

Оптимизация структуры матриц массы и жесткости для векторного конечно-элементного базиса на ортогональных сетках

М. В. Пузанов, Э. П. Шурина

Новосибирский государственный технический университет, Россия

e-mail: misha.puzanov@gmail.com

Рассматривается задача построения векторных базисов высоких порядков на ортогональных сетках в пространстве $H(\mathbf{rot}, \Omega)$, позволяющих минимизировать количество ненулевых элементов в матрицах массы и жесткости при решении нестационарных трехмерных задач электромагнетизма.

Ключевые слова: уравнения Максвелла, векторный метод конечных элементов, ортогонализация базиса.

Введение

Многие нестационарные задачи вычислительного электромагнетизма при использовании конечно-элементной дискретизации в пространстве $H(\mathbf{rot}, \Omega)$ приводят [1, 2] к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$R\mathbf{u} + M^s \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + M^e \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \mathbf{f}, \quad (1)$$

где $\mathbf{u} = \sum_{i=1}^n a_i \mathbf{N}_i$; $\mathbf{N}_i \in H(\mathbf{rot}, \Omega)$ — векторный базис, используемый при дискретизации; матрицы R, M_1, M_2 — квадратные, размерности n . В случае, если \mathbf{u} соответствует полю \mathbf{E} , то

$$R_{ij} = \int_{\Omega} \mu^{-1} \mathbf{rot} \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{rot} \mathbf{N}_j, \quad M_{ij}^s = \int_{\Omega} \sigma \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j, \quad M_{ij}^e = \int_{\Omega} \varepsilon \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j;$$

если же \mathbf{u} соответствует полю \mathbf{H} , то

$$R_{ij} = \int_{\Omega} \varepsilon^{-1} \mathbf{rot} \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{rot} \mathbf{N}_j, \quad M_{ij}^s = \int_{\Omega} \varepsilon^{-1} \mu \sigma \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j, \quad M_{ij}^e = \int_{\Omega} \mu \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j.$$

Выбор схемы дискретизации по времени уравнения (1) полностью определяет точность, устойчивость и вычислительную сложность решения задачи.

Использование неявных схем по времени (схемы Ньюмарка, Кранка—Николсона, Адамса—Молтона и др.) теоретически приводит к безусловно устойчивому вычислительному процессу, который требует решения СЛАУ (системы линейных алгебраических уравнений) с матрицей вида $aR + bM_\varepsilon + cM_s$, $a, b, c \in \mathbb{R}$, на каждом шаге по времени. В случае малых временных шагов для достижения заданной точности при

быстро и значительно изменяющемся во времени источнике электромагнитного поля эта процедура может быть крайне затратной в вычислительном плане.

Известно, что использование явной схемы по времени приводит к условно устойчивому вычислительному процессу, в котором устойчивость определяется соотношением Куранта. Применение явной схемы требует решения СЛАУ с матрицей вида $pM_\varepsilon + qM_s$, $p, q \in \mathbb{R}$, на каждом шаге. Таким образом, уменьшение меры обусловленности матрицы массы M , $M_{ij} = \int_{\Omega} \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j$ и количества ненулевых элементов в ней способствует снижению затрат времени вычислений и необходимой памяти.

Векторный МКЭ [3–6] предоставляет некоторые возможности конструирования базисов (в $H(\text{rot}, \Omega)$ и $H(\text{div}, \Omega)$), приводящих к уменьшению числа ненулевых элементов в глобальных матрицах жесткости и массы и обеспечивающих эффективное обращение матрицы массы.

Оптимальным результатом является построение ортогонального базиса, который формировал бы диагональную матрицу M . Достигнуть этого при аналитическом вычислении скалярного произведения и сохранить тангенциальную непрерывность решения практически невозможно.

В [7, 8] предлагается метод приведения матрицы массы к диагональному виду заменой точного интегрирования при вычислении скалярного произведения приближенной процедурой, использующей квадратуры Гаусса–Лежандра или Гаусса–Лобатто. Все полиномы, формирующие базисные функции, ортогональны на системе узлов интегрирования. Такая процедура приводит к некоторой потере точности, которая, однако, может быть нивелирована достаточно высоким порядком полиномов. Основное преимущество данного метода в том, что он применим и к неортогональным гексаэдральным сеткам.

Другой способ уменьшения затрат на обращение матрицы массы — ее приближенное обращение [9], в котором из матрицы $K = M^{-1}$ удаляются элементы, удовлетворяющие критерию $|k_{ij}| < \frac{\max_s K_{ss}}{\min_q K_{qq}}$. Этот вариант, соответствующий областям с однородными физическими свойствами, может давать плохую аппроксимацию M^{-1} в случае сильно меняющихся коэффициентов ε , σ и μ .

В данной работе предложен и исследован новый подход, состоящий в построении базиса, в котором неортогонально лишь несколько функций на конечном элементе; остальные функции ортогональны в смысле аналитического скалярного произведения, что позволяет сохранить интерполяционные свойства стандартного базиса. Кроме того, исследуется вопрос о трудоемкости точного обращения матрицы массы, которое позволяет избежать решения СЛАУ на каждом временном шаге.

