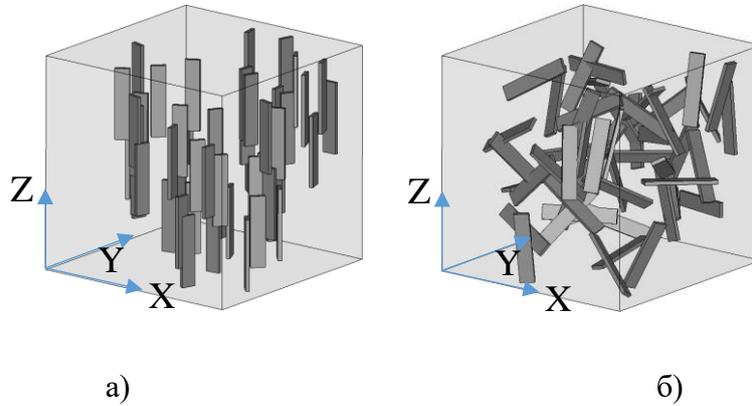


Рисунок 4.20 – Образцы с включениями, распределенными по равномерному закону: а – вертикальные трещины, б – трещины со случайным углом поворота

Для анализа результатов на графике (Рисунок 4.21) представлены зависимости главных компонент эффективного тензора упругости от объемной концентрации, поскольку данные компоненты являются наиболее информативными. По рисунку 4.21 видно, что для рассматриваемых концентраций наибольшее влияние на эффективный тензор упругости оказывают включения, ориентированные в вдоль главной оси (в данном случае это ось OZ). При концентрации 5,4% образец с вертикально-ориентированными включениями показывает свойства материала с трансверсальной изотропией [191]:

$$\mathbf{D}_{vertic\_5,4\%}^{eff} = \begin{pmatrix} 1,11e+09 & 4,32e+08 & 4,29e+08 & 1,93e+04 & -2,27e+04 & -5,48e+04 \\ & 1,12e+09 & 4,29e+08 & -3,07e+04 & -2,08e+04 & -1,54e+04 \\ & & 2,08e+09 & 1,64e+05 & -1,52e+05 & 9,90e+04 \\ & & & 8,87e+08 & 5,30e+04 & 3,16e+04 \\ & & & & 8,83e+08 & 6,50e+04 \\ & & & & & 3,93e+08 \end{pmatrix}.$$

(4.1)

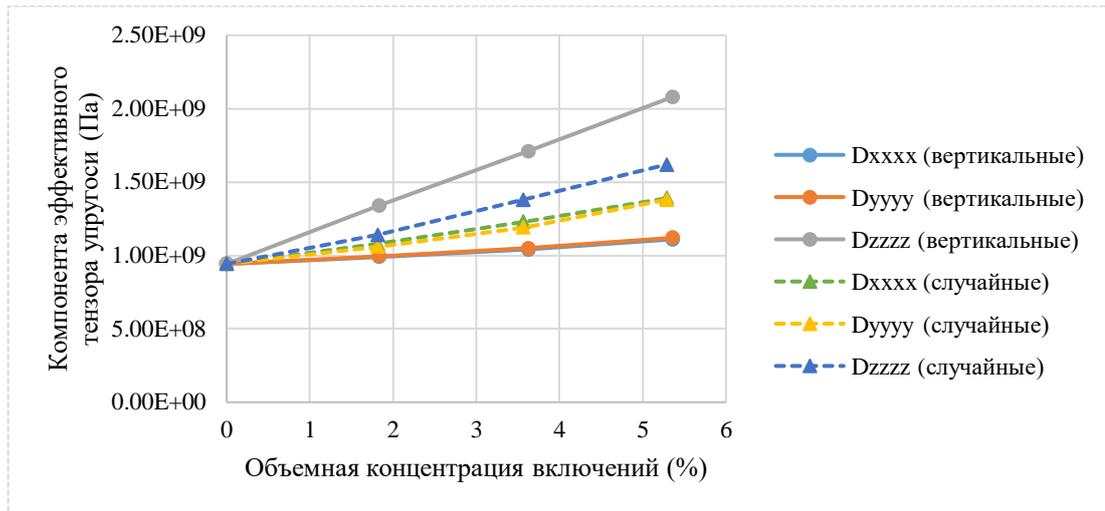


Рисунок 4.21 – Зависимость компонент эффективного тензора упругости от объемной концентрации включений в образцах с вертикальными включениями и в образцах с включениями со случайным углом поворота

### 4.3 Влияние разрушающей деформации на эффективные свойства сред

Для исследования влияния разрушающей деформации на эффективный тензор упругости и эффективное УЭС рассмотрим кубические образцы  $30 \times 30 \times 30$  мм (Рисунок 4.22) с радиальными трещинами, ориентированными случайным образом. Начальный радиус каждой из трещин равен 2 мм, толщина в центре трещины 1 мм. Свойства матрицы (песчаник, пропитанный раствором NaCl) и флюида, заполняющего трещины, приведены в таблице 4.12.

Таблица 4.12 – Модуль Юнга и коэффициент Пуассона песчаника и нефти

Материал	Модуль Юнга ( $E$ , Па)	Коэффициент Пуассона ( $\nu$ )	УЭС (Ом*м)
Песчаник	$18 \cdot 10^9$	0,3	3,33
Нефть	$2,03 \cdot 10^9$	0,5	$1,2 \cdot 10^6$

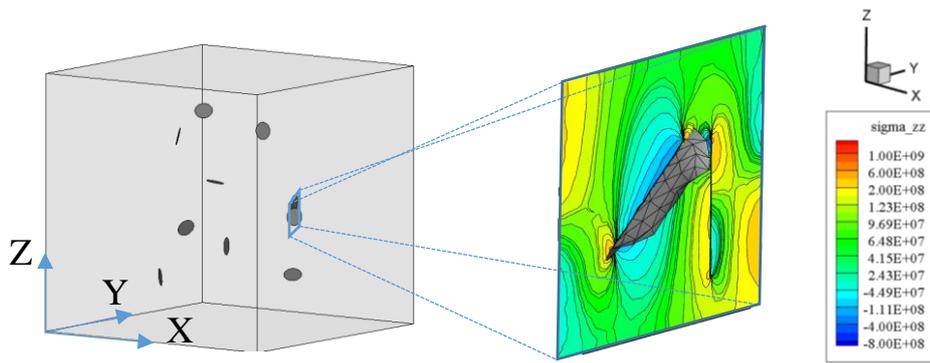


Рисунок 4.22 – Начальное состояние образца для проведения вычислительных экспериментов с радиальными трещинами и фрагмент распределения компоненты  $\sigma_{zz}$  тензора напряжений

На верхнюю грань образца осуществляется механическое воздействие, направленное по нормали вниз (к центру образца), 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 рисунках 4.23 и 4.24.

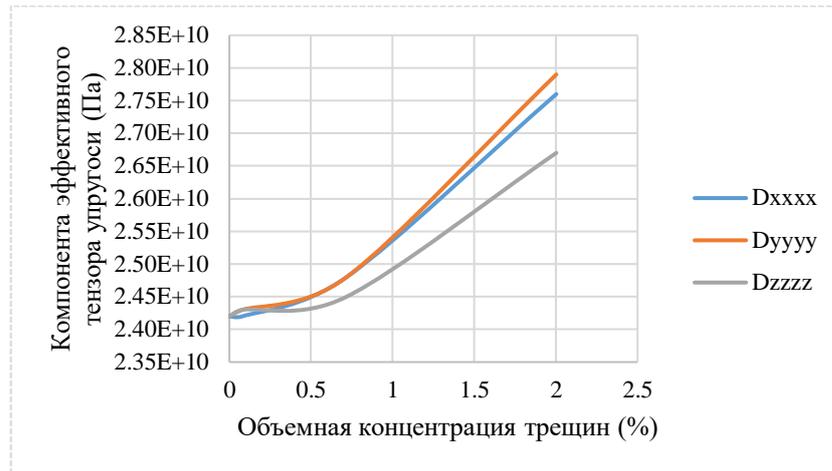


Рисунок 4.23 – Изменение главных компонент эффективного тензора упругости при разрушении образца



Рисунок 4.24 – Изменение эффективного УЭС при разрушении образца

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

#### 4.4 Численное моделирование распределения скалярного потенциала в среде под действием двухэлектродной установки постоянного тока

Одним из методов малоглубинной электроразведки является метод сопротивлений, основанный на изучении постоянных электрических полей, порождаемых двумя электродами (А и В на рисунке 4.25), к которым подключен источник постоянного тока [192]. Для восстановления физико-геометрических

свойств исследуемой геологической структуры решаются специальным образом сформулированные обратные задачи, ключевым этапом которых является моделирование распределения скалярного потенциала в среде под действием постоянного тока [193]. При этом численное моделирование должно выполняться с требуемой точностью и за минимальное время. Поэтому для решения данной задачи предлагается применять подходы, основанные на технологии апскейлинга модели с использованием современных многомасштабных методов, рассмотренных выше.

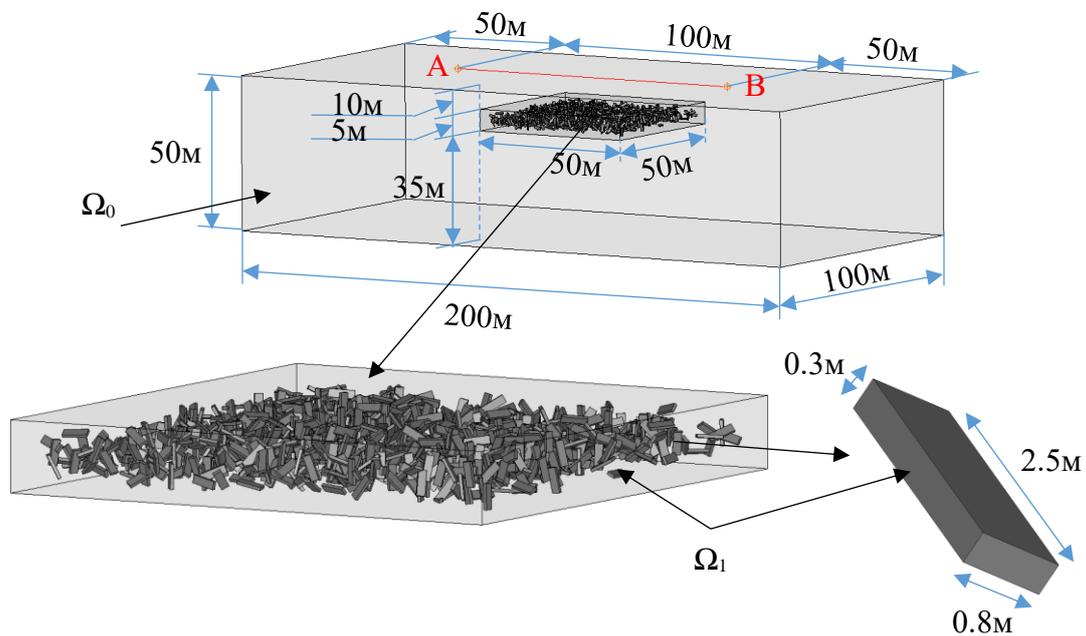


Рисунок 4.25 – Геометрические характеристики области моделирования, в малой подобласти которой сосредоточены включения-трещины (всего среда содержит 1000 включений)

Таким образом, в области  $\Omega = \Omega_0 \cup \Omega_1$  (Рисунок 4.25) сформулируем краевую эллиптическую задачу следующего вида:

$$-\text{div}\left(\left(\rho(\mathbf{x})\right)^{-1} \text{grad}U(\mathbf{x})\right) = 0 \text{ в } \Omega, \quad (4.2)$$

$$U(\mathbf{x})\Big|_A = -10^{-4}, \quad U(\mathbf{x})\Big|_B = 10^{-4}, \quad (4.3)$$

$$\left(\rho(\mathbf{x})\right)^{-1} \frac{\partial U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\partial\Omega(A \cup B)} = 0, \quad (4.4)$$

$$U(\mathbf{x})\Big|_{\Gamma_{in}^+} = U(\mathbf{x})\Big|_{\Gamma_{in}^-}, \quad (\rho(\mathbf{x}))^{-1} \frac{\partial U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\Gamma_{in}^+} = (\rho(\mathbf{x}))^{-1} \frac{\partial U(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\Gamma_{in}^-}, \quad (4.5)$$

где  $A$  и  $B$  – часть внешней границы  $\partial\Omega$ , соответствующая заземленным электродам (Рисунок 4.25).

Для решения данной задачи воспользуемся двумя подходами:

- 1) применение гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов (FE-НММ) во всей области моделирования;
- 2) апскейлинг модели (Рисунок 4.26), заключающийся в решении дополнительной подзадачи гомогенизации (получения эффективного УЭС гетерогенной среды) в малом представительном объеме  $\Omega^{RVE} \subset \Omega_0$ , с последующим решением общей задачи (4.2) в области  $\tilde{\Omega} = \tilde{\Omega}_0 \cup \Omega_{eff}$  с использованием эффективной характеристики среды в подобласти, занимаемой включениями.

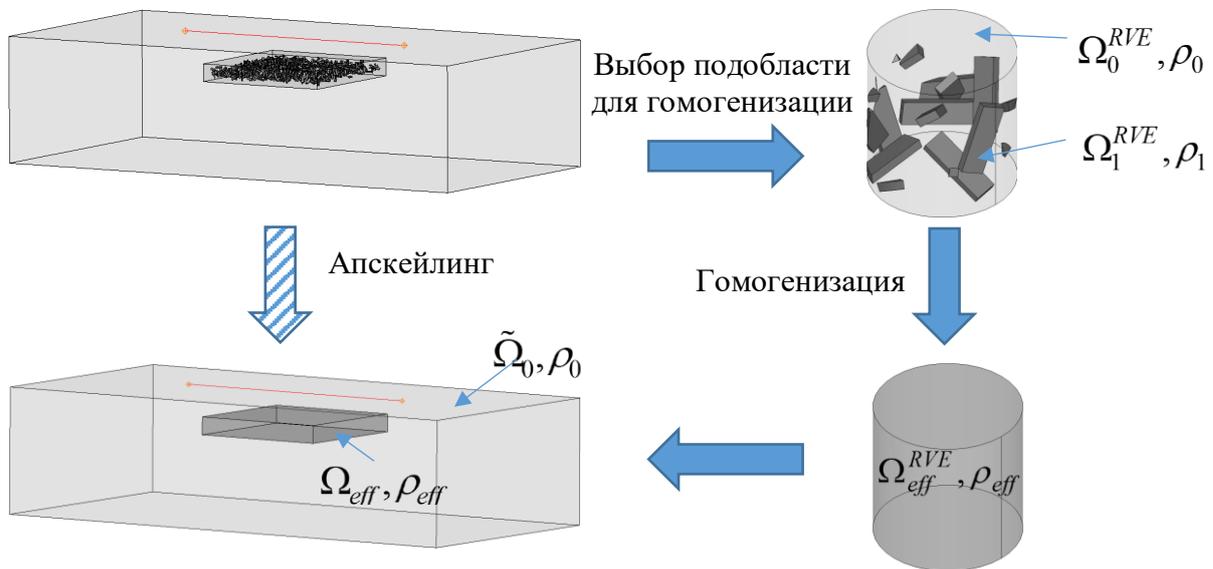


Рисунок 4.26 – Алгоритм апскейлинга модели для задачи распределения скалярного потенциала в среде с микровключениями, сосредоточенными в малой подобласти

Сравнение результатов решения (Рисунок 4.27) сформулированной задачи двумя рассмотренными подходами показало их эквивалентность (относительная погрешность не превышает 7%). При этом время решения задачи (4.2)

гетерогенным методом во всей области  $\Omega$  (способ 1) составило 35 минут, тогда как апскейлинг потребовал 8 минут, что меньше почти в 6 раз. Кроме того, при насыщении среды включениями меньшего размера, дискретный размер полной многомасштабной задачи даже для двухуровневого FE-НММ станет чрезмерным.

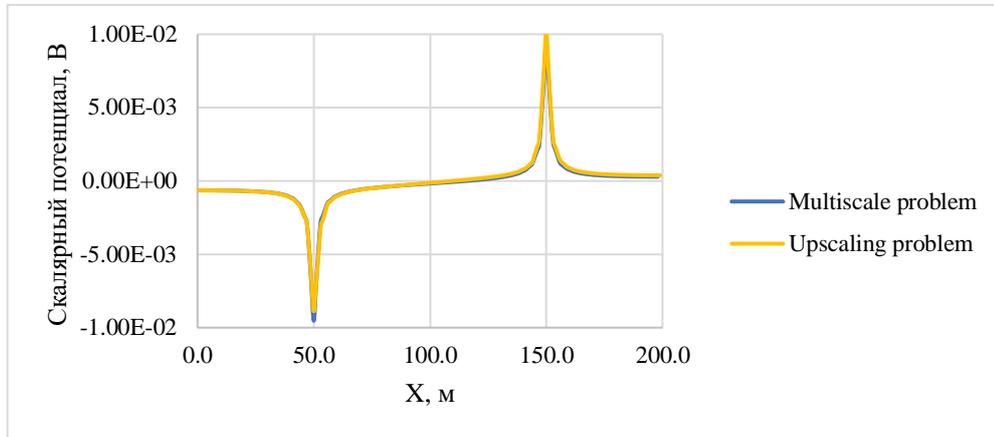


Рисунок 4.27 – Распределение скалярного потенциала вдоль линии, проходящей через электроды А и В

### Выводы по главе

В главе приведены результаты исследований влияния на эффективный тензор упругости и на эффективное удельное электрическое сопротивление (в том числе и на порог перколяции) таких факторов, как физические свойства включений и матрицы, концентрация, ориентация и способ размещения в образце. На основании проведенных вычислительных экспериментов можно сделать следующие выводы.

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, так и геометрической структуры. В большей степени это проявляется для случая проводящих включений в непроводящей (слабопроводящей) среде. При этом для рассматриваемых образцов, значимого различия в компонентах эффективных тензоров упругости не наблюдалось. Но было отмечено, что, при определенных

способах размещения включений, образцы показывали устойчивые упругостные свойства, характерные для одной из базовых типов сред (изотропия, трансверсальная изотропия и др.). При повышении концентрации включений данное соответствие становилось более явным.

При высоких концентрация включений было отмечено следующее:

- в случае насыщения среды слабоконтрастными включениями (отношение УЭС матрицы к УЭС включений меньше  $10^2$ ) порог перколяции не достигается;
- площадь поверхности отдельного включения обратно-пропорциональна величине порога перколяции материала, насыщенного включениями такого типа (данный результат согласуется с геометрическими предположениями о том, что объекты с большей площадью поверхности образуют кластеры при меньшей объемной концентрации);
- если включения в среде сосредоточены в подобласти, то является недопустимым упрощение модели до равномерного распределения;
- для смеси включений с различными УЭС может наблюдаться несколько скачкообразных изменений эффективного УЭС среды (т.е. несколько порогов перколяции).

## Глава 5 ОПИСАНИЕ ПРОГРАММНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Вычислительные схемы численной гомогенизации, состоящие из двух основных этапов: решение прямой задачи моделирования процессов в среде при заданных условиях и вычисление эффективных характеристик по полученным распределениям полей, реализованы в виде двух основных программных комплексов (Рисунок 5.1):

- 1) MultiscaleMech3D (Приложение А), предназначенный для решения прямой задачи моделирования физических процессов (распределение скалярного потенциала под действием постоянного тока и упругая изотермическая деформация твердого тела при воздействии внешних нагрузений различных типов) в трехмерных объектах с физической и геометрической многомасштабностью;
- 2) EffectiveProperties3D (Приложение Б), позволяющий вычислить удельное эффективное электрическое сопротивление и эффективный тензор упругости образца по известным распределениям соответствующих физических полей.

Данные комплексы являются независимыми, однако предусмотрены программные возможности, позволяющие сократить сервисные операции, связанные с формированием сеточных структур при решении полной задачи гомогенизации. Такой подход обеспечивает достаточную гибкость разработанных комплексов и является наиболее эффективным.

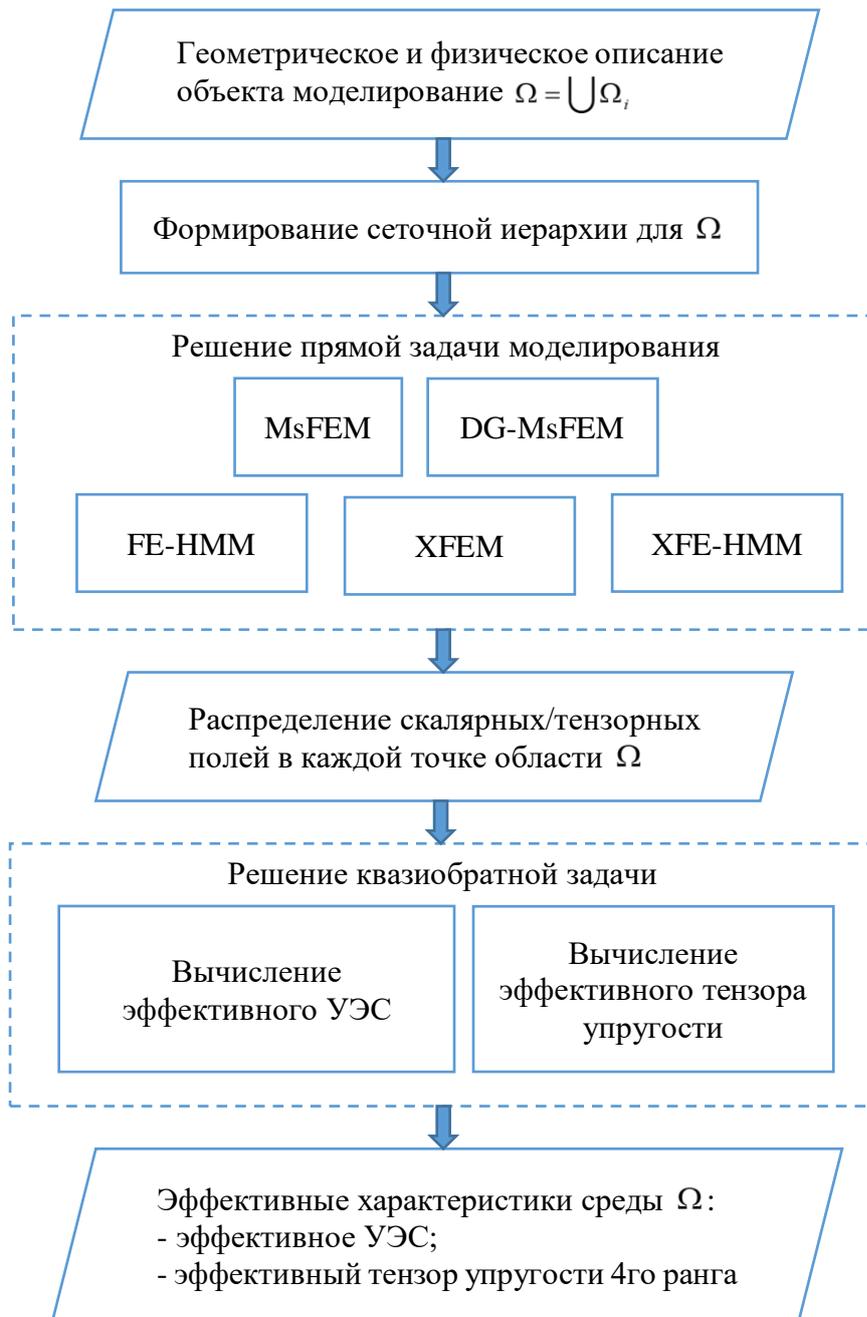


Рисунок 5.1 – Базовая структура программных комплексов

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

### 5.1 Решение прямой задачи моделирования физических процессов

В программном комплексе MultiscaleMech3D реализованы вычислительные схемы модификаций многомасштабных методов для решения стационарных и

квазистационарных задач в гетерогенных средах со скалярными и тензорными характеристиками. Полный перечень реализуемых модификаций методов и соответствующие им типы конечных носителей на макроуровне приведены в таблице 5.1 (носителями на микроуровне являются тетраэдры первого и второго порядков).

