

Численная гомогенизация многомасштабных гетерогенных сред

© М. И. Эпов, Э. П. Шурина, М. К. Артемьев, 2012

Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН, Новосибирск, Россия

Поступила 27 апреля 2012 г.

Представлено членом редколлегии В. И. Старостенко

Розглянуто задачу про розподіл електричного потенціалу в середовищі, яке містить контрастні за фізичними властивостями мікрвоключення різної геометричної форми. Як метод розв'язку вибрано багатомасштабний метод скінченних елементів. На основі отриманого розв'язку проведено процедуру гомогенізації електричного опору неоднорідного середовища. Виконано порівняння результатів чисельного моделювання і фізичного експерименту.

A problem of electrical potential distribution in media, containing micro-inclusions with highly contrasting physical properties and different geometric shapes, was considered. Multiscale finite element method has been chosen as a solver. A procedure of homogenization of electrical resistivity of heterogeneous media was held, using the solution of original task. The results of numerical modeling were compared with the results of physical experiment.

Введение. Многомасштабные и высококонтрастные среды доминируют во многих приложениях, например в естественных геологических объектах, представляющих пористую флюидонасыщенную среду с мелкими контрастными по физическим свойствам включениями, проводящими и непроводящими. При исследовании стационарных режимов, таких как установившееся течение жидкости, электропроводность объектов при постоянном токе может быть измерена как некоторая эффективная или усредненная характеристика этих структур. Однако вопрос, как связаны усредненные (эффективные) характеристики многомасштабного объекта и его структура и возможно ли по измерениям конкретных физических величин определить структуру исследуемого объекта, остается интенсивно разрабатываемым в теории и практическом приложении многомасштабных численных методов.

В настоящее время существует множество тесно связанных, но, тем не менее, различающихся, многомасштабных методов. Впервые многомасштабный метод был предложен Р.П. Федоренко и его коллегами в 1976 г. [Страховская, Федоренко, 1976] и получил название «метод конечных суперэлементов» (МКСЭ). Как и метод конечных элементов, МКСЭ основан на представлении решения задачи в виде разложения по системе базис-

ных функций, имеющих конечный носитель. Однако если в МКЭ мера такого носителя предполагается малой, а базисные функции — это полиномы, то в МКСЭ мера носителя базисных функций предполагается столь большой, что заведомо не позволяет передать мелкомасштабные особенности задачи, а базисные функции не известны заранее и имеют сложную структуру, определяемую решаемой задачей. Несмотря на то что данный метод был предложен довольно давно, его теоретические и численные исследования проводятся и в настоящее время [Жуков и др., 2002; Бородай и др., 2008]. К особенностям данного метода можно отнести требование разделения масштабов включений и основной среды. Кроме того, в работах, посвященных МКСЭ, рассматривается построение грубой сетки лишь по участкам относительно гладкого решения, т. е. контрастные включения должны содержаться строго внутри суперэлементов.

Одним из самых популярных современных многомасштабных методов является «гетерогенный многомасштабный метод» (ГММ) [E, Engquist, 2003; Abdulle, 2009]. ГММ состоит из двух этапов: выбор макроскопического решателя и оценивание недостающих макроскопических данных за счет решения локальной мелкомасштабной задачи. Особенности ГММ состоят в следующем:

1) общая структура вычислений определе-

на так, что позволяет максимально использовать преимущества разделения масштабов. Для периодических сред сложность метода не зависит от малого параметра осциллирующего коэффициента, также метод может применяться и для непериодических сред;

2) для задач без разделения масштабов для учета мелкомасштабных включений в ГММ необходимо адаптировать сеточные характеристики к геометрии этих включений.

Такое существенное ограничение, как разделение масштабов, налагаемое на решаемую задачу, значительно сужает область применения гетерогенного метода конечных элементов. Однако, по утверждению авторов метода, это упрощение позволяет значительно увеличить скорость решения задачи, сохраняя высокую точность.