1. Ортогонализация векторного базиса

1.1. Точная ортогонализация

Обозначим $\mathbf{S}^p(a, b)$ пространство полиномов порядка не выше p , определенных на отрезке $[a, b]$, со скалярным произведением

$$(u, v) = \int_a^b u(x) \cdot v(x) dx. \quad (2)$$

Пусть на отрезке $[0, 1]$ заданы точки $Q_x^p = \{x_0, \dots, x_p\}$ такие, что $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{p-1} < x_p = 1$. Тогда набор интерполяционных полиномов Лагранжа из $\mathbf{S}^p(0, 1)$ задается соотношением

$$L_i^p(x, Q) = \prod_{j=0, j \neq i}^p \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}. \quad (3)$$

Определим параллелепипедальный конечный элемент как множество

$$E = \{(x, y, z) \mid x_0 < x < x_p, y_0 < y < y_p, z_0 < z < z_p\}. \quad (4)$$

Аналогичным образом введем Q_y^p и Q_z^p . Тогда простейший базис пространства функций из $\mathbf{H}(\text{rot}, E)$ на элементе (4) имеет вид

$$\begin{cases} \mathbf{N}_x^{(p)ijk}(x, y, z) = L_i^{p-1}(x, Q_x^{p-1}) L_j^p(y, Q_y^p) L_k^p(z, Q_z^p) \cdot \mathbf{e}_x, \\ \mathbf{N}_y^{(p)ijk}(x, y, z) = L_i^{p-1}(y, Q_y^{p-1}) L_j^p(z, Q_z^p) L_k^p(x, Q_x^p) \cdot \mathbf{e}_y, \\ \mathbf{N}_z^{(p)ijk}(x, y, z) = L_i^{p-1}(z, Q_z^{p-1}) L_j^p(x, Q_x^p) L_k^p(y, Q_y^p) \cdot \mathbf{e}_z, \end{cases} \quad (5)$$

где $i = \overline{0, p-1}$, $j, k = \overline{0, p}$, \mathbf{e}_u — единичный орт, направленный вдоль оси координат u . Для упрощения дальнейшего изложения будем называть полиномы, определенные на оси координат, совпадающей с направлением базисной функции (т.е. $L_i^{p-1}(x, Q_x^{p-1})$ — в определении $\mathbf{N}_x^{(p)ijk}$, $L_i^{p-1}(y, Q_y^{p-1})$ — в определении $\mathbf{N}_y^{(p)ijk}$ и $L_i^{p-1}(z, Q_z^{p-1})$ — в определении $\mathbf{N}_z^{(p)ijk}$), нормальными, а все остальные тангенциальными.

Из определения (5) видно, что число локальных базисных функций на одном элементе составляет $3p(p+1)^2$. Для случая $p = 1$ функции (5) превращаются в хорошо известные edge-функции. Следует отметить, что при $p > 1$ базисные функции (5) не только ассоциируются с ребрами, но и могут быть внутренними, т.е. могут не иметь ненулевых тангенциальных следов на границе конечного элемента.

Поскольку с ростом порядка базиса растет заполненность матрицы массы ненулевыми элементами, актуально построение такого базиса \mathbf{N}_u^p , который, с одной стороны, обладал бы хорошими интерполяционными свойствами, с другой — минимизировал бы количество ненулевых элементов в матрице массы, увеличивал бы диагональное преобладание и снижал бы ее обусловленность. Поэтому ниже рассмотрим задачу выбора полиномов $L_j^p(x, Q)$ более подробно.

Можно заметить, что для конструкции базиса не имеет значения конкретный вид L_k^p . Это позволяет варьировать их коэффициенты с целью получения базисных функций, обладающих свойствами, лучшими с точки зрения конечно-элементной дискретизации. В частности, для получения матриц массы с малым числом обусловленности используются полиномы, которые строятся неравномерным распределением узлов $a = x_0 < x_1 < \dots < x_{p-1} < x_p = b$. Из теории аппроксимации известно [10, 11], что минимизация константы Лебега

$$\Lambda(Q) = \max_{x \in [0, 1]} \sum_{i=0}^p L_i^p(x, Q) \quad (6)$$

определяет распределение точек Q , оптимальное с точки зрения обусловленности матрицы массы. Субоптимальным в этом смысле является расположение корней полиномов Чебышева первого рода, определяемое (на отрезке $[0, 1]$) соотношением

$$\left\{ x_i = -\frac{\cos[(2i+1)\pi/(2p+2)]}{\cos[\pi/(2p+2)]} + \frac{1}{2}, i = \overline{0, p} \right\}. \quad (7)$$

Выбор полиномов Лежандра в качестве нормальных полиномов оптимальен с точки зрения структуры матрицы массы. Полиномы Лежандра, помимо ортогональности, позволяют построить иерархический базис. На отрезке $[0, 1]$ они принимают вид

$$\bar{l}^p(x) = \sqrt{2p+1} l^{p-1}(2x - 1), \quad (8)$$

где $l^p(x)$ определяется на отрезке $[-1, 1]$ стандартным образом [12]:

$$\begin{cases} l^0(x) = 1, \\ l^1(x) = x, \\ l^{p+1}(x) = \frac{2p+1}{p+1} x l^p(x) - \frac{p}{p+1} l^{p-1}(x). \end{cases} \quad (9)$$