Таблица 5.1 – Вычислительные схемы, реализуемые в программном комплексе MultiscaleMech3D

Коэффициенты в уравнении	Метод	Тип носителя на макроуровне (3D)		
		Параллелепипед	Тетраэдр	Полиэдр
Скалярные	MsFEM	+	+	-
	FE-HMM	+	+	+
	DG- MsFEM	-	-	+
Тензорные	FE-HMM	-	+	+
	XFEM	-	+	-
	XFE-HMM	-	-	+

В таблице использованы следующие сокращенные названия методов: MsFEM – многомасштабный метод конечных элементов [22], FE-HMM – гетерогенный многомасштабный метод конечных элементов [86], DG-MsFEM – многомасштабный разрывный метод Галёркина, XFEM – расширенный метод конечных элементов [167], XFE-HMM – расширенный гетерогенный многомасштабный метод конечных элементов.

Вычислительная технология реализуемых многомасштабных методов состоит из следующих основных этапов:

- 1) геометрическая декомпозиция:
  - a) первый уровень (макроэлементы): построение конечноэлементного разбиения на грубом масштабе,
  - b) второй уровень (микроэлементы): построение конечноэлементных разбиений каждого из макроэлементов на микроуровне в соответствии со внутренней геометрической структурой макроэлемента и со структурой реализуемого метода;
- 2) функциональная декомпозиция:
  - a) формирование базиса, определенного на микроразбиении,

- b) построение многомасштабных функций формы, определенные на макроэлементах в соответствии с п.1.b.

### **5.1.1 Алгоритмы реализуемых многомасштабных методов**

В зависимости от особенностей решаемой задачи алгоритмы многомасштабных методов могут различным образом реализовывать описанные выше этапы. Для рассматриваемых в данной работе задач моделирования физических процессов в трехмерных объектах со сложной непериодической внутренней структурой предлагаются алгоритмы, представленные в виде блок-схем на рисунках 5.2 – 5.6. В блок схемах используются обозначения, введенные ранее. Парами толстых горизонтальных линий обозначены блоки, внутри которых алгоритм является параллельным.

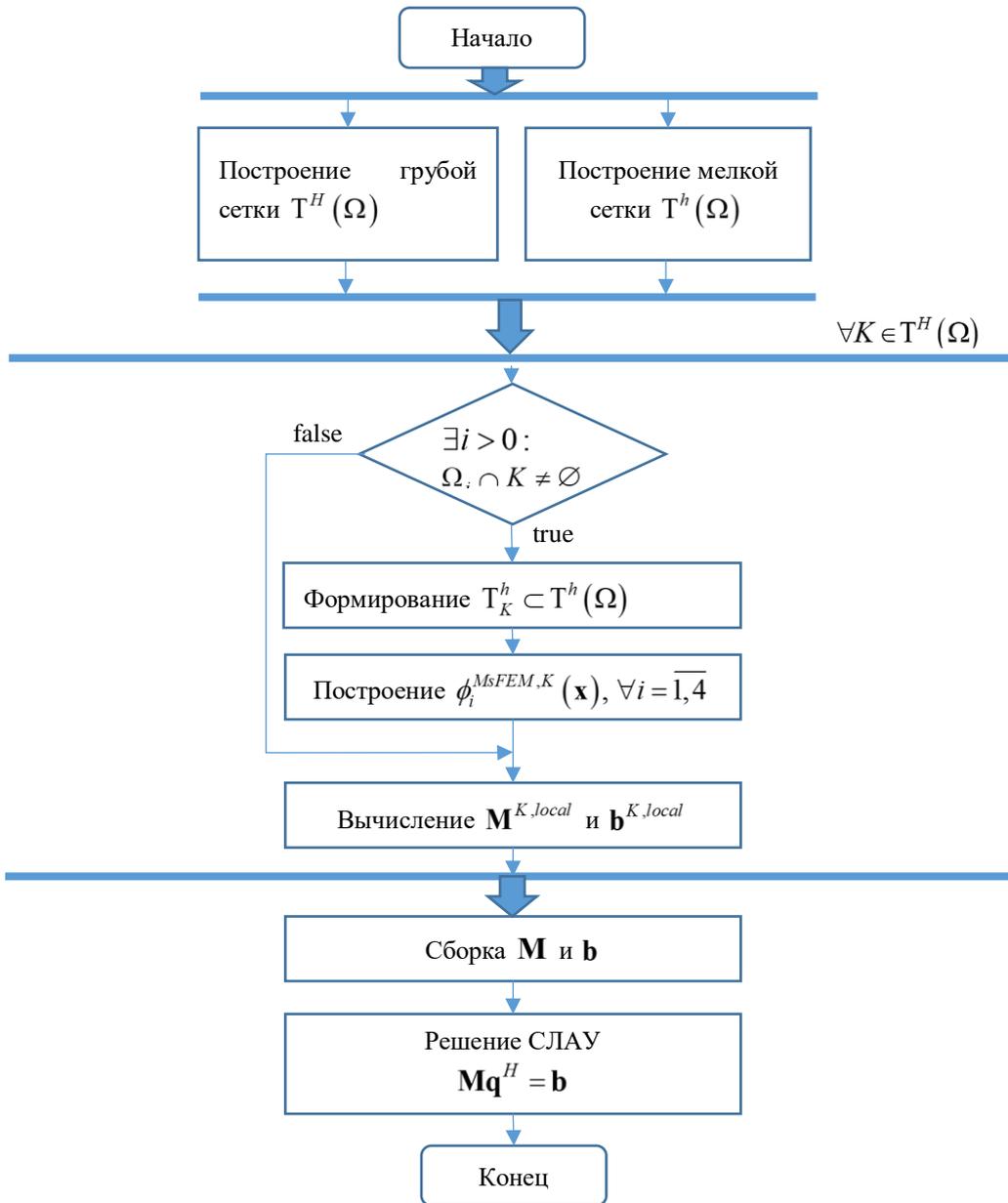


Рисунок 5.2 – Алгоритм многомасштабного метода конечных элементов (MsFEM)

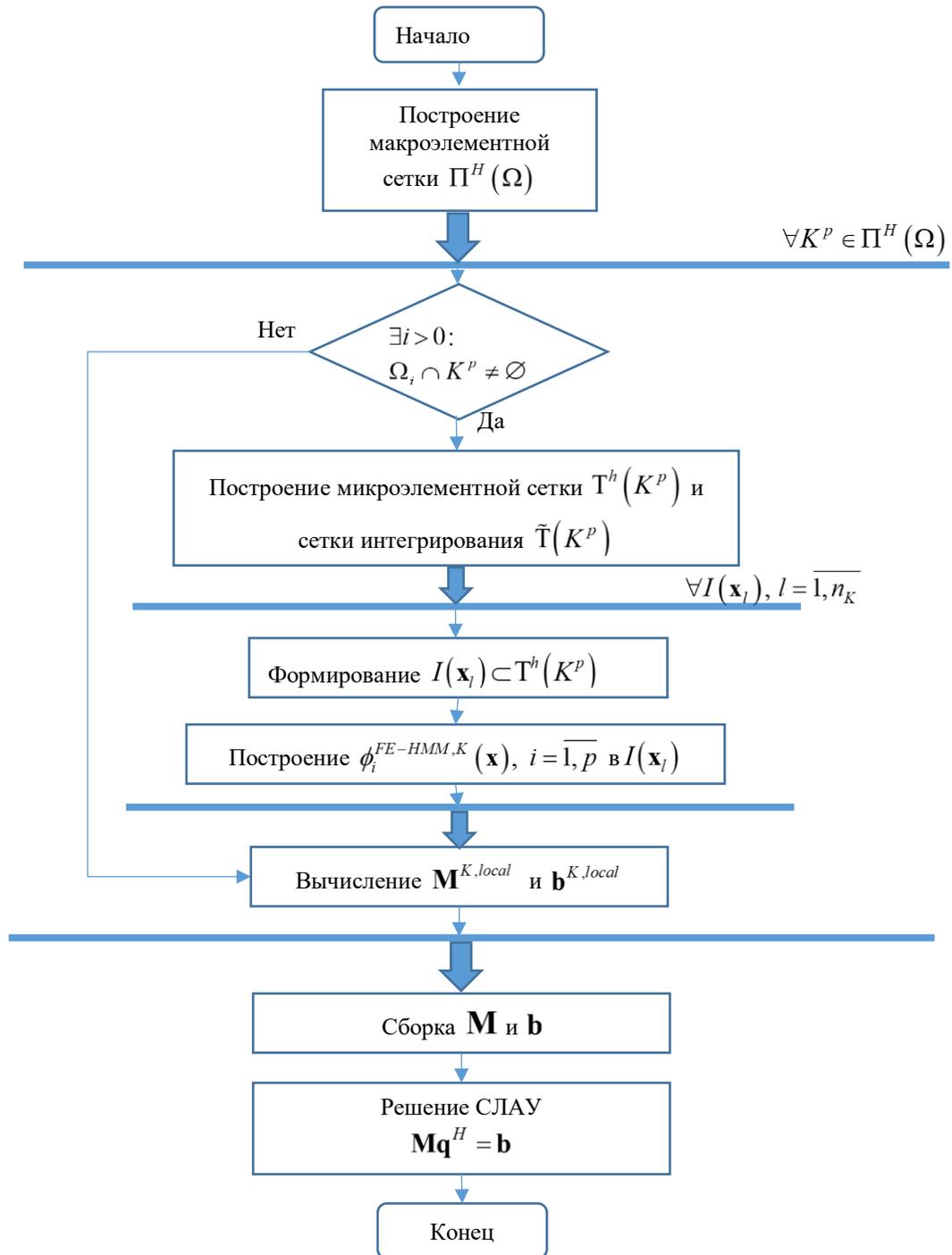


Рисунок 5.3 – Алгоритм гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов (FE-HMM)

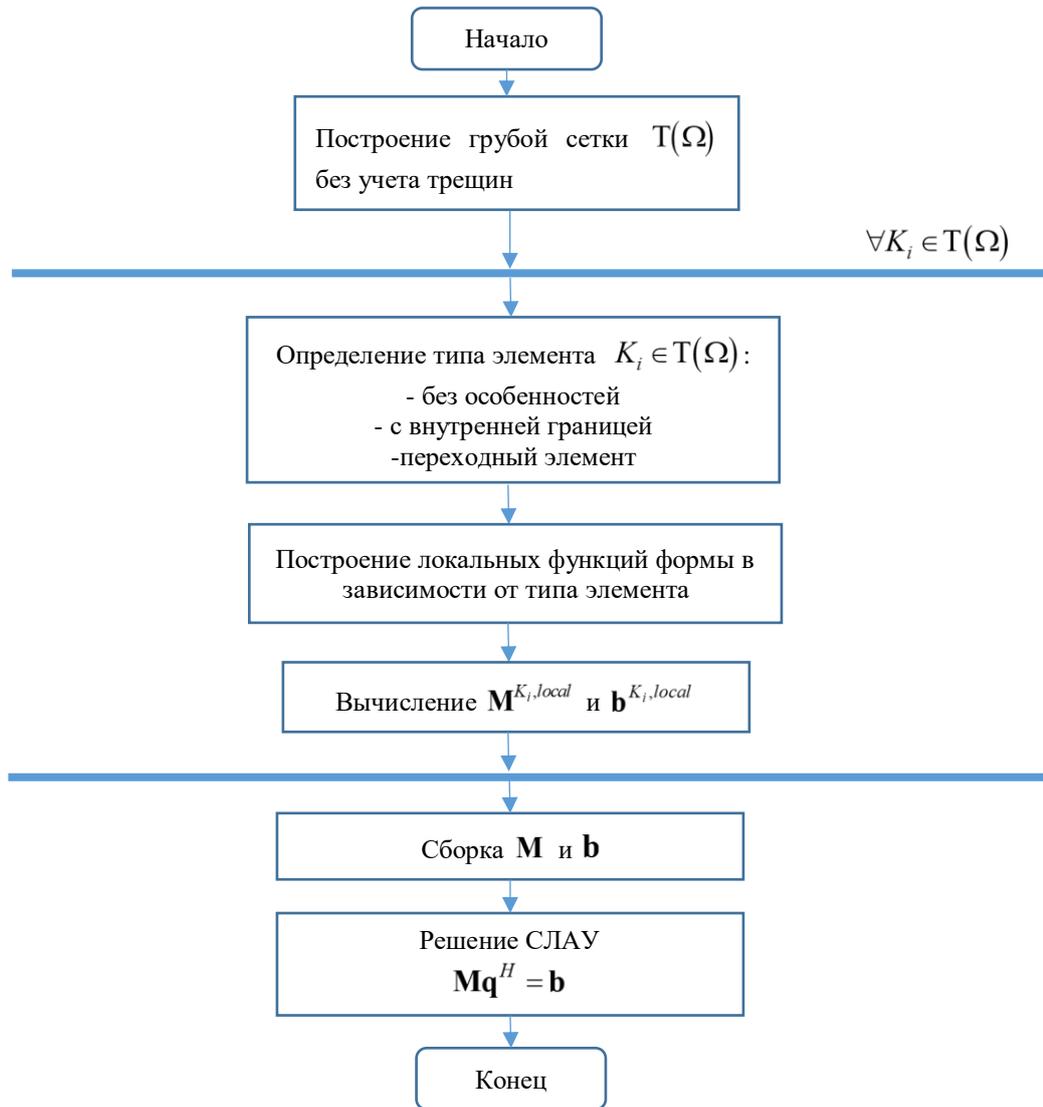


Рисунок 5.4 – Алгоритм расширенного метода конечных элементов (XFEM)

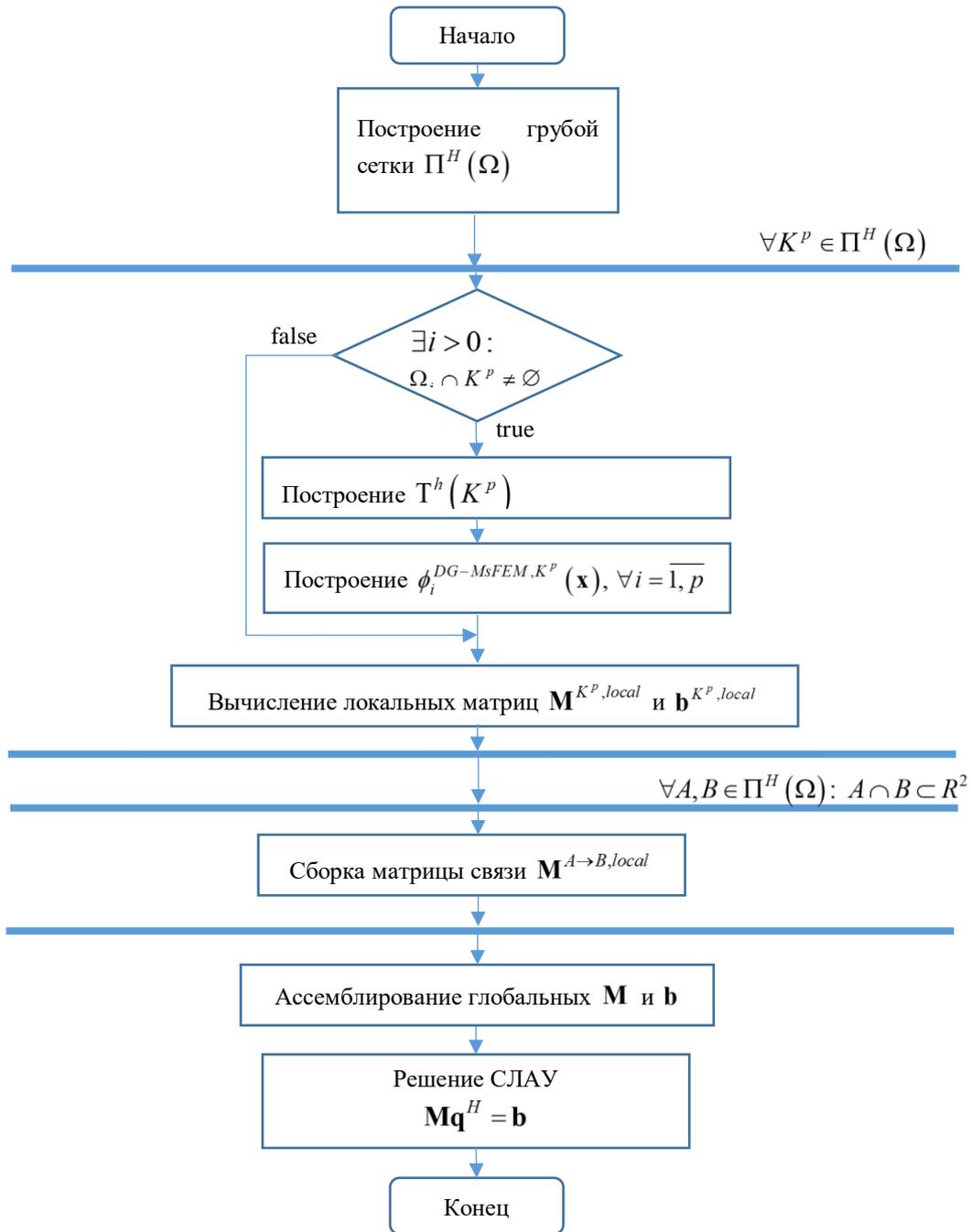


Рисунок 5.5 – Алгоритм разрывного многомасштабного метода конечных элементов (DG-MsFEM)

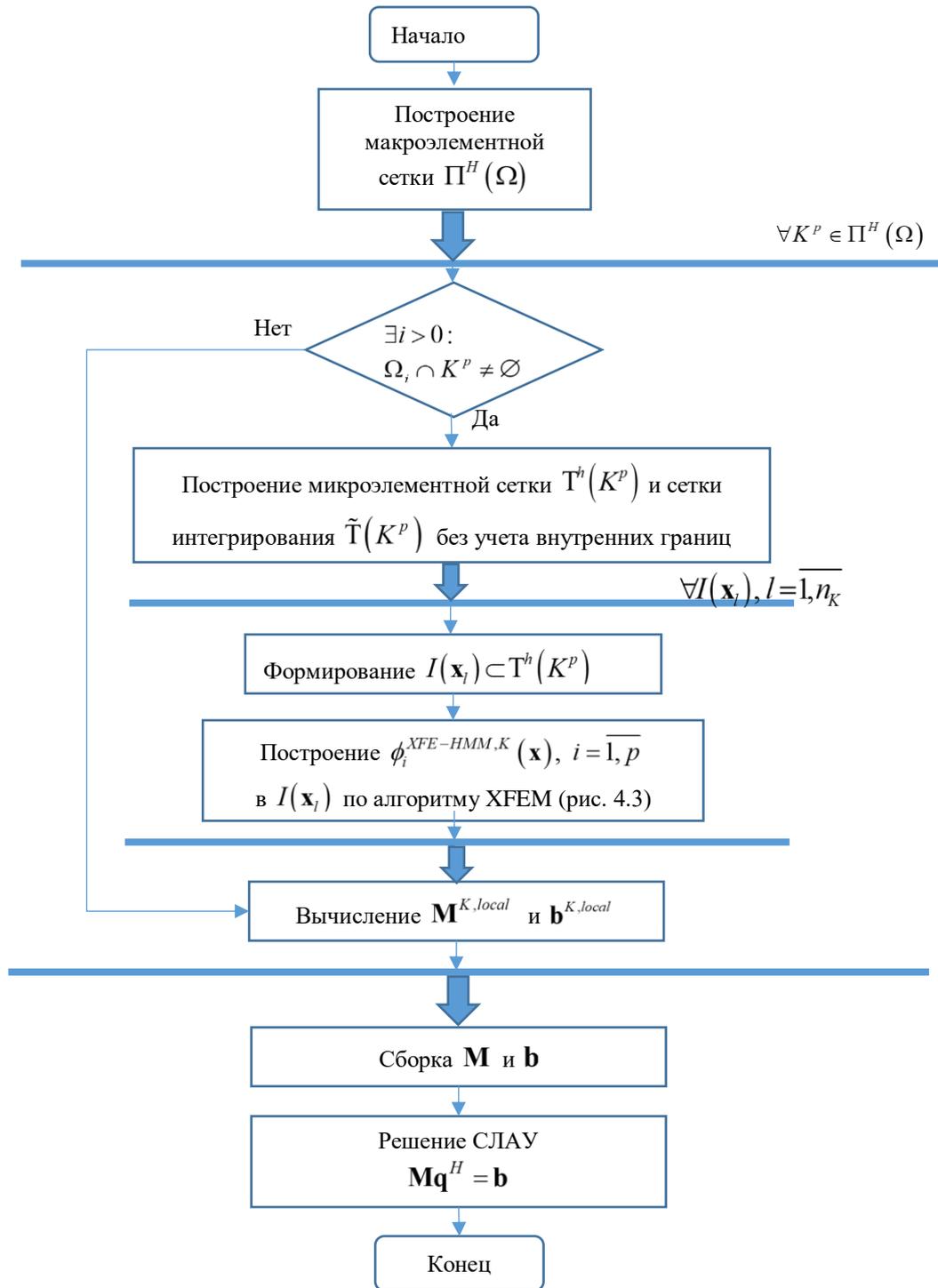


Рисунок 5.6 – Алгоритм расширенного гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов (XFEM-HMM)

### 5.1.2 Построение иерархических конечноэлементных сеток

Первым этапом работы всех рассматриваемых алгоритмов (Рисунки 5.2 – 5.6) является построение иерархии конечноэлементных сеток требуемой конфигурации. Рассмотрим далее особенности формирования сеточных структур для многомасштабных методов.