Не менее известным современным многомасштабным методом является «многомасштабный метод конечных элементов» (ММКЭ) [Hou, Wu, 1997; Hou et al., 1999; Efendiev, Hou, 2009]. Данный метод является наиболее успешной реализацией идеи МКСЭ Федоренко, а именно — использования в качестве базисных функций численного решения исходной задачи на более мелком масштабе. ММКЭ не имеет ограничений на периодичность осциллирующих коэффициентов, а также может применяться как для сред с разделенными, так и с непрерывными масштабами включений. Основной сложностью с теоретической и технологической точки зрения является «сшивка» многомасштабных базисных функций на границах элементов грубой сетки. «Сшивка» целиком определяется видом многомасштабных базисных функций на межэлементных границах. Поэтому вопросу учета краевых условий мелкомасштабной задачи, определяющей вид базисных функций, посвящено большое количество исследований, так как краевое условие, соответствующее природе исследуемого процесса, может значительно повысить точность решения. В настоящее время развитие ММКЭ связано с обоснованным выбором соответствующих краевых условий для вычисления базисных функций [Allaire, Brizzi, 2005; Chu et al., 2010; Zhang et al., 2011].

Главным преимуществом ММКЭ и МКСЭ Федоренко является их естественная параллельная структура. Она определяется тем, что наиболее затратные вычислительные процедуры — решение задач на микроуровне для определения многомасштабных базисных функций — могут быть выполнены парал-

лельно. Также тот факт, что ММКЭ не имеет ограничений на периодичность коэффициентов и разделение масштабов, делает целесообразным и обоснованным применение этого метода для решения широкого класса задач. В настоящей статье реализованы алгоритмы на базе этого метода для определения эффективного удельного сопротивления гетерогенной среды с мелкими контрастными включениями различной геометрической формы.

Математическая модель. В статье рассматривается задача о распределении электрического потенциала u в неоднородной области Ω (рис. 1), состоящей из скелета Ω_1 и пор (микровключений, заполненных флюидом), Ω_2 с характеристическим размером d . Задача описывается эллиптическим уравнением

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

где ρ — удельное электрическое сопротивление (Ом·м), различное в Ω_1 и Ω_2 .

Обозначим границу расчетной области $\partial\Omega = \partial\Omega_1 \cup \partial\Omega_2$ (см. рис. 1). На границе $\partial\Omega_1$ задано краевое условие Дирихле, которое определяется приложенным к границе электродом. На границе $\partial\Omega_2$ задано однородное краевое условие Неймана, которое интерпретируется как условие непротекания тока:

$$u|_{\partial\Omega_1} = g, \quad (2)$$

$$\rho^{-1} \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\partial\Omega_2} = 0. \quad (3)$$

Электроды находятся на противоположных гранях и покрывают их целиком, что обеспечивает протекание тока во всей расчетной области.

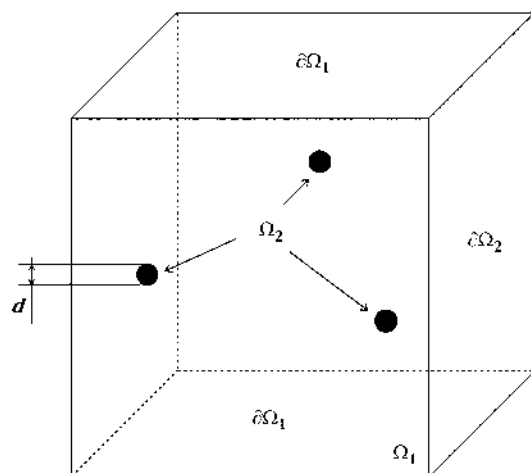


Рис. 1. Схематическое изображение расчетной области.

Вариационная постановка. Введем гильбертово пространство $H^1(\Omega)$, ассоциированное с нормой и скалярным произведением:

$$\|u\|_{H^1(\Omega)}^2 = (u, u)_{H^1(\Omega)},$$

$$(u, v)_{H^1(\Omega)} = \int_{\Omega} uv + \nabla u \nabla v d\Omega.$$

Введем пространства $H_0^1(\Omega) = \{x | x \in H^1(\Omega), x|_{\partial\Omega_i} = 0\}$ и $V(\Omega) = H_0^1(\Omega) + g$. Тогда вариационная формулировка модельной задачи имеет следующий вид: найти $u \in V(\Omega)$ такое, что $\forall v \in H_0^1(\Omega)$ выполняется $\int_{\Omega} \rho^{-1} \nabla u \nabla v d\Omega = 0$.