В этом случае векторный базис вводится как

$$\begin{cases} \mathbf{N}_x^{(p)ijk}(x, y, z) = l^{i-1}(x) L_j^p(y, Q) L_k^p(z, Q) \cdot \mathbf{e}_x, \\ \mathbf{N}_y^{(p)ijk}(x, y, z) = l^{i-1}(y) L_j^p(z, Q) L_k^p(x, Q) \cdot \mathbf{e}_y, \\ \mathbf{N}_z^{(p)ijk}(x, y, z) = l^{i-1}(z) L_j^p(x, Q) L_k^p(y, Q) \cdot \mathbf{e}_z. \end{cases} \quad (10)$$

В принципе, в качестве нормальных полиномов вместо полиномов Лежандра могут быть использованы любые ортогональные полиномы, однако в этом нет особого смысла.

Оптимальное решение задачи упрощения матрицы массы — построение ортогонального векторного базиса, в результате матрица массы становится диагональной. Так как результирующий базис должен обладать тангенциальной непрерывностью, необходимо наложить на тангенциальные полиномы дополнительные ограничения: они должны обеспечивать непрерывность интерполируемой функции.

Окончательно, необходимо построить две системы ортогональных полиномов на $[0, 1]$:

1) система нормальных ортогональных полиномов без ограничений (в качестве примера уже приведены полиномы Лежандра);

2) система тангенциальных ортогональных полиномов, обеспечивающая непрерывность интерполируемой функции в точках 0 и 1.

Во втором случае требуется найти полиномы $L_i \in \mathbf{S}^p(0, 1)$, $i = \overline{0, p}$, такие, что

$$\begin{cases} L_0(0) = 1, L_0(1) = 0, \\ L_i(0) = L_i(1) = 0, i = \overline{1, p-1}, \\ L_p(0) = 0, L_p(1) = 1. \end{cases} \quad (11)$$

Для этого L_i , $i = \overline{0, p}$, следует искать в виде

$$\begin{cases} L_0(x) = (1-x)M_0(x), \\ L_i(x) = x(1-x)M_i(x), \quad i = \overline{1, p-1}, \\ L_p(x) = xM_p(x). \end{cases} \quad (12)$$

Здесь $M_0, M_p \in \mathbf{S}^{p-1}(0, 1)$, $M_i \in \mathbf{S}^{p-2}(0, 1)$, $i = \overline{1, p-1}$, подлежат определению. Имеет место следующее утверждение.

Утверждение 1. Ортогональная, т. е. обладающая свойством $\forall i, j = \overline{0, p}$,

$$\begin{cases} (L_i, L_j) = 0, \quad i \neq j, \\ (L_i, L_j) \neq 0, \quad i = j, \end{cases} \quad (13)$$

система полиномов вида (12) не существует. При этом существует система (12), обладающая свойством

$$\begin{cases} (L_i, L_i) \neq 0, & i = \overline{0, p}, \\ (L_0, L_i) = (L_p, L_i) = 0, & i = \overline{1, p-1}, \\ (L_i, L_j) = 0, & i \neq j, \quad i, j = \overline{1, p-1}, \\ (L_0, L_p) \neq 0. \end{cases} \quad (14)$$

Иными словами, можно построить систему (12), в которой ортогональны все полиномы, кроме L_0 и L_p (или любой другой пары).

Доказательство. Невозможность существования доказывается от противного. Пусть построена ортогональная система L_0, \dots, L_{p-1} . Будем искать L_p в виде

$$L_p(x) = x \left(\sum_{j=0}^{p-1} \alpha_j x^j \right).$$

Тогда для определения L_p получаем p уравнений вида $(L_i, L_p) = 0$ или $\forall i = \overline{0, p-1}$:

$$\sum_{j=0}^{p-1} \alpha_j (L_i, x^j) = 0. \quad (15)$$

Матрица M с коэффициентами $M_{ij} = (L_i, x^j)$ — квадратная размерности p . Так как L_i линейно независимы, x^j линейно независимы, строки M также линейно независимы. Следовательно, СЛАУ (15) с нулевой правой частью имеет только тривиальное решение.

Конструирование системы, удовлетворяющей условиям (14), состоит из следующих шагов:

1) строится ортогональная система L_1, \dots, L_{p-1} с помощью стандартной процедуры Грама—Шмидта. Поскольку линейная комбинация финитных функций финитна, то достаточно в качестве начальной системы взять любые линейно независимые полиномы вида $x(1-x)M_j(x)$, $M_j \in \mathbf{S}^{p-2}(0, 1)$, $j = \overline{1, p-1}$;

2) строится L_0 :

$$\begin{aligned} W_0 &= (1-x)M_0(x), \quad M_0 \in \mathbf{S}^{p-1}(0, 1), \\ R_0 &= W_0 - \sum_{i=1}^{p-1} (L_i, W_0)W_0, \\ L_0 &= R_0/R_0(0); \end{aligned} \quad (16)$$

3) строится L_p :

$$\begin{aligned} W_p &= xM_p(x), \quad M_p \in \mathbf{S}^{p-1}(0, 1), \\ R_p &= W_p - \sum_{i=1}^{p-1} (L_i, W_p)W_p, \\ L_p &= R_p/R_p(1). \end{aligned} \quad (17)$$