#### 5.1.2.1 Макроэлементная сетка

В MultiscaleMech3D реализуются следующие типы макроэлементов: параллелепипед, тетраэдр, произвольный полиэдр (таблица 5.1).

В рамках данной работы не рассматриваются вопросы, связанные с построением адаптивных симплицальных сеток в сложных трехмерных областях. Для этого используется открытая интегрируемая платформа для численного моделирования SALOME [194], предоставляющая широкий диапазон инструментов для работы с геометрическими объектами и непосредственно с сеточными структурами.

Полиэдральные разбиения строятся, как дуальные к первичной тетраэдральной сетке. Узлами полиэдральной сетки становятся барицентры геометрических элементов первичной сетки. Данный подход основан на идеях диаграммы Вороного [195], которая является дуальной к триангуляции Делоне [196]. Существуют различные реализации данного подхода для двумерных и трехмерных областей [197], [198], [199], [200], [201], как правило, связанные с выбором способа построения граничных элементов, так как в базовой постановке диаграмма Вороного строится для неограниченной области.

Рассмотрим первичную тетраэдральную сетку  $T(\Omega) = \{T^{3D}, T^{2D}, T^{1D}, T^{0D}\}$  построенную в односвязной области  $\Omega$ , с негладкой внешней границей  $\partial\Omega$ .  $T(\Omega)$  состоит из подмножества тетраэдров  $T^{3D} = \{t_i^{3D}, i = \overline{1, n_{T^{3D}}}\}$ , граней  $T^{2D} = \{t_i^{2D}, i = \overline{1, n_{T^{2D}}}\}$ , ребер  $T^{1D} = \{t_i^{1D}, i = \overline{1, n_{T^{1D}}}\}$  и узлов  $T^{0D} = \{t_i^{0D}, i = \overline{1, n_{T^{0D}}}\}$ . В данной

работе предлагается следующий алгоритм построения полиэдральной сетки  $\Pi(\Omega) = \{\Pi^{3D}, \Pi^{2D}, \Pi^{1D}, \Pi^{0D}\}$  из тетраэдральной сетки  $T(\Omega)$ :

1. выделить подмножества которые содержат элементы, лежащие на  $\partial\Omega$ :

а) подмножество  $T_{ext}^{2D} \subset T^{2D}$  содержит треугольные элементы, лежащие на  $\partial\Omega$ ,

б) если поверхность  $\partial\Omega$  не является гладкой (содержит «ребра»), то подмножество  $T_{ext}^{1D} \subset T^{1D}$  содержит все одномерные элементы тетраэдральной сетки  $T(\Omega)$ , аппроксимирующие «ребра»  $\partial\Omega$  (Рисунок 5.7.б),

в) если поверхность  $\partial\Omega$  содержит «углы», то подмножество  $T_{ext}^{0D} \subset T^{0D}$  содержит все соответствующие узлы тетраэдральной сетки  $T(\Omega)$  (Рисунок 5.7.а);

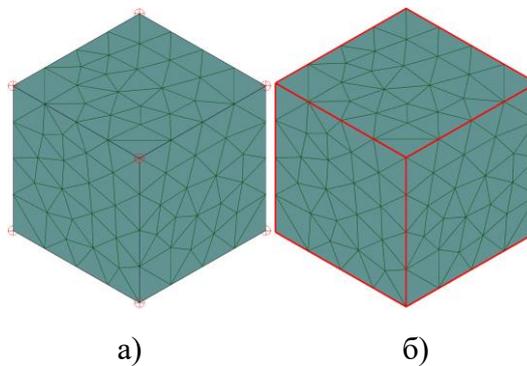


Рисунок 5.7 – Подмножества, выделяемые на первичном тетраэдральном сеточном разбиении (а – красным цветом выделены элементы  $T_{ext}^{0D}$ ; б – красным цветом выделены элементы  $T_{ext}^{1D}$ )

2. сформировать множество узлов полиэдральной сетки

$$\Pi^{0D} = \Pi_{3D}^{0D} \cup \Pi_{ext2D}^{0D} \cup \Pi_{ext1D}^{0D} \cup \Pi_{ext0D}^{0D} :$$

$$N : T^{3D} \mapsto \Pi_{3D}^{0D}, \quad (5.1)$$

$$N : T_{ext}^{2D} \mapsto \Pi_{ext2D}^{0D}, \quad (5.2)$$

$$N : T_{ext}^{1D} \mapsto \Pi_{ext1D}^{0D}, \quad (5.3)$$

$$N : T_{ext}^{0D} \mapsto \Pi_{ext0D}^{0D}, \quad (5.4)$$

где  $N$  – отображение, ставящее в соответствие барицентрам элементов первичной сетки узлы полиэдральной сетки;

3. сформировать множество ребер полиэдральной сетки

$$\Pi^{1D} = \Pi_{3D\_3D}^{1D} \cup \Pi_{3D\_ext2D}^{1D} \cup \Pi_{ext2D\_ext2D}^{1D} \cup \Pi_{ext2D\_ext1D}^{1D} \cup \Pi_{ext1D\_ext1D}^{1D} \cup \Pi_{ext1D\_ext0D}^{1D} :$$

$$E_{3D\_3D} : (\Gamma^{2D} \setminus \Gamma_{ext}^{2D}) \mapsto \Pi_{3D\_3D}^{1D}, \quad (5.5)$$

$$E_{3D\_ext2D} : (\Gamma_{ext}^{2D}) \mapsto \Pi_{3D\_ext2D}^{1D}, \quad (5.6)$$

$$E_{ext2D\_ext2D} : \{t^{1D} \mid t^{1D} \in \Gamma^{1D} \setminus \Gamma_{ext}^{1D} \text{ и } \exists t^{2D} \in \Gamma_{ext}^{2D} : t^{2D} \cap t^{1D} = t^{1D}\} \mapsto \Pi_{ext2D\_ext2D}^{1D}, \quad (5.7)$$

$$E_{ext2D\_ext1D} : \{(t^{1D}, t^{2D}) \mid t^{1D} \in \Gamma_{ext}^{1D}, t^{2D} \in \Gamma_{ext}^{2D} : t^{2D} \cap t^{1D} = t^{1D}\} \mapsto \Pi_{ext2D\_ext1D}^{1D}, \quad (5.8)$$

$$E_{ext1D\_ext1D} : \{t^{0D} \mid t^{0D} \in \Gamma^{0D} \setminus \Gamma_{ext}^{0D} \text{ и } \exists t^{1D} \in \Gamma_{ext}^{1D} : t^{1D} \cap t^{0D} = t^{0D}\} \mapsto \Pi_{ext1D\_ext1D}^{1D}, \quad (5.9)$$

$$E_{ext1D\_ext0D} : \{(t^{1D}, t^{0D}) \mid t^{1D} \in \Gamma_{ext}^{1D}, t^{0D} \in \Gamma_{ext}^{0D} : t^{1D} \cap t^{0D} = t^{0D}\} \mapsto \Pi_{ext1D\_ext0D}^{1D}, \quad (5.10)$$

где  $E_{3D\_3D}$  – отображение, ставящее в соответствие внутреннюю грань элемента первичной сетки ребро полиэдральной сетки (Рисунок 5.8.а),

$E_{3D\_ext2D}$  – отображение, ставящее в соответствие грани, которое являются внешним для первичной сетки, ребро полиэдральной сетки (Рисунок 5.8.б),

$E_{ext2D\_ext2D}$  – отображение, ставящее в соответствие ребру граничного элемента первичной сетки ребро полиэдральной сетки (Рисунок 5.8.в),

$E_{ext2D\_ext1D}$  – отображение, ставящее в соответствие смежным грани и ребру, лежащими на внешней границе первичной сетки, ребро полиэдральной сетки (Рисунок 5.8.г),

$E_{ext1D\_ext1D}$  – отображение, ставящее в соответствие узлу первичной сетки, лежащему на «ребре» границы  $\partial\Omega$  ребро полиэдральной сетки,

$E_{ext1D\_ext0D}$  – отображение, ставящее в соответствие смежным ребру и узлу, лежащими на внешней границе первичной сетки, ребро полиэдральной сетки (Рисунок 5.8.д);

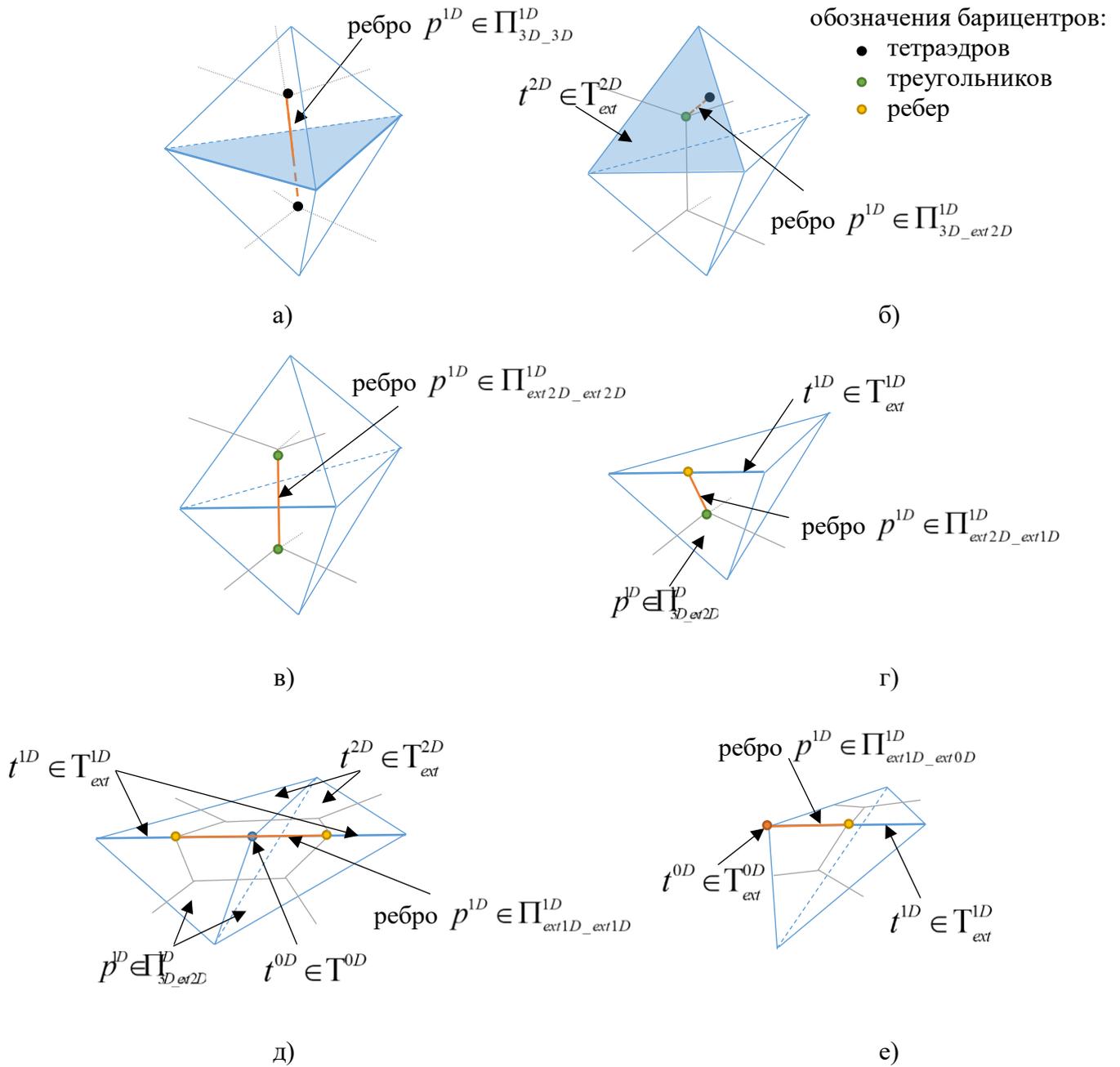


Рисунок 5.8 – Варианты построения ребер полиэдральной сетки (а – ребро между барицентрами соседних тетраэдров; б – ребро между барицентрами тетраэдра и треугольника, являющегося внешней гранью тетраэдра; в – ребро между барицентрами соседних треугольников, лежащих на внешней поверхности области моделирования; г – ребро между барицентрами треугольника, лежащего на внешней поверхности области моделирования, и внешнего ребра области; д – ребро между двумя барицентрами внешних ребер первичной тетраэдральной сетки; е – ребро между барицентром внешнего ребра первичной сетки и внешним узлом)

4. сформировать множество граней полиэдральной сетки  $\Pi^{2D} = \Pi_{1D}^{2D} \cup \Pi_{0D}^{2D}$ :

$$F_{1D} : (T^{1D}) \mapsto \Pi_{1D}^{2D}, \quad (5.11)$$

$$F_{0D} : \{t^{0D} \mid t^{0D} \in T^{0D} \text{ и } \exists t^{2D} \in T_{ext}^{2D} : t^{2D} \cap t^{0D} = t^{0D}\} \mapsto \Pi_{0D}^{2D}, \quad (5.12)$$

где  $F_{1D}$  – отображение, ставящее в соответствие ребру элемента первичной сетки грань полиэдральной сетки (Рисунок .а-в),

$F_{0D}$  – отображение, ставящее в соответствие узлу первичной сетки, лежащего на внешней границе  $\partial\Omega$ , грань полиэдральной сетки (Рисунок .г);

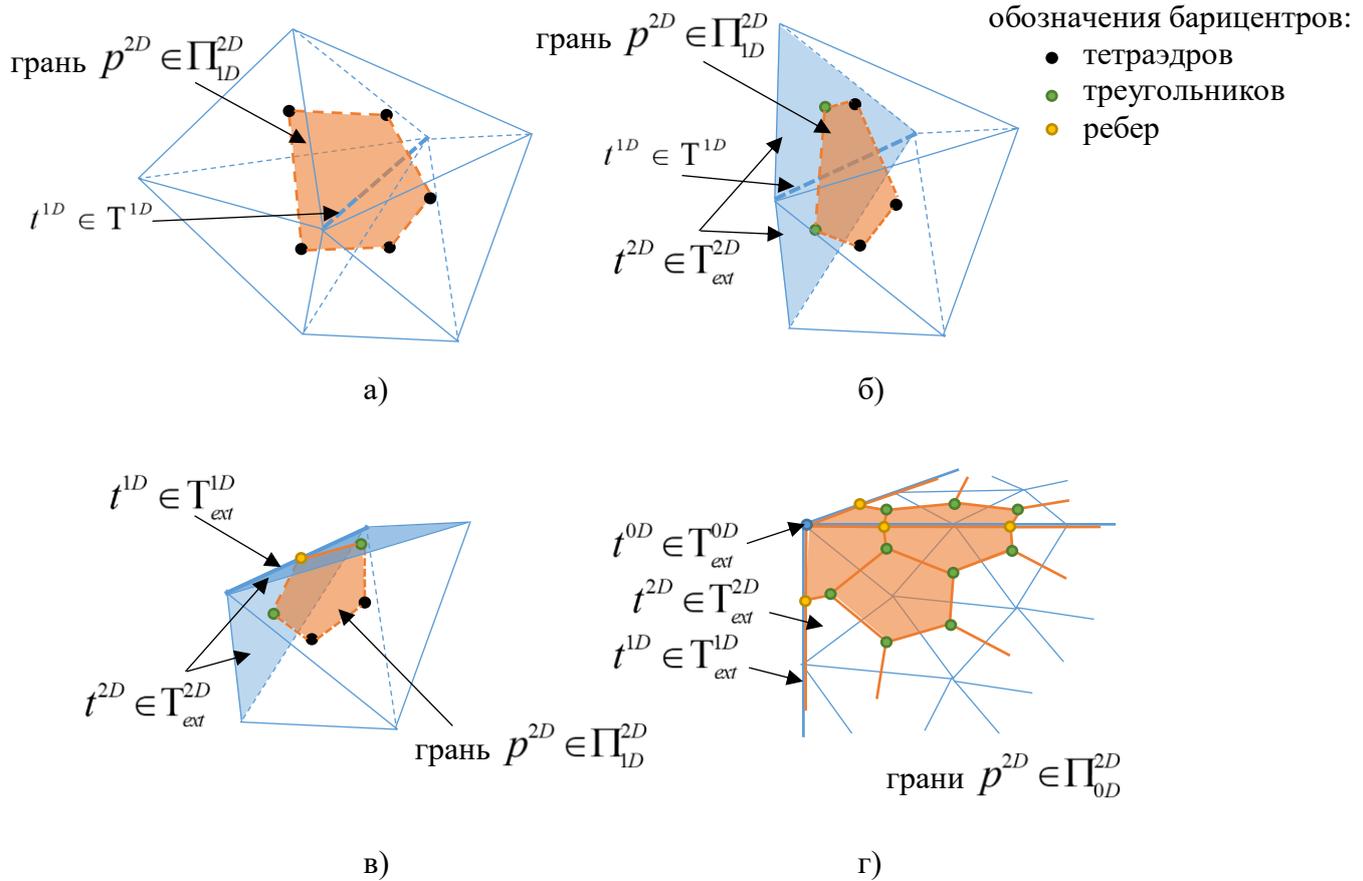


Рисунок 5.9 – Варианты построения граней полиэдральной сетки (а – грань полиэдра, лежащая строго внутри  $\Omega$ ; б, в – грани полиэдра с ребрами, принадлежащими  $\partial\Omega$ ; г – грани полиэдра полностью принадлежащие  $\partial\Omega$ )

5. сформировать множество полиэдров сетки  $\Pi^{3D}$ :

$$V_{0D} : (T^{0D}) \mapsto \Pi^{3D}, \quad (5.13)$$

где  $V_{0D}$  – отображение, ставящее в соответствие узлу первичной сетки полиэдр (Рисунок .б-в).

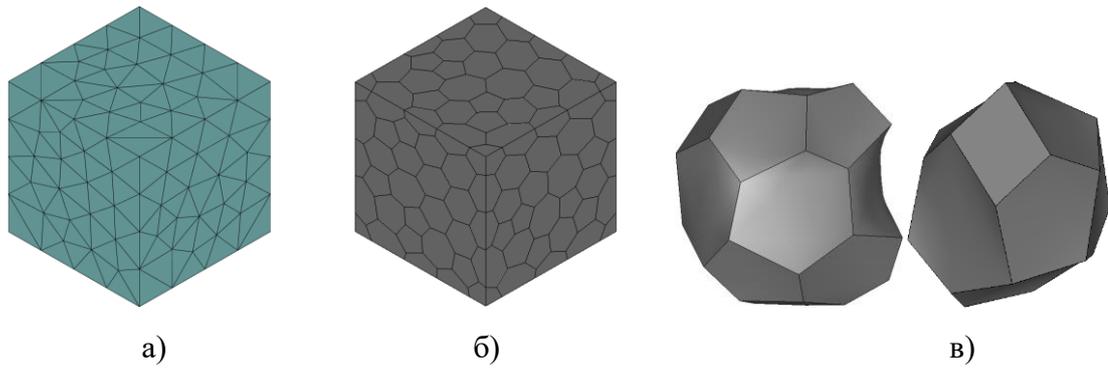


Рисунок 5.10 – Пример построенной полиэдральной сетки из первичной тетраэдральной нерегулярной сетки (а – первичная тетраэдральная сетка; б – полиэдральная сетка; в – примеры полиэдров)

Одним из недостатков рассматриваемого подхода к построению полиэдральной сетки является возможность появления неплоских граней и невыпуклых многогранников (Рисунок 5.10.в). Однако для предлагаемых в данной работе вычислительных схем на базе многомасштабных методов это не является критичным

### 5.1.2.2 Микроэлементная сетка

В соответствии с алгоритмами рассматриваемых многомасштабных методов на каждом из макроэлементов должны быть построены тетраэдральные адаптивные сетки с определенными свойствами. Например, в MsFEM необходимо обеспечение геометрического согласования микроэлементных сеток по границам соседних макроэлементов. Кроме того, используются одно- и двумерные конечноэлементные сетки, составляющие вместе с соответствующими им трехмерными сетками, иерархическую сеточную структуру, для решения подзадач для построения неполиномиальных функций формы. Такие дополнительные подсетки формируются из соответствующих трехмерных симплициальных разбиений путем последовательного выделения граничных элементов, имеющих «внешние» грани и ребра (Рисунки 5.11, 5.12).

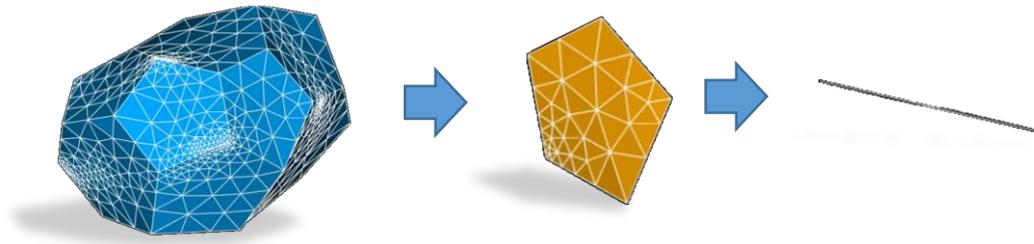


Рисунок 5.11 – Иерархическая система сеточных разбиений одного макроэлемента для разрывного многомасштабного метода конечных элементов (DG-MsFEM)

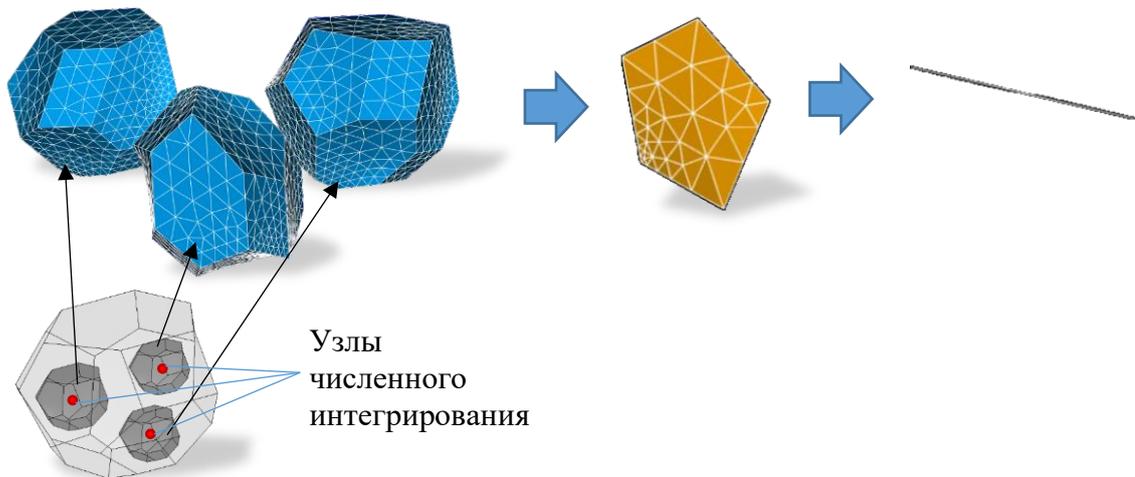


Рисунок 5.12 – Иерархическая система сеточных разбиений одного макроэлемента для гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов (FE-HMM)

Для построения симплициальных сеток внутри макроэлементов используется платформа SALOME [194], однако в явном виде данный программный комплекс не позволяет строить иерархические сеточные структуры, необходимые для многомасштабных методов. Кроме того, для проведения вычислительных экспериментов по получению эффективных характеристик в образцах с большим числом включений различной геометрии и локализации требуются инструменты, позволяющие выполнять генерацию внутренней структуры объектов с заданными геометрическими свойствами. Для этого разработана и реализована на языке C# программная оболочка GenerationS для платформы SALOME.