Дискретная вариационная постановка. Построим в области Ω параллелепипедальную регулярную сетку K^H с характеристическим размером ячейки $H = \min(H_x, H_y, H_z) \gg d$ (рис. 2). Поскольку размер ячейки больше характеристического размера включений, будем называть эту сетку «грубой». Степени свободы приближенного решения задачи (1)—(3) ассоциируем с вершинами параллелепипедов. В качестве дискретного пространства, которому принадлежит приближенное решение, выберем пространство $V^h(\Omega)$, натянутое на многомасштабные базисные функции $\psi_j, j=1, \dots, N$, где N — количество узлов K^H . Глобальные базисные функции $\psi_j, j=1, \dots, N$, определяются локальными функциями $\phi_i, i=1, \dots, 8$, заданными на каждом элементе k разбиения K^H . Каждая из локальных базисных функций $\phi_i, i=1, \dots, 8$, есть решение отдельной эллиптической краевой задачи:

$$\nabla \cdot (\rho^{-1} \nabla \phi_i) = 0 \text{ в } k \in K^H, \quad (4)$$

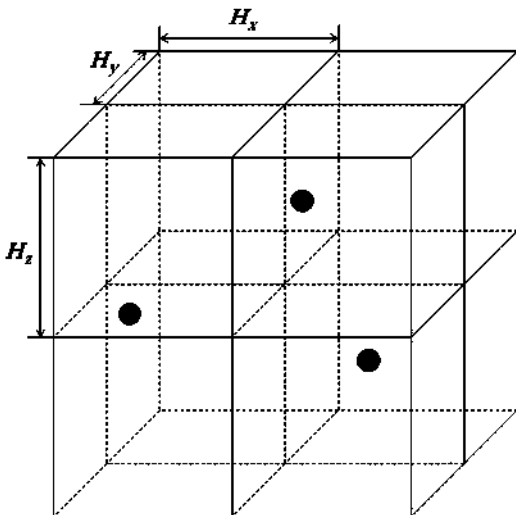


Рис. 2. Схематическое изображение грубой сетки.

$$\phi_i|_{\partial k} = \mu_i. \quad (5)$$

Выбор μ_i произволен, но именно он определяет правильность учета мелкомасштабных особенностей среды в решении исходной задачи.

В простейшем случае μ_i выбирают как полиномиальную функцию. Выбор такого краевого условия оправдан лишь тогда, когда грани параллелепипедальной сетки не пересекают поры, т.е. когда включения содержатся строго внутри элементов разбиения K^H .

Альтернативным способом учета краевого условия для задачи (4), (5) является решение дополнительной задачи в двумерной области:

$$\nabla \cdot (\rho^{-1} \nabla \mu_i) = 0 \text{ на } \partial k, \mu_i|_{\Gamma} = \xi_i. \quad (6)$$

Такой способ определения μ_i позволяет учесть мелкомасштабные особенности среды на гранях параллелепипедальной сетки.

В свою очередь ξ_i может также представлять собой полиномиальную функцию или решение дополнительной задачи в одномерной области:

$$\nabla \cdot (\rho^{-1} \nabla \xi_i) = 0 \text{ на } \Gamma, \xi_i|_{x_j} = \delta_{ij}. \quad (7)$$

Такой способ определения ξ_i позволяет учесть мелкомасштабные особенности среды на ребрах параллелепипедальной сетки.

В работе [Hou et al., 1999] первое краевое условие называется линейным. Это связано с тем, что в качестве полиномиальной функции обычно выступает полином первого порядка. Второе условие называют осциллирующим, поскольку оно позволяет учесть «осцилляции» решения на границах элементов грубой сетки.

Решение задач (4)—(7) осуществляется с помощью классического МКЭ, где в качестве элемента разбиения выступают симплексы.

При любом из перечисленных способов учета краевого условия вычисленные в каждом элементе $k \in K^H$ локальные базисные функции $\phi_i, i=1, \dots, 8$, образуют непрерывные многомасштабные функции $\psi_j, j=1, \dots, N$, склейкой по степеням свободы, ассоциированным с узлами грубой сетки. Множество всех базисных функций определяет пространство $V^h(\Omega) = \text{span}\{\psi_j, j=1, \dots, N\} \subset H_0^1(\Omega)$. Тогда дискретная вариационная постановка звучит следующим образом: найти $u^h \in V^h(\Omega)$ такое, что $\forall v^h \in V^h(\Omega)$ выполняется

$$\int_{\Omega} \rho^{-1} \nabla u^h \nabla v^h d\Omega = 0. \quad (8)$$

Дискретный аналог точного решения задачи (1)–(3) $u^h \in V^h(\Omega)$ можно представить как линейную комбинацию базисных функций

$$u^h = \sum_{j=1}^N q_j \psi_j. \quad (9)$$

Используя представление u^h и v^h в виде (9) и подставив его в уравнение (8), переходим к решению системы линейных алгебраических уравнений, которая в матричной форме имеет вид

$$Aq = b,$$

где элементы матрицы A определяются следующим образом:

$$[A]_{ij} = \int_{\Omega} \rho^{-1} \nabla \psi_i \nabla \psi_j d\Omega. \quad (10)$$