1.2. Приближенная ортогонализация

Полиномы $s_i \in \mathbf{S}^p(a, b)$, $i = \overline{1, k}$, называются ортогональными на системе точек $z_q \in [a, b]$, $q = \overline{1, m}$, если $\forall i \neq j$, $i, j = \overline{1, k}$, $q = \overline{1, m}$:

$$s_i(z_q) \cdot s_j(z_q) = 0. \quad (18)$$

Идея построения приближенно ортогонального базиса состоит в замене скалярного произведения (2) формой

$$\langle u, v \rangle_N = \sum_{i=0}^N w_i u(x_i) \cdot v(x_i). \quad (19)$$

Здесь точки x_i и веса w_i берутся из квадратур Гаусса или Гаусса—Лобатто [7]. Кроме того, полиномы $L_i(x) \in \mathbf{S}^p(a, b)$ из определения (5) строятся ортогональными на системе точек x_i , в этом случае $\langle L_i, L_j \rangle_{p+1} = 0$, $i \neq j$. Если порядок полиномов достаточно высок, то форма (19) достаточно точно аппроксимирует скалярное произведение (2). Для тангенциальных полиномов система точек x_i должна включать точки 0 и 1, поэтому необходимо использовать квадратуры Гаусса—Лобатто [13]. Использование точек квадратуры Гаусса для построения нормальных полиномов целесообразно только для случая неортогональных сеток, в случае же ортогональной сетки можно использовать полиномы ортогональные в скалярном произведении (2).

2. Вычислительный эксперимент

Цель эксперимента — сравнение интерполяционных свойств различных базисов, а также вычислительных затрат при их использовании. Введем обозначения: \mathbf{B}^p — стандартный базис, в котором в качестве нормальных и тангенциальных полиномов используются полиномы Лагранжа с корнями в узлах, определенных соотношением (7); \mathbf{B}_{or}^p — базис, в котором полиномы Лежандра применяются в качестве нормальных полиномов и полиномы, определенные уравнениями (14), — в качестве тангенциальных; \mathbf{B}_{gl}^p — базис, в котором нормальные полиномы — полиномы Лежандра, а тангенциальные полиномы — это полиномы, ортогональные на системе точек квадратуры Гаусса—Лобатто.

В качестве первого теста рассматривалась задача приближения векторной функции вида

$$\mathbf{f}(x, y, z) = \begin{bmatrix} \sin(xyz + \sin(x) \cos(z)) \\ \cos(xyz - \sin(y) \cos(x)) \\ e^{xyz-1} \end{bmatrix} \quad (20)$$

на единственном конечном элементе $[0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$. В такой задаче требуется решить СЛАУ $Mx = z$, где $z_i = (\mathbf{f}, \mathbf{N}_i)$. Для данной симметричной положительно определенной матрицы A через $\xi(A) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$ обозначим ее число обусловленности (здесь

$\lambda_{\min}(A)$ и $\lambda_{\max}(A)$ — наименьшее и наибольшее собственные числа), через $nz(A)$ — число ненулевых внедиагональных элементов матрицы A . Введем также обозначения: M^p — матрица массы для базиса \mathbf{B}^p , M_{or}^p — матрица массы для базиса \mathbf{B}_{or}^p , M_{gl}^p — диагональная матрица массы для базиса \mathbf{B}_{gl}^p , \mathbf{e}^p , \mathbf{e}_{or}^p и \mathbf{e}_{gl}^p — соответствующие базисам ошибки аппроксимации. В табл. 1 приведены значения числа ненулевых элементов в матрицах M^p и M_{or}^p , числа обусловленности и нормы ошибок для базисов порядков $p = \overline{1, 6}$.

В табл. 2 приведены те же величины для разбиения области $[0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$ на восемь равных кубических конечных элементов. Разбиение формируется делением каждой из сторон пополам. Для исследуемых базисов имеет место априорная оценка погрешности [3, 4]

$$\|\mathbf{u} - \Pi^p \mathbf{u}\|_{H(\mathbf{rot}, \Omega)} \leq Ch^p \|\mathbf{u}\|_{(H^{p+1}(\Omega))^3},$$

Таблица 1. Сравнение базисов для одного элемента

p	N	$nz(M^p)$	$nz(M_{or}^p)$	$\xi(M^p)$	$\xi(M_{or}^p)$	$\ \mathbf{e}^p\ _{L^2}$	$\ \mathbf{e}_{or}^p\ _{L^2}$	$\ \mathbf{e}_{gl}^p\ _{L^2}$
1	12	36	36	8.99	8.99	0.267318	0.267318	—
2	54	918	96	137.7	143.4	0.0326764	0.0326764	0.0332324
3	144	6768	180	261	394.7	0.00553697	0.00553697	0.00553939
4	300	29700	288	394.3	867	0.000851805	0.000851805	0.000853101
5	540	96660	420	703.5	1440	9.9662e-05	9.9662e-05	9.96709e-05
6	882	258426	576	1148	2401	1.27609e-05	1.27609e-05	1.27661e-05