Входными данными для программы GenerationS является макроэлементная сетка и геометрические свойства включений, которые задаются через графический

интерфейс приложения (Рисунок 5.13, 5.14). Предусмотрена возможность задания случайных свойств (угла поворота, местоположения в образце) по некоторому закону распределения. Образец может быть заполнен включениями различных типов. Генерация для каждого из типов включений производится независимо, что существенно расширяет возможности для моделирования. Для построения сеток производится системный вызов соответствующего приложения платформы SALOME (без графического режима) с последующим контролем результатов генерации. В случае возникновения ошибок в построенных сетках (например, наличие тетраэдров нулевого объема) в окно «Вывод» транслируется соответствующее сообщение.

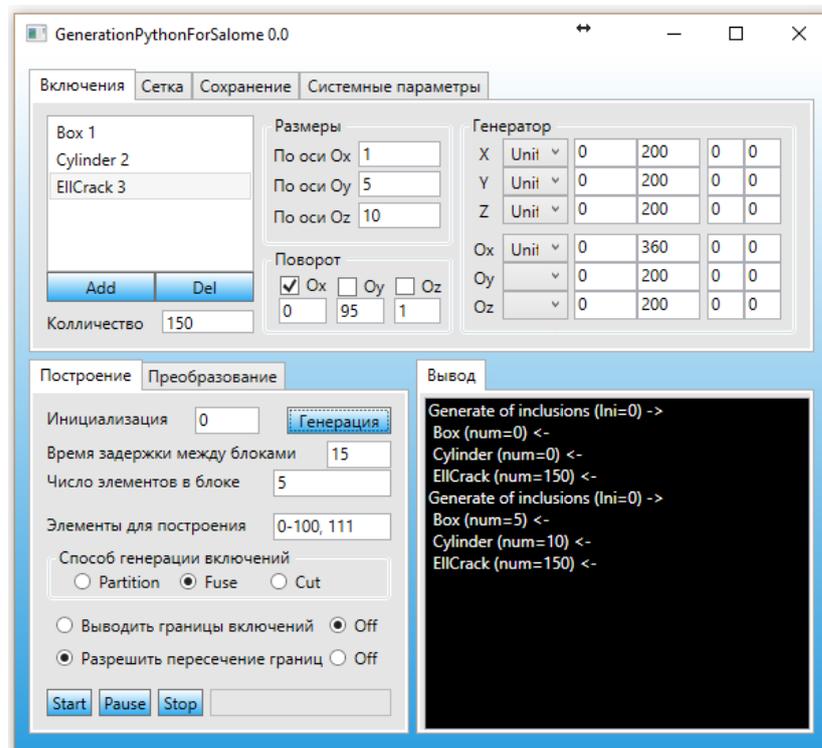


Рисунок 5.13 – Часть графического интерфейса программы GenerationS, предназначенная для задания внутренней структуры образца и контроля за процессом построения микроэлементных сеток

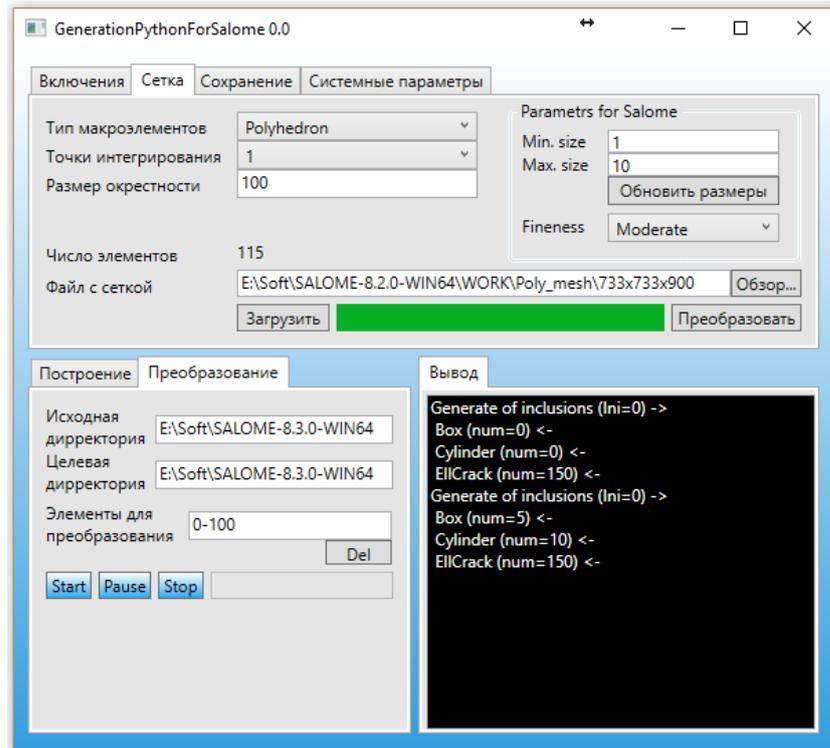


Рисунок 5.14 – Часть графического интерфейса программы GenerationS, предназначенная для ввода и преобразования макро- и микроэлементных сеток

Выходными данными программы GenerationS является иерархическая сеточная структура, хранящаяся в текстовых файлах, построенных в соответствии с требованиями программного комплекса MultiscaleMech3D.

### 5.1.3 Масштабируемость алгоритмов многомасштабных методов

Наиболее затратным с точки зрения необходимого процессорного времени и требуемой памяти является второй этап. Это связано с решением большого числа подзадач (3.12) – (3.14) для построения многомасштабных неполиномиальных функций формы. Например, для тетраэдрального макроэлемента при условии использования осциллирующих краевых условий для всех границ необходимо решить 4 трехмерных задачи (3.12), 12 задач на гранях макроэлемента (3.13) и 12 задач на ребрах (3.14). Понятно, что MsFEM следует применять только в тех случаях, когда классические методы дают плохую скорость сходимости и требуют слишком подробные сетки для получения требуемой точности, например, в задачах с мелкомасштабными включениями.

Значительное преимущество с точки зрения времени решения задач большой размерности многомасштабному методу конечных элементов даёт его естественная параллельность. А именно, задачи построения локальных многомасштабных неполиномиальных функций формы (3.12) – (3.14) для каждого макроэлемента решаются независимо, что дает возможность выполнить эффективное масштабирование алгоритма (Рисунок 5.2) [202].

#### *5.1.3.1 Равномерное распределение включений в образце*

Для исследования масштабируемости параллельной реализации метода была решена трехмерная задача в области (50 мм × 50 мм × 25 мм) с включениями в форме шаров диаметра 3,6 мм (Рисунок 5.15).

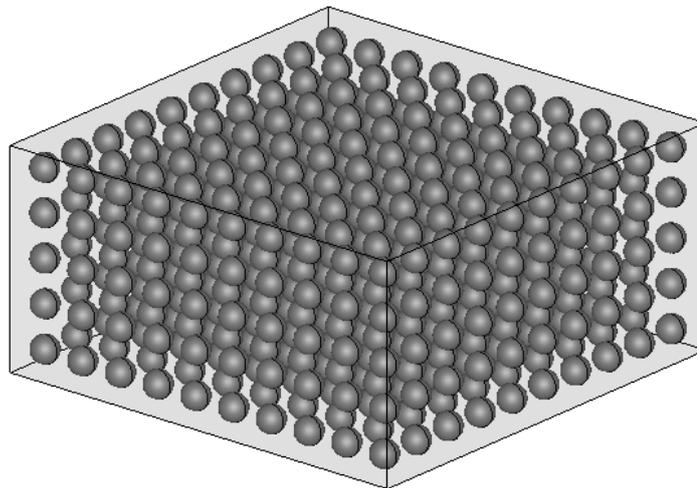


Рисунок 5.15 – Область с включениями в виде мелких шаров (концентрация 13,7%)

Макроэлементами являются тетраэдры (всего 423 тетраэдра). В качестве элементов мелкого разбиения также взяты тетраэдры (всего 466146 элементов). Вычисления производились на суперкомпьютере K100 Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН [185]. На рисунке 5.16 приведено время решения в зависимости от количества задействованных потоков.

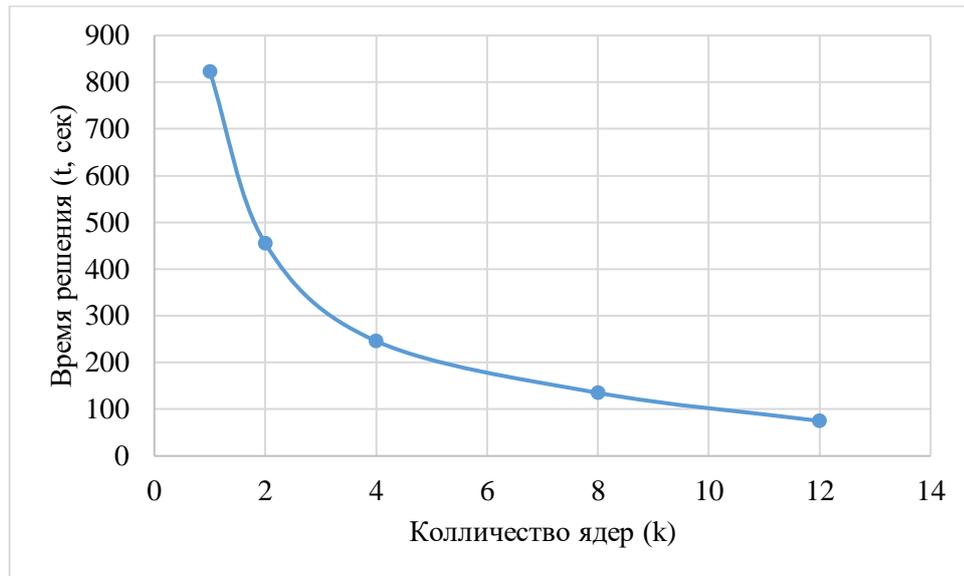


Рисунок 5.16 – Зависимость времени решения от количества потоков.

В ходе вычислительных экспериментов было получено почти линейное ускорение, то есть при увеличении количества ядер в  $k$  раз время решения уменьшается почти в  $k$  раз.

### 5.1.3.2 Хаотическое распределение включений в образце

Для оценки эффективности масштабирования многомасштабных методов для решения задачи распределения электростатического потенциала под действием постоянного тока в многомасштабных средах с включениями рассмотрим цилиндрические образцы из песчаника, пропитанного подсоленной водой, наполненного включениями различной формы (Рисунок 5.17). УЭС матрицы равно  $1,4 \text{ Ом} \cdot \text{м}$ . Включения являются трещинами и порами и заполнены подсоленной водой (УЭС  $10^{-5} \text{ Ом} \cdot \text{м}$ ).

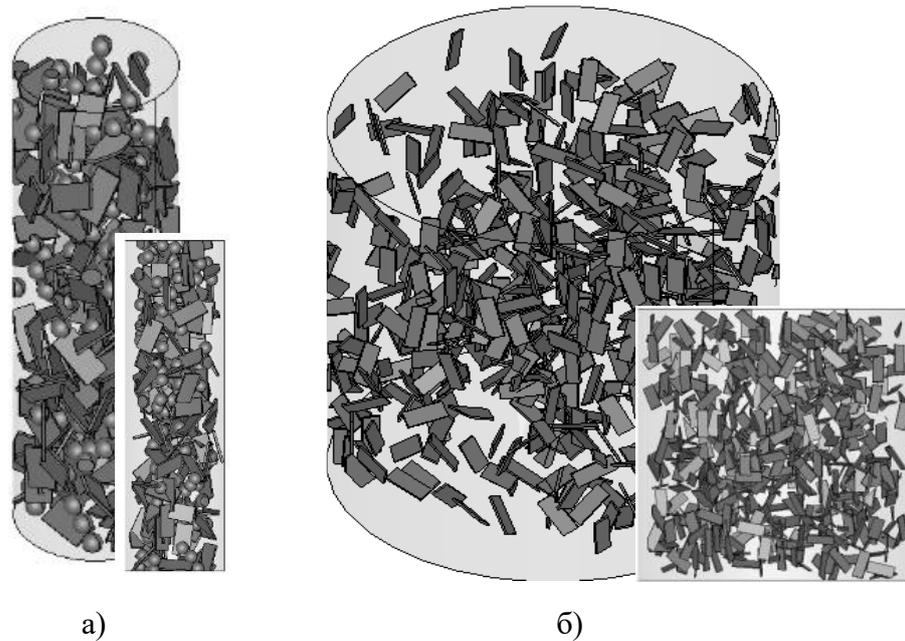


Рисунок 5.17 – Область моделирования (а – цилиндр радиуса 15 мм и высоты 100 мм с включениями-трещинами  $10 \times 0,6 \times 5$  мм и порами радиуса 1,93 мм; б – цилиндр с радиуса 50 мм и высоты 100 мм с включениями-трещинами  $10 \times 4 \times 0,5$  мм )

Для сравнения эффективности применения динамической и статической моделей организации параллельных вычислений рассмотрим образец с порами и трещинами (Рисунок 5.17.а). Образец содержит 300 включений, равномерно распределенных в объеме по равномерному закону. Объемная концентрация включений 8.9%. Макроэлементная сетка содержит 90 тетраэдральных конечных элементов. Минимальное число элементов в микроразбиении макроэлемента 5198, максимальное 440030. Суммарное число элементов микроразбиений во всех макроэлементах 2968738.

Исследования, выполненные на суперкомпьютере К100 Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН [185], показали, что для рассматриваемых многомасштабных методов системы со статическим распределением задач по потокам являются неэффективными, по сравнению с динамическими системами распределения ресурсов (Рисунок 5.18). Для рассмотренных случаев при использовании динамической модели время решения задачи сокращалось на 5% – 40%

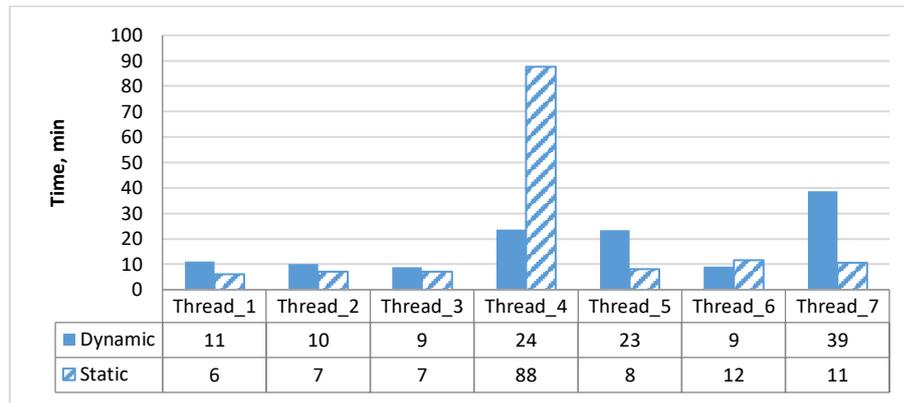


Рисунок 5.18.Использование процессорного времени при решении задачи

Для исследования влияния числа используемых процессоров при решении задачи на время решения рассмотрим образец с включениями-трещинами (Рисунок 5.17.б). Включения в количестве 600 штук распределены в образце по равномерному закону. Объемная концентрация включений 1,3%. Рассматриваются несколько сеточных разбиений, характеристики которых приведены в таблице 5.2.

Таблица 5.2 – Свойства сеточных структур для образца (Рисунок 5.17.б)

Число макро-элементов	Число элементов микроразбиений			Число включений, попадающих в макроэлемент	
	Минимальное	Максимальное	Сумма по всем макроэлементам	Минимальное	Максимальное
43	4375	22474	452203	8	44
119	340	14598	560863	1	26
217	41	8937	532131	0	21

Замеры времени показали, что с ростом числа макроэлементов при пропорциональном уменьшении числа элементов микромасштабных разбиений внутри макроэлементов время решения задачи уменьшается (Рисунок 5.19). Кроме того, наблюдается пропорциональное уменьшение времени решения задачи при увеличении числа используемых процессоров. Аналогичные результаты были получены при изменении геометрии включений-трещин, с сохранением объемной концентрации.

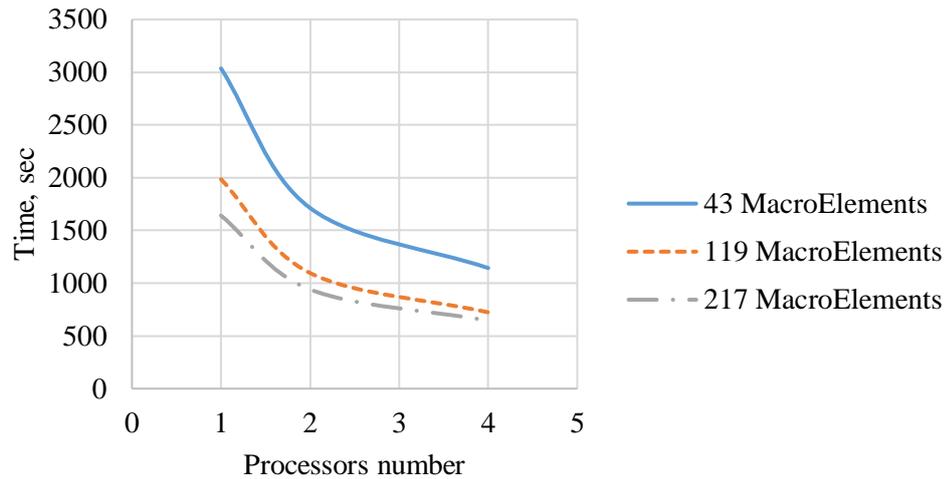


Рисунок 5.19 – Зависимость времени решения задачи от числа процессоров и свойств сеточных разбиений области моделирования

### 5.1.4 Структура программного комплекса

При разработке программного комплекса особое внимание уделялось созданию наиболее обобщенных реализаций в соответствии с идеологией объектно-ориентированного проектирования (Рисунок 5.20) и с использованием шаблонов (паттернов [203]). Такой подход позволяет использовать различные типы элементов на макро- и микроуровнях, не изменяя при этом структуры программы, а также адаптировать вычислительные схемы для решения широкого класса задач.

Рассмотрим далее основные структурные компоненты программного комплекса.

Класс «Element» является виртуальным классом, наследниками которого реализуют понятие конечного элемента в наиболее общем виде. А именно, для каждого из геометрических типов конечных элементов определены поля и методы, позволяющие автоматическую адаптацию объекта класса под требуемое функциональное пространство, в котором строится решение краевой задачи. Для корректной работы с такими адаптивными структурами используются различные интерфейсы, что позволяет существенно упростить разработку и реализацию новых алгоритмов и вычислительных схем на базе существующего программного комплекса.

Через структуру «Domain» осуществляется работа с подобластями области моделирования. Основным назначением данной структуры является передача информации о типе материала и о его свойствах в каждой точке области моделирования.

Класс-шаблон «Grid» содержит вспомогательные структуры и методы для работы с иерархическими сеточными структурами и с системой из подобластей, определяющих физические свойства объекта моделирования. Например, предусмотрено несколько методов для ввода и вывода данных в различном формате, в том числе в графическом виде (распределения поля, полученного в ходе решения задачи). В качестве входных данных чаще всего используются сеточные структуры, формируемые в программе «GenerationS». Одной из вспомогательных структур является октодерево [204]. Данная структура обеспечивает быстрый поиск элемента сетки, которому принадлежит заданная точка области. Кроме того, используются дополнительные классы и структуры: «Point» - реализует векторные и скалярные операции с объектом, являющимся точкой в трехмерной декартовой системе координат; «Crack» - отвечает за задание геометрической структуры трехмерной трещины через набор треугольников и содержит методы для работы (например, определение внешнего вектора к поверхности в заданной точке, проекция точки на фронт трещины, распространение трещины в заданном направлении и т.д.); «DenseMatrix» - класс-шаблон, обеспечивающий хранение плотной матрицы, которая в общем случае не является квадратной и симметричной, и предоставляющий инструменты для работы с ней (например, вычисление определителя матрицы, решение СЛАУ методом Гаусса с выбором ведущего элемента).

Классы «FEM\_matrix\_forMech» и «FEM\_matrix» реализуют программные интерфейсы для работы с сеточными и функциональными иерархическими структурами для решения задач моделирования физических процессов с тензорными и скалярными коэффициентами, соответственно. «RarefiedMatrix» является вспомогательным классом, который обеспечивает хранение

формируемых СЛАУ в разреженном строчно-столбцовом формате и предоставляет различные прямые и итерационные методы для их решения.