Интегралы из соотношения (10) вычисляются с использованием кубатурных формул [Мысовских, 1981]. При этом ненулевая часть вектора правой части ассоциирована с крайними условиями (2), (3).

Вычислительные эксперименты. Рассмотрим распределение электрического потенциала в среде, имеющей включения различной геометрической формы — цилиндрические, сферические, эллипсоидальные и параллелепипедальные (рис. 3). Сопротивление включений — 100 Ом·м, сопротивление скелета — 1 Ом·м. Так как включения не пересекают грани суперэлементов, для вычисления базисных функций используется линейное краевое условие. Результаты моделирования приведе-

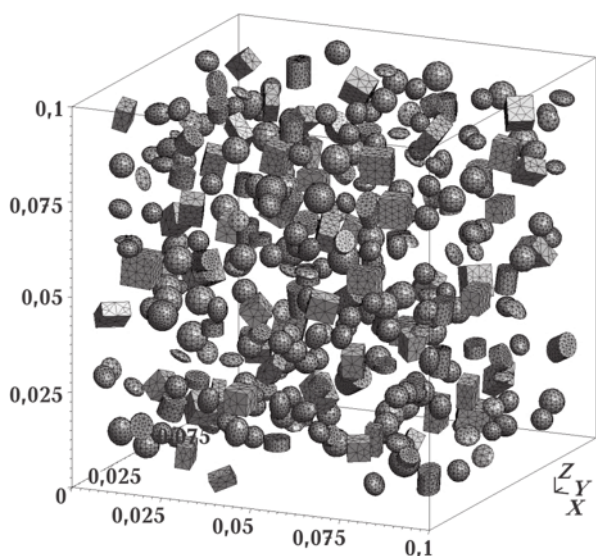


Рис. 3. Расчетная область с включениями различной геометрической формы.

ны на рис. 4, где показано распределение потенциала и вектора плотности электрического тока.

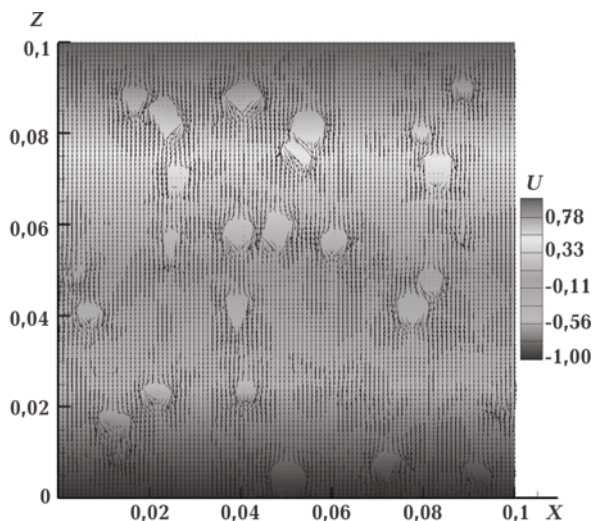


Рис. 4. Распределение потенциала и вектора плотности электрического тока.

Вычисление распределения электрического потенциала в образце позволило выполнить процедуру гомогенизации (осреднения) электрического сопротивления. Локальный закон Ома связывает плотность электрического тока $J(x)$ с напряженностью электрического поля $E(x)$ соотношением $J(x) = \rho^{-1}(x)E(x)$. Тогда эффективное удельное электрическое сопротивление может быть вычислено по формуле

$$\rho^e = \frac{SU}{I}, \quad (11)$$

где $U = u_1 - u_2$ — заданная разность потенциалов на электродах, I — полный ток в образце, S — площадь сечения, перпендикулярного течению тока. Отметим, что полный ток вычисляется по формуле

$$I = \int_{\Omega} |J| d\Omega.$$

Исследуем зависимость эффективно-го сопротивления от «пористости» среды. «Пористость» определяется как отношение объема включений к объему среды, выраженное в процентах:

$$V = \frac{\text{mes}(\Omega_2)}{\text{mes}(\Omega)} 100\%.$$

Будем регулировать «пористость» среды, фиксируя либо размер включений, либо их количество. При этом сопротивление скелета

постоянно (1 Ом·м), а сопротивление включений варьируется.