Таблица 2. Сравнение базисов для восьми элементов

p	N	$nz(M^p)$	$nz(M_{or}^p)$	$\xi(M^p)$	$\xi(M_{or}^p)$	$\ \mathbf{e}^p\ _{L^2}$	$\ \mathbf{e}_{or}^p\ _{L^2}$	$\ \mathbf{e}_{gl}^p\ _{L^2}$
1	54	240	240	13.8	13.8	0.133513	0.133513	—
2	300	6636	672	65.4	91.4	0.00839971	0.00839971	0.00853654
3	882	51012	1296	182	240	0.000731928	0.000731928	0.000732591
4	1944	228552	2112	379.5	600	5.34082e-05	5.34082e-05	5.34827e-05
5	3630	752520	3120	684	1260	3.2368e-06	3.2368e-06	3.23774e-06
6	6084	2026260	4320	1125	2352	2.10231e-07	2.10231e-07	2.10297e-07

где h — характерный размер конечного элемента. Это подтверждается результатами вычислений, приведенными в табл. 2.

Для анализа временных затрат для каждого вида базиса рассмотрим задачу моделирования нестационарного трехмерного магнитного поля в неоднородной среде:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{H} + \mu\sigma \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} + \mu\varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = \operatorname{rot} \mathbf{J}_0, \\ \mathbf{H} \times \mathbf{n}|_{\partial\Omega} = 0, \end{cases} \quad (21)$$

в области $\Omega = [-50, 50] \times [-50, 50] \times [-50, 50]$ (рис. 1). Источник поля — тонкая прямоугольная петля на границе областей Ω_1 и Ω_2 . При этом $\varepsilon(\Omega_1) = \varepsilon(\Omega_2) = \varepsilon_0$, $\sigma(\Omega_1) = 0$, $\sigma(\Omega_2) = 1$. Задача в такой постановке описывает довольно широкий класс проблем, возникающих в геоэлектрике.

Сила тока задается функцией $I(t)$, схематично представленной на рис. 2:

$$I(t) = \begin{cases} f(t), t \in [0, T], \\ I_0, t \in (T, 4T), \\ g(t), t \in [4T, 5T], \\ 0, t > 5T, \end{cases} \quad (22)$$

где $f(t)$ — монотонно возрастающая функция, $f(0) = 0$, $f(T) = I_0$, $g(t)$ — монотонно убывающая функция, $g(4T) = I_0$, $g(5T) = 0$.

После конечно-элементной дискретизации приходим к уравнению

$$R\mathbf{H} + M^s \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} + M^e \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = \mathbf{f}, \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} R_{ij} &= \int_{\Omega} \operatorname{rot} \mathbf{N}_i \cdot \operatorname{rot} \mathbf{N}_j \, d\Omega, & M_{ij}^s &= \int_{\Omega} \mu\sigma \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j \, d\Omega, \\ M_{ij}^e &= \int_{\Omega} \mu\varepsilon \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j \, d\Omega, & \mathbf{f}_i &= \int_{\Omega} \operatorname{rot} \mathbf{J}_0 \cdot \mathbf{N}_i \, d\Omega. \end{aligned}$$

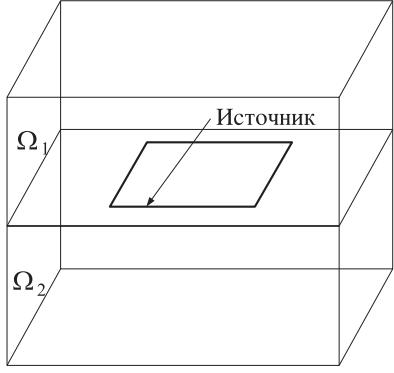
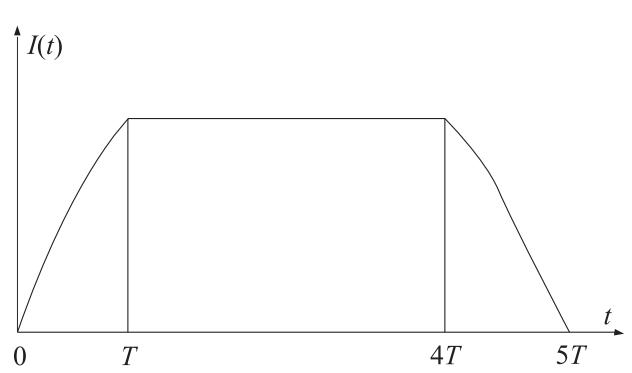
Рис. 1. Область моделирования Ω 

Рис. 2. Зависимость силы тока от времени

С учетом того, что

$$\int_{\Omega} \mathbf{rot} \mathbf{J}_0 \cdot \mathbf{N}_i \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{J}_0 \cdot \mathbf{rot} \mathbf{N}_i \, d\Omega + \int_{\Omega} \operatorname{div} (\mathbf{J}_0 \times \mathbf{N}_i) \, d\Omega$$

и

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} (\mathbf{J}_0 \times \mathbf{N}_i) \, d\Omega = \int_{\partial\Omega} (\mathbf{J}_0 \times \mathbf{N}_i) \cdot \mathbf{n} \, dS = 0,$$

вычисление \mathbf{f}_i для случая бесконечно тонкого проводника сводится к простому одномерному интегралу.