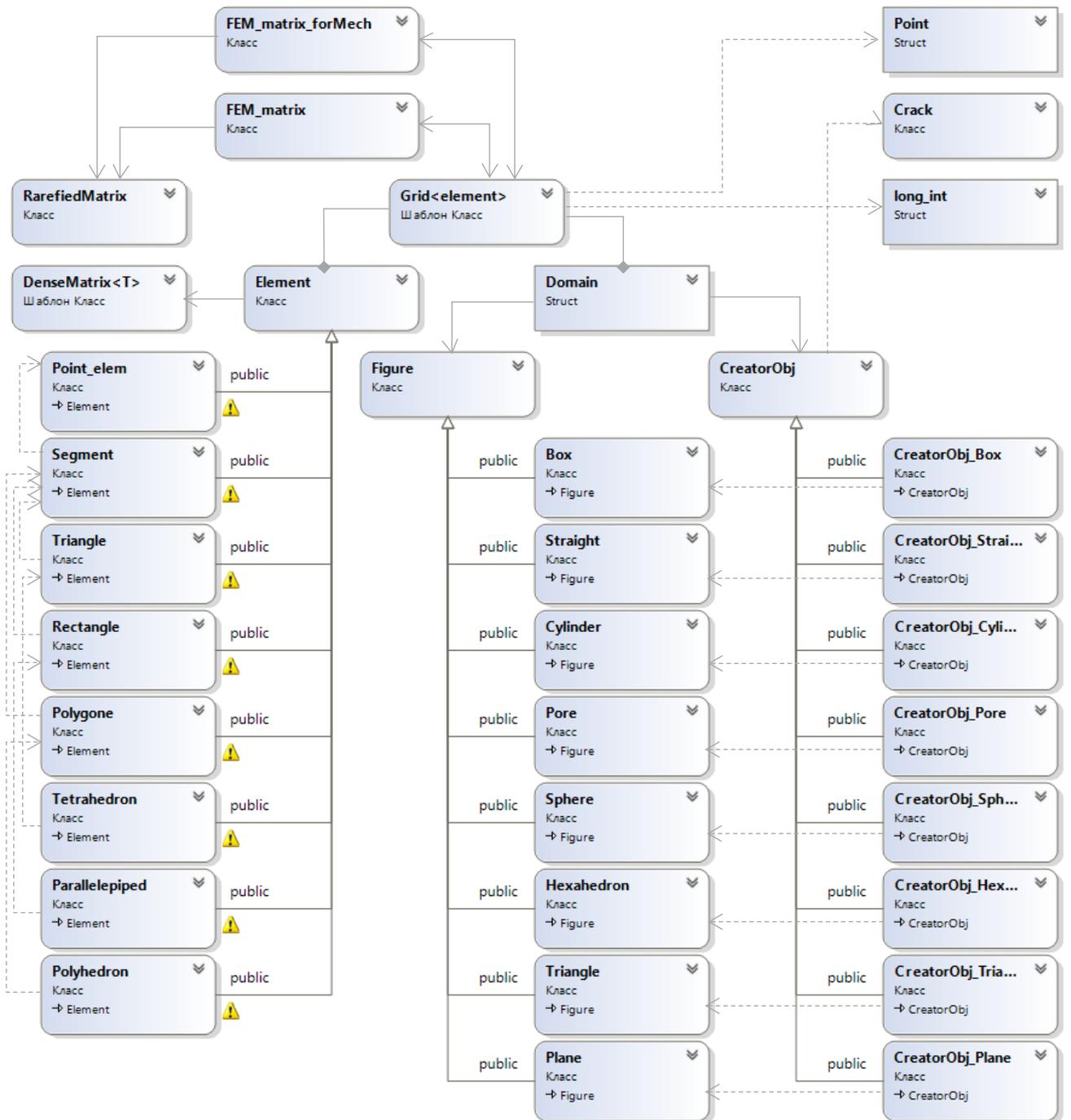


Рисунок 5.20 – Диаграмма классов программного комплекса MultiscaleMech3D

## 5.2 Численная гомогенизация

Программный комплекс EffectiveProperties3D предназначен для вычисления скалярных и тензорных эффективных характеристик по имеющимся распределениям физических полей. В рамках данной работы предлагаются вычислительные схемы для получения эффективного удельного электрического сопротивления и эффективного тензора упругости. Таким образом, реализуются два базовых алгоритма, которые будут рассмотрены далее.

### 5.2.1 Алгоритм вычисления эффективного удельного электрического сопротивления

Алгоритм получения эффективного УЭС гетерогенной среды основан на вычислении соотношения (2.11)

$$\rho_{эфф} = \left( \frac{\sqrt{\int_{\Omega} |(\rho^{\varepsilon}(\mathbf{x}))^{-1} \nabla U(\mathbf{x})|^2 d\Omega}}{\sqrt{\int_{\Omega} |\nabla U(\mathbf{x})|^2 d\Omega}} \right)^{-1}, \quad (5.14)$$

где  $U(\mathbf{x})$  – распределение скалярного потенциала, которое является решением задачи (2.2).

Для вычисления объемных интегралов в соотношении (5.14) предлагается параллельный алгоритм представленный на рисунке 5.21, поскольку для решения задачи распределения скалярного потенциала  $U(\mathbf{x})$  под действием постоянного тока при заданной разности потенциалов (2.2) в рамках программных комплексов MultiscaleMech3D и GenerationS формируется иерархическая сеточная структура и соответствующая ей функциональная иерархия. Данный алгоритм (Рисунок 5.21) является естественно параллельным благодаря иерархической организации данных, что соответствует обще идеологии многомасштабных методов.

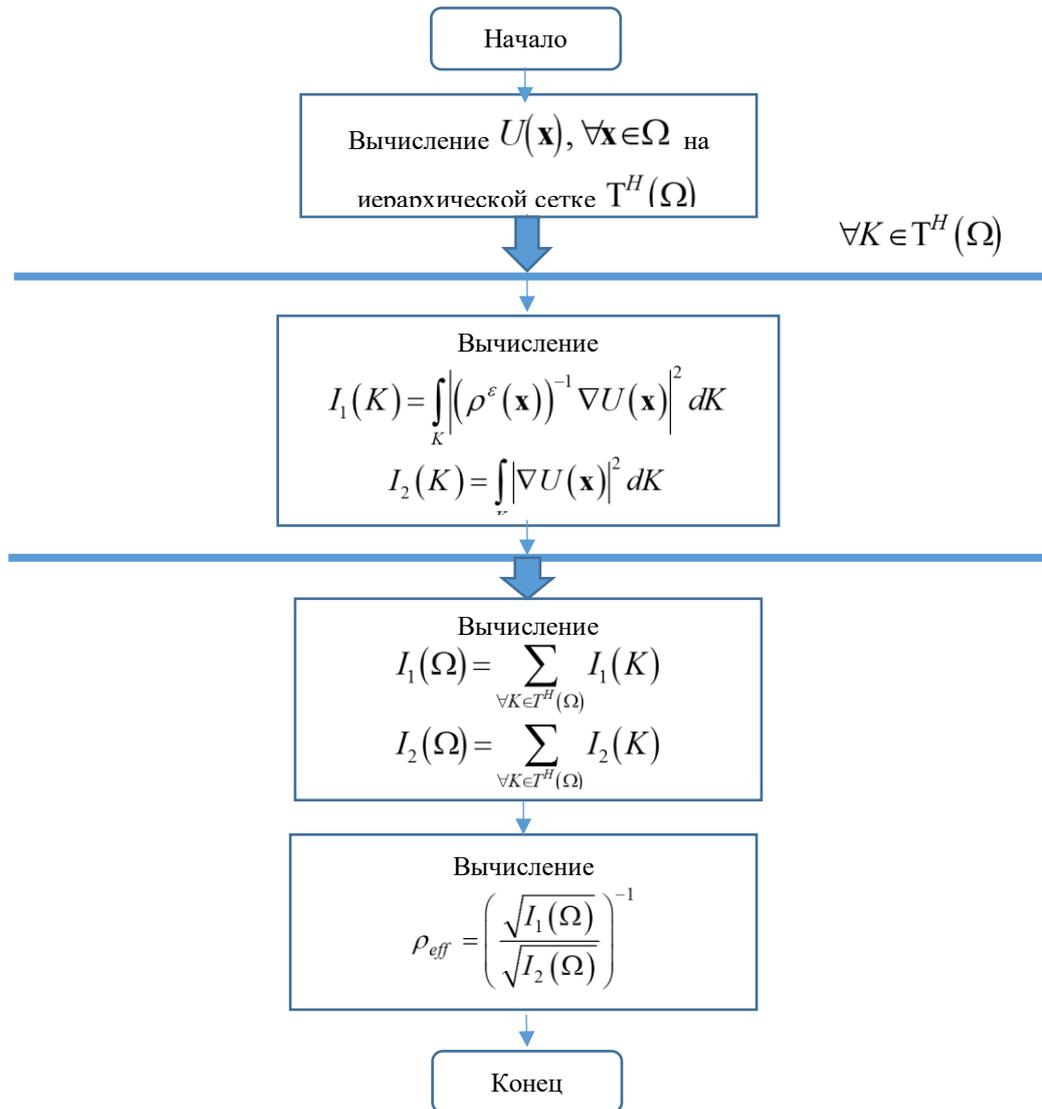


Рисунок 5.21 – Алгоритм вычисления эффективного УЭС по известному распределению скалярного потенциала в среде

## 5.2.2 Валидация и верификация алгоритма вычисления эффективного удельного электрического сопротивления

### 5.2.2.1 Включения из подшипниковой стали

Рассмотрим образец<sup>8</sup> (15×15×40 мм), состоящий из кварцевого песка, пропитанного раствором NaCl, и стальных включений-шариков с диаметром 2 мм. Размеры, количество и расположение включений выбирается в соответствии с

<sup>8</sup> Образцы были изготовлены в Институте химии твердого тела механохимии СО РАН Полубояровым В.А. в рамках интеграционного проекта №98 СО РАН.

классификацией образцов (Таблица 5.3, Рисунок 5.22). Удельное сопротивление включений  $\rho_1 = 1,4 \cdot 10^{-7}$  Ом·м, матрицы –  $\rho_0 = 3,3$  Ом·м.

Таблица 5.3 – Классификация образцов

№ п/п	Тип включений	Наличие включений	размеры включений	Распределение включений	Размеры, мм
		шт.	мм		
1	Шарики	20	d = 2	Равномерно по сетке 2x2x5	40,4x15,3x16,2
2		72	d = 2	Равномерно по сетке 3x3x8	40,7x15,2x17,4
3		20	d = 3,2	Равномерно по сетке с шагом 8 мм	40,2x15x15,1
4		20	d = 3,2	Равномерно по сетке с шагом 8 мм	40,25x15,2x16,6
5		20	d = 3,2	Равномерно по сетке с шагом 8 мм	40,2x15,2x17,9
6		20	d = 3,2	Равномерно по сетке с шагом 4 x2,8мм	40,2x15,2x15,5
7		20	d = 3,2	Хаотично	40,5x15x15,1
8	Кусочки проволоки	20	d = 2 h = 5	Равномерно по сетке с шагом 2,5x3,5мм	40x15,1x15,5
9		20	d = 2 h = 5	Хаотично	40,1x15,2x16,1

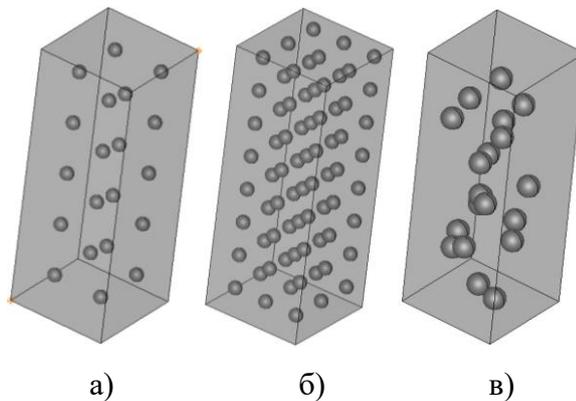


Рисунок 5.22 – Распределение включений-шариков в среде (а – равномерно по сетке 2x2x5 (эксперимент 1); б – равномерно по сетке 3x3x8 (эксперимент 2); в – хаотично (эксперимент 7))

Сравнение результатов вычислительных и лабораторных<sup>9</sup> экспериментов приведено в таблицах 5.4 и 5.5.

<sup>9</sup> Результаты лабораторных экспериментов предоставлены ведущим инженером ИНГГ СО РАН Н.А. Голиковым. Лабораторные эксперименты выполнялись по ГОСТ 25494-82 (Породы горные. Метод определения удельного электрического сопротивления.). Отклонения при повторных измерениях не превышают 3%.

Таблица 5.4 – Сравнение результатов физического и вычислительного экспериментов с некоторыми аналитическими оценками для образца 2

Метод	$\rho_{эфф}$ (Ом·м)	Относительная погрешность, %
Физический эксперимент	$2.77 \pm 0,04$	-
Приближение Максвелла	2.84	1.07% – 4.03%
Приближение Бруггемана	2.82	0.36% – 3.30%
Приближение когерентного потенциала	2.80	0.36% – 2.56%
Численное моделирование	2.79	0.71% – 2.20%

Таблица 5.5 – Результаты вычислительных экспериментов

Номер эксперимента	Физический эксперимент	Вычислительный эксперимент (FE-НММ на полиэдральных носителях)	
	$\rho_{эфф}$ (Ом·м)	$\rho_{эфф}$ (Ом·м)	Относительная погрешность, %
1	$2,95 \pm 0,04$	3,03	1,19% – 4,27%
2	$2,77 \pm 0,04$	2,79	0,77% – 2,25%
3	$5,61 \pm 0,08$	5,65	0,78% – 2,24%
4	$5,52 \pm 0,08$	5,47	0,60% – 2,37%
5	$5,50 \pm 0,08$	5,48	1,15% – 1,83%
6	$4,59 \pm 0,07$	4,14	8,43% – 11,14%
7	$4,25 \pm 0,07$	4,00	4,45% – 7,27%

### 5.2.2.2 Включения из медной проволоки

Рассмотрим образец ( $15 \times 15 \times 40$  мм) из кварцевого песка, пропитанного раствором NaCl, с медными включениями (кусочки медной проволоки). Размеры, количество и расположение включений выбирается в соответствии с классификацией образцов (Таблица 5.3, Рисунок 5.23). Удельное электрическое сопротивление включений  $\rho_1 = 1,4 \cdot 10^{-7}$  Ом·м, матрицы -  $\rho_0 = 3,3$  Ом·м.

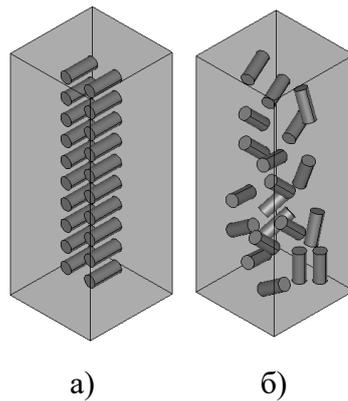


Рисунок 5.23 – Распределение включений-проволочек в среде (а – равномерно по сетке с шагом 2,5х3,5 (эксперимент 8); б – хаотично (эксперимент 9))

Сравнение результатов вычислительных и лабораторных<sup>10</sup> экспериментов приведено в таблице 5.6. Номер эксперимента соответствует нумерации, введенной в таблице 5.3.

Таблица 5.6 – Результаты вычислительных экспериментов

Номер эксперимента	Физический эксперимент	Вычислительный эксперимент (FE-НММ на полиэдральных носителях)	
	$\rho_{эфф}$ (Ом·м)	$\rho_{эфф}$ (Ом·м)	Относительная погрешность, %
8	5,03	5,24	2,64% – 5,76%
9	4,87	4,83	0,69% – 2,29%

### 5.2.3 Алгоритм вычисления эффективного тензора упругости

В программном комплексе EffectiveProperties3D реализован алгоритм вычисления плотного тензора упругости (Рисунок 5.24), основанный на энергетическом подходе [144], [116], [205]. На начальном этапе с помощью программного комплекса MultiscaleMech3D решается серия из 6 эллиптических задач (2.26) с краевыми условиями (Таблица 2.2), которые соответствуют одноосным растяжениям и сдвигам. Для этого в зависимости от особенностей области моделирования применяется один из многомасштабных методов, алгоритмы которых представлены на рисунках 5.2 – 5.6. Затем по полученным

<sup>10</sup> Результаты лабораторных экспериментов предоставлены ведущим инженером ИНГГ СО РАН Н.А. Голиковым. Лабораторные эксперименты выполнялись по ГОСТ 25494-82 (Породы горные. Метод определения удельного электрического сопротивления.). Отклонения при повторных измерениях не превышают 3%.

распределениям тензорных полей напряжений покомпонентно вычисляется эффективный тензор упругости  $\mathbf{D}_{eff}(\mathbf{x}) = d_{ijkp}^{eff}(\mathbf{x})$ ,  $i, j, k, p = \{x, y, z\}$  (2.32):

$$d_{ijkp}^{eff} = \frac{1}{(1 + 3\delta_{ijkp})\beta^2 |\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}^{(ij)} : \mathbf{D}^{\varepsilon} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(kp)} d\mathbf{x}, \quad (5.15)$$

где  $\delta_{ijkp}$  – символ Кронекера (2.33).

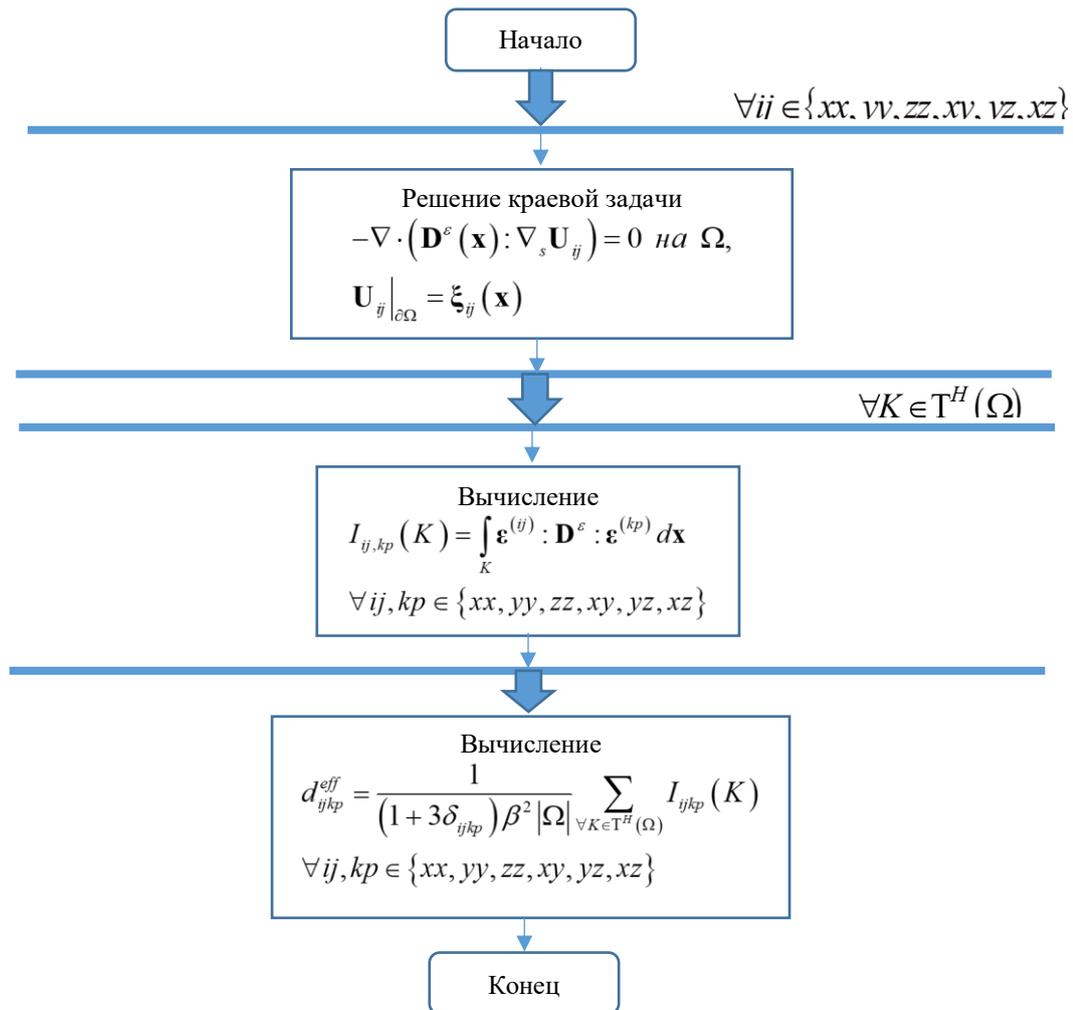


Рисунок 5.24 – Алгоритм вычисления эффективного плотного тензора упругости

#### 5.2.4 Верификация алгоритма вычисления эффективного тензора упругости

Для верификации разработанного программного комплекса для вычисления эффективного тензора упругости материалов с включениями выполним сравнение с аналитическими оценками. Рассмотрим квазиизотропную среду со сплошными сферическими включениями, расположенными равномерно в кубическом образце

со стороной 10 мм (Рисунок 5.25). Объемная концентрация включений варьируется от 10% до 50% изменением радиуса сфер при сохранении их количества и геометрического положения в образце.

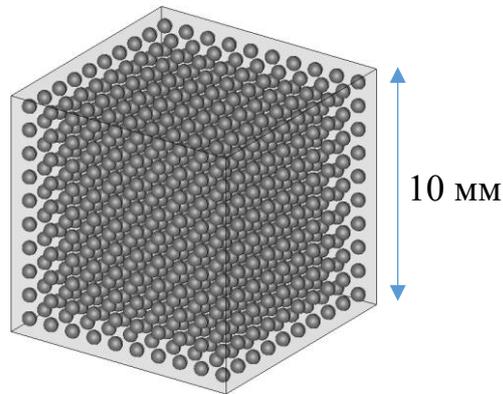


Рисунок 5.25 – Образец со сплошными сферическими включениями, расположенными равномерно (объемная концентрация включений 10%)

Свойства матрицы (медь) и включений (железо) приведены в таблице 5.7.

Таблица 5.7 – Модуль Юнга и коэффициент Пуассона меди и железа

Материал	Модуль Юнга ( $E$ , Па)	Коэффициент Пуассона ( $\nu$ )
Медь	$1,2 \cdot 10^{11}$	0,3
Железо	$2,06 \cdot 10^{11}$	0,3

Для рассматриваемого образца эффективный модуль Юнга может быть вычислен аналитически по формулам [206], [207]:

$$E_{eff}^* = E_m \cdot \frac{1 + \frac{4fG_m}{3K_m} \cdot \frac{K_{incl} - K_m}{3K_{incl} + 4G_m} + \frac{2f}{3} \cdot \frac{(7 - 5\nu_m)(G_{incl} - G_m)}{(7 - 5\nu_m)G_m + (8 - 10\nu_m)G_{incl}}}{1 - \frac{fE_m}{3K_m} \cdot \frac{K_{incl} - K_m}{3K_{incl} + 4G_m} + \frac{2fE_m}{3G_m} \cdot \frac{(4 - 5\nu_m)(G_{incl} - G_m)}{(7 - 5\nu_m)G_m + (8 - 10\nu_m)G_{incl}}}, \quad (5.16)$$

$$K_m = \frac{E_m}{3(1 - 2\nu_m)}, \quad K_{incl} = \frac{E_{incl}}{3(1 - 2\nu_{incl})}, \quad (5.17)$$

$$G_m = \frac{E_m}{3(1 + \nu_m)}, \quad G_{incl} = \frac{E_{incl}}{3(1 + \nu_{incl})}, \quad (5.18)$$

где  $E_m$  и  $E_{incl}$  – модуль Юнга (Па) матрицы и включений соответственно,

$\nu_m$  и  $\nu_{incl}$  – коэффициент матрицы и включений соответственно,

$f = V_{incl} / V_{box}$  – объемная концентрация включений,

$K_m$  и  $K_{incl}$  – модуль объемного сжатия (Па) матрицы и включений соответственно,

$G_m$  и  $G_{incl}$  – модуль сдвига (Па) матрицы и включений соответственно.