На рис. 5 представлены результаты исследования зависимости эффективного электрического сопротивления кубических образцов $0,1 \times 0,1 \times 0,1$ м при изменении размеров сферических включений от $4,5 \cdot 10^{-4}$ до $8,2 \cdot 10^{-3}$ м при их постоянном количестве 1331 и изменении сопротивления включений от $1 \cdot 10^{-2}$ до $1 \cdot 10^2$ Ом·м.

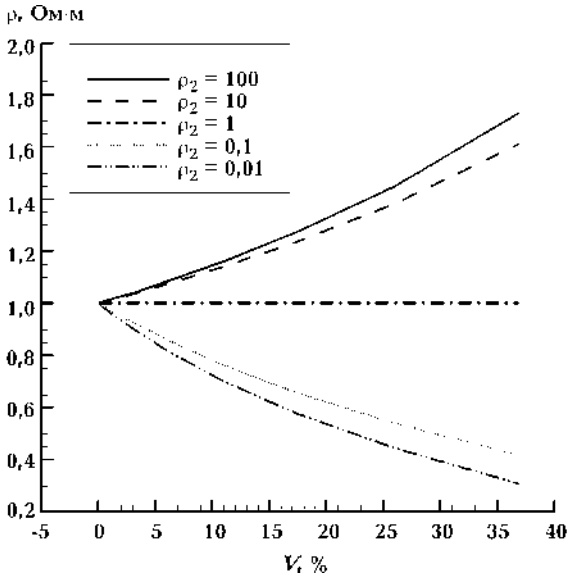


Рис. 5. Зависимость эффективного УЭС от плотности среды, регулируемой за счет изменения размеров включений при фиксированном количестве.

На рис. 6 представлены результаты исследования при количестве включений от 0 (однородная среда) до 1331 при фиксированном размере включения $8,2 \cdot 10^{-3}$ м и изменении сопротивления включений от $1 \cdot 10^{-2}$ до $1 \cdot 10^2$ Ом·м.

При одном и том же значении «пористости» значения эффективного электрического сопротивления, приведенные на рис. 5 и 6, различаются не более чем на 11 %, что определяется внутренней структурой исследуемого образца.

Физический эксперимент. Проведем сравнение значений, полученных в ходе физического эксперимента, со значениями, полученными в результате численного моделирования [Эпов и др., 2012]. В качестве образца для измерения свойств скелета используется однородный параллелепипед из песчано-цементной смеси $49,7 \cdot 10^{-3} \times 49,2 \cdot 10^{-3} \times 50 \cdot 10^{-3}$ м. В качестве образца гетерогенной среды — аналогичный объект с непроводящими (пластиковыми)

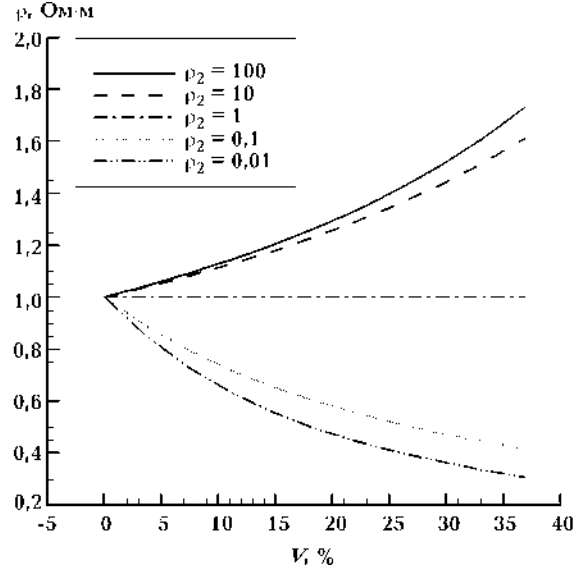


Рис. 6. Зависимость эффективного УЭС от плотности среды, регулируемой за счет изменения количества включений при фиксированном размере.