Явная схема по времени для уравнения (23) имеет вид

$$R\mathbf{H}_n + \frac{1}{\Delta t_{n+1}} M^s (\mathbf{H}^{n+1} - \mathbf{H}^n) + \\ + M^e \left(\frac{2}{\Delta t_{n+1} s_n} \mathbf{H}^{n+1} - \frac{2}{\Delta t_{n+1} \Delta t_n} \mathbf{H}^n + \frac{2}{\Delta t_n s_n} \mathbf{H}^{n-1} \right) = \mathbf{f}_n, \quad (24)$$

где $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$, $s_n = \Delta t_n + \Delta t_{n+1}$, или

$$\mathbf{H}^{n+1} = \left[\frac{1}{\Delta t_{n+1}} M^s + \frac{2}{\Delta t_{n+1} s_n} M^e \right]^{-1} \times \\ \times \left[\mathbf{f}_n + \left(-R + \frac{1}{\Delta t_{n+1}} M^s + \frac{2}{\Delta t_{n+1} \Delta t_n} M^e \right) \mathbf{H}^n - \frac{2}{\Delta t_n s_n} M^e \mathbf{H}^{n-1} \right]. \quad (25)$$

Для решения задачи (23) будем использовать схему (25) в сочетании с базисом с неполной ортогонализацией и базисом, ортогональным на системе точек Гаусса—Лобатто. Целью сравнения является установить:

- затраты памяти (число ненулевых элементов в матрицах массы и жесткости);
- возможность точного обращения матрицы массы и временные затраты на него.

При дискретизации (23) используем сетку $10 \times 10 \times 10$ элементов. Будем обозначать через $ssk(A)$ — максимальное число элементов, которое может содержаться в матрице A^{-1} . Фактически, это число равно числу элементов A при переводе ее в профильный формат (более распространенное название формата — SSK [14]). Расчеты для стандартного базиса не проводились, поскольку его использование заведомо более затратно

Т а б л и ц а 3. Сравнение характеристик матриц для различных базисов

p	N	$nz(M_{or}^p)$	$nz(R_{or}^p)$	$nz(R_{gl}^p)$	$ssk(M_{or}^p)$	$t_{or,c}$	$t_{gl,c}$
2	21 660	51 840	861 600	476 064	15 898 060	2151	51
3	75 690	106 560	4360 680	2825 064	12 6336 627	8753	169
4	182 520	180 480	14 563 200	10 348 416	544 551 216	35 352	461
5	360 150	273 600	38 220 600	28 841 400	1684 461 475	114 796	1091
6	626 580	385 920	85 554 720	67 339 296	4229 360 172	279 238	2324

и не дает никакого выигрыша в точности. В табл. 3 приведены данные о размерностях и числе ненулевых элементов в матрицах массы и жесткости, а также время решения для 7500 итераций по времени с шагом 10^{-10} с. Значение T полагалось равным 10^{-7} , $\sigma = 1$. При использовании базиса \mathbf{B}_{or}^p для решения СЛАУ с матрицей M_{or}^p использовался метод сопряженных градиентов с требованием уменьшения невязки в 10^{16} раз и ограничением на число итераций, равным 2000. При реализации использовалось распараллеливание основных операций (умножения матрицы на вектор, линейных комбинаций векторов, скалярного произведения и пр.) с помощью технологии OpenMP. Результаты измерений времени приведены для тестов на машине с четырехъядерным процессором Intel Core 2 Quad 6600 с распараллеливанием на четыре потока.

Из результатов вычислений можно сделать следующие выводы:

— точное обращение матрицы массы нецелесообразно, поскольку число элементов в матрице $ssk(M_{or}^p)$ оказывается чрезвычайно высоким несмотря на малое исходное число элементов в матрице M (действительно, полное LL^T - или LDL^T -разложение матрицы, содержащей примерно $0.5 \cdot 10^9$ элементов, потребует $10^{13} - 10^{14}$ сложений и умножений, а обратная подстановка — $0.5 \cdot 10^9$ сложений и умножений, что существенно сложнее, чем даже многократное решение СЛАУ с матрицей M);

— решение задачи с использованием базиса \mathbf{B}_{or}^p приблизительно в 50–120 раз более затратно по времени вычислений и примерно на 30–50 % — по объему памяти. Естественно, что подобные затраты связаны с требованием достаточно качественного решения СЛАУ на каждом шаге. В большинстве реальных случаев достаточно решения СЛАУ с требованием уменьшения нормы невязки в $10^8 - 10^{10}$ раз, кроме того, на скорость решения СЛАУ большое влияние оказывает выбор начального приближения (которое можно находить, например, экстраполяцией), а также выбор предобусловителя. Исследование этого вопроса, предположительно, позволит значительно сократить время решения СЛАУ с матрицей M_{or}^p и сделать его сравнимым с временем умножения матрицы R на вектор.