Разработанный программный комплекс позволяет вычислить симметричный плотный эффективный тензор Гука  $\mathbf{D}^{eff}(\mathbf{x}) = d_{ijkp}^{eff}(\mathbf{x})$ ,  $i, j, k, p = \{x, y, z\}$ :

$$\mathbf{D}_{0,3}^{eff} = \begin{pmatrix} 1,70e+11 & 7,27e+10 & 7,27e+10 & 1,93e+04 & -2,27e+04 & -5,48e+04 \\ & 1,70e+11 & 7,27e+10 & -3,07e+04 & -2,08e+04 & -1,54e+04 \\ & & 1,70e+11 & 1,64e+05 & -1,52e+05 & 9,90e+04 \\ & & & 4,89e+10 & 5,30e+04 & 3,16e+04 \\ & & & & 4,89e+10 & 6,50e+04 \\ & & & & & 4,89e+10 \end{pmatrix}, \quad (5.19)$$

где  $\mathbf{D}_{0,3}^{eff}$  – вычисленный эффективный тензор Гука для образца с концентрацией включений 30%.

Для сравнения с аналитическими оценками (5.16) – (5.18) вычислим по полученному эффективному тензору упругости эффективный модуль Юнга, используя следующее соотношение:

$$E_{eff} = 2d_{xzxz}^{eff} \left( 1 + \frac{2d_{xzxz}^{eff} - d_{zzzz}^{eff}}{2d_{xzxz}^{eff} - 2d_{zzzz}^{eff}} \right). \quad (5.20)$$

На рисунке представлено сравнение эффективного модуля Юнга, полученного из аналитических соотношений (5.16) – (5.18) и из вычислительного эксперимента, с использованием формулы (5.20).

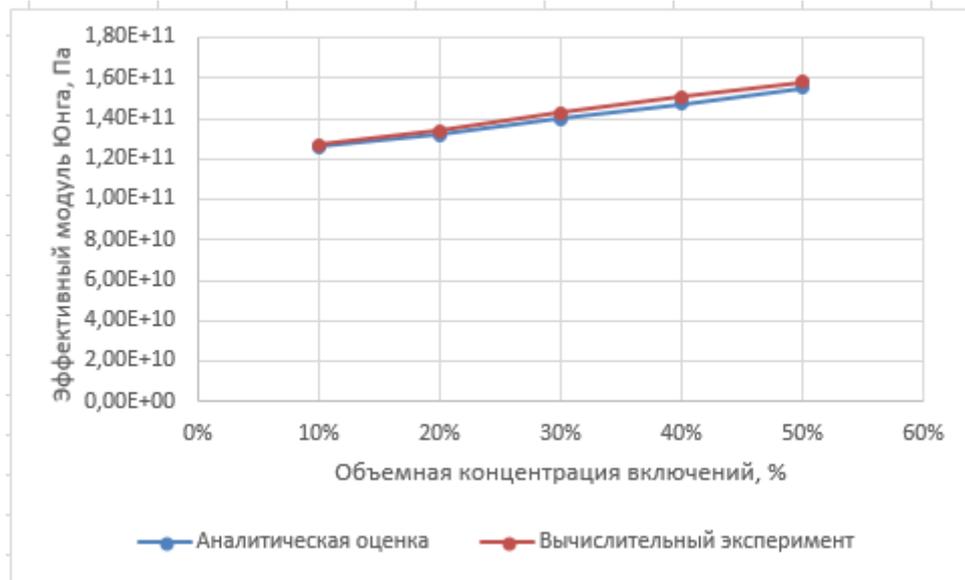


Рисунок 5.26 – Зависимость эффективного модуля Юнга от объемной концентрации включений

Для рассмотренных образцов со сферическими включениями относительная погрешность эффективного модуля Юнга не превышает 2%. За точное значение принимался эффективный модуль Юнга  $E_{eff}^*$ , полученный из соотношений (5.16) – (5.18). Отмечено увеличение относительной погрешности с ростом объемной концентрации включений (Рисунок 5.26).

### 5.3 Распространение трещин

#### 5.3.1 Алгоритм квазихрупкого распространения трещин при упругой деформации твердого тела

Вычислительные схемы программного комплекса MultiscaleMech3D, реализуют алгоритм критерия максимальной энергии [166], [167], который основан на вычислении трехмерного J-интеграла (2.44) в окрестности фронта трещины (Рисунок 5.27):

$$J_k = \int_{A_T} \left( \boldsymbol{\sigma} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}_k} - W \tilde{\mathbf{x}}_k \right) \frac{\partial q}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} dA_T, \quad k = \overline{1,2}, \quad (5.21)$$

где  $A_T \subset \Omega$  – область, «охватывающая» фронт  $\Gamma$ ;

$q$  – гладкая функция равная 1 на  $\Gamma$  и 0 на  $\partial A_r$ ;

$W = \frac{1}{2} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}$  – плотность энергии при условии линейной деформации;

$\{\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \tilde{\mathbf{x}}_3\}$  – единичные вектора, составляющие локальную ортонормированную криволинейную систему координат с центром в точке, лежащей на линии фронта  $\Gamma$ .

Локальная система координат строится следующим образом: ось  $\tilde{\mathbf{x}}_1$  выбирается лежащей в плоскости трещины, перпендикулярно фронту, тогда ось  $\tilde{\mathbf{x}}_2$  перпендикулярна плоскости трещины, ось  $\tilde{\mathbf{x}}_3$  является касательной к фронту трещины и лежит в плоскости трещины.

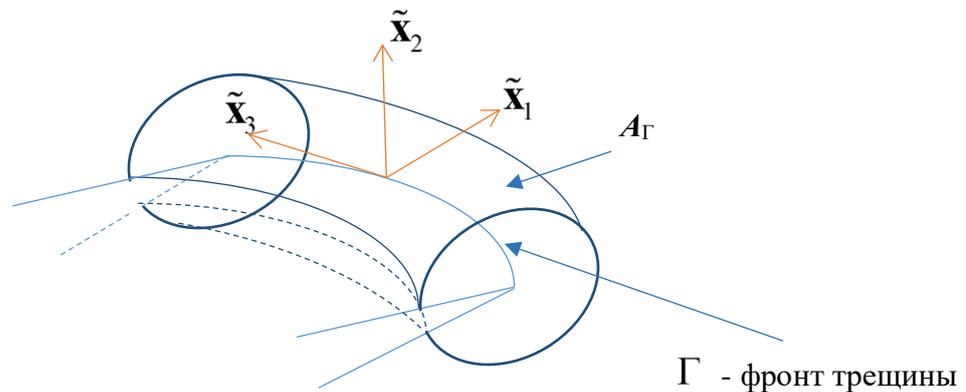


Рисунок 5.27 – Область интегрирования J-интеграла и вводимые обозначения

Для обеспечения максимальной универсальности и простоты работы с трещинами сложной геометрии каждая трещина представлена в памяти, как трехмерная поверхность, разбитая на треугольные элементы. Это позволяет, например, достаточно просто определять пересечения с элементами сеточных структур, на которых строится решение или строить нормаль к поверхности трещины. Однако в таком случае фронт трещины будет являться не гладким (в общем случае фронт не является прямой), что делает невозможным построение локальной криволинейной системы координат  $\{\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \tilde{\mathbf{x}}_3\}$  в каждой точке

фронта  $\Gamma$ . Поэтому предлагается для каждого фронта строить интерполяционный параметрический сплайн  $F_\Gamma(t)$  по четырем точкам фронта:

$$\begin{aligned} F_\Gamma(t) = & \frac{1}{2}((-x_{i-1} + 3x_i - 3x_{i+1} + x_{i+2})t^3 \\ & + (2x_{i-1} - 5x_i + 4x_{i+1} - x_{i+2})t^2 \\ & + (-x_{i-1} + x_{i+1})t + 2x_i), \forall t \in [0,1]. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Тогда для произвольной точки  $\mathbf{x} \in \Omega$  начало локальной системы координат  $\{\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \tilde{\mathbf{x}}_3\}$  будет совпадать с проекцией точки на кривую  $F_\Gamma(t)$ , вектор  $\tilde{\mathbf{x}}_2$  соответствует касательному вектору к кривой  $F_\Gamma(t)$ , вектор  $\tilde{\mathbf{x}}_3$  - внешняя нормаль к поверхности трещины, восстановленная в точку начала локальной системы координат  $\{\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \tilde{\mathbf{x}}_3\}$ , вектор  $\tilde{\mathbf{x}}_1$  равен нормированному векторному произведению векторов  $\tilde{\mathbf{x}}_2$  и  $\tilde{\mathbf{x}}_3$ . Данный подход близок к технологии работы с трещинами в XFEM на основе проекции ближайшей точки [208].

Для вычисления соотношений (5.21) необходимо сформировать в подобласти  $A_\Gamma \subset \Omega$  сетку численного интегрирования. Поскольку интеграл (5.21) является инвариантным относительно пути интегрирования [161], то для простоты пусть сечение подобласти  $A_\Gamma \subset \Omega$  плоскостью перпендикулярной фронту трещины будет квадратом. С учетом введенной локальной криволинейной системы координат  $\{\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \tilde{\mathbf{x}}_3\}$  относительно параметрической кривой  $F_\Gamma(t)$ , соответствующей фронту трещины, перейдем от интеграла (5.21) к интегралу в подобласти  $\tilde{A}_\Gamma$ :

$$\tilde{J}_k = \int_{\tilde{A}_\Gamma} \left( \boldsymbol{\sigma}(\tilde{\mathbf{x}}) \frac{\partial \mathbf{U}(\tilde{\mathbf{x}})}{\partial \tilde{\mathbf{x}}_k} - W(\tilde{\mathbf{x}}) \tilde{\mathbf{x}}_k \right) \frac{\partial q(\tilde{\mathbf{x}})}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} \Big| \tilde{J}(\tilde{\mathbf{x}}) \Big| d\tilde{A}_\Gamma, \quad k = \overline{1,2}, \quad (5.23)$$

где  $|\tilde{J}(\tilde{\mathbf{x}})|$  – определитель матрицы Якоби.

Вычисление интегралов (5.23) является наиболее ресурсоёмкой процедурой при моделировании распространения трещины по имеющемуся распределению полей напряжения и деформации, однако для каждого из фронтов трещины

траекторию можно вычислять независимо, что позволяет разработать параллельные вычислительные схемы (Рисунок 5.28).

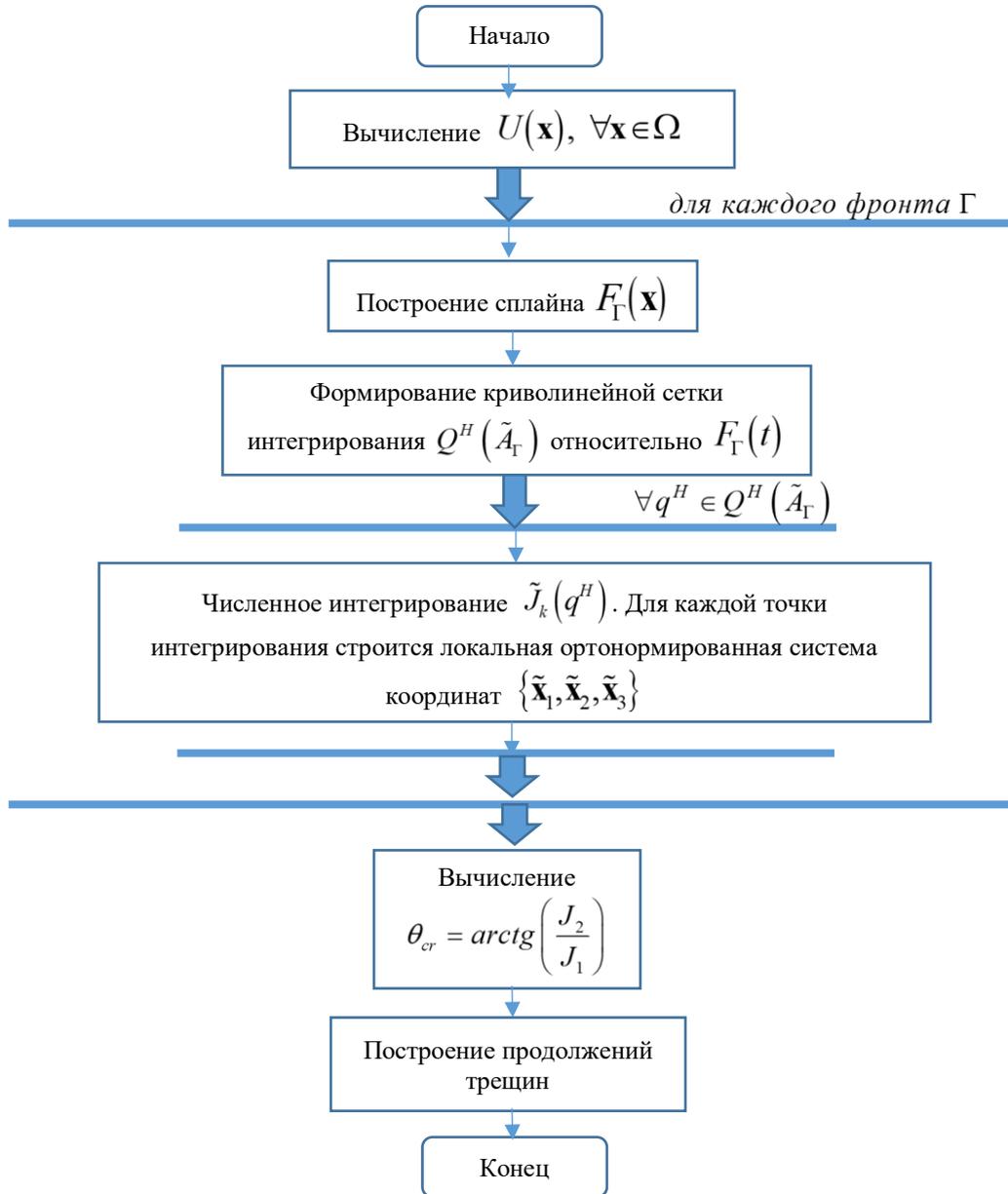


Рисунок 5.28 – Алгоритм одной итерации разрушающей деформации твердого тела (распространение трещин)

### 5.3.2 Верификация алгоритма распространения трещин

Для верификации реализованных алгоритмов и вычислительных схем моделирования распространения трещин в твердом теле под действием упругой деформации (Рисунок 5.28) рассмотрим балку длины 60мм квадратного сечения стороны 20мм, неподвижно закрепленную по середине длинной стороны так, как

показано на рисунке 5.29. На образцы действует растягивающее напряжение, направленное в противоположные стороны по направлению длины образца (Рисунок 5.29).

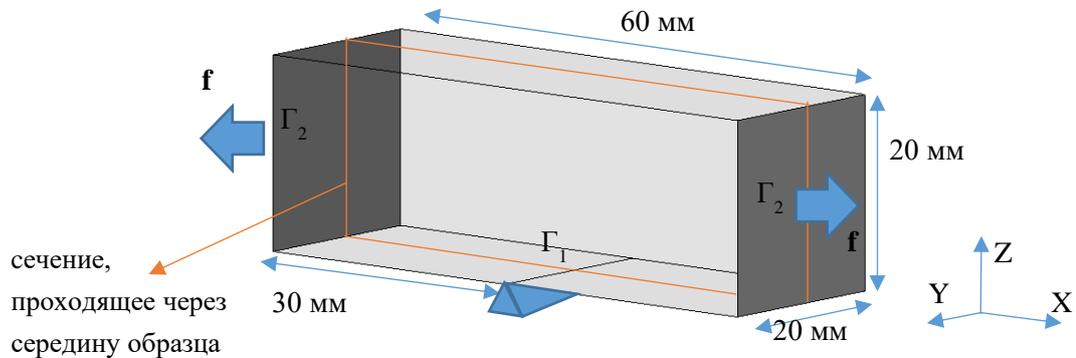


Рисунок 5.29 – Область моделирования и основные обозначения

Таким образом упругая деформация образца при отсутствии начальных напряжений и внутренних объемных сил описывается краевой задачей:

$$-\nabla \cdot (\mathbf{D}(\mathbf{x}) : \nabla_s \mathbf{U}(\mathbf{x})) = 0 \text{ на } \Omega, \quad (5.24)$$

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}) = 0 \text{ на } \Gamma_1, \quad (5.25)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = 0 \text{ на } \Gamma_N = \partial\Omega \setminus (\Gamma_1 \cup \Gamma_2), \quad (5.26)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = \mathbf{f} \text{ на } \Gamma_2. \quad (5.27)$$

Рассматриваются два основных типа трещин:

- 1) внешняя – трещина нарушает целостность внешней границы образца (Рисунки 5.30 – 5.32);
- 2) внутренняя – трещина расположена строго внутри образца (Рисунок 5.33).

Полученные в ходе вычислительных экспериментов траектории распространения как внешних трещин различных типов, так и внутренней трещины с криволинейным фронтом, отклоняются от теоретических предположений не более чем на  $1^0 - 2^0$ .

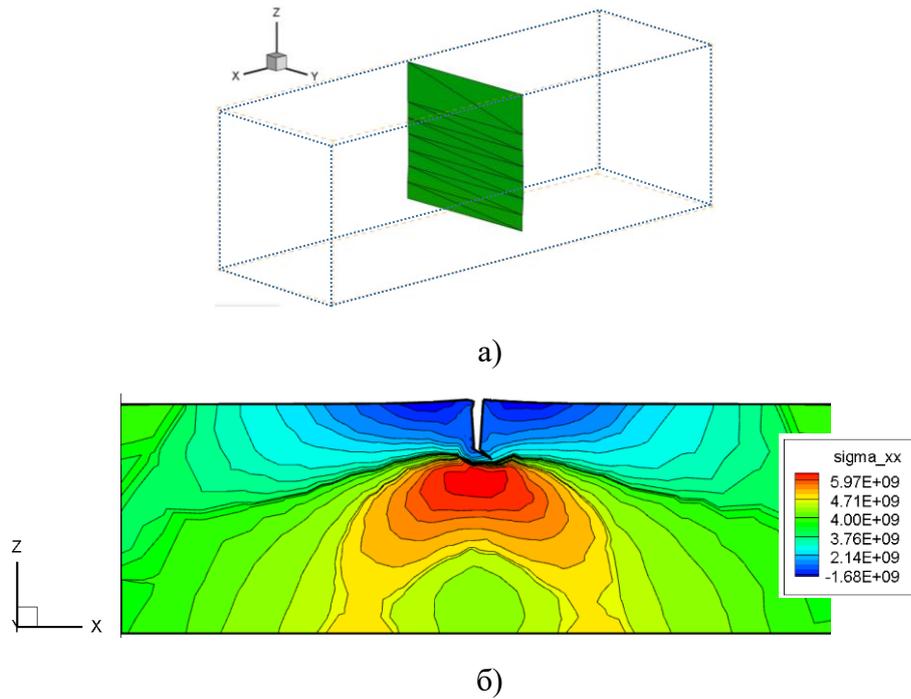


Рисунок 5.30 – Распространение внешней трещины с одним внутренним фронтом, расположенной перпендикулярно растягивающему нагружению в середине образца (а – поверхность трещины через 6 итераций от начала процесса; б – распределение  $\sigma_{xx}$  компоненты тензора напряжений в сечении образца)

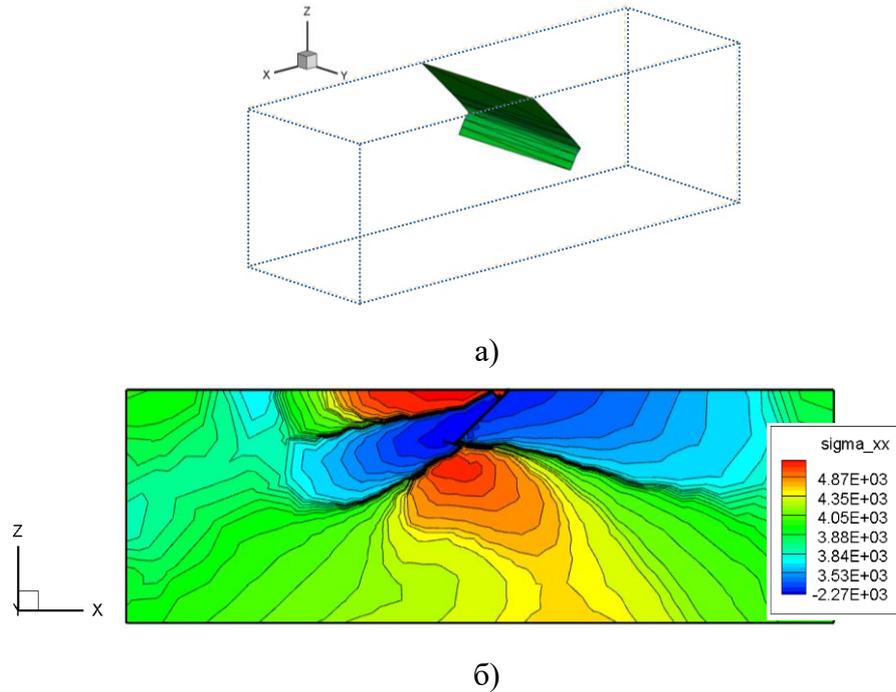


Рисунок 5.31 – Распространение внешней трещины с одним внутренним фронтом, расположенной под углом  $45^\circ$  к растягивающему нагружению в середине образца (а – поверхность трещины через 5 итераций от начала процесса; б – распределение  $\sigma_{xx}$  компоненты тензора напряжений в сечении образца)