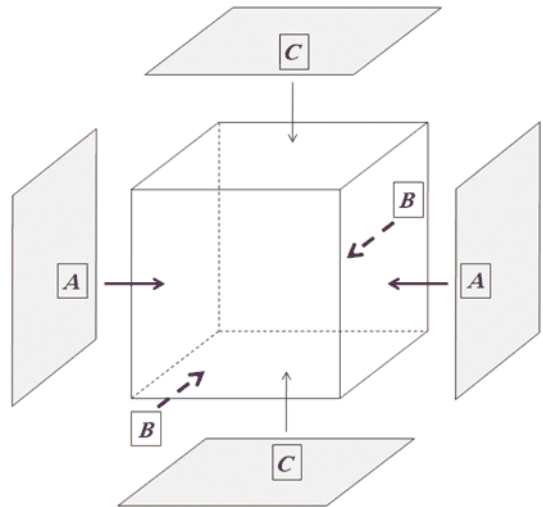


Рис. 7. Расположение электродов в ходе физического эксперимента.

Сравнение результатов физического эксперимента и численного моделирования

Положение электродов	УЭС (физический эксперимент), Ом·м	УЭС (численное моделирование), Ом·м	Относительная разность, %
A	12,424	12,009	3,5
B	11,314	11,634	2,8
C	12,422	12,313	0,9

включениями, диаметром $3 \cdot 10^{-3}$ м. Количество включений — 16. Измерения проводились для различного расположения электродов, как показано на рис. 7. Результаты физических измерений и численного моделирования приведены в таблице.

Необходимо отметить достаточно малое

расхождение между результатами численного и физического экспериментов (менее 4 %), что показывает эффективность и обоснованность разработанных алгоритмов.

Работа выполнена при поддержке гранта ОФИ-М 11-05-12-037 и интеграционного проекта СО РАН № 98.

Список литературы

- Борогай В. Э., Галанин М. П., Лазарева С. А., Паршенцев В. А., Шипилов В. А.* Применение метода конечных суперэлементов для расчета распределений электрического потенциала и плотности тока в проводящих объектах. — Москва, 2008. — 26 с. — (Препр. / ИПМ РАН; № 17).
- Жуков В. Т., Новикова Н. Д., Страховская Л. Г., Фегоренко Р. П., Феодоритова О. Б.* Метод конечных суперэлементов в задачах конвекции-диффузии // Матем. моделирование. — 2002. — **14**, №11. — С. 78—92.
- Мысовских И. П.* Интерполяционные кубатурные формулы. — Москва: Наука, 1981. — 336 с.
- Страховская Л. Г., Фегоренко Р. П.* Об одной специальной разностной схеме // Численные методы механики сплошной среды. — 1976. — **7**, № 4. — С. 149—163.
- Эпов М. И., Шурина Э. П., Артемьев М. К.* Численная гомогенизация электрических характеристик сред с контрастными мелкомасштабными включениями // Докл. РАН. — 2012. — **442**, № 1. — С. 188—120.
- Abdulle A.* The Finite Element Heterogeneous Multiscale Method: a computational strategy for multiscale PDEs // Math. Sci. Appl. — 2009. — **31**. — P. 133—181.
- Allaire G., Brizzi R.* A multiscale finite element method for numerical homogenization // SIAM MMS. — 2005. — **4**. — P. 790—812.
- Chu C.-C., Graham I. G., Hou T. Y.* A New Multiscale Finite Element Method for High-Contrast Elliptic Interface Problems // Math. Comput. — 2010. — **79**, № 272. — P. 1915—1955.
- E W., Engquist B.* The heterogeneous multiscale methods // Comm. Math. Sci. — 2003. — **1**, № 1. — P. 87—132.
- Efendiev Y. R., Hou T. Y.* Multiscale finite element methods: Theory and applications. — New York: Springer, 2009. — P. 234.
- Hou T. Y., Wu X.-H.* A Multiscale Finite Element Method for Elliptic Problems in Composite Materials and Porous Media // J. Comput. Phys. — 1997. — **134**. — P. 169—189.
- Hou T. Y., Wu X.-H., Cai Z.* Convergence of a multiscale finite element method for elliptic problems with rapidly oscillating coefficients // Math. Comput. — 1999. — **68**, № 227. — P. 913—943.
- Zhang H. W., Wu J. K., Lv J.* A new multiscale computational method for elasto-plastic analysis of heterogeneous materials // Comput. Mech. — 2011. — **49**, № 2. — P. 149—169.