На рис. 3–7 показаны графики зависимостей $\mathbf{H}_z(t)$ в точке $(5, 0, 0)$ на дневной поверхности. Как видно, решения, полученные на базисах \mathbf{B}_{or}^2 и \mathbf{B}_{gl}^2 , значительно различаются. Кроме того, качественная картина поведения поля для этих двух базисов не соответствует физике процесса: на отрезке $t \in [0, 10^{-6}]$ величина $|\mathbf{H}_z(t)|$ должна монотонно возрастать, чего не видно на рис. 3. Из этого можно сделать вывод, что использовать базис \mathbf{B}_{gl}^2 нецелесообразно в силу низкой точности. Очевидно также, что применение базисов пятого и шестого порядков не дает особых преимуществ, однако чрезвычайно усложняет вычислительную процедуру. Можно, таким образом, заключить, что по совокупности точности и вычислительных затрат для задач подобного класса лучше всего использовать базис \mathbf{B}_{gl}^4 (из рис. 4 видно, что в случае \mathbf{B}_{gl}^3 ошибка, обусловленная конструкцией базиса, все еще достаточно велика) и при необходимости измельчать

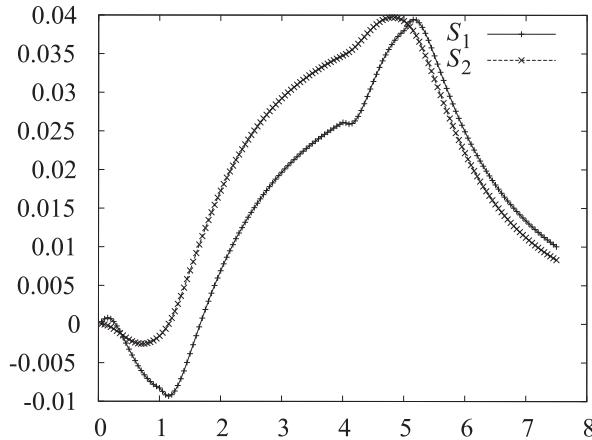


Рис. 3. $\mathbf{H}_z(\tilde{t})$, $\tilde{t} = 10^7 t$, в точке M для базисов \mathbf{B}_{or}^2 (график S_1) и \mathbf{B}_{gl}^2 (график S_2)

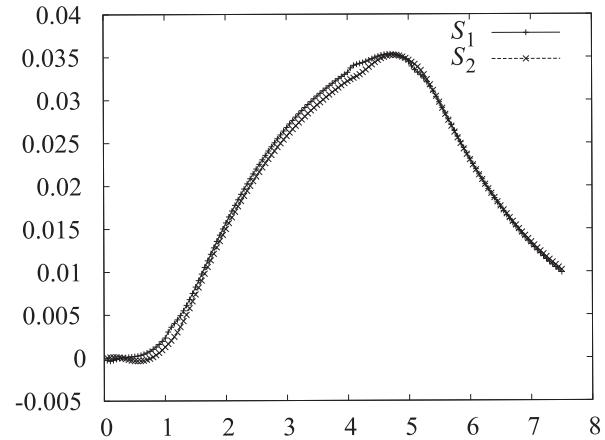


Рис. 4. $\mathbf{H}_z(\tilde{t})$, $\tilde{t} = 10^7 t$, в точке M для базисов \mathbf{B}_{or}^3 (график S_1) и \mathbf{B}_{gl}^3 (график S_2)

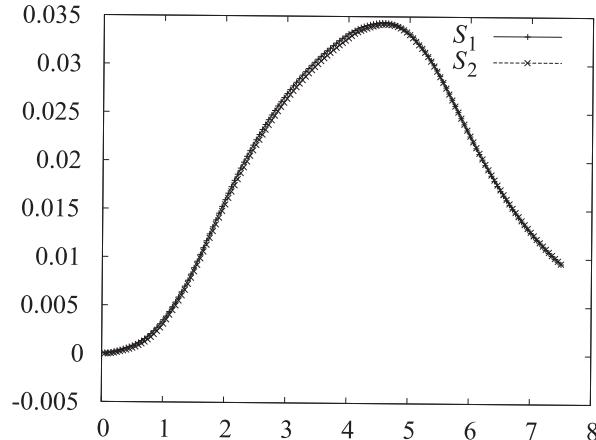


Рис. 5. $\mathbf{H}_z(\tilde{t})$, $\tilde{t} = 10^7 t$, в точке M для базисов \mathbf{B}_{or}^4 (график S_1) и \mathbf{B}_{gl}^4 (график S_2)

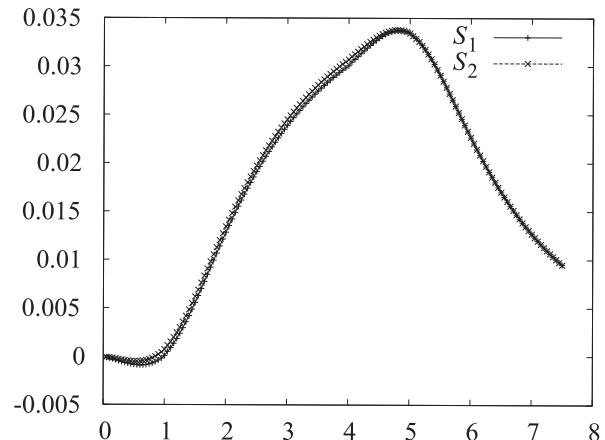


Рис. 6. $\mathbf{H}_z(\tilde{t})$, $\tilde{t} = 10^7 t$, в точке M для базисов \mathbf{B}_{or}^5 (график S_1) и \mathbf{B}_{gl}^5 (график S_2)