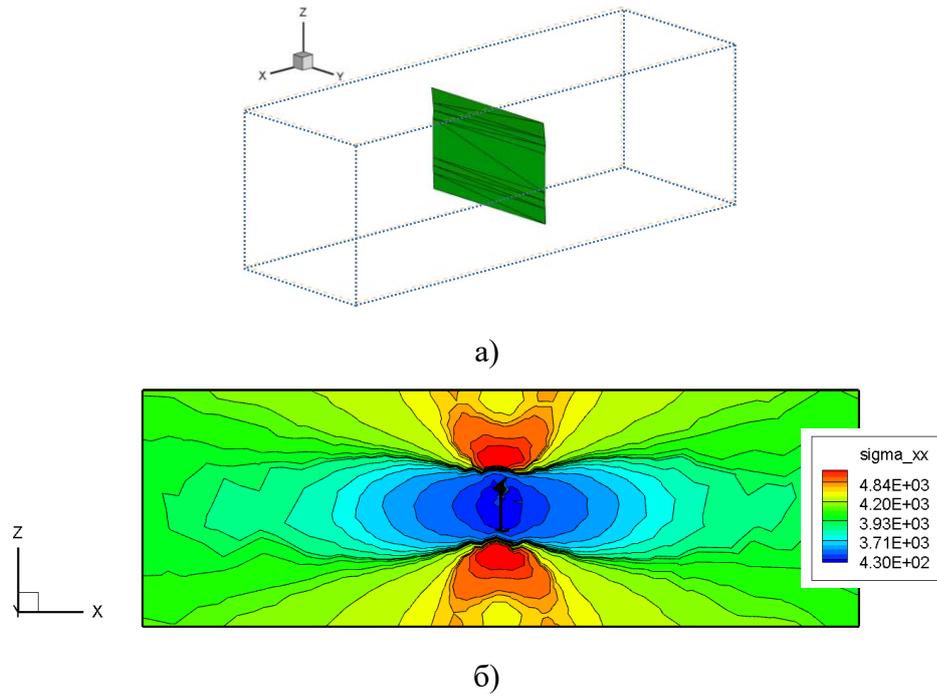


Рисунок 5.32 – Распространение внешней трещины с двумя внутренними фронтами, расположенной перпендикулярно к растягивающему нагружению в середине образца (а – поверхность трещины через 3 итерации от начала процесса; б – распределение  $\sigma_{xx}$  компоненты тензора напряжений в сечении образца)

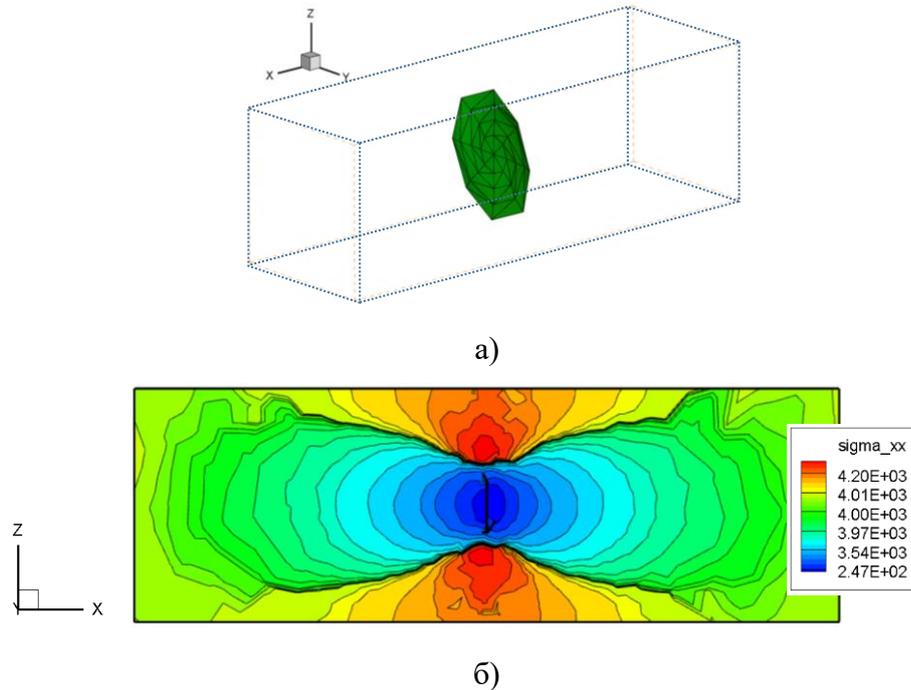


Рисунок 5.33 – Распространение внутренней дискообразной трещиной, расположенной перпендикулярно к растягивающему нагружению в середине образца (а – поверхность трещины через 3 итерации от начала процесса; б – распределение  $\sigma_{xx}$  компоненты тензора напряжений в сечении образца)

### **Выводы по главе**

В главе рассмотрены основные структурные части разработанных программных комплексов MultiscaleMech3D и EffectiveProperties3D, а также алгоритмы и вычислительные схемы, составляющие их основу. Рассмотрены особенности технологии таких процедур, как построение полиэдральной сетки на основе тетраэдрального разбиения, формирование иерархических сеточных структур, моделирование процесса распространения трещин. Исследована возможность масштабирования алгоритмов многомасштабных методов при условии различных моделей организации распределения вычислительных ресурсов между подзадачами. Выполнена валидация вычислительных схем получения эффективного электрического сопротивления и эффективного тензора упругости, а также распространения трещин в твердом теле.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для выполнения численного моделирования физических процессов в гетерогенных средах, необходима разработка специальных адаптивных численных методов, которые позволят учесть все значимые особенности топологии и физических свойств объектов моделирования. В данной работе предложены вычислительные схемы современных 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. Рассмотрены особенности построения соответствующих иерархических функциональных пространств в исследуемых методах, а также предложены некоторые технологические решения проблем, возникающих в ходе программной реализации алгоритмов многомасштабных методов.

На основе исследуемых численных методов моделирования физических процессов предложены вычислительные схемы получения эффективного удельного электрического сопротивления и эффективного тензора упругости. Вычислительные схемы реализованы на языках программирования C++ и C# в программных комплексах MultiscaleMech3D и EffectiveProperties3D, которые адаптированы для работы как на персональных компьютерах, так и на вычислительных кластерах.

Для всех реализованных вычислительных схем произведен поэтапный численный анализ точности получаемого решения, выполнено сравнение эффективности нескольких подходов к масштабированию алгоритмов многомасштабных методов. Выполнена валидация алгоритмов получения эффективного удельного электрического сопротивления на результатах лабораторных экспериментов, проведенных в Институте нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН.

С помощью реализованных программных комплексов выполнены исследования 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) (в том числе и на порог перколяции).

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Гаврилов В.И., Лабекина И.А. Горные породы. Учебно-методическое пособие к практикуму по курсу «Общая геология».
2. Борисов В.Е., Иванов А.В., Критский Б.В., Меньшов И.С., Савенков Е.Б. Численное моделирование задач пороупругости // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, Т. 081, 2017. С. 36.
3. Заливин В.Г. Осложнения при бурении нефтегазовых скважин. Иркутск: Изд-во ИрГТУ, 2013. 247 с.
4. Gupta N. Modeling and simulation in composite materials – integration from nanostructure to component level Design // Composite Materials and Mechanics Laboratory, Vol. 65, No. 2, 2013. pp. 136-139.
5. Durmaz S. A numerical study on the effective thermal conductivity of composite materials. IZMIR, 2004. 240 pp.
6. Эпов М.И., Шурина Э.П., Артемьев М.К. Численная гомогенизация электрических характеристик сред с контрастными мелкомасштабными включениями // Доклады РАН, Т. 442, № 1, 2012. С. 118-120.
7. Жиков В.В., Козлов С.М., Олейник О.А. Усреднение дифференциальных операторов. М.: Физматлит, 1993.
8. Aarnes J., Kippe V., Lie K.A., Rustad A.B. Modelling of Multiscale Structures in Flow Simulations for Petroleum Reservoirs // In: Geometric Modelling, Numerical Simulation, and Optimization. / Ed. by Hasle G., Lie K.A., Quak E. Berlin: Springer, 2007. pp. 307-360.
9. Буторин А.В. Строение продуктивного клиноформного пласта по данным сейсморазведки // Геофизика, Т. 1, 2015. С. 10-18.
10. Чусовитин А.А., Тимчук А.С., Грачев С.И. Исследование геолого-технологической модели сложнопостроенного коллектора нефтегазовой залежи самотлорского месторождения // Вестник Пермского национального

исследовательского политехнического университета. Геология, нефтегазовое и горное дело, Т. 15, № 20, 2016. С. 246-260.

11. Шишлов С.Б., Губаева Ф.Р. Строение и условия формирования раннемелового продуктивного пласта БВ-8 Повховского нефтяного месторождения (Западная Сибирь) // Нефтегазовая геология. Теория и практика., Т. 7, № 2, 2012. С. 1-24.
12. Journel A.G., Deutsch, C.V., Desbarats. A.J. SPE California Regional Meeting, 2-4 April // Power averaging for block effective permeability. Oakland, California. 1986.
13. Begg S.H., Carter R.R., Dranfield P. Assigning effective values to simulator gridblock parameters for heterogeneous reservoirs // SPE Reservoir Eng., Vol. 4, No. 4, 1989. pp. 455–463.
14. Durlofsky L.J. Numerical calculations of equivalent gridblock permeability tensors for heterogeneous porous media // Water Resour. Res., Vol. 27, No. 5, 1991. pp. 699–708.
15. Chen Z., Hou T.Y. A mixed multiscale finite element method for elliptic problems with oscillating coefficients // Math. Comp., Vol. 72, 2003. pp. 541–576.
16. Hou T., Wu X.H. A Multiscale Finite Element Method for Elliptic Problems in Composite Materials and Porous Media // Journal of computational physics, No. 134, 1997. pp. 169-189.
17. Jenny P., Lee S.H., Tchelepi H.A. Multi-scale finite-volume method for elliptic problems in subsurface flow simulation // J. Comput. Phys., Vol. 187, 2003. pp. 47–67.
18. Heller D. A nonlinear multiscale finite element model for comb-like sandwich panels, Darmstadt, 2016.
19. Lie K.A., Møyner O., Natvig J.R., Kozlova A., Bratvedt K., Watanabe S., Li Z. Successful Application of Multiscale Methods in a Real Reservoir Simulator

- Environment // 15th European Conference on the Mathematics of Oil Recovery, 29 August – 1 September 2016. Amsterdam, Netherlands. 2016.
20. Hornung U. Homogenization and porous media. New York: Springer–Verlag, 1997.
  21. Benesoussan, A., Lions J.L., Papanicolaou G. Asymptotic Analysis for Periodic Structures. Amsterdam: Elsevier Science Publishers, 1978.
  22. Efendiev Y. H.T.Y. Multiscale Finite Element Methods : Theory and Applications. B.: Springer, 2009. 241 pp.
  23. Hattori G., Trevelyan J., Augarde C.E., Coombs W.M., Aplin A.C. Numerical Simulation of Fracking in Shale Rocks: Current State and Future Approaches // Arch Computat Methods Eng, Vol. 24, 2017. pp. 281–317.
  24. Jiang Y., Zhao J., Li Y., Jia H., Zhang L. Extended Finite Element Method for Predicting Productivity of Multifractured Horizontal Wells // Mathematical Problems in Engineering, Vol. 2014, 2014. pp. Article ID 810493: 1-10.
  25. Bao J.Q., Fathi E., Ameri S. A coupled finite element method for the numerical simulation of hydraulic fracturing with a condensation technique // Engineering Fracture Mechanics, Vol. 131, 2014. pp. 269–281.
  26. Numerical Modeling and Investigation of Fluid-Driven Fracture Propagation in Reservoirs Based on a Modified Fluid-Mechanically Coupled Model in Two-Dimensional Particle Flow Code // Energies, Vol. 9, 2016. pp. 1-19.
  27. Li L., Xia Y., Huang B., Zhang L., Li M., Li A. The Behaviour of Fracture Growth in Sedimentary Rocks: A Numerical Study Based on Hydraulic Fracturing Processes // Energies, Vol. 9, 2016. pp. 1-28.
  28. Boso D.P., Lefik M., Schrefler B.A. Recent developments in numerical homogenization // Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences, Vol. 16, 2009. pp. 161–183.
  29. Peterseim D. Numerical Homogenization of Partial Differential Equations. Hausdorff Insitut of Mathematics Bonn, 2017.

30. Shurina E.P., Epov M.I., Shtabel N.V., Mikhaylova E.I. The Calculation of the Effective Tensor Coefficient of the Medium for the Objects with Microinclusions // Engineering. 2014. Vol. 6. No. 3. pp. 101-112.
31. Артемьев М.К. Исследование и расчет эффективных электрофизических характеристик сред с мелкомасштабными включениями [диссертация]. Новосибирск: ИНГГ СО РАН, 2012. 118 с.
32. Zienkiewicz O.C., Bahrani A.K., Arlett P.L. Numerical solution of 3-dimensional field problems // Proc. IEE (London), Vol. 115, 1968. pp. 367-369.
33. Brandt A. Multi-Level Adaptive Solutions to Boundary-Value Problems // Mathematics of Computation, Vol. 31, No. 138, 1977. pp. 333–390.
34. Quarteroni A., Valli A. Domain decomposition methods for partial differential equations numerical mathematics and scientific computation. New York: Oxford University Press, 1999.
35. Engquist B., Runborg O. Wavelet-based numerical homogenization with applications // In: Multiscale and multiresolution methods. Berlin Heidelberg: Springer, 2002. pp. 97-148.
36. Стаховская Л.Г., Федоренко Р.П. Об одной специальной разностной схеме // Численные методы МСС, Т. 5, № 1, 1974. С. 149-163.
37. Babuska I., Banerjee U., Osborn J.E. Generalized finite element methods — main ideas, results and perspective // International Journal of Computational Methods, Vol. 1, No. 1, 2004. pp. 67-103.
38. Babuska I., Melenk J.M. The partition of unity finite element method. // Int. J. Numer. Meth. Engng., Vol. 40, No. 4, 1997. pp. 727–758.
39. Belytschko T., Black T. Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing // Int. J. Numer. Meth. Engng., Vol. 45, 1999. pp. 601-620.
40. E W., Ming P., Zhang P. Analysis of the heterogeneous multiscale method for elliptic homogenization problems // J. Am. Math. Soc., No. 8, 2003. pp. 121-156.

41. Oden J.T., Ainsworth M. A posteriori error estimation in finite element analysis. John Wiley & Sons, 2011.
42. Овсянников Н.В. Адаптивный метод решения краевой задачи для уравнения Пуассона с быстро меняющимся потенциалом // Вестник СПбГУ, Т. 10, № 1, 2015. С. 64-74.
43. Гильманов А.Н. Методы адаптивных сеток в задачах газовой динамики. М.: Наука, 2000. 248 с.
44. Митрушкин Д.А., Попов Ю.П. Об одном способе локального измельчения расчётной сетки вблизи кругового источника малого размера // Препринты Ин-та прикл. математики им. М. В. Келдыша, № 25, 2014. С. 32 с.
45. Babuska I. On the h, p and h-p version of the finite element method // Tatra Mountains Math. Publ., Vol. 4, 1994. pp. 5-18.
46. Graham I.G., Lechner P.O. Domain Decomposition for Heterogeneous Media // In: Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XVI. Berlin, Heidelberg: Springer, 2007. pp. 573-578.
47. Bica I. Nonoverlapping Domain Decomposition Algorithms for the p-version Finite Element Method for Elliptic Problems // Contemporary Mathematics, Vol. 218, 1998. pp. 231-237.
48. Dolean V., Jolivet P., Nataf F. An Introduction to Domain Decomposition Methods: algorithms, theory and parallel implementation. B.: SIAM, 2015. 238 pp.
49. Gopalakrishnan J., Pasciak J.E., Demkowicz L.F. Analysis of a Multigrid Algorithm for Time Harmonic Maxwell Equations // SIAM J. Numer. Anal., Vol. 42, No. 1, 2006. pp. 90–108.
50. Mitchell W.F. The hp-Multigrid Method Applied to hp-Adaptive Refinement of Triangular Grids // Numerical Linear Algebra With Applications, Vol. 17, No. 2-3, 2010. pp. 211 - 228.

51. Nastase C.R., Mavriplis D.J. High-order discontinuous Galerkin methods using an hp-multigrid approach // *Journal of Computational Physics*, Vol. 213, No. 1, 2006. pp. 330-357.
52. Brussino G., Herbin R., Christidis Z., Sonnad V. Proceedings of the Third SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing // *Parallel multilevel finite element method with hierarchical basis functions*. Philadelphia. 1999. pp. 146–150.
53. Foresti S., Brussino G., Hassanzadeh S., Sonnad V. Multilevel solution method for the p-version of the finite elements // *Comput. Phys. Comm.*, Vol. 53, 1989. pp. 349–355.
54. Hashim F.R., Soraghan J., Petropoulakis L. Wavelet based motion artifact removal for ECG signals // *EMBS Proc., International Conference on Biomed. Eng. & Sci.* Langkawi, Malaysia. 2012. pp. 339-342.
55. Swenson D., Levine J., Fu Z., Tate J., MacLeod R. The Effect of Non-Conformal Finite Element Boundaries on Electrical // *Computing in Cardiology*, Vol. 37, 2010. P. 97–100.
56. Vouvakis M.N. A non-conformal domain decomposition method for solving large electromagnetic wave problems [DISSERTATION]. The Ohio State University, 2005.
57. Abbaspour S., Gholamhosseini H., Linden M. Evaluation of Wavelet Based Methods in Removing Motion Artifact from ECG Signal // *Conference: 16th Nordic-Baltic Conference on Biomedical Engineering and Medical Physics*. At Sweden. October 2014.
58. Nazimov A.I., Pavlov A.N., Hramov A.E., Grubov V.V., Sitnikova E.Y., Koronovskii A.A. Adaptive Wavelet Transform–Based Method for Recognizing Characteristic Oscillatory Patterns // *Journal of Communications Technology and Electronics*, Vol. 58, No. 8, 2013. pp. 790–795.

59. Ruikar S.D., Doye D.D. Wavelet Based Image Denoising Technique // (IJACSA) International Journal of Advanced Computer Science and Applications, Vol. 2, No. 3, 2011. pp. 49-53.
60. Hou T., Wu X.H., Cai Z. Convergence of a multiscale finite element method for elliptic problems with rapidly oscillating coefficients // Mathematics of Computation, No. 68, 1999. pp. 913-943.
61. Efendiev Y., Galvis J., Hou T.Y. Generalized Multiscale Finite Element Methods // Journal of Computational Physics, No. 251, 2013. pp. 116–135.
62. E W., Engquist B. The heterogeneous multiscale methods, No. 1, 2003. pp. 87-132.
63. Melenk J.M. On Generalized Finite Element Methods. PhD thesis. University of Maryland, 1995.
64. Melenk J.M., Babuska. The partition of unity finite element method: Basic theory and applications // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., Vol. 139, No. 1-4, 1996. pp. 289–314.
65. Стаховская Л.Г., Федоренко Р.П. Об одном варианте метода конечных элементов, Т. 19, № 4, 1979. С. 950-960.
66. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику. М.: МФТИ, 1994.
67. Галанин М.П., Лазарева С.А. О неравенствах типа Джексона и Бернштейна для приближений метода конечных суперэлементов // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, Т. 102, 2008. С. 26.
68. Галанин М.П., Лазарева С.А., Савенков Е.Б. Метод конечных суперэлементов для решения трехмерных задач теории упругости. Численное исследование., Москва, 2006.
69. Галанин М.П., Савенков Е.Б., Темис Ю.М. Метод конечных суперэлементов Федоренко для задач теории упругости // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, Т. 038, 2004. С. 38.

70. Геча В.Я., Захаренко А.Б. Применение метода конечных суперэлементов для расчета электромагнитного поля магнитоэлектрической машины // Вопросы электромеханики, Vol. 107, 2008.
71. Галанин М.П., Лазарева С.А. Метод конечных суперэлементов и его применение для решения задач науки и техники // Матем. моделирование, Т. 25, № 6, 2013. С. 32–40.
72. Бородай В.Э., Галанин М.П., Лазарева С.А., Паршенцев В.А., Шипилов А.В. Применение метода конечных суперэлементов для расчета распределений электрического потенциала и плотности тока в проводящих объектах // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, Т. 017, 2008. С. 26.
73. Галанин М.П., Лазарева С.А. Локальная гладкость и асимптотика решения метода конечных суперэлементов в угловых точках разбиения // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, Т. 049, 2008. С. 31.
74. Duarte C.A., Babuska I., Oden J.T. Generalized finite element methods for three-dimensional structural mechanics problems // Computers and Structures, Vol. 77, No. 215-232, 2000.
75. Soghrati S., Aragón A.M., Duarte C.A., Geubelle P.H. An interface-enriched generalized FEM for problems with discontinuous gradient fields // International journal for numerical methods in engineering, 2011.
76. Arndt M., Machado R.D., Scremin A. The Generalized Finite Element Method Applied to Free Vibration of Framed Structures // Advances in Vibration Analysis Research.
77. Jiang S., Du C., Gu C., Chen X. XFEM analysis of the effects of voids, inclusions and other cracks on the dynamic stress intensity factor of a major crack // Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures, Vol. 38, No. 8, 2014. pp. 866–882.
78. Torres D.A.F., Barcellos C.S., Tarso P., Mendonc R. Effects of the smoothness of partitions of unity on the quality of representation of singular enrichments for

- GFEM/XFEM stress approximations around brittle cracks // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 283, 2015. pp. 243–279.
79. Awais A. eXtended Finite Element Method(XFEM)-Modeling arbitrary discontinuities and Failure analysis, 2009.
  80. Efendiev Y., Galvis J., Li G., Presho M. Generalized Multiscale Finite Element Methods. *Nonlinear Elliptic Equations*, 2013.
  81. Li G., Galvis J., Shi K. A Generalized Multiscale Finite Element Method for the Brinkman Equation // *arXiv:1404.5087v1*, 2014.
  82. Du R., Ming P. Convergence of the heterogeneous multiscale finite element method for elliptic problem with nonsmooth microstructures, 2010.
  83. Abdulle A. On a priori error analysis of fully discrete heterogeneous multiscale FEM // *Multiscale modeling and simulation*, Vol. 4, 2005. pp. 447–459.
  84. Abdulle A., Vilmart G. Analysis of the finite element heterogeneous multiscale method for nonlinear elliptic homogenization problems., 2012.
  85. Abdulle A., Vilmart G. Coupling heterogeneous multiscale FEM with Runge-Kutta methods for parabolic homogenization problems: a fully discrete space-time analysis, 2011.
  86. Abdulle A. The Finite Element Heterogeneous Multiscale Method: a computational strategy for multiscale PDEs // *Multiple scales problems in Biomathematics, Mechanics, Physics and Numerics*, Vol. 31, 2009.
  87. Epov M.I., Shurina E.P., Itkina N.B., Kutishcheva A.Y., Markov S.I. Finite element modeling of a multi-physics poro-elastic problem in multiscale media // *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 352, 2019. pp. 1-22.
  88. Abdulle A., E W. Finite Difference HMM for homogenization problems // *J. Comput. Phys.*, Vol. 191, 2003. pp. 18-39.
  89. Engquist B., Holst H., Runborg O. Multiscale methods for the wave equation // *Proc. Appl. Math. Mech.*, Vol. 7, No. 1, 2007

90. Engquist B., Holst H., Runborg O. Multi-scale methods for wave propagation in heterogeneous media // Commun. Math. Sci., Vol. 9, No. 1, 2011. pp. 33-56.
91. Chen Z. Multiscale methods for elliptic homogenization problems // Numer. Methods Partial Differential Equations, Vol. 22, 2006. pp. 317-360.
92. Abdulle A., Engquist B. Finite element heterogeneous multiscale methods with near optimal computational complexity // SIAM Multiscale Model. Simul., Vol. 6, 2007. pp. 1059-1084.
93. Chen S., E W., Shu C.W. The Heterogeneous Multiscale Method Based on the Discontinuous Galerkin Method for Hyperbolic and Parabolic Problems // Multiscale Modeling & Simulation, Vol. 3, No. 4, 2005. pp. 871-894.
94. Abdulle A. Multiscale method based on discontinuous finite element methods for homogenization problems // C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I, Vol. 346, 2007. pp. 97-102.
95. Arnold D.N., Brezzi F., Cockburn B., Marini L.D. Unified analysis of discontinuous Galerkin methods for elliptic problems, No. 39(5), 2002. pp. 1749-1779.
96. Жиков В.В., Козлов С.М. Усреднение и перколяция, Vol. 43, No. 4, 1988.
97. Снарский А.А., Безсуднов И.В., Севрюков В.А. Процессы переноса в макроскопически неупорядоченных средах: От теории среднего поля к перколяции. М.: Издательство ЛКИ, 2007. 299с. pp.
98. Sihvola A. Electromagnetic Mixing Formulas and Applications. London: Institution of Electrical Engineers, 1999.
99. Karkkainen K., Sihvola A., Nikoskinen K. Analysis of a Three-Dimensional Dielectric Mixture with Finite Difference Method, Vol. 39, No. 5, 2001. pp. 1013-1018.
100. Epov M.I., Shurina E.P., Kutischeva A.Y. Computation of effective resistivity in materials with microinclusions by a heterogeneous multiscale finite element method // Physical Mesomechanics, Vol. 20, No. 4, 2017. pp. 407-416.

