分类号 分类号 密级 保密级别

UDC 编号

中国科学院研究生院
硕士学位论文

PHG 中线性棱单元的实现及
三维电磁时谐场问题并行自适应数值模拟实验

崔涛

指导教师 张林波、研究员、博士

中国科学院数学与系统科学研究院

申请学位级别 硕士 学科专业名称 计算数学

论文提交日期 论文答辩日期

培养单位 中国科学院数学与系统科学研究院

学位授予单位 中国科学院研究生院

答辩委员会主席

摘　要

本文的主要内容是关于 Nédélec 线性四面体有限元在 PHG (Parallel Hierarchical Grid) 中的实现，以及关于时谐 Maxwell 方程组的并行自适应数值模拟实验。

PHG 是我们自主设计的一个基于网格二分细化、适合大规模分布式存储并行计算机的三维并行自适应软件平台。为了实现 Nédélec 线性四面体有限元，在本文的工作中，首先，我们改进了 PHG 中的部分模块使其支持向量基函数，并进行了大量的测试验证这些模块的正确性。其次，改进了 PHG 中数值积分函数的 cache 机制，该机制在保证程序效率的同时使得用户接口更加规范、简便，数值实验证明了我们的 cache 机制对有限元计算的有效性。最后，我们将棱单元实现细节及并行相关内容封装在 PHG 的库中。由于 PHG 代码本身的复杂性，这些工作具有相当的工作量和一定的难度，并且目前国际上尚没有公开发布类似软件，本工作中涉及的许多研究内容是探索性、创新性的。

在此基础上，利用 PETSc 提供的 LGMRES 求解器，我们在分布式存储并行计算机上利用 PHG 计算一批典型算例，包括三维电磁时谐 Maxwell 方程组自适应数值模拟等。PHG 提供一系列规范化的接口，对分布式网格管理、自由度管理、合成分布式线性系统、并行后验误差估计等一系列烦琐的代码进行了很好的封装，使得用户代码中不必关心与并行及网格操作相关的内容，做到与串行程序一样简洁。这些的数值算例验证了 PHG 所实现的自适应算法的有效性和代码的正确性，这些数值实验中包括 128 个结点、超过一亿个自由度的并行有限元计算。在已经进行的数值实验中，PHG 的各部分代码，包括本文所进行的扩展，表现出了很好的鲁棒性、计算效率和并行可扩展性。

关键词: 并行计算、自适应有限元、时谐场、线性棱单元、后验误差估计、四面体网格二分细化

Implementation of Linear Nédélec Element in PHG and Parallel Adaptive Simulation of 3-D Time-Harmonic Electro-Magnetic Problems

Cui Tao (majored in compuational mathematics)
Directed by Prof. Zhang Lin-bo

PHG (Parallel Hierarchical Grid) is a parallel adaptive finite element toolbox under development at the Academy of Mathematics and System sciences, Chinese Academy of Sciences, for parallel solution of partial differential equations (PDEs) using adaptive finite element method. This thesis presents the work on implementing the linear Nédélec element in PHG and numerical experiments with time-harmonic electro-magnetic problems.

PHG works with conforming tetrahedral meshes which are adaptively refined by bisectioning selected tetrahedra. It is designed for distributed memeory parallel computers. This work mainly consisted of tuning, testing and debugging modules and data structures of PHG to make them suitable for finite element computations using vector basis functions such as the linear Nédélec element. Some aspects of the internal design of PHG were also improved. For example, a more flexible cache mechanism for transparently caching values of basis functions and their gradients at the quadrature points was implemented, which simplifies the user interface for finite element applications, and the linear solver interface of PHG was enhanced for dealing with more complex problems. The linear Nédélec element was integrated into PHG and thoroughly tested. A set of new functions which are useful for solving the Maxwell's equations was implemented.

The implementation of linear Nédélec element was further justified by a number of numerical experiments with 3D time-harmonic electro-magnetic problems. Up to 128 cluster nodes were used to solve problems with up to 100 million degrees of freedom. For problems with strong singularities, expected convergence behaviour of the adaptive procedure based on a posteriori error estimates was observed. The computations show that our code is reliable, efficient, and has good parallel scalability.

Keywords: parallel computing, adaptive finite element, tetrahedral mesh, bisectioning refinement, Nédélec element, a posteriori error estimates