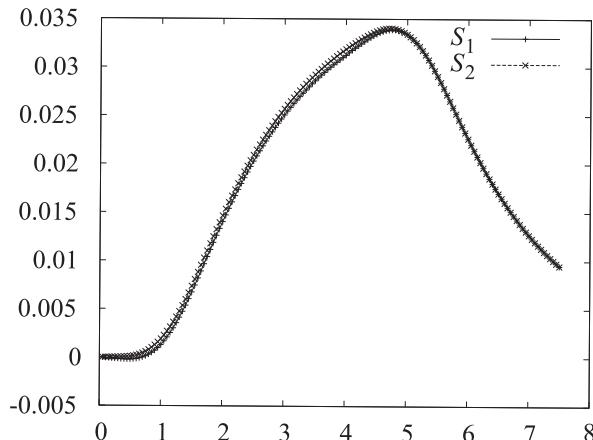


Рис. 7. $\mathbf{H}_z(\tilde{t})$, $\tilde{t} = 10^7 t$ в точке M для базисов \mathbf{B}_{or}^6 (график S_1) и \mathbf{B}_{gl}^6 (график S_2)

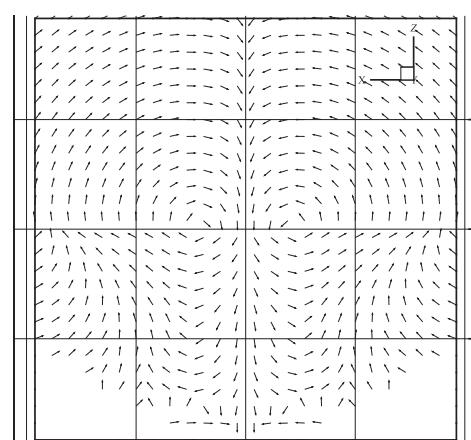


Рис. 8. \mathbf{H} в сечении плоскостью $y = 0$ для базиса \mathbf{B}_{or}^3

пространственную сетку. На рис. 8 приведен вид решения \mathbf{H} в сечении плоскостью $y = 0$ для базиса \mathbf{B}_{or}^p и $p = 3$, полученный аналогичным методом на сетке $30 \times 30 \times 30$ элементов.

Заключение

В работе введен и исследован базис пространства $H(\text{rot}, \Omega)$, который строится с использованием частично ортогональных полиномов, что позволяет значительно уменьшить вычислительные затраты на решение уравнений Максвелла на ортогональных сетках. Проведено сравнение с базисом, предложенным в [7] для волнового уравнения, который был вполне успешно применен к задаче в области, содержащей $\sigma \neq 0$.

Список литературы

- [1] BOSSAVIT A. Computational electromagnetism. Variational formulation, complementary, edge elements. San Diego: Acad. Press, 1998.
- [2] HIPTMAIR R. Finite elements in computational electromagnetism // Acta Numerica. 2002. N 11. P. 237–339.
- [3] NEDELEC J.C. Mixed finite elements in R^3 // Numer. Meth. 1980. Vol. 35. P. 315–341.
- [4] NEDELEC J.C. A new family of mixed finite elements in R^3 // Numer. Meth. 1986. Vol. 50. P. 57–81.
- [5] GRAGLIA R.D., WILTON D.R., PETERSON A.F. Higher order interpolatory vector bases for computational electromagnetics // IEEE Trans. Antennas and Propagation. 1997. Vol 45, N 3. P. 329–342.
- [6] RODRIGUE G., WHITE D. A vector finite element time-domain method for solving Maxwell's equations on unstructured hexahedral grids // SIAM J. Sci. Comp. 2001. Vol. 23, N 3. P. 683–706.
- [7] FISHER A., RIEBEN R.N., RODRIGUE G.H., WHITE D.A. A generalized mass lumping technique for vector finite-element solution of the time-dependent Maxwell equations // IEEE Trans. on Antennas and Propagation. 2005. Vol. 53, N 9. P. 2900–2910.
- [8] JENSEN M.S. High convergence order finite elements with lumped mass matrix // Int. J. Numer. Meth. Eng. 1996. Vol. 39, N 2. P. 1879–1888.
- [9] HE B., TEIXEIRA F.L. Sparse and explicit FETD via approximate inverse hodge (mass) matrix // IEEE Microwave and Wireless Components Letters. 2006. Vol. 16, N 6. P. 348–350.
- [10] BRUTMAN L. Lebesgue functions for polynomial interpolation — a survey // Annals of Numer. Math. 1997. Vol. 4. P. 694–704.
- [11] RIEBEN R., WHITE D., RODRIGUE G. Generalized high order interpolatory 1-form bases for computational electromagnetics // Proceedings of the 2002 IEEE International Antennas and Propagation Symposium. San Antonio, Texas. 2002. Vol. 4. P. 686–689.
- [12] VOSSE F.N. VAN DE, MINEV P. Spectral element methods: theory and applications // Eindhoven University of Technology Report 96-W-001 ISBN 90-236-0318-5. 1996.
- [13] БАХВАЛОВ Н.С. Численные методы. М.: Наука, 1973. Т. 1.
- [14] SAAD Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. Boston: PWS Publishing Company, 1996.

*Поступила в редакцию 20 февраля 2008 г.,
в переработанном виде — 3 декабря 2008 г.*