101. Шурина Э.П. Численное моделирование порогов перколяции коэффициентов электропроводности // Вычислительные технологии, Т. 22, № 3, 2017. С. 3-15.
102. Broadbent S.K., Hammersley J.M. Percolation processes I. Crystals and mazes. // Proc. Camb. Phil. Soc., Vol. 53, 1957. pp. 629-641.
103. Chatterjee A., Verma R., Umashankar H.P., Kasthuriengan S., Shivaprakash N.C., Behera U. Heat conduction model based on percolation theory for thermal conductivity of composites with high volume fraction of filler in base matrix // International Journal of Thermal Sciences. February 2019. Vol. 136. pp. 389-395.
104. Tian W., Yang R. Phonon Transport and Thermal Conductivity Percolation in Random // CMES, Vol. 24, No. 2, 2008. pp. 123-141.
105. Last B.J., Thouless D.J. Percolation Theory and Electrical Conductivity // Physical review letters. December 1971. Vol. 27. No. 25. pp. 1719-1721.
106. Kovačič J., Simančič F. Aluminium foam—modulus of elasticity and electrical conductivity according to percolation theory // Scripta Materialia. 1998. Vol. 39. No. 2. pp. 239–246.
107. Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка. М.: Наука, 1982. 265 с.
108. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. Москва: УРСС, 2002.
109. Shi F., Wang S., Forest M.G., Mucha P.J. Percolation-induced exponential scaling in the large current tails of random resistor networks // Multiscale modeling and simulation. 2013. No. 11.
110. Бузмакова М.М. Перколяция вытянутых эллипсоидов вращения в континууме // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки., Vol. 4(29), 2012. pp. 146-153.
111. Москалев П.В. Анализ структуры перколяционного кластера // Журнал технической физики, Т. 79, № 6, 2009. С. 1-7.

112. Назаров А.В. Компьютерное моделирование перколяционных процессов в однородных структурах // Электронный журнал «Труды МАИ», № 49, 2011. С. 1-6.
113. Shurina E.P., Kutischeva A.Y. Numerical simulation of a solid deformation under the action of an external and internal pressure // Actual problems of electronic instrument engineering (APEP-2016) (Novosibirsk, 3-6 October 2016 г.): XIIIth International Scientific and Technical Conference: Proceedings: В 12 т., Vol. 1, No. 2, 2016. pp. 394-397.
114. Шурина Э.П., Иткина Н.Б., Кутищева А.Ю., Марков С.И. Математическое моделирование процесса упругой деформации пористой флюидонасыщенной среды // Краевые задачи и математическое моделирование: Тематический сборник научных трудов, 2017. С. 225-232.
115. Шурина Э.П., Кутищева А.Ю. Многомасштабный метод конечных элементов для полиэдральных носителей // Марчуковские научные чтения - 2017 (г. Новосибирск, 25 июня - 14 июля 2017 г.): Тезисы. Новосибирск. 2017. С. 65-66.
116. 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., Vol. 1, No. Part 4, 2018. pp. 294-297.
117. Хилл Р. Математическая теория пластичности. М.: Гостехиздат, 1956. 408 с.
118. Sanei S., Fertig R. Uncorrelated volume element for stochastic modeling of microstructures based on local fiber volume fraction variation // Composites Science and Technology, Vol. 117, 2017. pp. 191–198.
119. Lydzba D., Rozanski A. Microstructure Measures and the Minimum Size of a Representative Volume Element: 2D Numerical Study // Acta Geophysica, Vol. 62, No. 5, 2014. pp. 1060–1086.

120. Kulkarni M. Finite element analysis of 2-D representative volume element. Michigan: Michigan Technological University, 2012.
121. Санчес-Паленсия Э. Неоднородные среды и теория колебаний. М.: Мир, 1984. 472 с.
122. Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П. Осреднение процессов в периодических средах. Математические задачи механики композиционных материалов. М.: Наука, 1984. 352 с.
123. Shojaei A., Shao J. Porous Rock Fracture Mechanics. Woodhead Publishing, 2017. 336 pp.
124. Šejnoha M., Zeman J. Micromechanics in Practice. Czech Republic: Czech Technical University Prague, 2013. 292 pp.
125. Li S., Wang G. Introduction in Micromechanics and nanomechanics. World Scienrific Publ.Co, 2008. 504 pp.
126. Voight W. Lehrbuch der Kristallphysik. Berlin: Teubner, 1928. 962 pp.
127. Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle // Zs. Angew. Math. und Mech., Vol. 9, No. 1, 1929. P. 49—58.
128. Hill R. The elastic behavior of a crystalline aggregate // Proc. Phys. Soc., Vol. A65, 1952. pp. 349–354.
129. Филипов А.А., Павлов В.П., Никитин С.Н. Вычисление эффективных упругих характеристик композиционного материала методов асимптотического осреднения // Вестник УТАТУ, Т. 20, № 3(73), 2016. С. 49-57.
130. Hashin Z., Shtrikman S. A variational approach to the elastic behavior of multiphase materials // J. Mech. Phys. Solids., Vol. 11, 1963. pp. 127–140.
131. Mixture theories for rock properties // In: Rock Physics and Phase Relations: a Handbook of Physical Con Constants. Washington, DC: Am. Geophys. Union, 1995. pp. 205-228.

132. Kuster G.T., Toksöz M.N. Velocity and attenuation of seismic waves in two phase media. Part 1: Theoretical formulation // *Geophysics.*, Vol. 39, 1974. pp. 587–606.
133. O'Connell R.J., Budiansky B. Seismic velocities in dry and saturated cracked solids // *J. Geophys. Res.*, Vol. 79, 1974. pp. 4626–4627.
134. Hudson J.A. Overall properties of a cracked solid // *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, Vol. 88, 1980. pp. 371–384.
135. Баюк И.О. Основные принципы математического моделирования макроскопических физических свойств коллекторов углеводородов // *Технологии сейсморазведки*, Vol. 4, 2013. pp. 5–18.
136. Ризниченко Ю.В. О сейсмической квазианизотропии // *Известия АН СССР. Серия географ. и геофиз.*, № 13, 1949. С. 518–544.
137. Postma G.W. Wave propagation in a stratified medium // *Geophysics*, Vol. 20, 1955. pp. 780–806.
138. Bakulin A. Intrinsic and layer-induced vertical transverse isotropy // *Geophysics*, Vol. 68, 2003. pp. 1708–1713.
139. Giordano S., Goueygou M., Tiercelin N., Talbi A., Pernod P., Preobrazhensky V. Magneto-electro-elastic effective properties of multilayered artificial multiferroics with arbitrary lamination direction // *International Journal of Engineering Science*, Vol. 78, 2014. pp. 134–153.
140. Павлов В.П., Нусрфтуллин Э.М., Филиппов А.А., Мухамедова И.З. Методика определения упругих характеристик гибридного композиционного материала и оценка её точности // *Известия КГАСУ*, Т. 3, № 21, 2012. С. 167-174.
141. Montemurro M., Catapano A., Doroszewski D. A multi-scale for the simultaneous shape and material optimization of sandwich panels with cellular core // *Compos Part B Eng*, Vol. 91, 2016. pp. 458–72.
142. Malek S., Gibson L. Effective elastic properties of periodic hexagonal honeycombs // *Mech Mater*, Vol. 91, No. 1, 2015. pp. 226–40.

143. Catapano A., Montemurro M. A multi-scale approach for the optimum design of sandwich plates with honeycomb core. Part I: Homogenization of core properties // Compos Struct, Vol. 118, 2014. pp. 664–76.
144. Catapano A., Jumel J. A numerical approach for determining the effective elastic symmetries of particulate-polymer composites // Compos Part B Eng, Vol. 78, 2015. pp. 227–243.
145. Adachia J., Siebritsb E., Peircec A., Desroches J. Computer simulation of hydraulic fractures // Int. J. of Rock Mechanics & Mining Sciences, Vol. 44, 2007. pp. 739–757.
146. Shimizu H., Koyama T., Murata S., Ishida T., Chijimatsu M., Fujita T., Nakama S. Distinct element modeling for Class II behavior of rock and hydraulic fracturing // International Journal of the JCRM, Vol. 7, 2011. pp. 33-36.
147. Park N. DE modeling of rock fracture behavior: fracture toughness and time-dependent fracture growth [PhD thesis], 2006.
148. Улькин Д.А. Методы моделирования образования и развития трещин в горных породах [канд.дисс.], М., 2011.
149. Есипов Д.В., Куранаков Д.С., Лапин В.Н., Чёрный С.Г. Математические модели гидроразрыва пласта // Вычислительные технологии, Т. 19, № 2, 2014. С. 33-61.
150. Каракин А.В., Рамазанов М.М., Борисов В.Е., Меньшов И.С., Савенков Е.Б. Автомодельное решение задачи о трещине гидроразрыва пласта для пороупругой среды // Матем. моделирование, Т. 4, № 59–74, 2017. С. 29.
151. Бобровицкий В.И., Сидоров В.А. Механическое оборудование: техническое обслуживание и ремонт. Донецк: Юго-Восток, 2011. 238 с.
152. Черный С.Г., Лапин В.Н., Есипов Д.В., Куранаков Д.С. Методы моделирования зарождения и распространения трещин: монография. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2016. 312 с.

153. Shokin Y.I., Cherny S.G., Esipov D.V., Lapin V.N., Lyutov A.E., Kuranakov D.S. Three-dimensional model of fracture propagation from the cavity caused by quasi-static load or viscous fluid pumping // *Communications in Computer and Information Science*. 2015. Vol. 549. pp. 143-157.
154. Николаева Е.А. Основы механики разрушения. Пермь: Издательство Пермского государственного технического университета, 2010. 103 с.
155. Тихомиров В.М., Суровин П.Г. Развитие усталостных трещин смешанного типа в образцах из стали // *Прикладная механика и техническая физика*, Т. 45, № 1, 2004. С. 135-142.
156. Галанин М.П., Лукин В.В., Родин А.С., Семерикова М.А. Математическое моделирование разрушения хрупкого материала под действием тепловых нагрузок // *Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша*, Т. 100, 2013. С. 36.
157. Корнев В.М. Диаграммы квазихрупкого разрушения и модель зарождения трещин около концентраторов напряжений // *Физическая мезомеханика*, Т. 18, № 2, 2015. С. 51-59.
158. Постников В.С. Физика химия твердого состояния. М.: Металлургия, 1978. 544 с.
159. Писаренко Г.С. Соппротивление материалов. К.: Вища шк. Головное изд-во, 1986. 775 с.
160. Черепанов Г.П. О распространении трещин в сплошной среде // *Прикладная математика и механика*, Т. 3, 1967. С. 476-488.
161. Rice J.R. A path-independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks // *J. Appl. Mech.*, Vol. 35, No. 2, 1968. pp. 379-386.
162. Shih C.F., Moran B., Nakamura T. Energy release rate along a three-dimensional crack front in a thermally stressed body // *International Journal of Fracture*, Vol. 30, No. 2, 1986. pp. 79–102.

163. Tafazzolimoghaddam B., Curiel-Sosa J.L. On the calculation of energy release rate in composites by Finite Elements, Boundary Elements and Analytical Methods // Composites: Mechanics, Computations, Applications, An International Journal, Vol. 6, No. 3, 2015. pp. 219-237.
164. Nakamura T., Parks D.M. Determination of elastic T-stress along three dimensional crack fronts using an interaction integral // Int. J. Solids Structures, Vol. 29, No. 12, 1992. pp. 1597-1611.
165. Barbieri E., Meo M. A Meshless Cohesive Segments Method for Crack Initiation and Propagation in Composites // Applied Composite Materials, Vol. 18, No. 1, 2011. pp. 45–63.
166. Wu C.H. Maximum-energy-release-rate criterion applied to a tension-compression specimen with crack // Journal of Elasticity, Vol. 8, No. 3, 1978. pp. 235–257.
167. Baydoun M., Fries T.P. Crack propagation criteria in three dimensions using the XFEM and an explicit–implicit crack description // International Journal of Fracture, Vol. 178, No. 1-2, 2012. pp. 51–70.
168. Sih G.C. Strain-energy-density factor applied to mixed-mode crack problems // International Journal of Fracture, Vol. 10, 1974. pp. 305-321.
169. Williams M.L. On the stress distribution at the base of a stationary crack // J. Appl. Mech., Vol. 24, 1957. pp. 109-114.
170. Zafošnik B., Ulbin M., Flašker J. Numerical Analyses of Mixed Mode Crack Propagation Using Virtual Crack Extension Method // Proceedings of DESIGN 2002, the 7th International Design Conference, Dubrovnik, 2002. pp. 1279-1284.
171. Завадский В.Ю. Метод конечных разностей в волновых задачах акустики. М.: Наука, 1982. 270 с.
172. Moes N., Dolbow J., Belytschko T. A finite element method for crack growth without remeshing // International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 46, 1999. pp. 131–150.

173. Di Pietro D.A., Ern A. *Mathematical Aspects of Discontinuous Galerkin Methods*. В.: Springer, 2012.
174. Митчелл Э., Уэйт Р. *Метод конечных элементов для уравнений с частными производными*. М.: Мир, 1981. 216 с.
175. Saad Y. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. 2nd ed. В.: SIAM Society for Industrial & Applied Mathematics, 2003. 477 pp.
176. Соловейчик Ю.Г., Рояк М.Э., Персова М.Г. *Метод конечных элементов для решения скалярных и векторных задач*. Новосибирск: НГТУ, 2007.
177. Мысовских И.П. *Интерполяционные кубатурные формулы*. М.: Наука, 1981.
178. Chi H., Beirao da Veiga L., Paulino G.H. Some basic formulations of the virtual element method (VEM) for finite deformations // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* , Vol. 318, 2017. pp. 148–192.
179. Oden J., Duarte C., Zienkiewicz O. A new cloud based hp finite element method // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 153, 1998. pp. 117–126.
180. Strouboulis T., Babuska I., Coppers K. The design and analysis of the generalized finite element method // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 181, 2000. pp. 43-69.
181. Лазуткин В.Ф. *Выпуклый билиард и собственные функции оператора Лапласа*. Л.: Изд-во Ленинградского ун-та, 1981. 193 с.
182. Duarte C.A., Oden J.T. Hp clouds-an hp meshless method // *Numerical methods for partial differential equations*, Vol. 12, No. 6, 1996. pp. 673-706.
183. Timoshenko S., Goodier J.N. *Theory of elasticity*. New York: McGraw-Hill book company, 1951. 506 pp.
184. Cocburn B. Discontinuous Galerkin methods for convection-dominated problems // *In High-Order Methods for Computational Physics*, Springer, Vol. 9, 2005. pp. 69-224.
185. К-100 [Электронный ресурс] [2017]. URL: <http://www.kiam.ru/>

186. Wei Q., Mukaida M., Kirihara K., Naitoh Y., Ishida T. Recent Progress on PEDOT-Based Thermoelectric Materials // *Materials*, Vol. 8, 2015. pp. 732-750.
187. Бетехтин А.Г. Курс минералогии: учебное пособие. М.: КДУ, 2007. 721 с.
188. Kalaitzidou K., Fukushima H., Drzal L.T. A Route for Polymer Nanocomposites with Engineered Electrical Conductivity and Percolation Threshold // *Materials*, Vol. 3, 2010. pp. 1089-1103.
189. Yu Y., Song G., Sun L. Determinant role of tunneling resistance in electrical conductivity of polymer composites reinforced by well dispersed carbon nanotubes // *J. Appl. Phys.*, Vol. 108, No. 8, 2010. P. 084319.
190. Hautot S., Tarits P. Effective electrical conductivity of 3-D heterogeneous porous media // *Geophysical Research Letters*, Vol. 29, No. 14, 2002. pp. 14-1–14-4.
191. Федоров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах. М.: Наука, 1965.
192. Доброхотова И.А., Новиков К.В. Электроразведка. Москва: РГГРУ, 2009. 53 с.
193. Порохова Л.Н., Яновская Т.Б. Обратные задачи геофизики. 2-е-е изд. Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский государственный университет, 2004. 217 с.
194. SALOME [Электронный ресурс] [2017]. URL: <http://www.salome-platform.org/news/17-mar-2017-salome-version-8.2.0>
195. Aurenhammer F. Voronoi Diagrams - A Survey of a Fundamental Geometric Data Structure // *ACM Computing Surveys*, Vol. 23, No. 3, 1991. pp. 345–405.
196. Frey P.J., George P.L. Mesh Generation - Application to Finite Elements. London: Wiley, 2008.
197. Barber C.B., Dobkin D.P., Huhdanpapp H.T. The Quickhull algorithm for convex hulls // *ACM Trans. on Mathematical Software*, Vol. 22, No. 4, 1996. pp. 469–483.
198. Rycroft C.H. Voro++: A three-dimensional Voronoi cell library in C++. // *Chaos*, Vol. 19, 2009. P. 041111.

199. Yan D.M., Wang W., L'evy B., Liu Y. Efficient Computation of 3D Clipped Voronoi Diagram // Lecture Notes in Computer Science (GMP 2010: Advances in Geometric Modeling and Processing), Vol. 6130, 2010. pp. 269-282.
200. Ebeida M.S., Mitchell S.A. Uniform Random Voronoi Meshes // Proceedings of the 20th International Meshing Roundtable, Vol. 90, 2011. pp. 273–290.
201. Garimella R.V., Kim J., Berndt M. Polyhedral Mesh Generation and Optimization for Non-manifold Domains // Proceedings of the 22nd International Meshing Roundtable, 2013. pp. 313-330.
202. Shurina E.P., Kutishcheva A.Y. Parallel heterogeneous multiscale finite element method // Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии, Vol. 1, No. 8, 2018. pp. 118-122.
203. Гамма Э., Хелм Р., Джонсон Р., Влиссидес Д. Приемы объектно-ориентированного проектирования. Паттерны проектирования. СПб: Питер, 2001. 368 с.
204. Sojan Lal P., Unnikrishnan A., Poulouse Jacob K. Parallel implementation of octtree generation algorithm // Image Processing, 1998. ICIP 98. Proceedings. 1998 International Conference on. Chicago, IL, USA, USA. 7-7 Oct. 1998.
205. Шурина Э.П., Кутищева А.Ю. Вычисление эффективного тензора упругости гетерогенных сред с включениями // Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии, Т. 1, № 8, 2018. С. 59-63.
206. Соколкин Ю.В., Ташкинов А.А. Механика деформирования и разрушения структурно-неоднородных тел. М.: Наука, 1984. 115 с.
207. Беляев Н.М. Сопротивление материалов. М.: Наука, 1965.
208. Савенков Е.Б., Борисов В.Е., Критский Б.В. Алгоритм метода X-FEM с представлением поверхности трещины на основе проекции ближайшей точки // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша, Т. 042, 2018. С. 36.

**ПРИЛОЖЕНИЕ А. СВИДЕТЕЛЬСТВО О ГОСУДАРСТВЕННОЙ  
РЕГИСТРАЦИИ ПРОГРАММЫ MULTISCALEMECH3D**

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



**СВИДЕТЕЛЬСТВО**

о государственной регистрации программы для ЭВМ

**№ 2018616279**

**«MultiscaleMech3D»**

Правообладатель: **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука Сибирского отделения Российской академии наук (ИНГГ СО РАН) (RU)**

Авторы: **Шурина Элла Петровна (RU),  
Кутищева Анастасия Юрьевна (RU)**



Заявка № **2018613274**

Дата поступления **05 апреля 2018 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **28 мая 2018 г.**

Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности

Г.П. Ивлиев

**ПРИЛОЖЕНИЕ Б. СВИДЕТЕЛЬСТВО О ГОСУДАРСТВЕННОЙ  
РЕГИСТРАЦИИ ПРОГРАММЫ EFFECTIVEPROPERTIES3D**

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



**СВИДЕТЕЛЬСТВО**

о государственной регистрации программы для ЭВМ

**№ 2017663134**

**EffectiveProperties3D**

Правообладатель: **Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Новосибирский государственный технический университет»  
(RU)**

Автор: **Кутищева Анастасия Юрьевна (RU)**

Заявка № **2017660094**

Дата поступления **09 октября 2017 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **24 ноября 2017 г.**

Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности

 **Г.П. Ивлиев**

